



*Óbudai Egyetem,
Anyagtudományok és Technológiák Doktori Iskola,
Mikroelektronikai és Technológia Intézet*

III-V-alapú kvantumponthoz tartalmazó napelemek néhány technológiai aspektusa

Doktori (Phd.) értekezés

*Szerző: Ürmös Antal
okleveles villamosmérnök*

*Témavezető: Dr. Nemcsics Ákos
egyetemi tanár
az MTA Doktora*

*Anyagtudományok és Technológiák Doktori Iskola
Budapest, 2018.*

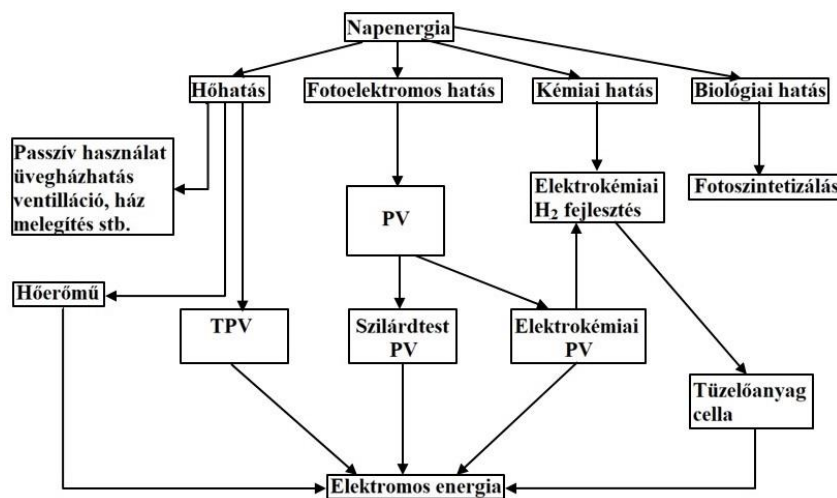
Tartalom

Bevezetés.....	2
1 A napelemekről általában és a GaAs-alapú napelemek.....	4
2 GaAs és rokon anyagok tulajdonságai	8
3 GaAs-alapú napelemek technológiája	25
3.1 Az epitaxiáról általában	25
3.2 Molekulasugár epitaxia elmélete.....	28
3.3 A molekulasugár epitaxiás berendezésünk felépítése	35
3.4 Mikroelektronikai lépések a napelem technológiában	44
3.5 Vákuumpárolgatás elmélete és berendezése	47
4 A GaAs-alapú QD napelemek felépítése, működése.....	50
5 Droplet epitaxiás nanostrukturák.....	54
5.1 QD előállítása	54
5.2 Új modell, a dinamikai viszkozitás mikroszkópikus értelmezésére (1. tézis).....	58
5.3 Effektív modellezési algoritmus a III-V alapú nanolyukak feltöltődésére (2. tézis) 59	
5.4 III-V alapú nanolyukak feltöltődés-kinetikájának szimulációja (Ga esetén, ill. In esetén) (3. tézis).....	65
6 Lágyszámítási módszerek a technológia támogatására	74
6.1 Fuzzy következtetési rendszer és a Kohonen leképezés elmélete.....	74
6.2 Nanostrukturák osztályozása Kohonen leképezéssel és fuzzy következtető rendszer alkalmazásával (4. tézis)	76
6.3 Fuzzy modell, a nanostruktúra tervezés támogatására (5. tézis)	85
7 GaAs napelemek kontaktusai	89
7.1 A kontaktusok elektromos tulajdonságai.....	89
7.2 III-V anyagrendszer kontaktusfémzéseinek geometriai tulajdonságainak vizsgálata (6. tézis).....	96
8 Összefoglalás, kitekintés	100
9 Tézisek.....	102
10 Köszönetnyilvánítás	103
11 Irodalomjegyzék.....	103

Bevezetés

Napjainkban nagyon sok szó esik a környezetünk szennyezéséről és megóvásáról is. A környezetszennyezés nem más, mint az emberi társadalom környezetének rossz irányú megváltoztatása. Ennek a fogalomkörnek számos aspektusa van, pl. ide tartozik a környezeti elemek, levegő, víz, talaj összetételének az előnytelen megváltozása, ill. minőségromlása, de ide tartozik a fosszilis energiahordozó-tartalékok kimerülése is. Komoly probléma, hogy a fosszilis energiahordozók elégetésével megnövekszik a Föld átlaghőmérséklete, ami a sarki jégsapkák megolvadásához és lakott területek elsivatagosodásához vezet.

Ennek a problémakörnek a megoldásához a megújuló energiaforrások alkalmazásával lehet közelebb jutni. Többféle megújuló energiaforrás van, pl. szélenergia, geotermikus energia, ár-apály-energia, vízenergia, de ide tartozik a napenergia is [1] [2]. Utóbbi energia többféle módon hasznosítható, mely módok az 1. ábrán láthatók.



1. ábra. A napenergia hasznosításának módjai (forrás: [2]).

Tény, hogy szinte valamennyi energiaforrásunk a napsugárzásból ered, ami egy megújuló energiaforrás [2]. A Nap lényegében egy fúziós reaktor, ahonnan a Föld minden másodpercben 50 milliárd kWh energiát kap. E fúziós folyamat során hidrogén alakul át héliummá. Ez a fúziós átalakulás, körülbelül 20 millió °C hőmérsékleten történik. Ennek megfelelően a kisugárzott elektromágneses energia spektrumában a hullámhossz tartomány az ultraibolyától (100-200 nm) az infravörösig (2500-3000 nm) terjed, a látható tartományba (300-700 nm) eső maximummal. Napból kisugárzott energiamentiség megközelítőleg 150 millió nagyméretű erőmű energiatermelésével egyenértékű. Megjegyzendő, hogy majdnem mindegyik más energiaforrásra hatással van a Nap valamilyen formában. Erre jó példa, hogy a szén, a kőolaj és a földgázból származó energia is végsősoron a napenergiából származik. Másik jó példa, hogy a megújuló energiák közül a biomasszából származó biogáz, ill. a hullám-erőművek, melyek e tengerek mozgási energiáját hasznosítják villamosenergia termelésére. A napenergiának többféle hatása is felhasználható elektromos energia termelésére, többek között a fotoelektromos hatás is. Ebben az értekezésben a napenergia fotoelektromos hatását kihasználó szilárdtest napelemekről lesz szó (2. ábra).

A napelem olyan eszköz, amely a naptól érkező elektromágneses sugárzást (a napsugárzást) közvetlenül villamos energiává alakítja. Ez az energiaátalakítás úgy történik, hogy a naptól

érkező fotonok hatására a pn-átmenet kiürített rétegében keletkezett lyuk-elektron párok a beépített tér segítségével szétválasztódnak.



2. ábra. Polikristályos napelem panel¹.

A napelemek hagyományosan Si-ból készülnek. A mono- és polikristályos Si technológiával készülő napelemek napjainkban a legelterjedtebb napelem-technológiának számítanak. A szilícium a földkéregben a második leggyakrabban előforduló elem. Emiatt a szilíciumtechnológia széles körben alkalmazott és kiforrott háttér van mögötte. Ugyanakkor fő hátránya, hogy az alapanyag előállítása nagy energiaigényű [2]. Ismert tény, hogy a napelemek fontos paramétere a hatásfok, ami a leadott elektromos teljesítmény és a beeső fénytelsítmény hányadosa. Különböző okok miatt a hagyományos kristályos szilícium-alapú napelemek, ill. az egyszerű pn átmenetes GaAs alapú napelemek hatásfoka maximum 30% lehet, a Schokley-Queisser határ következtében [3]. További hatásfoknövelést III-V alapú nanostuktúrák napelemek vagy esetleg más anyagok alkalmazásával érhetünk el.

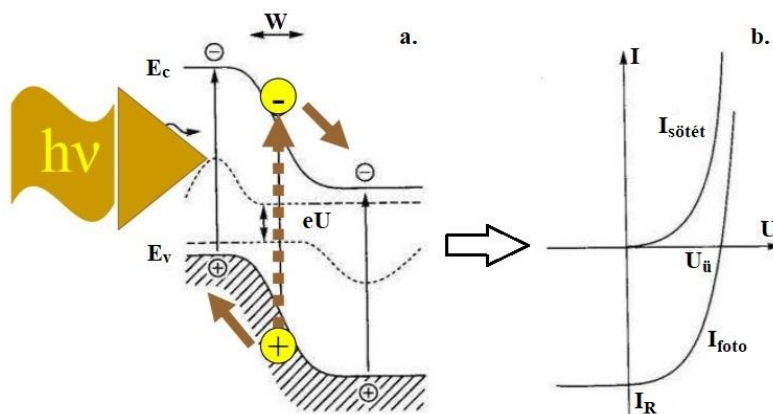
Az értekezésben először számbaveszem a III-V vegyület-félvezető anyagok, többek között a GaAs tulajdonságait. Többek között szó lesz a GaAs kristályszerkezetéről, elektromos és transzporttulajdonságairól is. Ezután áttekintem a különféle epitaxiás eljárásokat, különös figyelmet szentelve a molekulásugár-epitaxiának (MBE), elméleti és gyakorlati aspektusból is. Ennek az az oka, hogy ezzel az eljárással lehet legegyszerűbben és a legsokoldalúbb módon nanostrukturákat növesztetni [4] [5]. További előnye az eljárásnak, hogy a molekulásugár precízen irányítható és a környezeti feltételek is pontosan beállíthatók. Szó lesz a kutatócsoportunk által fejlesztett MBE rendszerről is, ill. a GaAs-alapú kvantum pontokkal készült napelemek felépítéséről, működéséről, ill. a csepp-epitaxia útján történő előállításukról is. Röviden szólok a vákuumpárológatásról, amivel ohmos kontaktusokat készíthetünk napelemekhez.

¹ Forrás: <https://www.napelemek-napkollektorok.hu/wp-content/uploads/napelem-rendszer-olcso-napkollektorok.png>. Megtekintés: 2017. július 22

1 A napelemekről általában és a GaAs-alapú napelemek

Ahogy azt a bevezetőben is megemlítettem, a napelem olyan eszköz, amely a Napból érkező elektromágneses sugárzást (a napsugárzást) közvetlenül villamos energiává alakítja.

A napelem oly módon alakítja át az energiát, hogy a Napból érkező fotonok a pn átmenetben elektron-lyuk párokat generálnak. Ezek az eszközben lévő beépített elektromos tér segítségével szétválasztódnak, így a lyukak a p oldalra, míg az elektronok a n oldalra sodródnak. E töltéshordozó-felhalmozódás hatására elektromos feszültség keletkezik (3. ábra). Az (a.) részábrán az E_c a vezetés sáv, az E_v a vegyérték sáv, eU a Fermi szint eltolódása, míg a W a tiltott sáv szélessége. A (b.) részábrán az $I_{sötét}$ az eredő áram sötétben, míg az I_{foto} az eredő áram a megvilágítás hatására, $U_{ü}$ az üresjárási feszültség.



3. ábra. A fotoelektromos hatás. Az (a.) részábrán a pn átmenet sávábrája látható, fotogerjesztés esetén, a (b.) részábrán az átmenet áram-feszültség karakterisztikája látható sötét és megvilágított esetben (forrás: [2]).

A pn átmenet eredő árama a következő módon számolható ki:

$$I = I_{telítési} \left(e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right) - I_{foto}, \quad (1)$$

ahol az I az eredő áram, $I_{telítési}$ a telítési áram, I_{foto} a fotoáram, a k a Boltzmann állandó, T a hőmérséklet, e az elektron töltése, U a napelem kapcsain mérhető feszültség. Ha az (1)-es egyenletbe behelyettesítjük az $U = 0 \text{ V}$ értéket, akkor a rövidzárási és a fotoáram megegyezik ($I_{sc} = I_{foto}$), ha az $I = 0 \text{ A}$, akkor az üresjárási feszültség a következő lesz:

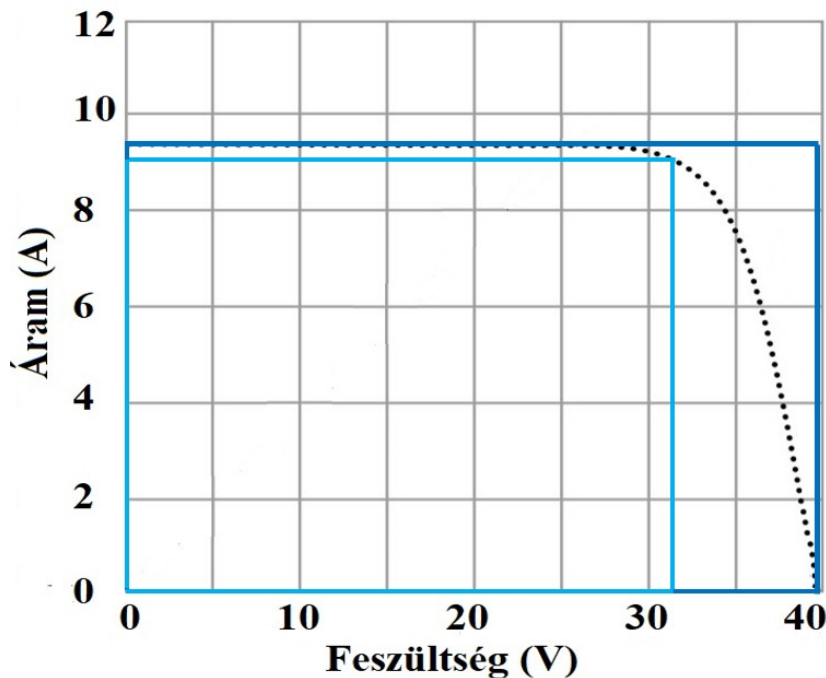
$$U_{oc} = \frac{k_B T}{e} \ln \left(\frac{I_{foto}}{I_{telítési}} + 1 \right), \quad (2)$$

ahol az U_{oc} az üresjárási feszültség, $I_{telítési}$ a telítési áram, I_{foto} a fotoáram, a k_B a Boltzmann állandó, T a hőmérséklet, e az elektron töltése.

R terhelés esetén a napelem I_m (optimális) munkaponti áram U_m munkaponti feszültség hatására a levehető maximális teljesítmény:

$$P_m = U_m * I_m. \quad (3)$$

A P_m maximális teljesítmény és a $P_{ur} = I_{sc} * U_{oc}$ szorzat aránya az úgynevezett φ kitöltési tényező (4. ábra). Ezen az ábrán a kitöltési tényező kiszámítására egy SHARP NU-RD285² monokristályos szilícium napelem esetében adok példát. A celláról levehető maximális kivehető teljesítményhez tartozó munkaponti feszültség $U_{max} = 31,3$ V, maximális kivehető teljesítményhez tartozó munkaponti áram $I_{max} = 9,1$ A. E két érték szorzata a cian színű téglalap területe. A cella üresjárási feszültsége $U_{oc} = 39,2$ V, míg a rövidzárási árama, $I_{sc} = 9,73$ A, e két érték szorzata pedig a kék színű téglalap területe. A kitöltési tényezője két téglalap területének aránya, amely jelen esetben 74,67%. Az itt közölt adatok standard mérési körülmények esetére tüntetem fel (1000 W/m² besugárzás, AM 1,5, 25 °C cellahőmérséklet esetén).



4. ábra. Egy példa a monokristályos napelem kitöltési tényezőjének kiszámítására, SHARP NU-RD285 napelemhez.

A napelem η hatásfokát a P_m maximálisan levehető teljesítmény és a P_{foto} beeső fénytelsítmény határozza meg:

$$\eta = \frac{U_m * I_m}{P_{foto}} = \varphi * \frac{U_{oc} * I_{sc}}{P_{foto}}. \quad (4)$$

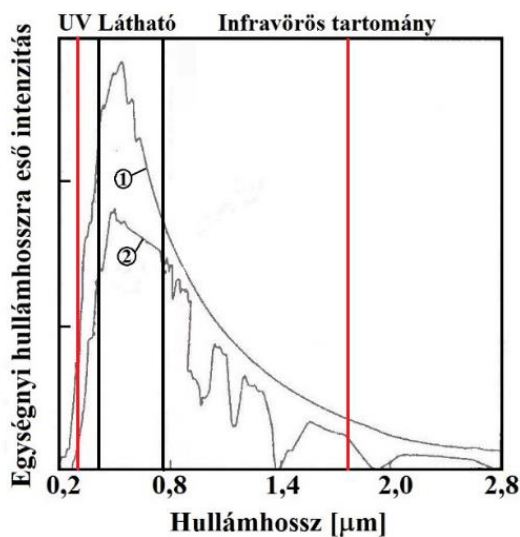
A hatásfokot jelentősen befolyásolja a félvezető anyag sávszerkezete (pl. a tiltott sávjának szélessége). Ez a paraméter azért nagyon fontos, mert a fotonok energiájának ugyanannyinak vagy nagyobbak kell lennie, mint a félvezető tiltott sávjának a szélessége. Ha ez az energia kisebb, akkor a foton nem gerjeszt szabad töltéshordozókat, ha nagyobb, akkor a többletenergia nem hasznosul, hanem disszipálódik.

² Forrás: <http://www.enerpoint.it/fvprodotti/scheda-tecnica-Scheda%20tecnica%20-%20Sharp%20NU-RD280-285.PDF>. Megtekintés: 2017. november 11-e.

Az egyszerű pn-átmenetes napelemstruktúrával a föld felszínét elérő napsugárzás (AM 1.5³) optimális konverziója olyan tiltott sávú anyaggal érhető el, amely tiltottsáv szélességének értéke körülbelül 1.4 eV [2] és direkt sávátmenetű.

Az elméleti félvezető-fizikai számítások alapján ezt a feltételt pl. a GaAs (1.42 eV), a CdTe (1.8 eV) és az InP (1.26 eV) teljesíti (ezek a tiltott sáv szélességek T = 300K hőmérséklethez tartoznak) [6] [7].

A valóságban a különböző napelem struktúrák hatásfokai ettől eltérhetnek, többek között veszteségek (termikus, reflexiók, rekombinációs stb.) vagy cellakonstrukciók (tandem, egyátmenetes vagy többátmenetes stb.) miatt. Az tiltottsáv-szélesség értéke miatt a hagyományos szilícium-alapú napelemek a napsugárzás spektrumából csak a látható hullámhossztartományt és a közeli infratartományt hasznosítják (1100 nm-ig) (5. ábrán, a folytonos fekete vonalak által határolt tartomány). Többek között emiatt is a kereskedelmi szilícium alapú cellák hatásfoka 30% alatt van [3]. Erre a problémára megoldást jelenthet az egyátmenetes, a többátmenetű, ill. a nanostruktúrák GaAs alapú napelemek alkalmazása. Ezen struktúrák alkalmazásával a napelemek, a napsugárzás spektrumából egy szélesebb hullámhossztartományt képesek hasznosítani. Az 5. ábrán, a piros vonalak által határolt hullámhossztartomány az AlAs-GaAs-InAs kvantumpontos napelem által hasznosított hullámhossztartomány.



5. ábra. A hagyományos szilícium alapú napelemek által hasznosított (a fekete vonalak által határolt tartomány) és a nanostruktúrák napelemek által hasznosított tartomány (a lila és a piros vonalak által határolt tartomány). Az 1. a légköri abszorpció nélküli spektrum (AM0), míg a 2. a Földet érő sugárzás spektruma, merőleges beesés és tiszta égboltnál (AM1) (forrás: [2]).

Egyszeres heteroátmenetű GaAs alapú napelemeket fémorganikus kémiai gőzfázisú leválasztással (MOCVD) ill. MBE-vel növesztenek és litográfiával, hőkezeléssel, ill. száraz

³ A napelemet érő napsugárzás számszerűsítésére bevezették az AM_x (air-mass) fogalmát, ahol az $x = \sec \theta$ (θ a felület normálisával bezárt szög). Az AM0 a légkörben még nem gyengített spektrum. Az AM1 a légkörön merőleges beesés ($\theta = 0^\circ$) mellett egyszerűen átjutott spektrum (tiszta égbolt esetén, tengerszint magasságában mérve). Az AM 1.5 spektrum az AM1-hez képest $\theta = 48.2^\circ$ zár be.

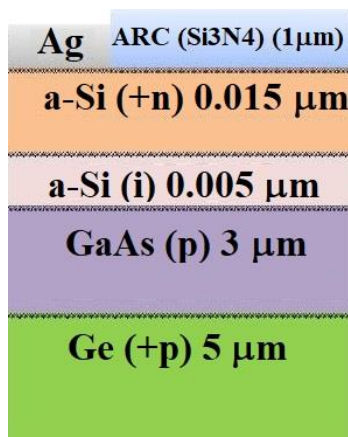
marási technikával munkálnak meg [8]. Az ilyen napelemek felépítése a 6. ábrán látható.

Elő kontaktus (Ti/Pt/Au)	500 nm
Ohmos p-GaAs	300 nm
Ablak p-In _{0,5} Ga _{0,5} P	200 nm
Emitter p-GaAs	500 nm
Bázis n-GaAs	3500 nm
BSF n-In _{0,5} Ga _{0,5} P	50 nm
Buffer n-GaAs	200 nm
Hordozó n-GaAs	350 μm
Hátsó kontaktus (AuGe/Ni/Au)	500 nm

6. ábra. Egyszeres heteroátmenetű GaAs alapú napelemek felépítése (forrás: [8]).

Ezeknek a napelemek felépítése másfajta is lehet, pl. GaAs vékonyréteg napelem flexibilis hordozón [9], vagy GaAs-Ge szendvicsszerkezetű megvalósítás [10]. Utóbbi esetben az volt a cél, hogy a GaAs-el közel azonos rácsállandójú Ge réteg segítségével megnöveljék a kimeneti áramot (7. ábra). A 7. ábrán az ARC réteg egy antireflexiós réteg, mellette Ag fémkontaktus van. Az a-Si (i) réteg a napelem abszorpcióját javítja.

Többszörös heteroátmenetű InGaP/GaAs/Ge alapú tandem napelemeket szintén MOCVD vagy MBE növesztik.



7. ábra. Egyszeres heteroátmenetű GaAs-Ge szendvicsszerkezetű napelem szerkezet felépítése (forrás: [10]).

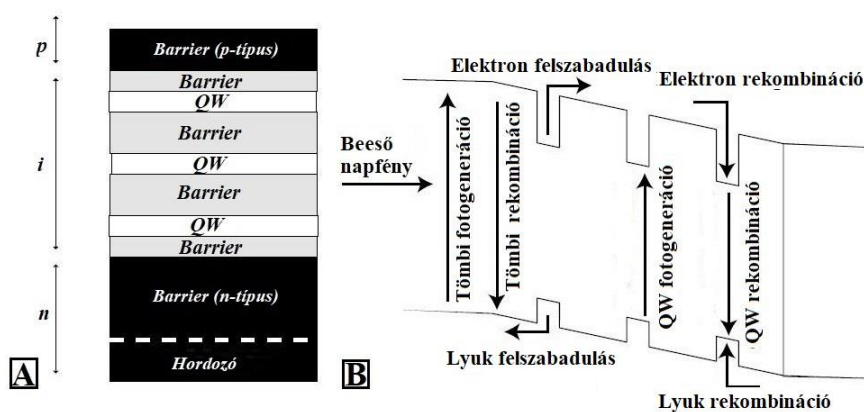
A többszörös átmenetű napelem az egymásra növesztett egyszeres átmenetű napelemekből áll. E napelemek felépítése olyan, hogy a szerkezetben lefelé haladva minden réteg tiltott sávja kisebb, mint az előző rétegé. A csökkenő szélességű tiltott sáv rétegsorrend szerepe az, hogy az keskenyebb tiltott sávú napelem hasznosítani tudja azt a fotont, ami az előző, nagyobb tiltott sávú rétegen áthalad anélkül, hogy elnyelődne. E napelemek hatásfoka többátmenetes napelemeknél (4 vagy több átmenettel és koncentrátorral) eléri a 46 %-ot⁴ [11] [12] [13].

⁴ Forrás: <https://www.nrel.gov/pv/assets/images/efficiency-chart.png> . Megtekintés: 2018. január 17.

A többszörös heteroátmenetű napelemek egy különleges fajtája a nanostrukturás napelemek csoportja [14] [15] [16]. Egyrészt ide tartoznak a ZnO nanorúd/szerves vékonyréteg, Si nanohuzal/szerves vékonyréteg, ill. III-V/szerves vékonyréteg alapú nanostrukturás napelemek is [17].

Másrészt ide soroljuk azokat a szintén nanostrukturás (pl. a kvantum pontokat, kvantum gyűrűket, kvantumvölgyeket, inverz kvantum pontokat stb. tartalmazó) napelemeket is, melyek molekulásugár epitaxia segítségével hozhatók létre, III-V-ös vegyület-félvezető (pl. GaAs, InP) hordozón [2] [18].

Utóbbi csoporthoz tartoznak a többszörös kvantumvölgyet (MQW – Multiple Quantum Well) tartalmazó nanostrukturás napelemek. [19] [20] [21]. Ezeknél a napelemknél a kvantumvölgyek szélessége és a mélysége a vékonyréteg anyagának és vastagságának a megválasztásával állítható be. A 8. ábrán egy ilyen struktúra látható. A többszörös kvantumvölgyeket tartalmazó napelemek hatásfoka a 40 %-ot is meghaladhatja.



8. ábra. A többszörös kvantum völgyes napelemek struktúrája, (A) rétegábra, (B) sávábra (forrás: [22]).

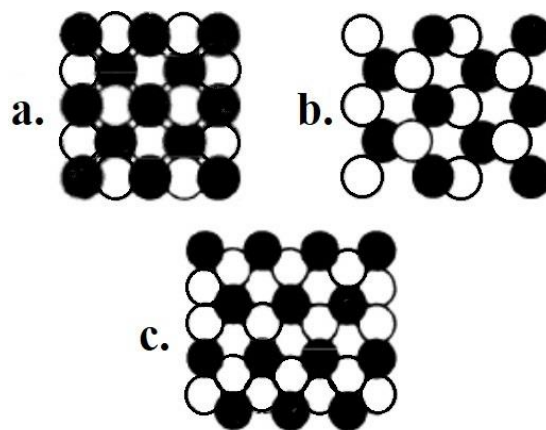
A másik lehetőség az, hogy a tiltott sávban egy közbenső kvantum pont réteget hozunk létre (IBQD - Intermediate Band Quantum Dot). E kvantum pont réteg(ek)nek köszönhetően a napelem a fotonok szélesebb hullámhossztartományát tudja abszorbeálni, így több elektron keletkezik. A kvantum pontokat tartalmazó napelemekről részletesebben a 4. fejezetben lesz szó.

2 GaAs és rokon anyagok tulajdonságai

A vegyület- félvezető anyagokat a huszadik század közepén fedezte fel H. Welker [23] [24] [25]. Ezt követően a kutatók hamarosan kísérleti úton és számításokkal is igazolták, hogy a III-V vegyület-félvezetők hasonló félvezető tulajdonságaik vannak, mint a Si-nak és a Ge-nak. Ezek a vegyület-félvezetők olyan anyagok, amelyeknél az egyik elem a periódusos rendszer III. főcsoportjába (pl. Ga, In) a másik elem a periódusos rendszer V. főcsoportjába (pl. As, P) tartozik. Később felfedezték, hogy ezeknek az anyagoknak számos olyan fontos tulajdonsága van, melyek adott esetben előnyösebbek, mint az addig ismert elemi félvezetőknek. Egy jó példa erre a töltéshordozók nagyobb mozgékonyasága. Emiatt a III-V vegyület-félvezetők gyorsan a kutatók figyelmének a középpontjába kerültek.

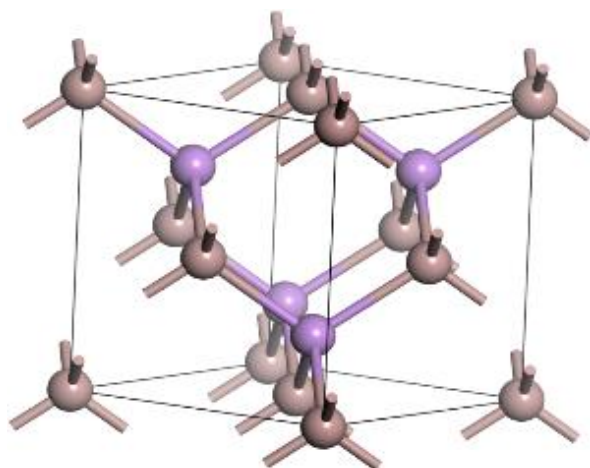
A GaAs és rokon anyagok, mint pl. az InP a III-V alapú vegyület-félvezetők családjába tartozik. A GaAs és az InP kristályszerkezete hasonlít a gyémántéhoz. A III-V vegyület-félvezető anyagok kristályszerkezete cinkblende. A gyémánt és a cinkblende szerkezetet úgy képzelhető el, mint két lapcentrált köbös rács, amelyek egymáshoz képest egynegyed testátlóval el vannak tolva. Például a GaAs esetében az egyik alrács a Ga atomokból, míg a másik As atomokból áll [26] [27] [28] [29] [30] [31] [32] [33].

A GaAs hordozónak három fő jellemző kristálytani iránya van [6] [26]. Ezek a (100), az (110) és az (111) kristálytani síkok. Ezen kristálytani síkok felületi szimmetriája a 9. ábrán látható. Mindegyik As atom az adott (100) felületen két kötéssel csatlakozik Ga atomokhoz a réteg alatt, a másik két kötés szabadon van (9/a. ábra). Az (110) sík ugyanannyi Ga és As atomot tartalmaz, minden atomnak van egy kötése a réteg alatt (9/b. ábra). Az (111) felületen három kötéssel csatlakozik a réteg alatt Ga atomokhoz, a negyedik kötés szabad (9/c. ábra).



9. ábra. GaAs atomjainak elhelyezkedése felületen adott sík esetén. Az (a.) {100} felülethez tartozó atomok elhelyezkedése, a (b.) az {110} felülethez tartozó atomok elhelyezkedése, a (c.) a {111} felülethez tartozó atomok elhelyezkedése. Az üres körök a gallium, míg a fekete betöltött körök az arzén atomok (forrás: [6])

Az 10. ábrán a GaAs és az InP kristályszerkezete látható, ahol a barna gömbök a Ga ill. In atomokat, míg a lila gömbök az As ill. P atomokat jelképezik. A gyémánt és a cinkblende rácsoknál minden atomot a legközelebbi négy szomszédja veszi körül. Gyémántrács esetén az atomoknak négy vegyérték elektronja van. A kémiai kötést az egymáshoz két legközelebbi atom között a két vegyérték elektron alakítja ki ellentétes spinekkkel. Cinkblende rács esetén a szomszédoknak eltérő számú vegyérték elektronja van, de a vegyértékelektronok számának az összege a két legközelebbi szomszédnak mindig nyolc. Minden atomnak átlagban négy vegyértékelektronja van a kötések kialakítására.



10. ábra. A GaAs és az InP kristályszerkezete. A barna gömbök a Ga (In) atomokat, míg a lila gömbök az As (P) atomokat jelképezik.

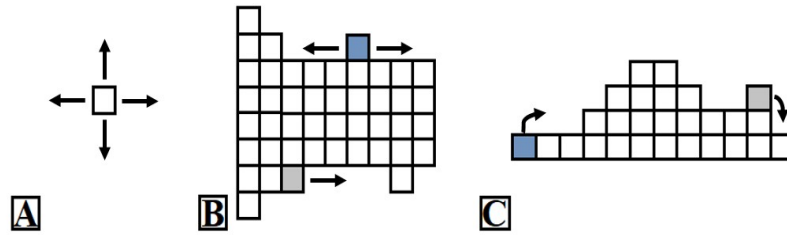
Ahogy az epitaxiával foglalkozó fejezetben is látni fogjuk a GaAs felülete úgy keletkezik a tökéletes kristályból, hogy egy adott kristálytani irányban (pl. a (001) sík mentén) a tömbi anyagot elvágjuk. Ennek a folyamatnak a következtében kristályhiba keletkezik, hiszen számos olyan Ga és As atom lesz a felületen, amelyeknek egy vagy több szabad kötőelektronja lesz, azaz szabad kötések alakulnak ki. Ezen kötések jelenléte több szempontból is kedvezőtlen, hiszen ezek a szabadon lévő kötőelektronok a rendszer összenergiáját növelik. Azért, hogy ezt az összenergiát a rendszer csökkentse felületi relaxáció vagy felületi rekonstrukció lép fel [34] [35].

A felületi migráció egy lehetséges modellezési módjával a 3.2 fejezetben foglalkozom [27]. A felületi migráció leírásához, tekintsünk egy rendszert (a hordozó, ill. a felületi atomok), ahol az adott c_i konfigurációban van az i . iterációban. Minden lépésben c_i konfigurációból a c_{i+1} konfigurációba való átmenet valószínűsége $P(c_i \rightarrow c_{i+1})$. Ha pl. egy atom elmozdul egyik pozícióból egy másikba, akkor az egy új konfigurációnak felel meg. Ha n lehetséges új konfigurációnk van, akkor n darab $P_k(c_i \rightarrow c_{i+1})$ valószínűség értékünk van, ahol k a folyamat száma. Ez a valószínűség az E_a aktivációs energiától és a termikus energiától függ:

$$P_k = e^{-\frac{E_a}{k_B T}}, \quad (5)$$

ahol a k_B a Boltzmann állandó és a T a hőmérséklet. A felületi diffúzióknak többféle formája van, melyek a 11. ábrán láthatók.

A 11/A. ábrán az egyszerű felületi diffúzió látható felülnézetből. 11/A. ábrán az egyszerű felületi diffúzió látható felülnézetből. 11/B. ábrán a lépcsők éle mentén történő diffúzió látható szintén felülnézetből. 11/C. ábrán a lépcsőre fel ill. a lépcsőről történő leugrás látható, oldalnézetből.

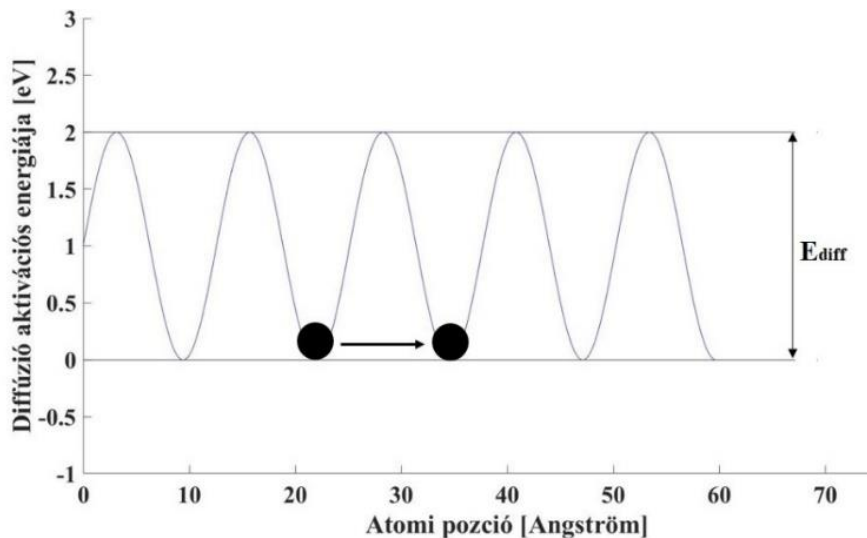


11. ábra. A felületi diffúzió típusai. (A) egyszerű felületi diffúzió, felülnézetből. (B) a lépcsők éle mentén történő diffúzió, felülnézetből. (C) ábrán a lépcsőre fel ill. a lépcsőről történő leugrás látható, oldalnézetből.

Az (5) egyenletben az E_a aktivációs energiát a következő összefüggéssel lehet kiszámítani [28] [29]:

$$E_a = E_{diff} + n * E_{kötési} + \gamma * E_{es}, \quad (6)$$

ahol az E_{diff} a szabad felületi diffúzió aktivációs energiája (12. ábra).

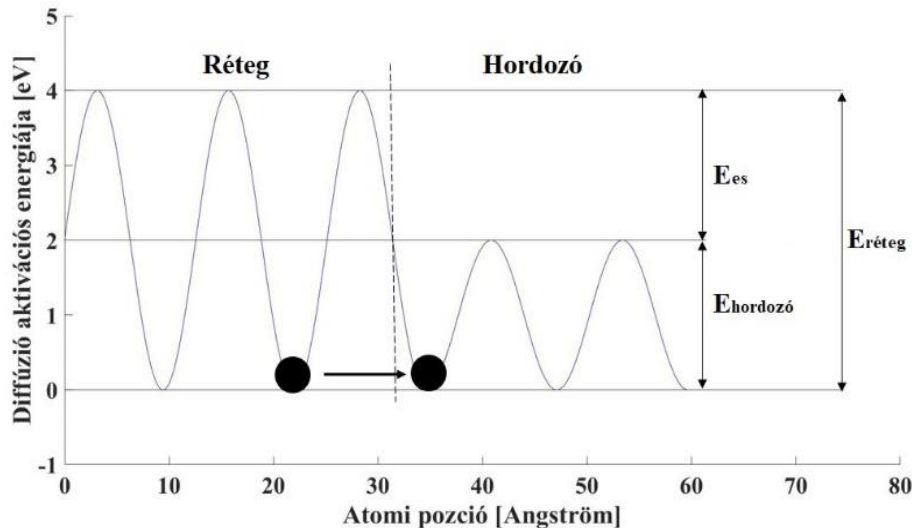


12. ábra. A felületi diffúzió. A hullámvonal a periodikus potenciált jelképezi, ahol az E_{diff} a szabad felületi diffúzió aktivációs energiája.

Az $E_{kötési}$ az atom és a szomszéd atom kötési energiája, az n a szomszédok száma. A 11/B. ábra esetében a kék színnel jelölt atom szomszédjainak száma 2, mert ahhoz, hogy elmozduljon az él mentén két kötést kell elszakítani (egyik szomszéd az alatta, a másik a mellette lévő atom). Ugyanezen a részábrán a szürke színnel jelölt atom szomszédjainak száma 3 (egy szomszéd atom alatta, egy mellette, egy mögötte). Az γ értéke 1, ha az atom felugrik a lépcsőre, vagy leugrik róla és 0, ha nem. Az E_{es} az úgynevezett Erlich-Schwöbel barrier [30] [31], amit a következő képlettel lehet kiszámolni:

$$E_{es} = E_{hordozó} - E_{réteg}, \quad (7)$$

ahol az $E_{hordozó}$ a hordozó diffúziós aktivációs energiája és az $E_{réteg}$ a réteg diffúziós aktivációs energiája [30]. A 13. ábrán látható példában az $E_{réteg} = 4 \text{ eV}$, az $E_{hordozó} = 2 \text{ eV}$, így a (7) képlet értelmében az $E_{es} = 2 \text{ eV}$. A hullámvonal itt is a periodikus potenciált jelképezi. A fekete kör az atom, ami felületi diffúzió útján átkerül a rétegről a hordozóra.

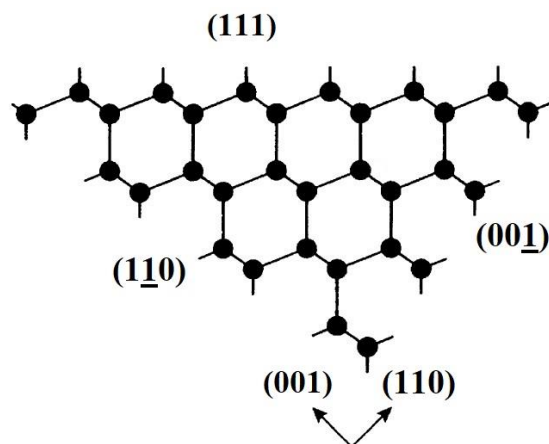


13. ábra. Erlich-Schwöbel barrier. A hullámvonal a periodikus potenciált jelképezi.

A diffúzióval GaAs hordozó felületén számos kutató foglalkozott már az elmúlt években [31] [32] [33] [36]. A Ga felületi diffúzióját is megvizsgálták többféle elorientált hordozón, pl. T. Shitara et. al. [34]. Megvizsgálták továbbá a felületen migráló adalékatomok diffúziós hosszát, és MBE-vel növesztett anyagba való beépülését is, elméleti és kísérleti úton pl. T. Nishinaga et. al. [35]. Bebizonyították, hogy az atomok migrációs sebessége különböző pl. Y. Horikoshi et. al. [37]. Ezeket a kutatásokat jól összefoglalja a D. J. Fisher et. al. [38].

Az epitaxiás rétegnövesztés során fontos szerepe van a felületnek. A felületet jellemző paraméterek közül az egyik pl. a felületi szimmetriája. A felület makroszkópikus szempontból a szilárdtest külső része, amit hagyományos módszerekkel alakítható ki, úgymint vágással, polírozással, és marással. Ebben a megközelítésben a felület egy interfész a környezet és a tömbi anyag között, ahol oxid réteg alakul ki. Mikroszkópikus értelemben a felület atomi értelemben sima és tiszta kristálysík, ami egy ugrásszerű átmenetet hoz létre a tömbi szilárdtest és az ideális vákuum vagy gáz között. A felület az ideális kristály elvágása során keletkezik. Ebben az esetben a felület első monorétegében az atomok nem kötődnek olyan erősen a kristályhoz, mint az elvágás előtt. A vágás következtében az atomok koordinációs száma megváltozik. Tulajdonképpen egy vagy több kötés hiányzik, így szabad kötések keletkeznek (14. ábra).

Néhány kristálytani irányban, mint a (001) és (111), a felülről és az alulról látható oldal nem ugyanaz. Ezzel ellentétben az (110) felület nem poláros, és az atomi elrendezés csak relaxációt enged meg. A (001) és az (111) felületet egyaránt terminálhatja anion és kation is ezek a poláros felületek elektrosztatikailag nem stabilak, így a felület újrendeződik, hogy elektrosztatikus potenciál alakuljon ki. A felületi atomok újrendeződése feszültséget okoz, ami deformálja a felületet. A rekonstrukció nem csak a legfelső rétegre korlátozódik, az atomi elmozdulások a következő rétegekben viszonylag kicsiknek vélhetőek.



14. ábra. (111)-es orientációjú rekonstruálatlan felület (forrás: [39]).

Energetikai szempontból nézve, egy tökéletes, végtelen kristályban mindegyik atom egyensúlyi helyét a kristályban lévő más atomok hatására ébredő erők határozzák meg. Ez az erőhatás rendszer egy periodikus kristálystruktúrát alakít ki oly módon, hogy a rendszer összenergiája legkevesebb legyen. Ha a kristályt egy adott kristálytani sík mentén elvágunk, akkor ott egy felület alakul ki. Ezen a felületen az atomok által gerjesztett erők megváltoznak az ideális végtelen kristályhoz képest és a maradék atomok egyensúlyi helyzete is más lesz. Ennek az az oka, hogy az atomokra a felület síkjának közelében csak egy irányból, a tömbi anyagban lévő atomok közötti erők hatnak. Ez az egyensúlytalanság azt okozza, hogy az atomok helyzete a felület közelében más lesz. Ez egyaránt jelentheti az atomi távolságok és a szimmetria megváltozását is, teljesen más felületi struktúrát alkotva.

A kristály felületek struktúrája öt egyszerű kémiai és fizikai alapelv határozza meg [40], melyek a következők: (1) szabad kötések telítése, (2) szigetelő felület kialakítása, (3) felületi rendezettség/újrarendezés kinetikájának figyelembevétele, (4) elektromosan semleges felületi kialakítása, (5) kötéstávolságok megtartása.

A korábban már említett szabad kötések jelenléte energetikai szempontból nézve kedvezőtlen. Az atomok között ható erők hatására az atomok újrarendeződnek úgy, hogy azok energetikailag kedvezőbb helyzetbe kerüljenek. Ezt az energetikailag kedvező állapot úgy alakul ki, hogy a szabad kötések megszűnnek.

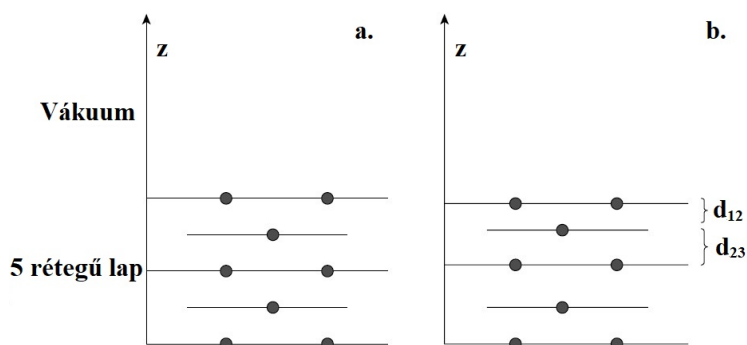
Ez szigetelő felület létrehozásával érhető el, azaz új kötések kialakításával a felületi atomok vagy a felületi adalékatomokkal. Ez azt jelenti, hogy egy sávot nyitunk az elfoglalt és a szabad felületi állapotok között. A felület szigetelővé válhat felület szerkezeti újrarendezése folytán, azaz felületi relaxáció vagy felületi rekonstrukció miatt, ami elektronokat ad át a felületi atomok között. Így a szabad kötő elektronok elektron párba állnak, azaz elektromosan semleges felület alakul ki. Ezen kötések létrehozó kormányzó erők közül az i . erőt az E_{teljes} összenergia gradiensének a minimalizálásával kaphatjuk meg, azaz

$$F(i) = -\nabla_{r(i)} E_{teljes}(r_1, r_2, \dots, r_N) = 0 \quad (8)$$

egyenlet megoldásával.

A relaxáció során az atomok helyzete az egész felületen megváltozik a tömbi anyagban lévő atomokhoz képest [41] [42]. Ekkor a felületi rétegek a felületre merőlegesen

mozognak, emiatt a rétegek közötti távolságok a szokásosnál kisebbek lesznek. A legtöbb fémnél ez a relaxáció lép fel. Néhány felületen nemcsak merőleges, hanem oldalsó irányban egyaránt fellép relaxáció, így a felső rétegek relatíve eltolódnak úgy, hogy a helyzeti energiájuk a legkisebb legyen. A felületi relaxáció hatása a 15. ábrán látható. Az (a) részábrán az ideális rétegelrendezés látható, míg a (b) részábrán az atomok relaxációja a felületre merőleges irányban (forrás: [41]).

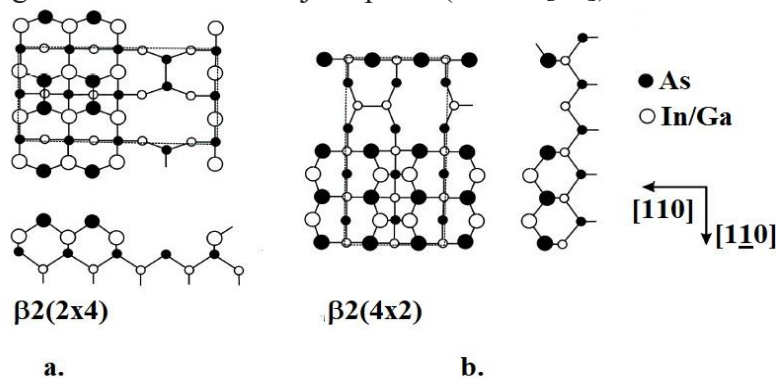


15. ábra. A felületi relaxáció hatása. Az (a) részábrán az ideális rétegelrendezés látható, míg a (b) részábrán az atomok relaxációja a felületre merőleges irányban (forrás: [41]).

A rekonstrukció során a felületi réteg kétdimenziós szerkezete és az egész réteg helyzete megváltozik. Például a köbös anyagnál a felületi réteg újra strukturálja önmagát úgy, hogy az atomok közötti kétdimenziós térköz minél kisebb legyen. A rekonstrukció egy vagy több rétegre hat a felületen, mely hatására a réteg összetomyszáma változatlan marad (megőrző rekonstrukció) vagy megváltozik a tömbi anyaghoz képest (nem megőrző rekonstrukció).

Vegyület-félvezetők esetében a felületi rekonstrukció leírása bonyolultabb az elemi félvezetőkhez és más fémekhez képest, mert a hőmérsékleten kívül a felületi rekonstrukcióba beleszól a felület sztöchiometriája is. A felületeket sűrűsöngű elektron sugaras technikával (Reflection High Energy Electron Diffraction RHEED) vizsgálják [43] [44] [45] [46] [47] [48] [49].

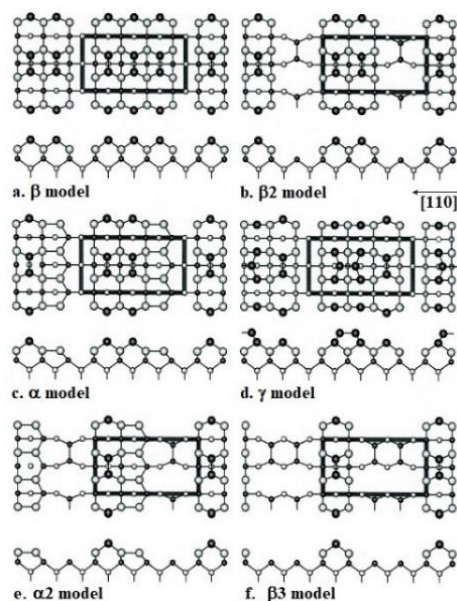
A vegyület-félvezetőknél a rekonstrukciókat az a körülmény okozza, hogy a hibrid pályák nem tudnak kötést kialakítani a felületen. Ezek a rekonstruálatlan felületek nem telítettek, így részben szabad kötések tartalmaznak, ami energetikailag nem kedvezők. A GaAs(001) felület számos elektromos és optoelektronikai eszköz szerkezetnek a kiindulópontja. Ezt a felületet egyaránt lezárhatják As vagy Ga atomok (16. ábra). A nagyobb körök a felső rétegekben lévő atomokat jelképezik (forrás: [50]).



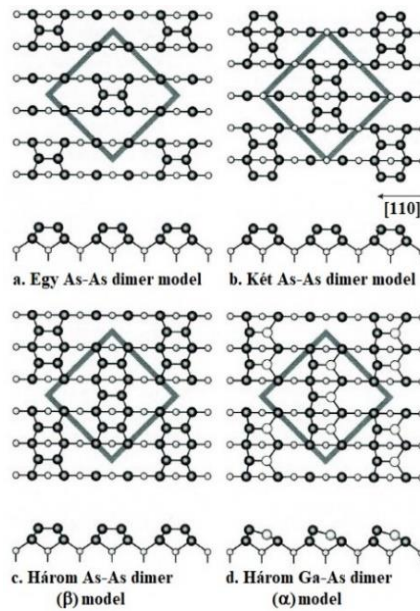
16. ábra. As lezárt felület (a.), Ga lezárt felület (b.). A fekete pontok az As, míg az üres pontok az In/Ga atomok (forrás: [25]).

A GaAs felületén mindegyik felületi atomnak két szabad kötése van. A GaAs(001) felületénél (hasonlóan a többi GaAs felülethez), a felület sztöchiometriája nagyon fontos ellentétben az elemi félvezetőkkel. Ennek az az oka, hogy a kémiai összetétel erős hatással van a kristályszerkezet periodicitásra. Stabil felület esetében az elektro-negatív atom (As) szabad kötése betöltött, míg az elektro-pozitív atom (Ga) szabad kötése üres [51] [52]. Amennyiben ezek a feltételek teljesülnek akkor a felület félvezető tulajdonságú, ha a szabad kötések csak részben vannak betöltve, akkor a felület fémes tulajdonságú. A rekonstrukcióknak nagyon bonyolult fázis diagramja van minden anyaghoz és orientációhoz.

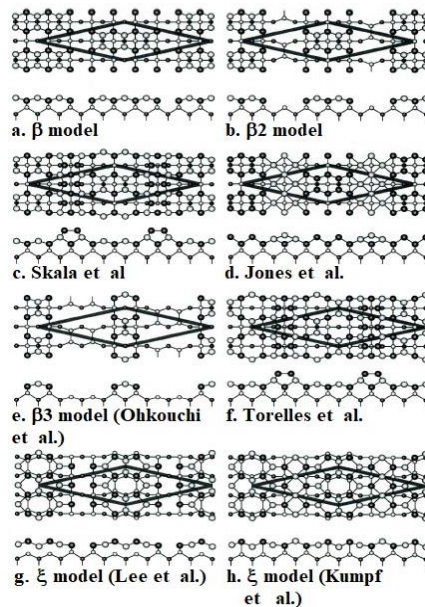
Az első közelítésben kétféle rekonstrukciós fázist veszünk figyelembe. Az első fázisnál, ha a hőmérséklet alacsony As-gazdag, míg a második fázisnál, ha a hőmérséklet magas Ga-gazdag felület alakul ki. GaAs esetén az As-gazdag elrendezések a (2x4) (17. ábra), c(2x8), c(4x4) (18. ábra), míg Ga-gazdag elrendezések a (4x2), c(8x2), (6x6), (4x6) (19. ábra). Ezek között vannak ideiglenes rekonstrukciók is, úgymint (3x1) vagy (1x6). Ideiglenes rekonstrukcióról akkor beszélünk, ha változik az As/Ga arány. A szimmetria miatt egy bizonyos rekonstrukció különböző atomi elrendezéseket takarhat. A (2x4) egy speciálisan stabil rekonstrukció. A c(4x4) felület szintén speciális, mert egyes szerzők Ga-gazdagnak tekintik, míg más szerzők szerint As-gazdag [44] [53] [54].



17. ábra. A (2x4)-es rekonstrukció szerkezete As gazdag GaAs (001)-es felületen (forrás: [55]).



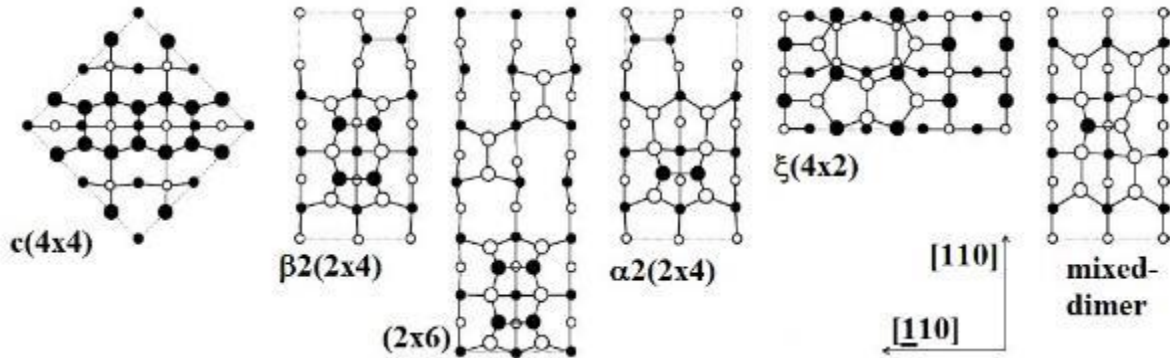
18. ábra. A (4x4)-es rekonstrukció szerkezete As gazdag GaAs (001)-es felületen (forrás: [55]).



19. ábra. A (8x2)-es rekonstrukció szerkezete As gazdag GaAs (001)-es felületen (forrás: [55]).

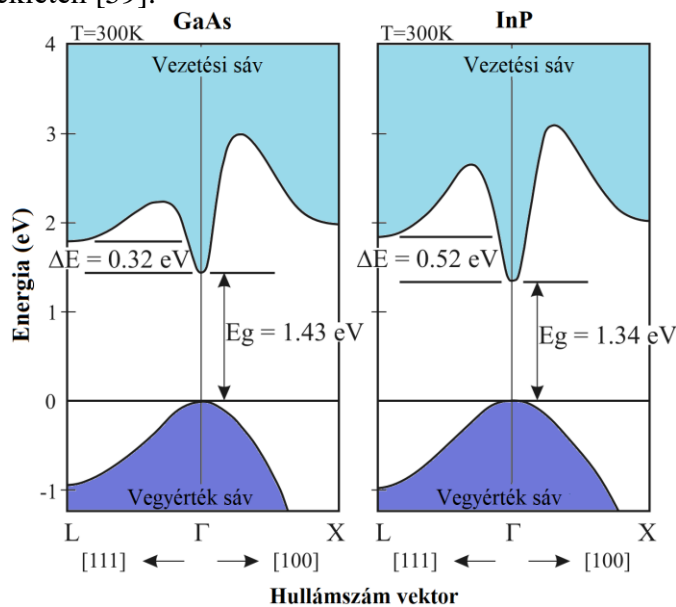
A növekvő GaAs hordozón a leggyakoribb rekonstrukció a $\beta_2(2 \times 4)$, ami a $[1\bar{1}0]$ irányban vonalakat mutat, melyek As dimer párokból áll, melyek között Ga árkok vannak. Ez a felületet As-lezárt felületnek nevezzük. A növesztés alatt ez tökéletes felületnek számít maximális reflektivitással, habár a felület nem sík. A Ga indukált növesztésnél a kiindulási felület (2×4) -es, ami As atmoszférában alakult ki [48] [56]. Ahogy a rétegek egyre jobban növekednek, a felület egyre durvább lesz, a RHEED oszcilláció lecseng és a visszavert pont intenzitás minimumra csökken. Ebben az esetben a Ga-gazdag felület (4×2) -es rekonstrukciót mutat [56]. A felület hőkezelésével As atmoszférában maximális intenzitás érhető el. Az ismétlődő pont intenzitás növekedésével a (2×4) -es rekonstrukció újra megjelenik [43] [48] [56]. A különféle felületi rekonstrukciókhoz különböző felületi sztöchiometria, ill. más és más RHEED intenzitás tartozik [55].

A 20. ábrán relaxált GaAs(001) felületi struktúrák láthatók, a Ga fedettség sorrendjében. Az üres körök a Ga atomok, míg a telített körök az As atomok. A 16. ábrához hasonlóan, a nagyobb körök a felső rétegekben lévő atomokat jelképezik (forrás: [50]).



20. ábra. A relaxált GaAs(001) felületi szerkezetek a Ga fedettség sorrendjében. Az üres körök a Ga atomok, míg a telített körök az As atomok. A nagyobb körök a felső rétegekben lévő atomokat jelképezik (forrás: [50]).

A kötések kvantummechanikailag az sp^3 -hibrid hullámfüggvényekkel írhatók le. A III-V anyagoknál kétféle kötéstípus létezik. Ezek a kötések nagyrészt kovalensek, kisebb részben ionosak. Az energiasávok alakja és a sáv extrémumok helye megtalálható a szakirodalomban [57] [24]. A III-V vegyület-félvezetők legnagyobb részének direkt sáv szerkezete van, ellentétben az elemi félvezetőkkel, pl. a Si-mal. A 21. ábrán látható, hogy a GaAs és az InP anyagok direkt tiltott sávú félvezető anyagok. Ez azt jelenti, hogy a vezetési sáv minimuma és a vegyértéksáv maximuma azonos hullámszám értéknél van. Emiatt a vegyértéksáv és a vezetési sáv közötti átmenetnél csak az energia változik a hullámszám nem, ellentétben az indirekt tiltott sávú anyagokkal, ahol a hullámszám is más lesz (pl. Si). A GaAs-nek gömbszimmetrikus parabolászerű sávjai vannak, a vezetési sávban 0,08 effektív tömeggel, míg a könnyű lyuk tömege 0,2, a nehéz lyuk tömege 0,68 [58]. Abszorpciós mérések alapján a tiltott sáv szélessége 1,521 eV 21 Kelvin, 1,511 eV 90 Kelvin és 1,435 eV 294 Kelvin hőmérsékleten [59].

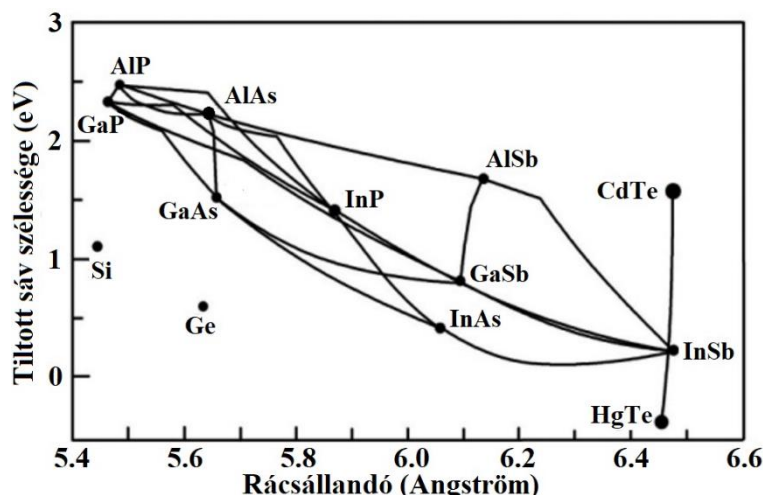


21. ábra. A GaAs és az InP energiasáv szerkezete (forrás: [60]).

A III-V vegyület félvezetők nemcsak két, hanem három vagy négy különböző atomból

is állhatnak. Az összettel megváltoztatásával a sávstruktúra és a tiltott sáv is megváltozik. A 22. ábrán a tiltott sáv szélessége és a rácsállandó közötti összefüggés látható, különböző elemi félvezető és vegyület-félvezető anyagok esetén.

Az optikai emisszió és abszorpció alapvető fizikai folyamatok, az optikai energia elektromos energiává (pl. napelemek) vagy elektromos energia optikai energiává (pl. LED-ek) való átalakítása során. Az optoelektronika területe ezen a két folyamaton alapul. Ahogy az 1. fejezetben is utaltunk rá a napelem működése optikai energia – elektromos energia átalakítás jelenségén alapul. Ahhoz hogy megfelelően leírassuk ezt a jelenséget egyrészt a fény tulajdonságait, másrészt a fény-félvezető anyag kölcsönhatást kell figyelembe vennünk.



22. ábra. A tiltott sáv szélessége és a rácsállandó összefüggése, különböző elemi félvezető és vegyület-félvezető anyagok esetén (forrás: [61]).

Max Planck és Albert Einstein munkásságának köszönhetően ma már tudjuk, hogy a fényt nemcsak hullám formalizmussal írhatjuk le, hanem részecskének is tekinthetjük. A fény legkisebb kvantummechanikai egysége a foton. A fotonok sebességét egy adott anyagban a következő módon határozhatjuk meg [62]:

$$c = \frac{c_0}{n}, \quad (9)$$

ahol a c_0 a fénysebesség értéke vákuumban (ennek értéke $3 \cdot 10^8$ m/s), c a fénysebesség értéke az adott anyagban és az n az anyag törésmutatója. Ez a törésmutató több tényezőtől függhet, többek között a hőmérséklettől [63], a szabad töltéshordozó koncentrációtól is [64]. Amennyiben törésmutató hőmérséklet függését vesszük figyelembe [63], akkor azt az értéket a következő empirikus formulával határozhatjuk meg:

$$n(T) = 3,255 * (1 + 4,5 * 10^{-4} * T), \quad (10)$$

ahol a T a hőmérséklet (Kelvinben), az $n(T)$ pedig a hőmérsékletfüggő törésmutató. A fotonok (5) képlettel kiszámolt sebessége, ill. frekvenciájuk vagy hullámhosszuk ismeretében az E_f foton energia a következő képlettel számolható ki:

$$E_f = h * \nu = \frac{h * c}{\lambda}, \quad (11)$$

ahol a h a Planck állandó, a ν a fény frekvenciája, a c a fénysebesség az adott anyagban és a λ a fény hullámhossza.

Félvezetőkben az elektromos és optikai tulajdonságokat az adott anyag sávszerkezete határozza meg. A 1. fejezetben megemlítettük, hogy a napelem oly módon alakítja át az energiát, hogy a naptól érkező fotonok a pn átmenetben töltéshordozó párokat generálnak. Ahhoz, hogy ez a töltéshordozó generáció létrejöjjön, két feltételnek kell teljesülni: (1) energia megmaradás feltétele (2) impulzus megmaradás feltétele. Az (1) feltétel mindig, míg a (2) feltétel nem minden esetben teljesül. Az impulzus megmaradás feltételének a megsértésére jó példa az indirekt tiltott sávú félvezetők esete, hiszen itt az impulzus elvész, mert a vezetési sáv minimuma és a vegyérték sáv maximuma nem ugyanahhoz a hullámszámhoz tartozik. Emiatt a fotonok gerjeszteni kezdi a félvezető anyag kristályrácsát és rácsrezgések (fononok) keletkeznek és nemcsak elektron-lyuk párok. Emiatt a foton szükséges energiája a következő összefüggéssel állapítható meg:

$$E_f = E_g \pm E_p, \quad (12)$$

ahol az E_g a félvezető anyag tiltott sávjának a szélessége, az E_p pedig a rácsrezgések energiája. A (8) képlet szerint foton energiája egyaránt lehet nagyobb és kisebb is a tiltottsáv szélességénél. Indirekt tiltottsávú félvezetőknél az elektron átmenettel kapcsolatban a fononok generációja hatszor nagyobb, mint a fononok vesztesége. Emiatt több fotonnak van $E_g - E_p$ energiája, mint $E_g + E_p$ energiája. Kvantummechanikából ismert, hogy az összes együttes elektron és fonon átmenet valószínűsége nagyon kicsi. Emiatt az indirekt tiltottsávú félvezetőknél a sugárzásos rekombináció négy-hat nagyságrenddel kisebb a direkt tiltott sávú félvezetőkéhoz képest. Emiatt a Si-ből nem lehet LED-eket készíteni [62]. Mivel a GaAs direkt sávú félvezető, így ebben a vegyület-félvezetőben a rácsrezgések energiája elhanyagolható ($E_p \approx 0$) [62].

Az adott felületre eső P_{opt} optikai teljesítmény a következő formulával határozható meg:

$$P_{opt} = E_f * \Phi * A, \quad (13)$$

ahol az E_f a foton energiája, a Φ a fotonfluxus időegységenként, adott A felületen. Az anyagba behatoló optikai teljesítmény a Lambert-Beer törvénnyel írható le:

$$P(x) = P_{opt} * e^{-\alpha * x}, \quad (14)$$

ahol a P_{opt} az adott felületre eső optikai teljesítmény, x a behatolási mélység és α az abszorpciós tényező. Utóbbi tényező a következő képlettel határozható meg [65]:

$$\alpha = \frac{4 * \pi * k}{\lambda}, \quad (15)$$

ahol a α az abszorpciós tényező, a k a hullámszám, a λ a hullámhossz. Amennyiben az $E_f > E_g$ Az abszorbeált fotonok elektron-lyuk párokat generálnak. Az adott térfogatban generált töltéshordozók aránya ($G(x)$), a következő módon számolható ki:

$$G(x) = \frac{\alpha * P_{opt}}{A * h * \nu} * e^{-\alpha * x}, \quad (16)$$

ahol az α az abszorpciós tényező, P_{opt} az adott felületre eső optikai teljesítmény, x a behatolási mélység, A a felület, h a Planck állandó, a ν a fény frekvenciája.

A vegyület-félvezető anyagok másik előnye Si-mal szemben a nagyobb töltéshordozó mozgékonyosság és a nagyobb telítési sodródási sebesség. Ezek az előnyök lehetővé teszik, hogy nagyfrekvenciás, pl. mikrohullámú tartományban működő eszközöket készítsünk.

Félvezetőben a töltéshordozókra elektromos tér hatására elektrosztatikus erő hat ($F = -q * E$) és gyorsulni kezdenek az elektromos tér mentén [7] [66]. A mozgás során ütköznek más töltéshordozókkal és a rácsatomokkal és elérnek egy adott sebességet az elektromos tér függvényében. A sodródási sebesség (v_d) arányos az elektromos térerősséggel, az arányossági tényező a töltéshordozók mozgékonyossága. Ez a mennyiség többféle eljárással is meghatározható, pl. annak függvényében, hogy intrinsic vagy adalékolt félvezetőről van szó.

A sodródási sebesség képlete a következő:

$$v_d = -\left(\frac{\tau_c}{m^*}\right) * F = -\left(\frac{\tau_c}{m^*}\right) * q * E = -\left(\frac{q * \tau_c}{m^*}\right) * E = \mu * E, \quad (17)$$

ahol a q az töltéshordozó töltése, az E az elektromos térerősség, az m^* a töltéshordozó tömege, a τ_c az ütközések között eltelt átlagos idő, a μ pedig a mozgékonyosság. A mozgékonyosság egy nagyon fontos paraméter a töltéshordozók transzportjánál, mert ez a paraméter leírja azt, hogy az elektromos tér milyen erősen hat a töltéshordozóra. A (17) egyenletből látszik, hogy a mozgékonyosság közvetlen kapcsolatban van az ütközések között eltelt átlagos idővel. A töltéshordozók egyaránt ütközhetnek rácsatomokkal és az adalékatomokkal is. A rácsatomokkal való ütközések rácsatomok vibrációjából adódnak, ez a hőmérséklettel arányosan növekszenek, és különösen dominánssá válnak magas hőmérsékleten. Ezzel arányosan a mozgékonyosság lecsökken a hőmérséklet növekedésével. Ezzel szemben a adalékatomokkal való ütközés, ahol a töltéshordozó az ionizált adalékatomokkal ütközik kevésbé jelentős magas hőmérsékleten.

A töltéshordozók sodródási sebességét a térerősség függvényében a következő formula írja le [67]:

$$v(E) = \frac{\mu_0 * E + (3 * v_{kr} - 2 * \mu_0 * E_{kr}) * \left(\frac{E}{E_{kr}}\right)^2 + v_t * \left(\frac{2 * v_{kr} - \mu_0 * E_{kr}}{v_{kr} - v_s}\right) * \left(\frac{E}{E_{kr}}\right)^3}{1 + \left(\frac{2 * v_{kr} - \mu_0 * E_{kr}}{v_{kr} - v_s}\right) * \left(\frac{E}{E_{kr}}\right)^3}, \quad (18)$$

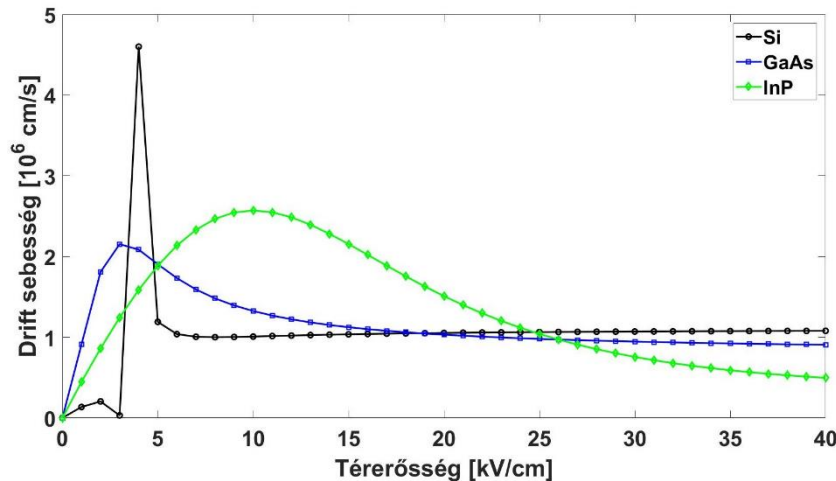
ahol v a töltéshordozó sebessége, E az elektromos térerősség, μ_0 töltéshordozó mozgékonyosság (kis térerősségek esetén), v_t a töltéshordozó telítési sebessége v_m a maximális töltéshordozó sebesség és E_{kr} a kritikus térerősség.

Az elektronok mozgékonyossága (kis térerősségek esetén), telítési sebessége, maximális sebessége és maximális térerőssége Si, GaAs és az InP félvezetők esetén, $T = 300$ K hőmérsékleten az I. táblában láthatók (forrás: [68] (Si) és [67] (GaAs és InP).

	Si	GaAs	InP
μ_0 (cm ² /(V*s))	1400	7500	4600
v_s (cm/s)	$11 \cdot 10^6$	$8 \cdot 10^6$	$8 \cdot 10^6$
v_{max} (cm/s)	10^7	$21,6 \cdot 10^6$	$25,7 \cdot 10^6$
E_{kr} (V/cm)	8000	3200	10000

1. táblázat. Az elektronok mozgékonyága Si, GaAs és az InP félvezetők esetén, T = 300 K hőmérsékleten (forrás: [68] (Si) és [67](GaAs és InP)).

Az elektronok sodródási sebessége a térerősség függvényében Si (fekete kör), GaAs (kék négyzet) ill. InP (zöld ferde négyzet) hordozó esetén T = 300 K hőmérsékleten a 23. ábrán látható, melyet az I. tábla adatai alapján rajzolunk meg. Az itt látható sodródási sebességeknél a kis térerősségek esetén használt mozgékonyágot vettük figyelembe (tehát feltételeztük, hogy $E < E_{kr}$). Amennyiben kritikusnál nagyobb a térerősség, akkor a sodródási sebesség csökkenni kezd és a mozgékonyág is megváltozik [69].

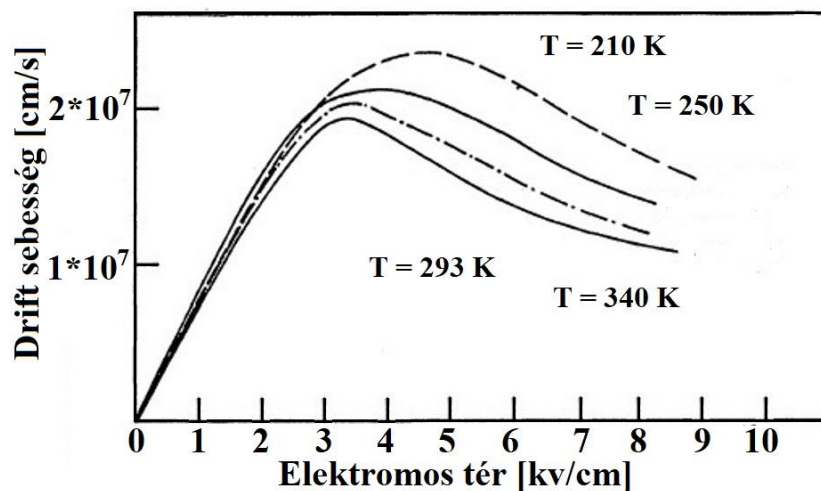


23. ábra. Az elektronok sodródási sebessége a térerősség függvényében, Si (fekete kör), GaAs (kék négyzet) ill. InP (zöld ferde négyzet) esetén, T = 300 K hőmérsékleten (forrás: [68] (Si) és [67](GaAs és InP)).

A töltéshordozók (köztük az elektronok) mozgékonyága nemcsak a térerősségtől hanem a hőmérséklettől is függ [70] [71].

Számos olyan modell is létezik, ahol egy matematikai modellben egyesítik a hőmérséklet és az elektromos tér és adalékolás függését, elektronokra és lyukakra egyaránt [72] [73]. A 24. ábrán egy ilyen görbesereget látunk, ahol a sodródási sebesség látható a térerősség függvényében, T = 210 K és T = 340 K hőmérséklettartományban, GaAs esetén [74].

A GaAs-ben a csúcs mozgékonyág a lineáris tartományban hatszor nagyobb a Si-nál tipikus térerősségek esetén. A tényleges művelet sebességnövekedést viszont más tényezők is befolyásolják, mint pl. az áramkörök kapacitásai és az elektromos tér tartománya, ahol az adott eszköz működik.

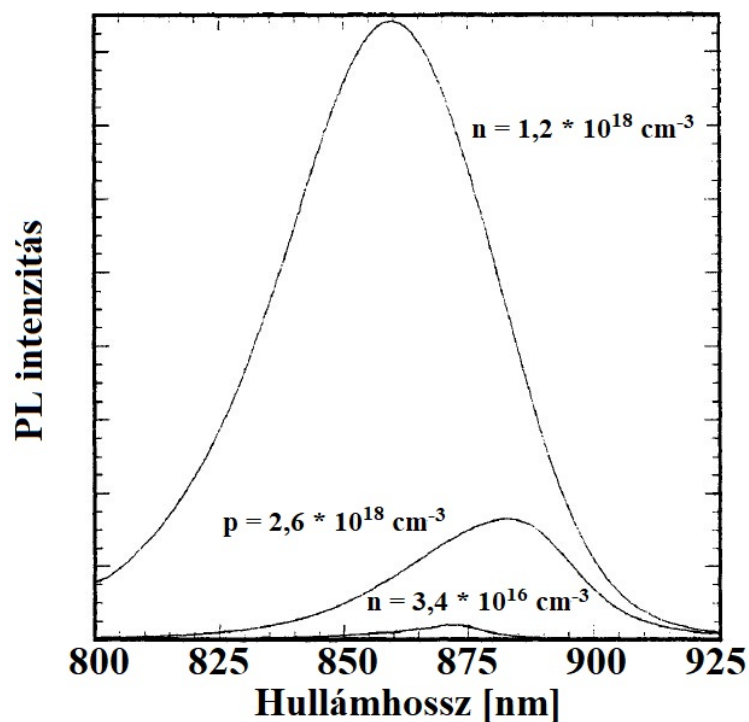


24. ábra. A sodródási sebesség a térerősség függvényében GaAs esetén, különféle hőmérsékleteken $T = 210$ K és $T = 340$ K hőmérsékletek között (forrás: [74]).

A félvezető anyagot többféle módon is lehet vizsgálni. Az egyik ilyen lehetőség a félvezető fotolumineszcenciás (PL) vizsgálata [75] [76]. A fotolumineszcencia egy olyan folyamat, amely során az anyag fotonokat nyel el, majd más a frekvenciákon kisugározza. Lényegében e folyamat során az elektronokat egy nagyobb energia állapotba gerjesztjük, majd azok visszajutnak egy alacsonyabb energia állapotba, mely során fotonkibocsátás történik.

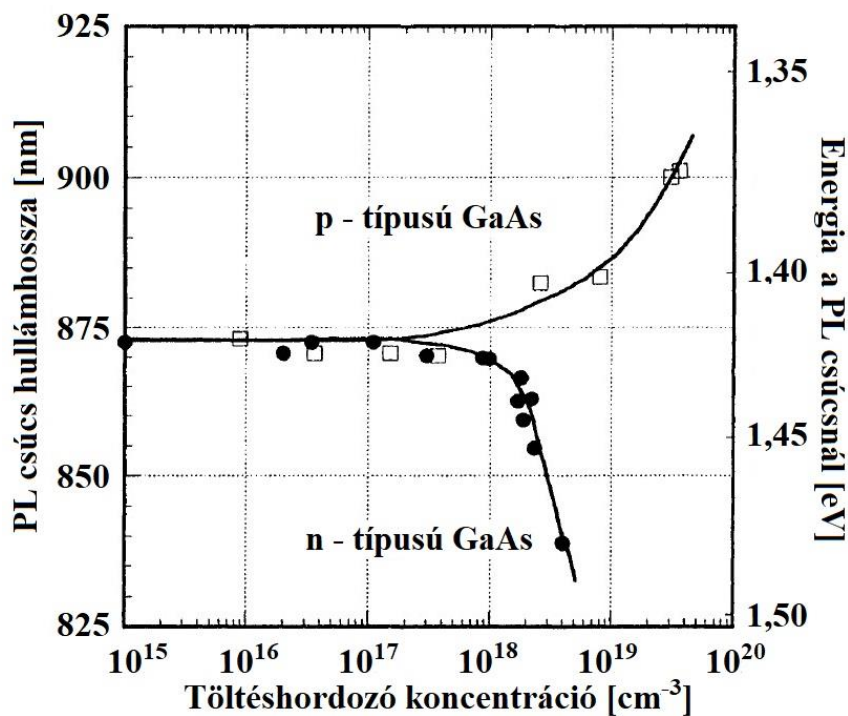
A PL leképezés a lyuk és elektron párok rekombinációjából származó fotonok térbeli és spektrális eloszlása. A PL jel többek között az anyag tiltottsáv szélességétől, adalékoltságától, elektromosan aktív hibáktól hordoz információt.

Ahogy a 25. ábrán is láthatjuk, szobahőmérsékleten a GaAs PL spektruma egy széles csúcsot tartalmaz [66]. Ahogy ezen az ábrán is látható, alacsony teljesítmény sűrűség és adalékolási szintnél a GaAs spectrum maximum 870 nm-nél van, ami megfelel a vegyértksávban lévő donor átmenetnek. Ezen feltételek esetén a PL csúcsának a szélessége kicsivel több, mint $k * T$ (ez 300 K hőmérsékleten ~ 22 nm)



25. ábra. GaAs fotolumineszenciás spektruma, szobahőmérsékleten ($T = 300\text{ K}$) (forrás: [66]).

Az n - típusú és p - típusú GaAs PL csúcsok helyei (hullámhossza és energiája) a töltéshordozó koncentráció függvényében szobahőmérsékleten, a 26. ábrán látható.



26. ábra. Az n - típusú és p - típusú GaAs PL csúcsok helyei (hullámhossza és energiája) a töltéshordozó koncentráció függvényében szobahőmérsékleten (forrás: [66]).

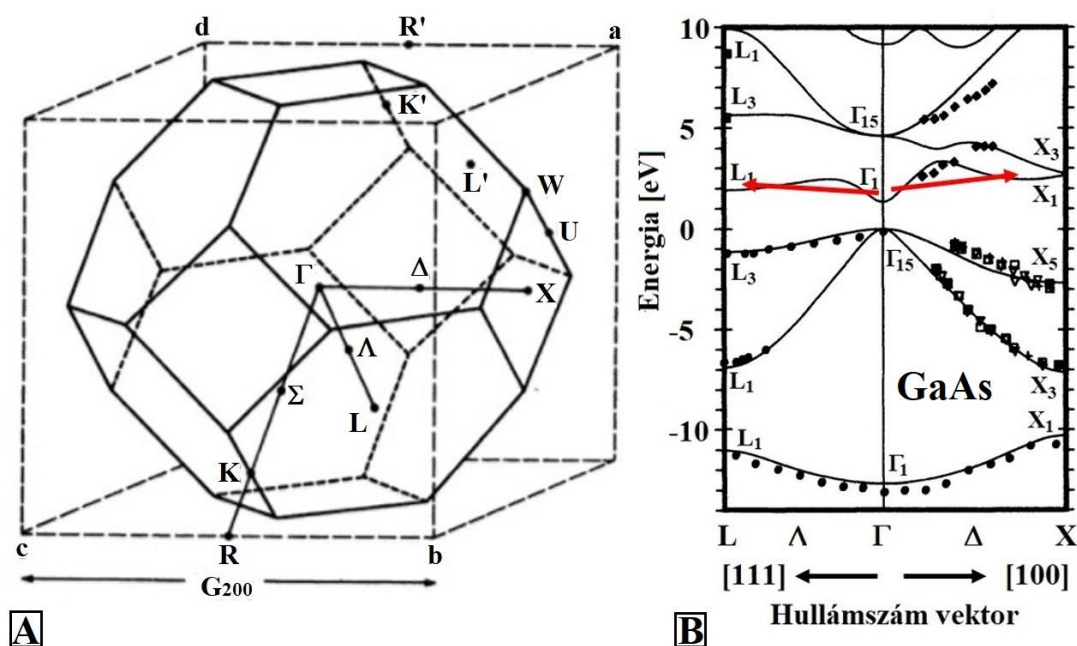
A PL vizsgálatnak két fő típusa van. Az egyiknél a pixeleket kép formájában összegyűjtjük, melyeket a minta felett lévő világító forrás segítségével raszterizáljuk és a PL pontokat sorban összegyűjtjük. A rendszer korábbi típusa a kis terület leképezése

pánkromatikus PL képképzés útján [77]. Az újabb megoldás a nanoskálájú PL leképezés, ami a pásztázószondás és közeltéri optikai mikroszkópiából származik [78] [79] [80]. A mintaelőkészítésnél fontos azonos előkészítő lépések megtétele (ugyanolyan kémiai, ill. oxid eltávolítási és növesztési lépések), valamint a felületi simasága is [66].

A GaAs harmadik előnye, hogy az ellenállása nagyon nagy lehet [7]. Ennek az az oka, hogy a tiltott sáv szélessége 1,43 eV, ami viszonylag nagyobb a Si-nál. A nem adalékolt GaAs-ben nagyon kevés intrinsic töltéshordozó van. Részben emiatt, másrészt az EL2 mélyszintek miatt is ez az anyag fél-szigetelő tulajdonságú [7]. A mélyszintek komoly mértékben hatnak az adott félvezető anyag vezetőképességére, ha a koncentrációjuk sokkal kisebb a töltéshordozó sűrűségénél [81]. A mélyszinteknek többféle hatása is lehet, pl. viselkedhetnek töltéshordozó csapdaként, rekombinációs központként vagy szórási központként. Ezáltal sokféle módon gyakorolhatnak hatást az integrált áramkörök teljesítményére. Ennek egyik megfigyelhető jele, hogy a negatív hordozó előfeszítés vagy a térerősség megnövekedése esetén a pn átmenetben a tértöltés tartomány vastagsága megnövekszik. A hordozón a csapdaállapotok elfoglaltságát befolyásolja a hőmérséklet, a megvilágítás, de a besugárzás is. A mélyszintek különféle típusai tömbi és epitaxiálisan növesztett GaAs esetén a [81] cikk I. táblázatában található meg. Ezen mélyszintek közül az EL2 mélyszinteket vizsgálták a legnagyobb mértékben [82] [83] [84] [85]. Ezt az érdeklődést az váltotta ki a kutatókból, hogy ettől a csapdatípustól függ az adalékolatlan GaAs fél-szigetelő képessége. Ez a csapdatípus tömbi és epitaxiálisan növesztett GaAs esetén egyaránt megtalálható (kivéve LPE vagy MBE eljárással készült rétegeknél). Az EL2 csapda egy As_{Ga} hibát és egy intersticiális helyen lévő As atomot tartalmaz (tehát az As és a Ga egy Frenkel párt alkotnak). Fontos megkülönböztető jegye a metastabil állapot. Az EL2 csapdák koncentrációját az As/Ga részecskeszám arány és a növekedési ráta határozza meg. Ez a csapdatípus rugalmas deformáció neutron besugárzás és ionimplantáció esetén is előfordul. Ez a csapdatípus lehetővé teszi, hogy a hordozón a különféle szomszédos eszközöket egymástól elszigeteljék, és eliminálják a parazita kapacitásokat, hasonlóan a Si alapú p-n átmeneteknél alkalmazott izolációs technikánál.

A GaAs és az InP negyedik előnye az úgynevezett átvitt elektron (transferred electron (TE)), másnéven Gunn effektus [7] [86] [87]. Ezt a jelenséget TED (transferred electron device) eszközök hasznosítják, melyek egyik képviselője az ún Gunn dióda. Ez az eszköz olyan két-kivezetéses, negatív ellenállású nemlineáris félvezető eszköz, amely megfelelő módon hangolt áramköri elemekkel együtt rezgékeltésre alkalmas, mikrohullámú frekvenciatartományban.

Bizonyos félvezetők esetén (pl. GaAs) az elektronok nagytömegű alacsony sebességű állapotba, ill. kis tömegű nagysebességű állapotba is kerülhetnek megfelelő térerősség hatására. Ezekben az állapotokban az állandó tér hatására az elektronok klasztereket alkotnak és pulzusszerűen mozogni kezdenek. Az energia momentum kapcsolat két energiaszintet (más néven völgyet) tartalmaz a Γ és a L (vagy az X) energiaszinteket. Az L völgyben az elektron effektív tömege nagyon nagy és a sebessége kicsi. A Γ völgyben az elektron effektív tömege kicsi és a sebessége nagy. A két völgy között az energiakülönbség GaAs esetén 0,32 eV [60]. Szobahőmérsékleten az elektronok a Γ völgy alján helyezkednek el. A nagy mozgékonyaságuk miatt erős elektromos tér hatására azonnal gyorsulni kezdenek és átkerülnek az L völgybe, ahol lelassulnak. A 27/A ábrán a GaAs Brilluoin zónája, míg a Gunn effektus a 27/B. ábrán látható.



27. ábra. (A) az GaAs első Brilluoin zónája (forrás: [88]), (B) a GaAs Brilluoin zónája síkban, a piros nyilak a Gunn-effektust szemléltetik (forrás: [89]).

3 GaAs-alapú napelemek technológiája

3.1 Az epitaxiáról általában

A 19. században ásványokkal foglalkozó kutatók megfigyelték, hogy néha két különböző, a természetben előforduló kristály néhány meghatározott és unikális tulajdonságát tekintve együtt növekedik [90]. E megfigyelések oda vezettek, hogy kutatók megpróbálták mesterségesen reprodukálni a kristálynövekedést. Az első ilyen sikeres kísérlet Frankenheim nevéhez kötődik [39] [91], aki NaNO_3 réteget növesztett kalciton (CaCO_3) [92]. A növesztés során megfigyelte, hogy a réteg és a hordozó orientációja párhuzamos. E megfigyelés és több más, többek között röntgendiffrakciós kísérlet hatására 1928-ban L. Royer [93] megalkotta az epitaxia fogalmát. Állítása szerint: “Epitaxia csak akkor lép fel, ha két kristálysíknak azonos vagy kvázi azonos hálója és közel azonos térköze van.” Maga az epitaxia szó is a görög “epi” (azonos) és “taxis” (textura, mintázat) szavakból épül fel.

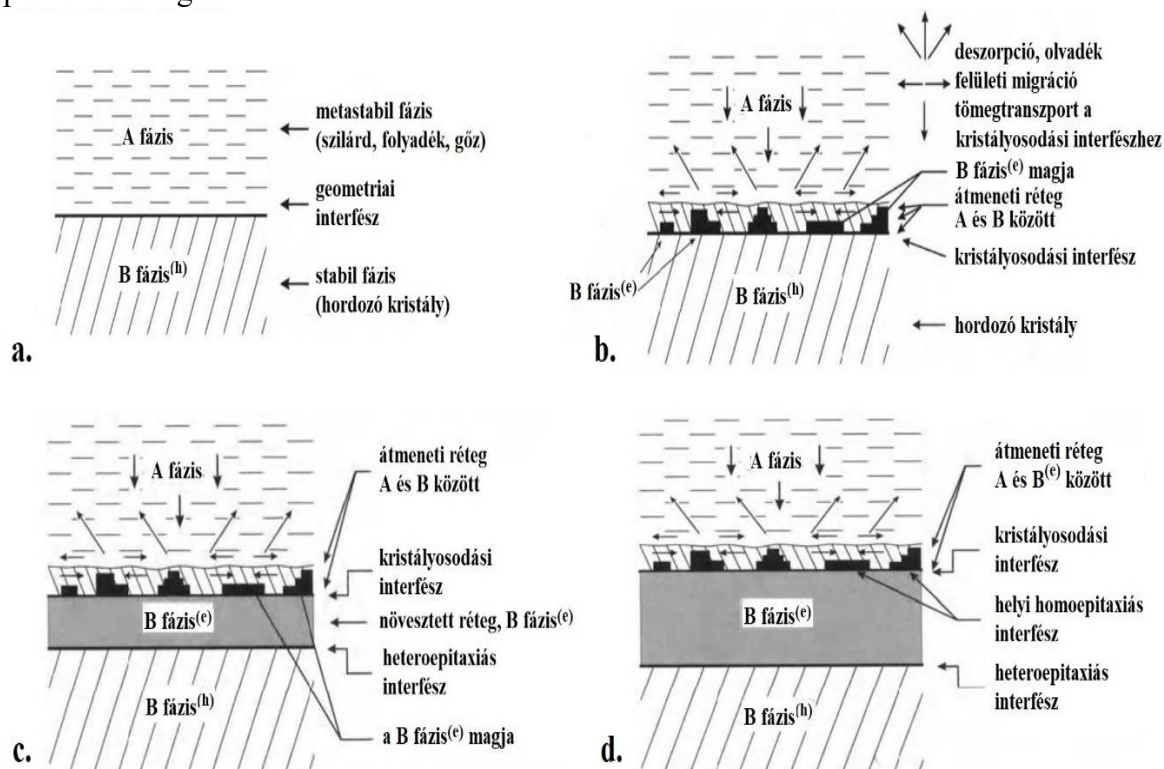
Általánosan az epitaxia leírásához négy alapvető fogalmi eszköz szükséges. Ezek a következők: 1. a fázisátmenetek termodinamikájának leírása [94] [95] [96], 2. a tömegtranszport áramlási dinamikája [97] [98] [99], 3. kristálynövekedés statisztikus mechanikája [100], beleértve a felületi migráció és diffúzió kinetikáját is [101], 4. a kémiai kötések kialakulásának kvantummechanikája [102].

Általánosan három szempont alapján lehet csoportosítani az epitaxiális rétegnövesztés témakörét [39] [103].

Az első megközelítés a fenomenológikus, másnéven makroszkópikus megközelítés. Ez a megközelítés éles határt húz a között, hogy mi lehetséges az epitaxiában és mi nem. Ide tartoznak a fázisátmenetek, az interfész kialakulás fenomenológikus aspektusai, és a tömegtranszport jelenség. Az epitaxia ebben a megközelítésben egy jól kontrollált

fázisátmenet, amely során egykristályos szilárd anyag keletkezik [104], aminek következményeként az epitaxiálisan növesztett anyag új fázist hoz létre [105]. Az új fázis létrejötte nukleáció útján történik. A két kristályos fázis közötti növekedési kapcsolatok teszik lehetővé azt, hogy a kristályos fázis szerkezetfüggő módon növekedjen egy másik kristályos fázison (pl. a hordozón) [39]. Alapvetően kémiai és szerkezetileg inhomogén interfész tartomány alakul ki. Amennyiben a kétfázisú rendszer kémiai összetétele azonos, akkor homoepitaxiáról beszélünk, ha nem, akkor heteroepitaxiáról. Az epitaxiális rétegnövesztés néhány kulcsfolyamaton alapul, ami a kristályréteg párhuzamosan orientált növekedéséhez vezet egykristály rétegen. Az első a fázisátmenet egy metastabil fázis (gáz, folyadék, szilárd) és a felületi réteg között. Ez legtöbbször különféle elemek tömegtranszportjával a jár a tömbi anyagból a metastabil fázison keresztül a növekedési frontoz, ami a kristályosodási interfész. A kristályosodás hajtóereje, azaz a metastabil fázis helyi szuperszaturációja tartja fenn interfész adott területén a kristályosodási folyamat működését. .

A vékonyréteg a felületen kialakulhat amorf szilárd üledékből, folyékony fázisból (azaz oldatból vagy olvadékból), gőzből vagy gázból (természetes vagy ionizált részecskékből), és atomi vagy molekulásugárból (nagy vagy ultranagy vákuumban). Emiatt számos epitaxiális eljárás alakult ki [39], mint pl. a szilárdfázisú epitaxia, folyadékfázisú epitaxia, gőzfázisú epitaxia ill. a molekulásugár epitaxia. Az epitaxiális rétegnövesztés folyamata a 28. ábrán látható. A növesztés megkezdése előtt (a.), nukleációs periódus az első monorétegnél (b.), az epitaxia korai fázisa, amikor egy vékony réteg már kialakult (c.), az idő periódus, amikor a reguláris epitaxiális növekedés érvényesül, és egy viszonylag vastag epitaxiális réteg alakult ki.

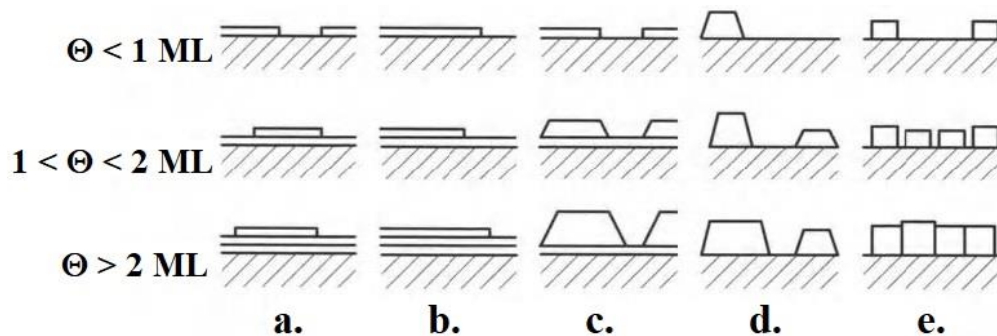


28. ábra. Az epitaxiális rétegnövesztés folyamata. A növesztés megkezdése előtt (a.), nukleációs periódus az első monorétegnél (b.), az epitaxia korai fázisa, amikor egy vékony réteg már kialakult (c.), az idő periódus, amikor a reguláris epitaxiális növekedés érvényesül, és egy viszonylag vastag epitaxiális réteg alakult ki (forrás: [39]).

A nukleáció nem más, mint kicsi kezdeti klaszterek spontán kialakulása, egy bizonyos kritikus méretben, amit a gőznyomás és a környezeti nyomás egyensúlya határoz meg. A mag metastabil szuperszaturált médiumon alakul ki ("A" fázis). E mag megjelenése elengedhetetlen a makroszkópikus fázis kialakulásához. Ez azt jelenti, hogy a mag az egész kristálynövekedés prekurzora. A megnövekedett felületi-térfogat arány következtében a kritikus méretű magoknak nagyobb energiája van, mint a tömbi fázisnak. Emiatt új stabil fázis ("B" fázis) alakul ki a szuperszaturált hordozó felületén.

A második megközelítés az epitaxia atomi szintű leírásán alapul és magában foglalja a statisztikus termodinamikát is. Ez a megközelítés az epitaxiális növesztés különféle módjairól szól. A különféle nanostrukturák többféle módon növekedhetnek. Egyik ilyen növekedési mód csoport a hagyományos Frank Van Der Merve (FM), Volmer-Weber (VW) és Stransky-Krastanov (SK), step flow(SF) és a columnar growth (CG) módszerek [39].

A növekedési módok között a különbség az atom-hordozó, atom-szomszédos atom közötti kötési energiában rejlik. A Frank Van Der Merve növekedésnél (29/a. ábra) és a step flow növekedésnél (29/b. ábra) az atom-hordozó kötési energia nagyobb, mint az atom-szomszédos atom kötési energia, tehát elsősorban rétegek növekednek. A step flow mód akkor lép fel, ha az atomok diffúziós hossza nagyobb, mint a lépcső szélessége, ellenkező esetben a Frank van der Merve növekedési módról beszélünk [39]. A Stransky-Krastanov növekedésnél (29/c. ábra) az atom-hordozó kötési energia és az atom-szomszédos atom kötési energia megközelítőleg ugyanaz, tehát atomcsoportok és a rétegek azonos arányban alakulnak ki. Ebben az esetben eltérő rácsállandójú réteget alkalmazunk. A Volmer-Weber növekedésnél (29/d. ábra) az atom-hordozó kötési energia kisebb, mint az atom-szomszédos atom kötési energia, vagyis elsősorban atomcsoportok (klasztetek) alakulnak ki. A columnar growth mód hasonló az SK és a VW módhoz, ugyanakkor a rétegek vastagsága különböző, így ezek az oszlopok nem olvadnak össze (29/e. ábra), mert a leválasztott atomok felületi migrációja elhanyagolható. A 29. ábrán a Θ a felületi befedettséget jelenti.



29. ábra. A rétegnövekedés hagyományos típusai: Frank Van Der Merve (FM) (a.), step flow (SF) (b.) Stransky-Krastanov (SK) (c.), Volmer-Weber (VW) (d.), columnar growth (CG) (e.) (forrás: [39]).

A Stransky-Krastanov módszer esetén a kvantum pontok úgynevezett feszültség-indukált módon alakulnak ki [106] [107]. Ez a feszültség a hordozó és a vékonyréteg rácsállandójának a különbségéből adódik.

A harmadik megközelítésben a növekedés legalapvetőbb folyamatait, pl. a kristályrácsba történő beépülés, ill. a felület kristálytani orientációjából és a felület rekonstrukcióból származó anizotróp hatásokat a kvantummechanika eszköztárával lehet kezelni [39].

3.2 Molekulasugár epitaxia elmélete

Az epitaxiális rétegnövesztés egy nemegyensúlyi folyamat, ahol egy bizonyos anyagot választunk le egy felületre, ahol az kikristályosodik a hordozó felülete kristálystruktúrájának megfelelően. Többféle epitaxiás eljárás is létezik [108]. Az epitaxiális rétegnövesztés legegyszerűbb és legsokoldalúbb megvalósítása a molekulásugár epitaxia (molecular beam epitaxy (MBE)) [4] [5]. További előnye az eljárásnak, hogy a molekulásugár precízen irányítható, és a környezeti feltételek is pontosan beállíthatók. Az eljárás működésének a lényege, hogy atomi vagy molekulásugarat irányítunk ultranagyvákuum (UHV) környezetben egy fűthető mintatartóra. Az atomok a minta felületén kondenzálódnak. Egy III-V alapú molekulásugár epitaxiás berendezés lehetséges megvalósítása a 30. ábrán látható.



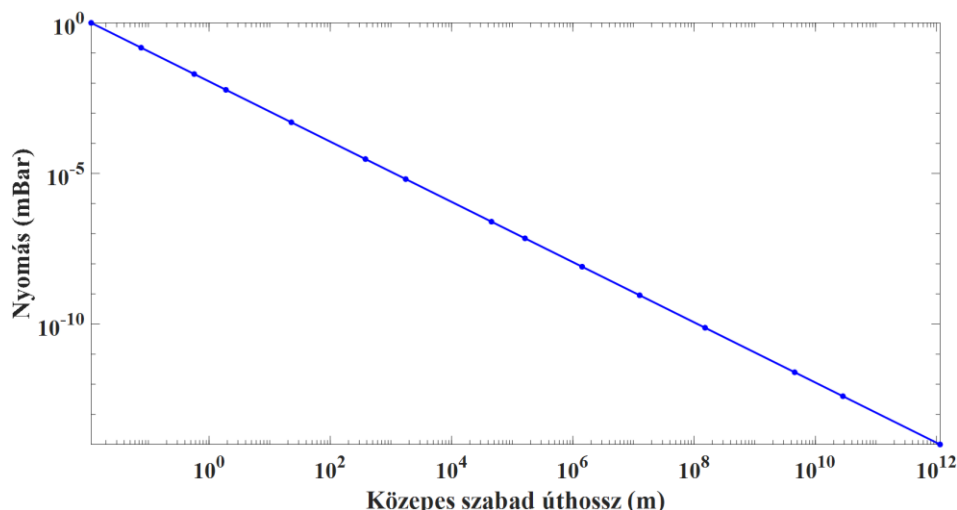
30. ábra. Egy Drezdában működő laboratórium III-V alapú molekulásugár epitaxiás berendezése⁵.

Az atomok, molekulák leválasztása nagy tisztaságú, UHV térben történik (kb. 10^{-9} Torr nyomás alatt). Az UHV-nak kettős szerepe van. Egyik az, hogy segítségével elkerülhető, hogy a felület, ahol növesztetni akarunk vagy a növesztett struktúra idegen atomokkal szennyeződjön. A másik, hogy nagyvákuumban megnövekszik a leválasztott atomok, molekulák közepes szabad úthossza. Emiatt a molekulásugarak gázfázisban egymással nem lépnek kölcsönhatásba, csak a minta felületén. Ez a közepes szabad úthossz a következő módon számítható [109]:

$$\bar{l} = \frac{k \cdot T}{\sqrt{2} \cdot (2 \cdot r_{\infty})^2 \cdot \pi \cdot (1 + \frac{T_D}{T})} \cdot \frac{1}{p}, \quad (19)$$

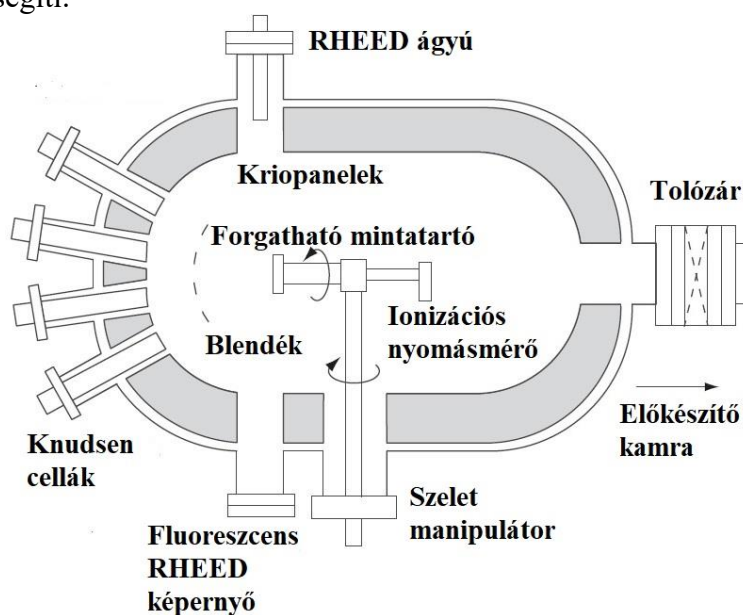
ahol a k a Boltzmann állandó, T a vákuum rendszer hőmérséklete (Kelvinben), p a vákuum nyomása (Torr-ban vagy mbar-ban), r_{∞} a részecske sugara, ha $T \rightarrow \infty$, a T_D az úgynevezett kétszeres hőmérséklet (Kelvinben). Utóbbi mennyiséget a [109] publikáció szerzője a számítások megkönnyítésére vezette be. A 31. ábrán a közepes szabad úthossz látható a vákuum nyomás függvényében.

⁵ Molekulásugár epitaxiás laboratórium, Institute for Integrative Nanosciences (IIN), IFW Dresden <https://www.ifw-dresden.de/de/institute/iin/laboratories/molecular-beam-epitaxy/>. Megtekintés: 2017. július 4. A kutatócsoportunk által fejlesztett MBE rendszerről a 3.3-as fejezetben lesz szó.



31. ábra. A közepes szabad úthossz a vákuum nyomás függvényében (argon gázra, $T = 300\text{K}$ hőmérsékleten).

A 32. ábrán egy általános célú MBE rendszer főkamrájának a belső felépítése látható. A kriopanelek a főkamra hűtését segíti elő, a vákuumot az ionizációs nyomásmérővel mérhetjük meg. A minta megfelelő pozícióba való beállítását a forgatható mintatartó és a szeletmanipulátor segíti.



32. ábra. Egy MBE rendszer főkamrájának belső felépítése (forrás: [110]).

Az MBE berendezésben a rétegnövesztéshez szükséges atomok, molekulák külön-külön forrásból (Knudsen, vagy effúziós cella) kerülnek a molekulasugarba, egyensúlyi körülmények között. E cella működésének alapja az, hogy a Knudsen cellát magas - a párologtatni, ill. szublimáltatni kívánt anyagtól függő - hőmérsékletre fűtjük fel, aminek hatására a cellában lévő atomok párologni, ill. szublimálni kezdenek. Ez a párologás ill. szublimáció úgy jön létre, hogy az MBE rendszerben a háttérnyomás megközelítőleg nulla és hő hatására a Knudsen cellában lévő anyag gőznyomása megemelkedik. Ez a gőznyomás (másnéven egyensúlyi nyomás) a vákuum-nyomás egyenlettel számítható ki. Ennek a számításnak egy lehetséges módja a következő [111]:

$$\log_{10} P_{eq}(T_k) = A + \frac{B}{T_k} + C * \log_{10} T_k + D * T_k + E * T_k^2, \quad (20)$$

ahol a T_k a Knudsen cella hőmérséklete (Kelvinben), $P_{eq}(T_k)$ az egyensúlyi nyomás a Knudsen cellában (Torr-ban), az A, B, C, D, E paraméterek a hivatkozott függelékben található táblázatban megtalálható anyagfüggő állandók.

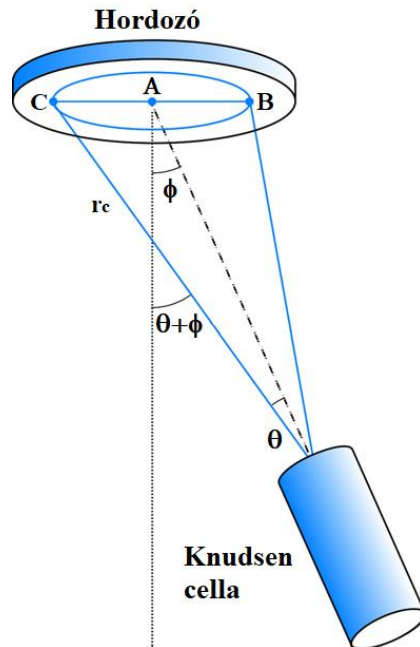
A Knudsen cella működését az ún. Knudsen egyenlet írja le, ami a következő [4]:

$$J_k = \frac{dN_e}{dt} = A_e * (P_{eq}(T_k) - P) * \sqrt{\frac{N_A}{2 * \pi * k_B * M * T}}, \quad (21)$$

ahol J_k a Knudsen cellából távozó részecskeáram, az N_e az atomok száma, a t az idő, A_e a Knudsen cella nyílásának a keresztmetszete, a $P_{eq}(T_k)$ az egyensúlyi nyomás a Knudsen cellában (Torr-ban), P az nyomás a vákuum rendszerben (ennek az értéke MBE rendszer esetén $P \approx 0$ Torr), az N_A az atomszám 1 mol anyagban, a k_B Boltzmann állandó (J/K-ben), M a molekulatömeg (kg/mol-ban), T a rendszer hőmérséklete (Kelvinben). Az atomok a felületre érve monoréteget alkotnak, mely réteg növekedési rátáját a következő módon lehet meghatározni:

$$G = \frac{J_k}{r_c^2 * \pi} * \cos \phi * \cos(\theta + \varphi), \quad (22)$$

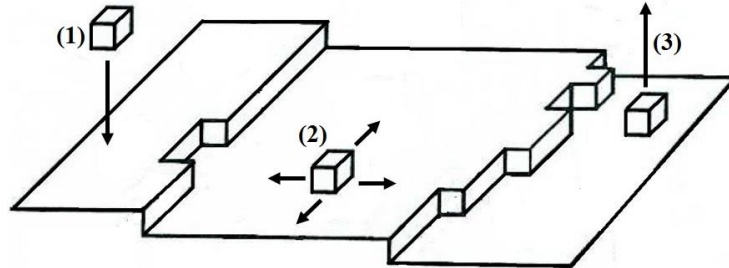
ahol a J_k a Knudsen cellából távozó részecskeáram, az r_c a Knudsen cella távolsága a mintától a C pontban, a φ a mintára merőleges egyenes és a Knudsen cella nyílására merőleges egyenes közti szög, a θ a molekulásugár félszöge. Az elrendezést a 33. ábrán láthatjuk.



33. ábra. A Knudsen cella és a minta elrendezése (forrás: [5]).

A Knudsen cellák körül cseppfolyós nitrogénnel hűtött csapda van (cooling panel), mely távol tartja a mintától a szennyezéseket és egyben javítja a vákuumot. A Knudsen cella nyílása blendével zárható el.

A Knudsen cellából érkező atomok a felületen kondenzálódnak, ahol többféle fizikai folyamat történhet velük. Ezeket a folyamatokat a három csoportba oszthatjuk: (1) adszorpció, (2) felületi diffúzió, (3) deszorpció (13. ábra) Az MBE rendszerben a kristálynövesztés során e három csoportba tartozó folyamat verseng egymással (34. ábra).



34. ábra. A felületen fellépő fizikai folyamatok. Ezeket a folyamatokat a három csoportba oszthatjuk: (1) adszorpció, (2) felületi diffúzió, (3) deszorpció.

E rétegnövesztési folyamatokat folytonos és diszkrét modellekkel egyaránt modellezni tudjuk [112].

A folytonos modellek a felületi érdességét írják le az idő és a helykoordináta függvényében. Ennek a modellcsaládnak van lineáris és nemlineáris jelenségeket leíró formája.

A lineáris modell [112] a felületi érdességet lineáris differenciálegyenlettel írja le, amelyben a felületi diffúzió nemlineáris tagjait elhanyagoljuk. E modell differenciálegyenlete a következő:

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = v * \Delta h(x,t) - K * \Delta^2 h(x,t) + B * [\mu(x,t) - \mu_s] + F(x,t) + \eta(x,t), \quad (23)$$

ahol a $h(x, t)$ az adott x koordinátapont magassága és t az idő, v egy numerikusan meghatározott skálatényező, K a felületi diffúziótól függő skálatényező, a $\mu(x, t)$ az x pont kémiai potenciálja a t időpontban, a μ_s a felületi lokális kémiai potenciálja, $\eta(x, t)$ lokális véletlen fluktuáció, a B egy konstans, $F(x, t)$ a bejövő atomi részecskeáram, mely az (21) egyenlettel határozható meg.

Ha a felületi diffúzió nemlineáris tagjait is figyelembe vesszük [112], akkor a modell a következő lesz:

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = -K * \Delta^2 h(x,t) + \lambda_1 * \Delta(\Delta h(x,t))^2 + \lambda_2 \nabla(\nabla h(x,t))^3 + F(x,t) + \eta(x,t). \quad (24)$$

A bejövő atomi részecskeáram, a (21) egyenlettel határozható meg, a λ_1 és a λ_2 konstansok.

A deszorpció során a leválasztott atomok elhagyják a felületet. A jelenség bekövetkezésének a valószínűsége arányos a deszorpciós energiával. A deszorpció feltétele, hogy az adott atomnak, molekulának a felületre merőleges irányban $v_0 = 10^{13}$ 1/s frekvenciával kell rezegnie, hogy a részecske elváljon a felülettől. Ebből következik,

hogy e rezgés időállandója $\tau_0 = 10^{-13}$ s. Az átlagos idő, amit az adott atom vagy molekula a felületen tölt, a következő egyenlettel határozható meg:

$$t = \tau_0 * e^{\frac{E_{Des}}{R*T_f}} * \ln \frac{1}{f}, \quad (25)$$

ahol az E_{Des} a deszorpció aktivációs energiája (J/mol-ban), az R az univerzális gázállandó, a T_f a felületi hőmérséklete (Kelvinben) és az f a fedettség mértéke.

A molekulásugár epitaxiás rétegnövesztés egy lehetséges diszkrét modellje a Kinetic Monte Carlo (KMC) algoritmus. Ez egy statisztikai módszer, amellyel a rendszer dinamikáját tanulmányozhatjuk, jellemzően egyensúlyi helyzettől távol eső esetekben. A KMC módszereknek két fajtája van: az off-lattice és az on-lattice módszerek. A két eset között az a különbség, hogy az on-lattice esetben az atomok egy merev többnyire egyszerű köbös kristályrácsra mozognak egyik pozícióból a másikba, a felületi konfiguráció (vagyis a potenciálgátak) elhelyezkedésének megfelelően [27]. Az off-lattice esetben a KMC algoritmus ezt a rácsot nem alkalmazza, az atomok egy potenciál mezőben rendeződhetnek át.

A KMC a módszernél minden időpillanatban az összes fizikai folyamat (a felületi diffúzió, deszorpció, nukleáció stb.) egyaránt felléphet.

Tegyük fel, hogy az összes fizikai folyamat esetében atomok ugyanazzal a ν termikus frekvenciával rezegnek ($\nu = 10^{13}$ 1/s). Ez az úgynevezett karakterisztikus frekvencia, amely pontos értéke a sűrűség funkcionál eljárással határozható meg [27] [41] [113] [114]. Az atomok helyváltoztatási frekvenciája a k . folyamat esetében:

$$R_k = \nu_k * P_k = \nu_k * e^{-\frac{E_a}{k_B T}}. \quad (26)$$

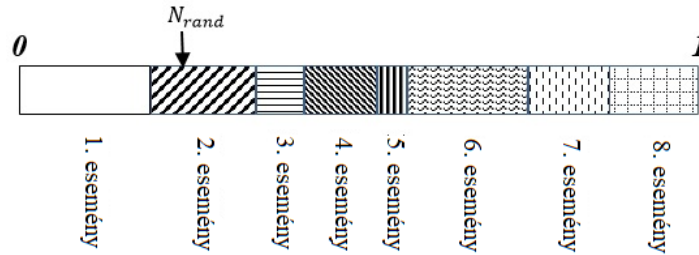
Az adott folyamat kiválasztásához a relatív helyváltoztatási frekvenciája:

$$\delta R_k = \frac{R_k}{\sum_{k'=1}^n R_{k'}}, \text{ ahol } 0 \leq \delta R_k \leq 1. \quad (27)$$

Az adott \tilde{k} fizikai folyamat véletlenszerűen választódik ki

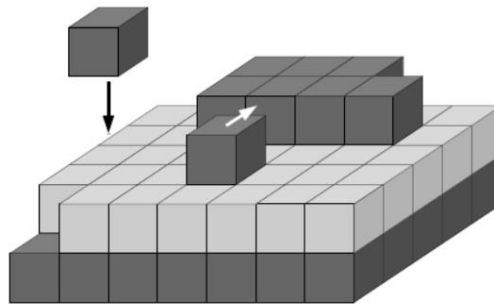
$$\sum_{k'=0}^{\tilde{k}-1} R_{k'} \leq N_{rand} \leq \sum_{k'=0}^{\tilde{k}} R_{k'}, \quad (28)$$

ahol az $0 \leq N_{rand} \leq 1$ egy véletlen szám. Fontos dolog megjegyezni, hogy ahhoz, hogy a KMC algoritmus valóságghű eredményt adjon, elengedhetetlenül fontos a véletlenszámgenerátor megfelelő működése. Az adott fizikai folyamat kiválasztásának menete (Event 1...8) a 35. ábrán látható.



35. ábra. A fizikai folyamat kiválasztása véletlenszerű módon.

A KMC módszer lehetőségei korlátozottak, mert soros algoritmus, alapvetően szekvenciális számítógépre készült. Ezt a hátrányt egy másik algoritmus, a Lattice Gas Automata (LGA) alkalmazásával és egy párhuzamos számítógép architektúra (pl. multiprocessoros, vagy GPU-s hardver) használatával lehet orvosolni. Ha összehasonlítjuk a KMC és az LGA módszert, akkor látható, hogy az összes részecske egy rácsozaton van és egymással szinkronban mozognak egyik helyről a másikra, időtől és helytől függő valószínűségekkel [27] [115]. Ez azt jelenti, hogy hasonlóan a KMC algoritmusához, ezeket a valószínűségeket a felület energetikai térképe (vagyis a felületi struktúra) határozza meg. Az idő lépésköze fix, amely a referenciafolyamat definiál. Az algoritmus működése a 36. ábrán látható.



36. ábra. Az LGA algoritmus működése (forrás: [116]).

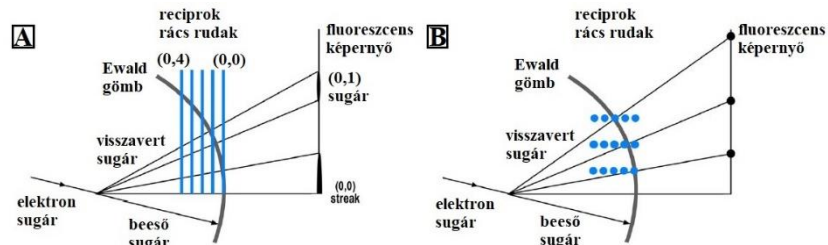
Minden egyes időszelvényben, iterációban három részfolyamat történik, mindegyik egymás után: 1. az atom(ok) a felületre ér(nek), 2. az atom(ok) sebességének a kiszámítása, 3. az atom(ok) mozgása.

Az LGA működésének részletes leírása megtalálható a [117] cikkben. Az algoritmust nanoszőrök (whiskerek) [118] és nanohuzalok [119] növekedésének a modellezésére is alkalmazták már.

A rétegek kialakulása a sűrűsöngű elektrondiffrakcióval (reflection high energy electron diffraction, RHEED) követhető nyomon [120]. A RHEED technika működése egy elektron ágyú segítségével működik, itt 10-50 keV energiájú párhuzamos elektronnalábot lövünk ki és az visszaverődve ill. szóródva a fluoreszcens képernyőn kirajzolja a diffrakciós képet. A sugár és a felületi közötti szög 0.5° és 2.0° között változhat. Emiatt az így keletkezett képen in-situ módon megfigyelhetjük a nanostrukturák növekedését [121] [122].

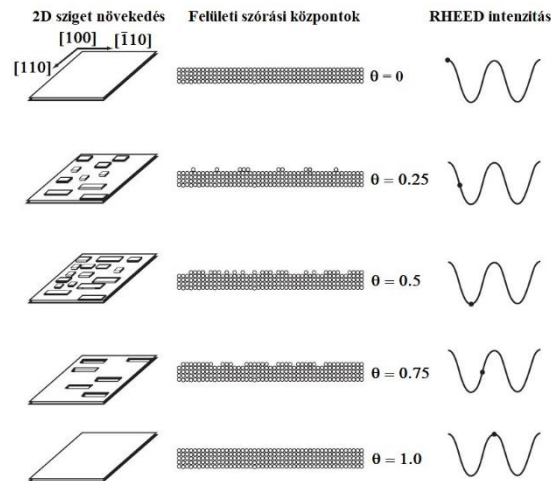
A rugalmasan visszavert elektronok konstruktív interferencia feltételét a Laue törvény mondja ki, mely lényege, hogy a beeső és a visszavert sugarak egy reciproklátszámokkal

különböznek. Súrló beesési szög alatt és atomi szempontból sima felület esetén az elektronok csak akkor lépnek ki kristályból, ha a visszaverődési síkok mélysége néhány monoréteg. Ebben az esetben az elektronsugarat a kétdimenziós rács veri vissza, melynek a reciprokrácsa párhuzamos vonalakat tartalmaz (37/A. ábra). Más esetben, az atomosan durva felületeknél az elektronok akkor lépnek ki, ha a mélyebb síkok verik vissza őket. Ekkor az elektronok 3 dimenziós rácsot érzékelnek, melynek a reciprokrácsa pontokból áll (37/B. ábra).



37. ábra. A súrlószögű elektrondiffrakció működése. (A) atomi szempontból durva felület, (B) atomi szempontból sima felület (forrás: [5]).

A 2D szigetek képződése egyre több szórési központot hoz létre, ami lecsökkenti a visszavert elektronok intenzitását. Ha a monoréteg elkészül, akkor a szórési központok száma lecsökken és a RHEED intenzitás megnő (38. ábra).



38. ábra. A RHEED oszcilláció egyszerűsített magyarázata. A 2D szigetek képződése egyre több szórési központot hoz létre, ami lecsökkenti a visszavert elektronok intenzitását. Ha a monoréteg elkészül akkor a szórési központok száma lecsökken és a RHEED intenzitás megnő (forrás: [123]).

Az UHV rendszer – a RHEED mellett - lehetővé teszi számos valósídejű (a növesztés ideje alatt történő) in-situ (a berendezésbe beépített) vizsgálati eljárás alkalmazását is mint pl. XPS⁶, UPS⁷, STM⁸, AFM⁹, AES¹⁰, SIMS¹¹.

⁶ X-ray Photoemission Spectroscopy

⁷ Ultraviolet Photoemission Spectroscopy

⁸ Scanning Tunnelling Microscope

⁹ Atomic Force Microscope

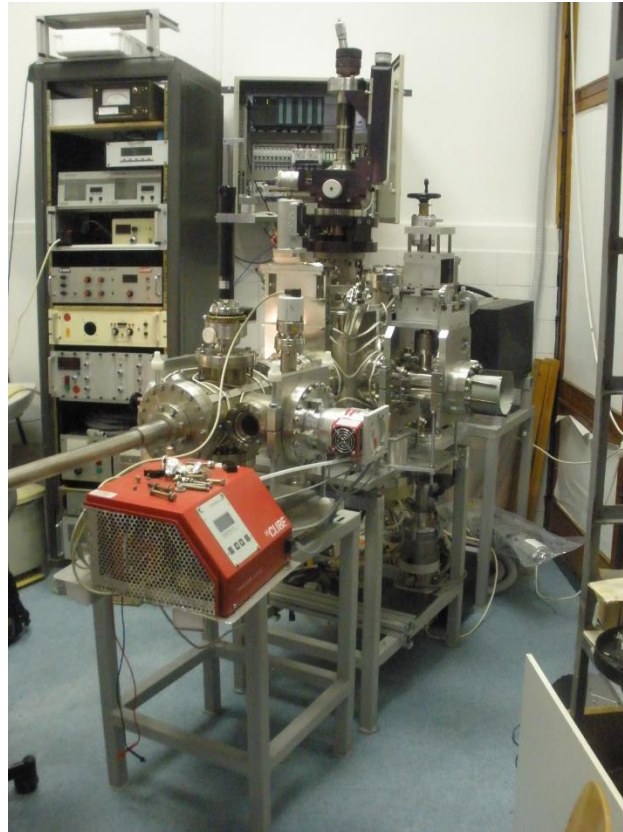
¹⁰ Auger Electron Spectroscopy

¹¹ Secondary Ion Mass Spectrometry

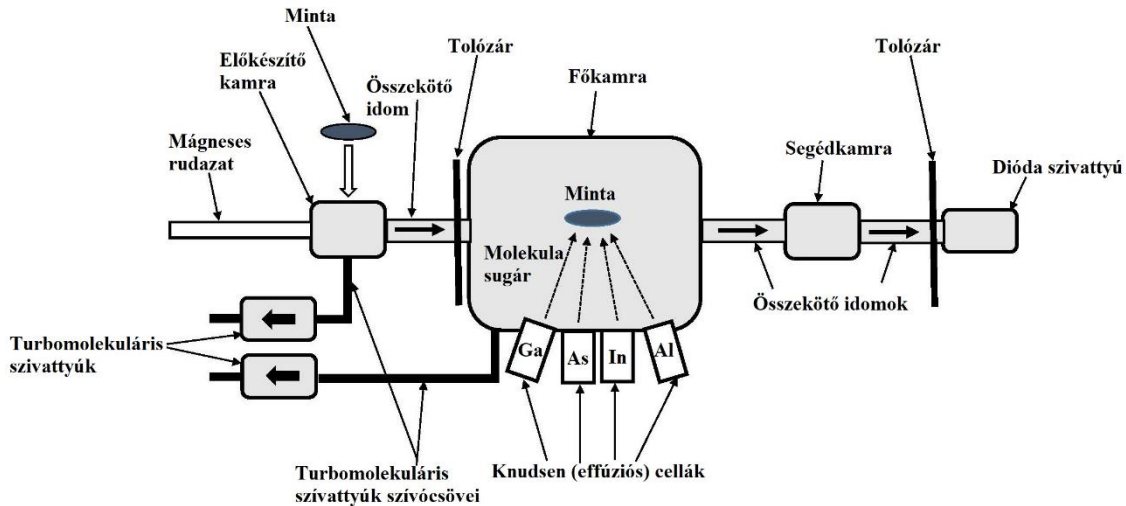
A gőzölés ultranagyvákuumban, 10^{-11} mbar-nál alatti, olajgőz-mentes vákuumban történik. Az MBE berendezés fontos eleme még az adagoló rendszer (pl. egy előkészítő kamra), mely a hordozók előkészítését és cseréjét (pl. egy mágneses rudazat alkalmazásával) teszi lehetővé, a vákuum lerontása nélkül. Ezen egység és a különböző mérési lehetőségek jelenléte az alkalmazás céljától függően (kutatás, gyártás stb.) változik.

3.3 A molekulásugár epitaxiás berendezésünk felépítése

A kutatócsoportunk által megvalósított MBE berendezés [124] [125] [126] három fő részből áll. A berendezés a 39. ábrán, míg az elvi vázlata a 40. ábrán látható.



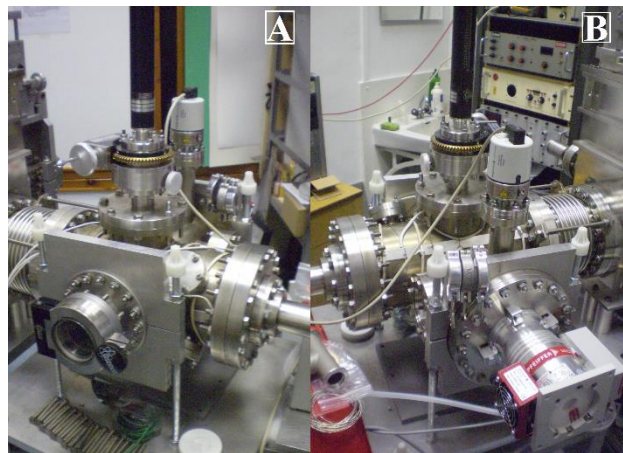
39. ábra. A kutatócsoportunk által megvalósított MBE berendezés.



40. ábra. A kutatócsoportunk által megvalósított MBE berendezés elvi felépítése.

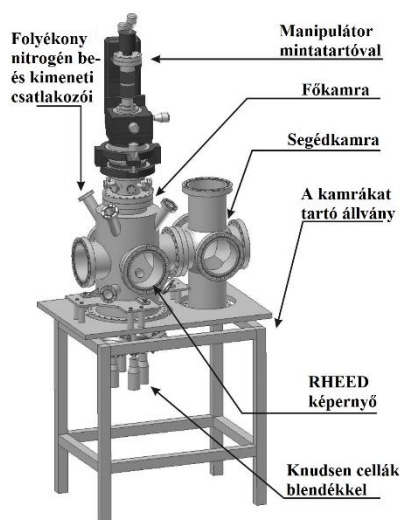
A berendezésen végzett mechatronikai fejlesztések három csoportba oszthatók. Ide egyrészt vezérlési feladatok (a kamra kifűtése, mintafűtés, a Knudsen cellák fűtése, blendék mozgatása), másrészt képfeldolgozási feladatok (RHEED kiértékelés), harmadrészt pedig finommechanikai feladatok (mintarögzítés, mintatartó továbbítás, léptetőmotorok és forgóátvezetők kapcsolata) tartoznak. A kiértékelés és a szabályozás technológiai visszacsatolást tesz lehetővé, amely pl. szuperrácsok készítését, vagy kritikus rétegvastagság alatti struktúrák létrehozását teszi lehetővé [126].

Az előkészítő kamrában 10^{-8} mbar nyomás uralkodik. Alkalmazásával a vákuum megszüntetése, és a rendszer háttérszennyezése nélkül juttathatjuk be a mintát a főkamrába. A 41. ábrán az előkészítő kamra a zsilipajtó felőli oldalról (41/A. ábra), ill. az elővákuumszivattyú felőli oldalról (41/B. ábra) is látható. A zsilipajtó mögött (41/A. ábra) egy mintatartó van. Ezért ebbe a kamrába egyszerre több mintát tehetünk, így egymás után több növesztést végezhetünk az UHV rendszer megnyitása nélkül. A megfelelő vákuumot egy Pfeiffer HiPace 80 típusú turbomolekuláris szivattyú segítségével érjük el (41/B. ábra alja). Itt az aktuális nyomást egy beépített ionizációs vákuummérővel mérjük folyamatosan (41/B. ábra, a turbomolekuláris szivattyú felett). A mintát a vákuumtérben mágneses mozgató rudazattal juttathatjuk át zsilipkamrából a főkamrába.



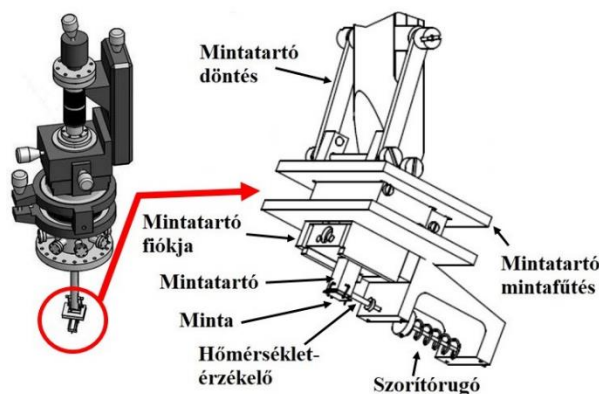
41. ábra. Az előkészítő kamra a zsilipajtó felőli oldalról (A), ill. az elővákuum szivattyú felőli oldalról (B).

A főkamrában történik a rétegleválasztás és a kristálynövesztés atom- ill. molekulásugarak segítségével [126]. Ezeket a műveleteket nagyvákuumban (10^{-10} mbar) végezzük Így biztosítjuk azt, hogy a részecskék szabadút hossza nagy- és a kamra háttérszennyezettsége kicsi legyen. A főkamra és a segédkamra rajza a 42. ábrán látható.



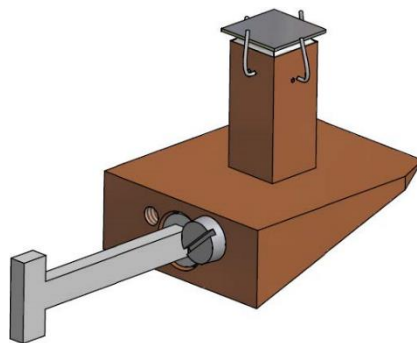
42. ábra. A MBE berendezés növesztő és mellék kamrájának rajza (forrás: [127]).

A precíziós manipulator és a mintatartó megfogása a 43. ábrán látható.



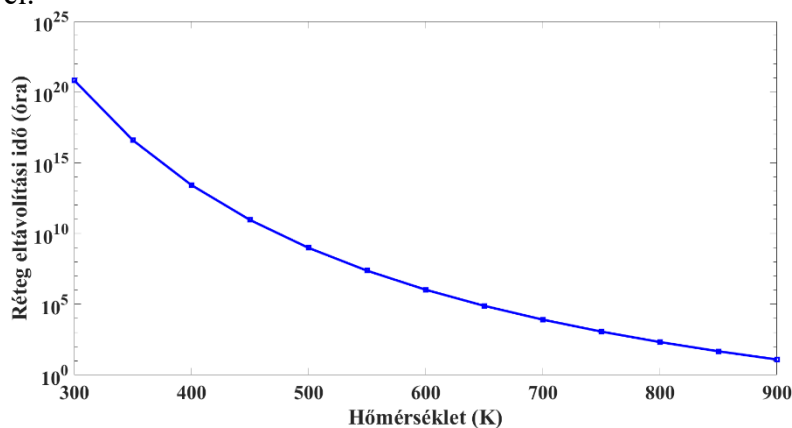
43. ábra. A precíziós manipulator és a mintatartó megfogása (forrás: [125]).

Az MBE főkamrájában a különféle növekedési módok elsősorban a mintahőmérséklettel szabályozhatóak. Emiatt a minta felerősítése és a hőátadás a minta és a mintatartó között kiemelten fontos probléma. Általában az ipari alkalmazásoknál rugóval fogatják fel a tartóra a mintát. A jó reprodukálható eredmények ellenére az abszolút mintahőmérséklet beállítása és tartása ennél a megoldásnál problémás (a gyenge hőátadás miatt), ráadásul akadályozza a növekedés in-situ RHEED megfigyelését. Ez kutatási célra nem jó megoldás. Csoportunk korábban az In-mal való felragasztást használta. Ez a jó hőátadás miatt előnyös, sajnos azonban a minta könnyen leeshet a mintatartóról, ráadásul a minta ráhelyezése a mintatartóra nagy felkészültséget és gyakorlottságot igényel. Kifejlesztettünk egy hibrid megoldást, mely az In-mal való ragasztás és a rugós rögzítés előnyeit egyesíti (44. ábra) [126] [125] [128].



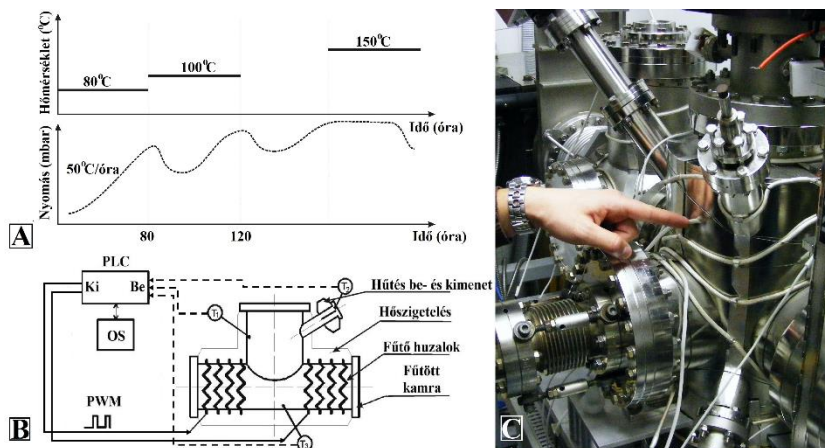
44. ábra. A molibdéből készült mintatartó axonometrikus képe (forrás: [126]).

Az UHV növesztéshez szükséges végvákuum (10^{-10} Torr) eléréséhez a kamrát folyamatos szivattyúzás mellett fokozatosan ki kell fűteni. A kifűtés segítségével jelentősen lecsökkenthető a leszívási ideje. Ezt a leszívási időt a (25) egyenlettel határozhatjuk meg. A 45. ábrán egy $E_{Des}=170$ kJ/mol deszorpciós energiájú atom eltávolításához szükséges idő látható a hőmérséklet függvényében 300 K és 900 K között. Ebben a példában a monoréteg 99% távolítjuk el.



45. ábra. Leszívási idő.

Azért szükséges a fokozatos kifűtés, mert, ha hirtelen nagy hőmérsékletre fűtjük fel, akkor a szennyeződések beleégnek a vákuumedény falába és nehezebb őket eltávolítani. Emiatt a kamrát egyenletesen elosztva fűtőszállal kell beborítani. A kifűtést PLC alapú vezérlőberendezés vezérli. A 46/A. ábrán a hőmérséklet és a nyomás csökkenését láthatjuk az idő függvényében. A 46/B. ábrán a fűtési rendszer vezérlésének a kapcsolási rajza látható, míg a 46/C. ábrán a fűtési rendszer fizikai megvalósítása látható fűtőszálakkal [127]. A hőmérsékletet 10 különféle ponton mérjük, és 10 fűtőszálat vezérlünk. A zárthurkú fűtésvezérlést egy Simatic S7 PLC vezérlőn futó PI vezérlő algoritmus végzi, mely a beállított hőmérsékletet hibamentesen követi. Az egész rendszer egy PC operátorállomásról működik (OS). Ez az OS írja és olvassa a rendszer folyamat változóit és megjeleníti a rendszer állapotát. A hőmérsékleti jellemzők és más funkciók, mint pl. a molekulaforrások az OS-en paraméterezhetők és a PLC-vel vezérelhetjük.



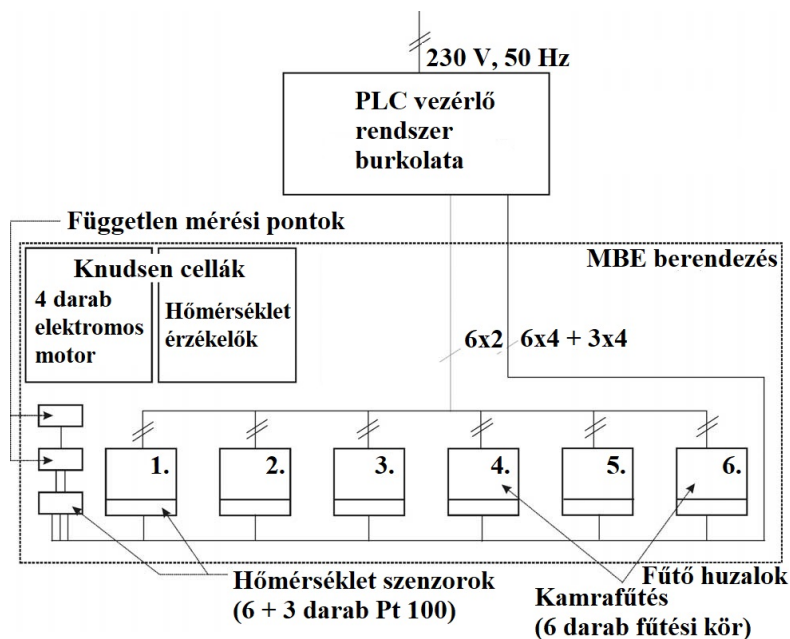
46. ábra. Az általunk fejlesztett MBE rendszerben (A) a hőmérséklet és a nyomás csökkenése az idő függvényében, (B) a fűtési rendszer vezérlésének a kapcsolási rajza, (C) a fűtési rendszer fizikai megvalósítása fűtőszálakkal (forrás: [127]).

A további hőmérsékleti homogenitás okán a kamrák bedobozolása szükséges, melyet belülről hőszigetelt alumínium lemezekből alakítottunk ki (47. ábra).



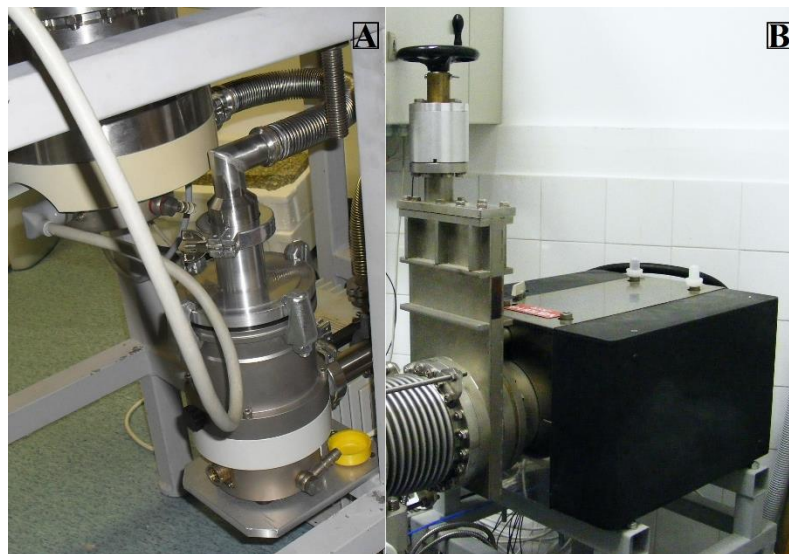
47. ábra. Az MBE rendszerünk főkamrája, bedobozolva.

A kamrában a kristályos alacsonydimenziós struktúrák növesztése különböző hőmérsékleteken, változó molekulafluxus mellett történik. A mintatartó, a Knudsen-cellák hőmérséklete a blendék mozgatása, a háttér parciális nyomása egyaránt komoly befolyással vannak a formálódó struktúrára. Ezen értékek folyamatos monitorozása és – szükség esetén - változtatása szükséges. Ennek a megoldása egy megbízható (kis meghibásodási valószínűségű) ipari, PLC (Siemens Simatic S7PLC) alapú vezérlővel történik (48. ábra). A PLC programozása és a grafikus felületek megjelenítése egy PC állomáson történik.



48. ábra. Az MBE rendszert vezérlő PLC blokkdiagramja (forrás: [127]).

A főkamrához egy Balzers TPU 520 turbómolekuláris szivattyú csatlakozik közvetlenül (49/A. ábra) és egy segédkamrán keresztül egy Varian Diode iongetter szivattyú csatlakozik (49/B. ábra).



49. ábra. Az MBE főkamrához csatlakozó szivattyúk.

Az iongetter szivattyút egy vákuumszeleppel tudjuk leválasztani a főkamráról. A zsilipkamra szintén leválasztható egy további vákuumszeleppel a főkamra vákuumterétől (50. ábra).



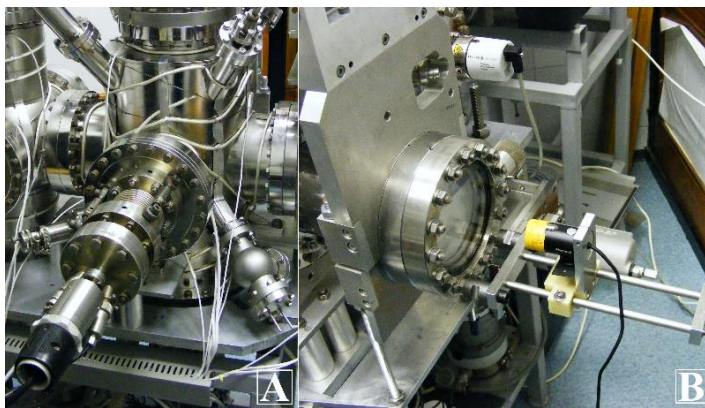
50. ábra. Az MBE rendszerünk vákuumszelepe, a zsillipkamra és a főkamra között.

A főkamrán helyet kapott egy hidegkatódos vákuummérő is (51. ábra).



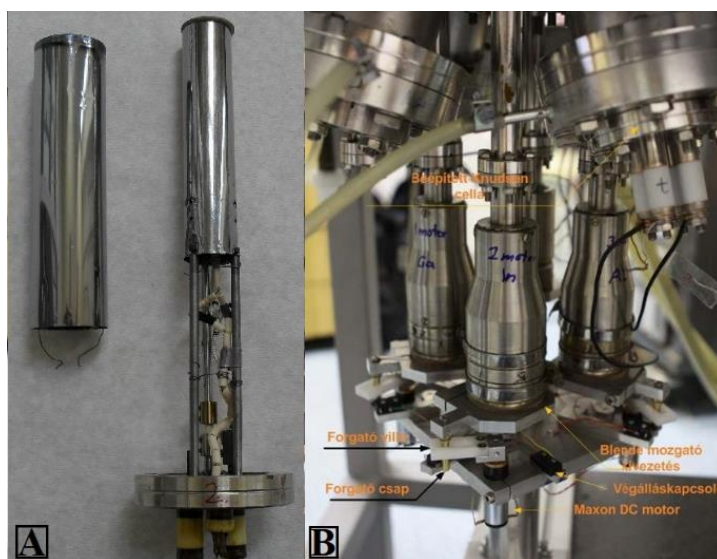
51. ábra. A főkamrán elhelyezett hidegkatódos vákuummérő.

A berendezés fontos része a 12 keV-os sűrolószögű elektron diffrakciós berendezés, mellyel a növekedés in-situ módon vizsgálható (Riber CER 606 – ACE 1010 RHEED). Ezzel az eljárással többek között azt is megállapíthatjuk, mikor készült el egy atomi réteg, valamint, hogy milyen nanostruktúrák növekedtek a mintán (kvantum pont, kvantum gyűrű, kvantum dupla gyűrű, kvantum völgy, ill. nano lyuk). Minden egyes struktúrának más és más a RHEED mintázata, amely az elektron ágyúval (52/A. ábra) szembeni oldalon lévő fluoreszcens képernyőn (52/B. ábra) látható. Ahogy az 52/B. ábrán is látható, a RHEED képek további feldolgozására egy webkamerát telepítettünk [129] [130].



52. ábra. Az MBE rendszerünkben alkalmazott RHEED ágyú (Riber CER 606 – ACE 1010) (A) és a RHEED képernyő (B).

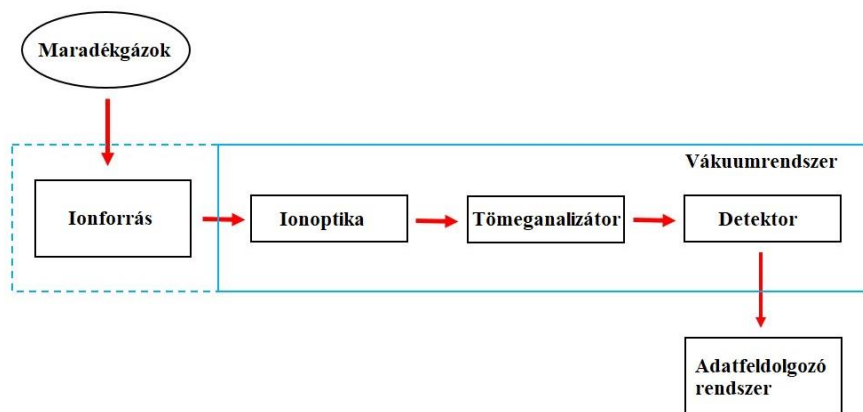
A főkamrában a részecskesugarak kibocsátása a mintára irányított effúziós (más néven Knudsen) cellákból történik. A mi rendszerünkben négy ilyen cella van (Ga, As, In, Al). A növesztéshez szükséges molekulásugarat e cellák fűtésével hozzuk létre. Az 53/A. ábrán egy ilyen Knudsen cella látható szétszedve. A 4 darab Knudsen- cella blendéjének mozgathatóságához léptetőmotoros, végállaskapcsolóval ellátott mechatronikai rendszer készült (53/B. ábra). A Knudsen cellák cső alakú tégelyek, melyek pirolitikus bor-nitridből készültek. Ezek a tégelyek körül spirálisan Ta fűtő tekercesek vannak, melyeket Ta fóliába csomagolnak be. Egy fontos követelmény a forrással kapcsolatban, hogy az egész egység nagyon kevés szennyezőanyagot vigyen bele a molekulásugarba. Emiatt a cellát egy vízhűtésű panel veszi körül, melyre blendék vannak felszerelve, melyek nyitják és zárják a Knudsen cellát.



53. ábra. Knudsen cellák. (A) egy Knudsen cella szétszedve, (B) beépített Knudsen cellák és vezérlésük.

Fontos tudnunk még azt is, hogy az MBE rendszerben milyen maradékgázok vannak. A maradékgáz a rendszer leszívásakor a vákuumrendszerben maradó gázok összessége. A maradékgáz analízis egyik célja a vákuumrendszer egészének és egyes részeinek diagnosztikai vizsgálata, a másik az egyes folyamatok ellenőrzése. A maradékgázok fajtáiból és azok intenzitásából több dologról is kapunk információt, pl. (1) a szivattyú elégtelen működése, (2) tömítetlenség (levegő beszívargása lyukon keresztül nitrogén, oxigén stb megjelenése), (3) szennyezésre (különösen szénhidrogének, de más anyagok is lehetnek), (4)

nem megfelelő szerkezeti anyagok jelenlétére (víz, szerves anyagok), (5) egyéb folyamatokra, amelyek gázt termelnek vagy nyelnek el. Erre a problémakörre a vákuummérők nem adnak választ, mert azok össznyomást mérnek. Ahhoz, hogy az egyes gázokat meg tudjuk különböztetni egymástól, parciális nyomásmérőt, vagyis tömegspektrométert kell alkalmazni (54. ábra) [109]. A tömegspektrométer elektronok segítségével ionizálja a mérőnyíláson áthaladó atomokat, molekulákat. Ezt követően tömeg/töltés szerint osztályozza őket. Mivel leggyakrabban az egyszeres ionizáció lép fel, ezért mondhatjuk, hogy az atomok tömegét mérjük. Az eszköz az egyes atomok, molekulák ionizációs hajlama szerint érzékeny. A tömegspektrométert nyomás mértékegységben kalibrálják. Ennek az az oka, hogy a maradékgáz-analízisnél nemcsak az összetétel, hanem az alkotó gázok parciális nyomása is fontos információ.

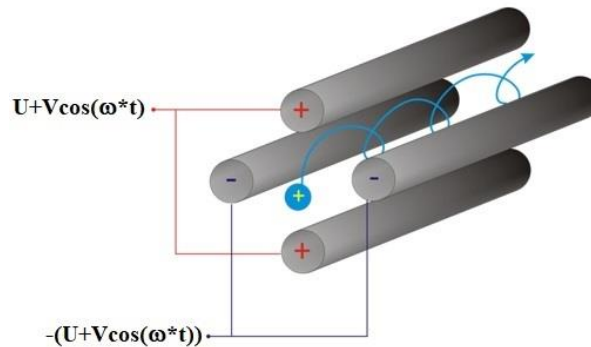


54. ábra. A tömegspektrométerek felépítésének blokkdiagramja.

Több különféle tömegspektrométert típus van, pl. mágneses, repülésiidő, valamint kvadrupól tömegspektrométer.

Egy kvadrupól tömegspektrométer négy párhuzamosan elhelyezkedő, elektromosan vezető elektródából áll. A rudakra egyenfeszültséget (U) és váltófeszültséget ($V \cdot \cos(\omega \cdot t)$) is kapcsolunk oly módon, hogy az átlósan egymással szemben elhelyezkedő elektródok potenciálja megegyezzen, az egymás melletti rudak potenciálja pedig ellentétes előjelű legyen. Az ionforrásból kilépő ionok a gyorsító feszültség hatására hosszanti irányból belépnek a rudak közti térrészbe, majd az analizátorban a folyamatosan változó kvadrupól elektromágneses tér hatására fajlagos tömegüktől függő pályára állnak. A pozitív töltésű ionokat az éppen pozitív töltésű rudak taszítani, míg a negatív töltésűek vonzani fogják. Miközben a váltófeszültség hatására az elektródok relatív töltése folyamatosan változik, az ionok oszcillációs mozgást végezve haladnak a rudak között. A rudakra kapcsolt váltó- és egyenfeszültség megfelelő megválasztásával elérhető, hogy az analizátoron csak egy kiválasztott m/z értékkel rendelkező ionok juthassanak át, az összes többi ion – a kisebbek és a nagyobbak is – a rudakba ütközve semlegesítődnék. Emiatt tömegszűrőnek is hívják a kvadrupól analizátort. E típus működése az 55. ábrán látható¹².

¹²Forrás: <http://tamop412a.ttk.pte.hu/files/kemia7/www/ch09s02.html>. Megtekintés: 2017. július 10-e



55. ábra. A kvadrupól tömegspektrométer működése.

Az MBE rendszerünkben maradékgáz-analízisre Pfeiffer Vacuum PrismaPlus QMG 220 F kvadrupól tömegspektrométert (quadrupole mass spectrometer: QMS) használunk. A 56. ábrán e tömegspektrométer mérőfeje látható.



56. ábra. Az MBE rendszerünkben alkalmazott kvadrupól tömegspektrométer (QMS) mérőegysége.

3.4 Mikroelektronikai lépések a napelem technológiában

A Si a hagyományos napelemek készítésének fő alapanyaga, mert technológiája viszonylag olcsó és kiforrott [2]. A vastagréteg kontaktusú egykristályos vagy multikristályos Si napelem az egyik nagy sorozatban gyártott eszköz. A kristályos Si napelemek és a legtöbb félvezető alapú elektronikus eszköz félvezető szeleten készül.

A Si egykristályban létrehozandó pn átmenet vagy más adalékolási inhomogenitás létrehozása többnyire tömbi diffúzió útján történik [2]. A diffúzió az atomok koncentrációgradiens hatására történő mozgása. Ha az adalékatomok koncentrációja nem túl nagy, akkor a diffúzió leírható az ismert Fick törvényekkel, melyek a következők [131]:

$$J = -D * \frac{\partial N(x,t)}{\partial x}, \quad (29)$$

$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial t} = D * \frac{\partial^2 N(x,t)}{\partial x^2}, \quad (30)$$

ahol J a részecskesűrűség, N a hely és időfüggő koncentráció, D a diffúziós tényező, t az idő és x a helykoordináta. Ha a (29) egyenletet adott kezdetiérték- és határfeltételekkel megoldjuk, akkor az adott anyag diffúzióját kétféle módon írhatjuk fel:

Az első eset a diffúzió állandó N_s felületi koncentráció mellett. Ebben az esetben folyamatosan biztosítani kell, hogy a felületi koncentráció állandó legyen:

$$N(x) = N_s * \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{\sqrt{4*D*t}} \right], \quad (31)$$

ahol az x a behatolási mélység, D a diffúziós állandó, t az idő, N_s a felületi koncentráció, $N(x)$ a koncentráció az x mélységben.

A második eset diffúzió állandó összalékmennyiség esetén:

$$N(x) = \frac{Q}{\sqrt{\pi*D*t}} * e^{-\frac{x^2}{4*D*t}}, \quad (32)$$

ahol az x a behatolási mélység, D a diffúziós állandó, t az idő, Q a bevitt anyagmennyiség, $N(x)$ a koncentráció az x mélységben.

Az adalékanyagoknak a diffúzió után elektromosan aktívnak kell lenniük, ami akkor teljesül, ha az adalékatomok a rácspontokba épülnek be, azaz a diffúzió helyettesítéses típusú. A diffúzió az ún. diffúziós kályhákban történik 800-1200 °C hőmérsékleten.

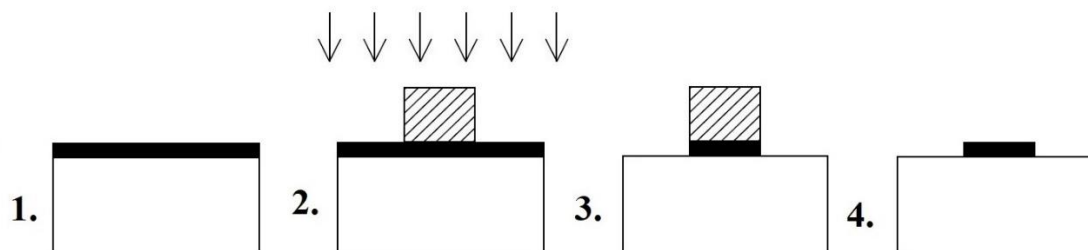
A napelemkészítés egyik fontos lépése az oxidáció, amely célja a szigetelés, passzíválás, ill. a technológiaközi maszkolás. Az oxidréteg kialakítható termikus oxidációval (szárazon vagy nedvesen) anódos oxidációval, CVD eljárással vagy katódporlasztással. Alkalmazástól függően használják a termikus oxidációt (száraz és nedves). A termikus oxidációt ún oxidálókályhákban 900-1200 °C hőmérsékleten alkalmazzák. A felületi passzíválására az oxidált felületet 450 °C hőmérsékleten formálógázban hőkezelik, hogy a felületi állapotok sűrűségét csökkentsék.

A félvezetőeszköz és a külvilág kapcsolatát a fémezés jelenti, ami lehet Schottky és ohmos kontaktus. Ezt a kontaktust porlasztással, CVD eljárással vagy vákuumpárolgattalással ill. szitanyomtatással lehet felvinni. A vákuumpárolgattalás elméletéről a következő fejezetben ejtünk szót.

A napelemek felületét fotolitográfia útján is megmunkálhatjuk. A megmunkáladó félvezető szeletet fotorezisztrel vonják be, amelyre aztán rávetítik kívánt mintázatot egy maszk segítségével [132]. Attól függően, hogy a reziszt a fény hatására könnyebben oldható vagy nehezebben oldható teszi, megkülönböztetünk pozitív vagy negatív rezisztet. A rávetítés után a felesleges területeket marással eltávolítják.

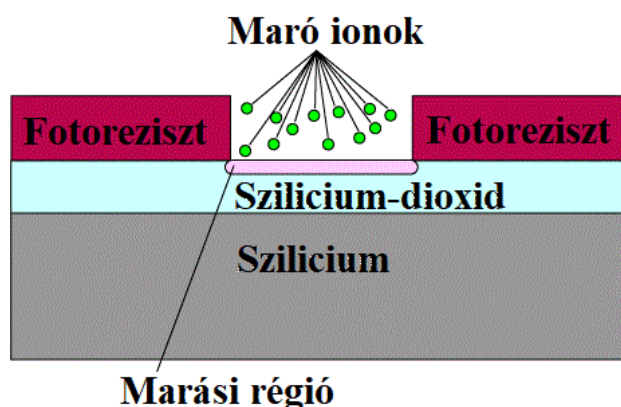
A fotolitográfias rétegmegmunkálásnak egyik hagyományos változata a fémmaratásos eljárás. Az 57. ábrán az üres rész a hordozó, a fekete rész a fémezés és a ferdén vonalkázott téglalap a reziszt. Az 57/1 ábrán látható, hogy egy adott fémet választunk le a hordozóra.

Ezután a fémfelület megmaradó részére fotolakkot viszünk fel és exponáljuk (57/2 ábra), majd kioldjuk a nem polimerizálódott részt (57/3 ábra). Végül a megmaradt összes rezisztet eltávolítjuk a felületről (57/4 ábra). Ezt a művelet akár egymás után többször is megismételhetjük más és más fotomaszkkal.



57. ábra. Hagyományos fémmaratásos eljárás.

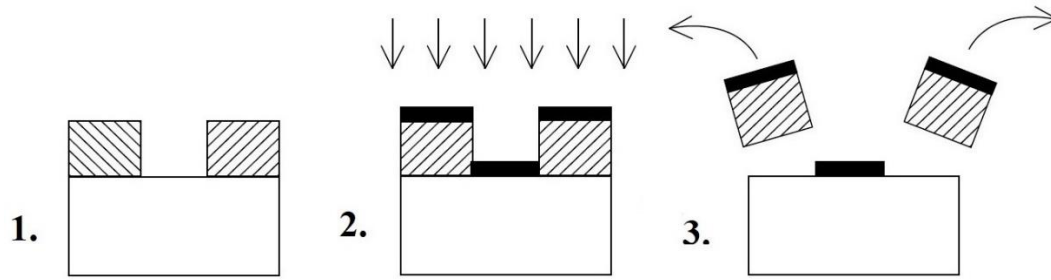
A reaktív ionmarás (reactive ion etching, RIE) egy plazma folyamat, ahol a hordozó vagy vékonyréteg felületet rádiófrekvenciával gerjesztett gyökök vagy ionok segítségével marjuk egy alacsony nyomású reaktorban [133]. Mivel az ionbombázás irányított, a RIE anizotróp jellegű eljárás, ahol a laterális (vagy oldalirányú) marás sebessége kisebb, így függőleges (vagy megközelítőleg függőleges) oldalfalat kapunk (58. ábra). Az RIE előnyös ha keskeny vonal, ill. csatorna szükséges, vagy nagy oldalarányú szerkezeteket kell elkészítenünk. Szinte tetszőleges alakzat kialakítható vele.



58. ábra. Reaktív ionmarás¹³.

A fotolitográfias rétegmegmunkálásnak másik változata az ún. lift-off technika (59. ábra) [134]. A technológia lényege, hogy a megmintázott fémezést egy feláldozandó reziszt rétegre készítik el (59/1 ábra). A litográfias lépés után fémot választ le a reziszt mintázatra (59/2 ábra), amit a reziszt oldószerben való leoldása követ (59/3 ábra). A lift-off technika különösen jól használható nehezen marható fémek, pl. arany vagy platina esetén. Ugyanakkor a technikának több hátránya van a reziszt miatt. Az egyik ilyen hátrány, hogy a technika maximum 120 °C hőmérsékletig használható a reziszt termikus stabilitása okán.

¹³ Forrás: http://cleanroom.byu.edu/rie_etching . Megtekintés: 2017. augusztus 16.



59. ábra. A lift-off technika (forrás: [134]).

A mikroelektronikában a lézeres technológiák kiegészítik a hagyományos technológiákat és új lehetőségeket nyitnak [135] [136] [137].

3.5 Vákuumpárolgatás elmélete és berendezése

A vákuumpárolgatás egy - vékonyrétegek előállítására szolgáló - fizikai gőzfázisú leválasztási eljárás (PVD, Physical Vapor Deposition). Az eljárás lényege, hogy a leválasztani kívánt anyagot vákuumtérben - magas hőmérsékletre hevítve - elpárologtatják, majd az a bevonni kívánt hordozó felületére kondenzáltatva kialakítja a vékonyréteget.

Zárt rendszerben, 0 K-nél magasabb és állandó T hőmérsékleten az anyag felületéről kilépő és a felületre visszatérő atomok dinamikus egyensúlyban vannak. Ezt az adott hőmérsékletre tartozó P egyensúlyi telített gőznyomással (más néven tenzióval) jellemezhetjük. Az egykomponensű rendszer két fázisának egyensúlyi feltételét a Clausius-Clapeyron egyenlettel határozhatjuk meg:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{L_m}{T*(V_m^1 - V_m^2)}, \quad (33)$$

ahol a P a tenzió, t az idő, L_m a fázisátalakuláshoz szükséges moláris hőmennyiség, a T a hőmérséklet, V_m^1 az egyes fázis moláris térfogata és a V_m^2 az kettes fázis moláris térfogata.

Szilárd-gőz fázisátalakulás esetén a szilárd fázis V_m moláris térfogata elhanyagolható, így a gőz fázis moláris térfogata $V_m^1 = R*T/P$ (R az egyetemes gázállandó) összefüggést az (1) egyenletbe behelyettesítve az alábbi összefüggést kapjuk:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{P*L_m}{T^2*(V_m^1 - V_m^2)}. \quad (34)$$

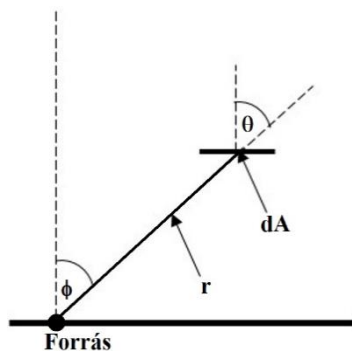
Ha ezt a kifejezést kiintegráljuk, akkor a következő kifejezést kapjuk:

$$\ln P = - \frac{L_m}{R*T} + konstans. \quad (35)$$

Legyen egy kisméretű síkforrás, ahol a forrás φ irányú, θ szöghelyzetű, a forrástól r távolságban lévő, dA felületű hordozóra elpárologtatott $dM(\varphi, \theta)$ anyagmennyiség az alábbi koszinuszos képlettel írható fel:

$$\frac{dM(\varphi, \theta)}{dA} = \frac{M*cos\theta}{r^{x*\pi}} * cos\varphi^y, \quad (36)$$

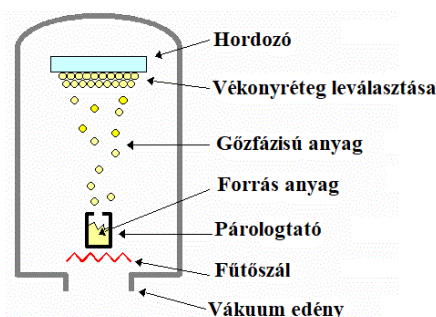
ahol M az elpárolgatott anyag mennyisége. A (35) képlet alapján látható, hogy a hordozó felületére levált anyagmennyiség a forrás és a hordozó távolságának négyzetével fordítottan arányos. Ez csak akkor igaz, ha gőzatomok átlagos szabad úthossza sokkal nagyobb a vákuumkamra méreténél. Alapesetben az $x = 2$ és az $y = 1$. Nagy gőznyomás (kis átlagos szabad úthossz) esetén figyelembe kell venni a gőzatomok egymással történő ütközését is. Ekkor $x > 2$ és $y > 1$. A kisméretű síkforrás iránykarakteristikájának az értelmezése a 60. ábrán látható.



60. ábra. A kisméretű síkforrás iránykarakteristikájának az értelmezése.

A vákuumpárolgatás alapfolyamatai: (1) leválasztani kívánt anyag megfelelő nyomású gőzfázisának létrehozása, (2) gőzrészecskék transzportja a hordozóig, (3) gőzrészecskék kondenzációja a hordozón.

A vákuumpárolgatást különlegesen kialakított, vákuum-berendezésekben végzik. Egy ilyen berendezés felépítése az 61. ábrán látható.



61. ábra. Vákuumpárolgató berendezés¹⁴.

A párolgató forrásnak két része van, az elpárolgatni kívánt anyag és a forrástartó. A forrástartóban felmelegítjük a forrásanyagot egy bizonyos hőmérsékletre.

A leválasztandó forrásanyag lehet szilárd vagy folyadék halmazállapotú. A forrásanyag tisztasága jelentős mértékben befolyásolja a lekondenzálódó vékonyréteg szennyezettségét. A párolgatás megkezdésekor a hordozót blendékkel választják el a forrástól. Ezek a blendék mozgathatók. A forrásból elpárolgatott atomok akkor érik el a hordozót, ha a blende ki van nyitva. A kondenzáció és a felületi diffúzió mértéke a hordozó hőmérsékletétől függ, ami meghatározza a leváló réteg szerkezetét, mintázatát.

¹⁴Forrás: <http://web.tuat.ac.jp/~usuilab/English/depo.html>. Megtekintés: 2017. július 11.

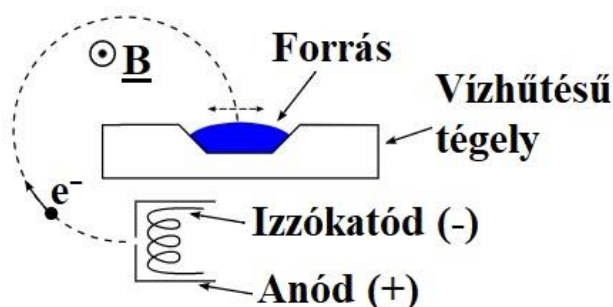
Az elpárolgatott anyag mennyiségét megadó (19) képlet alapján látható, hogy a hordozó felületére leválasztott rétegvastagság függ a forrás és a hordozó távolságától, ezért az egyenletes rétegvastagság eléréséhez megfelelő mintatartó szerkezeteket alkalmaznak. A vákuumpárolgatással leválasztott réteg minősége az alábbi paramétereiktől függ: (1) vákuumkamra nyomása, (2) forrásanyag és forrástartó tisztasága, (3) forrásanyag gőznyomása, (4) hordozó hőmérséklete, (5) forrás és hordozó távolsága, (5) mintatartó szerkezet.

Az értekezésben vizsgált felületek Balzers vákuumpárolgatóval készültek, mely az 62. ábrán látható.



62. ábra. Balzers vákuumpárolgató¹⁵.

Ez a típus egy elektronsugaras párolgató. Az eljárás lényege, hogy magas olvadáspontú és kis diffúziós állandójú főtégelyben a párolgatatandó anyagot elektronsugárral melegítjük. A rézből készült tégelyt, vízzel hűtik a gőzölés alatt azért, hogy anyaga semmiképpen se szennyezhesse be a gőzölni kívánt forrást. Elektronforrásként volfrám szálat használnak. A volfrám izzókatódból kilépő elektronokat az anódra kapcsolt 5-15 kV-os nagyfeszültség gyorsítja fel. A wolfram szálból kibocsájtott elektronnalábot elektromágnessel eltérítik 270°-ban a forrásanyag irányába. A berendezés elvi működése a 63. ábrán látható.



63. ábra. Elektronsugaras vákuumporlasztás elve¹⁶.

¹⁵Forrás: <http://www.newdest.ca/Balzers%20Vacuum%20Evaporator.jpg>. Megtekintés: 2017. szeptember 7.

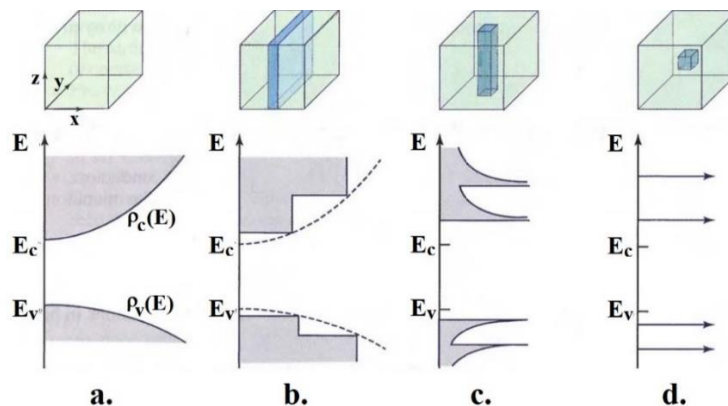
¹⁶ Forrás: http://fizipedia.bme.hu/index.php/F%C3%A1jl:E_beam_270.svg . Megtekintés: 2017. augusztus 20.

4 A GaAs-alapú QD napelemek felépítése, működése

A tömbi félvezetőkben az elektronok és a lyukak szabadon mozoghatnak, energiaértékeik folytonosak és az energiaszintjeik nagyon közel vannak egymáshoz, így energiasávok keletkeznek. A betöltött sáv a vegyérték sáv, míg a betöltetlen sáv a vezetési sáv, melyek között a tiltott sáv található. A fotoelektromos konverzió fő problémája az, hogy a tiltottsáv szélességénél kisebb energiájú fotonok nem tudnak a vezetési sávban töltéshordozókat gerjeszteni [138], így ezek a fotonok nem járulnak hozzá az eszköz által termelt áramhoz. Másrészt a tiltott sáv szélességénél nagyobb energiájú, abszorbeált fotonok többlet energiája a rácsrezgéseket gerjeszt, így ez a plusz energia nem hasznosítható, és hővé alakul. Ennek következtében a napelem melegedni fog, ami pl. csökkenti a hatásfokot, ill. meggyorsítja az eszköz öregedését. Ellenben, ha az eszköz tiltottsávjában kvantum pontok segítségével közbenső sávokat hoznak létre, akkor az a kisebb energiájú fotonokat is abszorbeálni tudja.

A félvezető kvantum pontok koncepcióját az 1960-as évek elején javasolták először, és az évek során egyre több kutató kezdett foglalkozni velük [139]. 1981-ben Ekimov számolt be félvezető kvantum pontokról üveg mátrixban [140]. 1985-ben L. Brus fejlesztette ki a gömbszerű kvantumpontok effektív tömeg közelítésen alapuló modelljét [141]. Maga a kvantum pont megnevezést először 1988-ban Reed kutatócsoportja használta [142]. 2004-ben egy Los-Alamos-i kutatócsoport számolt be ólomszelenid kvantumpontok előállításáról [143]. Napjainkban a kvantum pontok ígéretes nanostrukturájú anyagok a fotonikában és az orvosi alkalmazások terén is.

Általánosan fogalmazva, ha az adott szerkezet egy vagy több dimenzióban eléggé kicsi (tehát egy vagy több mérete 100 nm alatt van) ahhoz, hogy az elektron mozgását korlátozza, akkor kvantum behatárolásról beszélünk. A kvantum behatárolás során az elektron mozgását nulla (tömbi anyag (64/a. ábra)), egy (kvantum völgy (64/b. ábra)), kettő (kvantum huzal (64/c. ábra)) vagy három (kvantum pont (64/d. ábra)) irányban is korlátozhatjuk. Ez a jellegzetes behatároltság diszkrét és kvantált energiaszintekhez vezet. A 64. ábrán az is látható, hogy a behatárolás mértékétől függ az adott szerkezet állapotsűrűsége. A vezetési és a vegyérték sáv egymást átfedő alsávokra bomlanak. Ezek az alsávok annál vékonyabbak, minél több irányban korlátozzuk az elektronok mozgását. A kvantum pont egy nulla dimenziós rendszer, ahol az elektron mozgása mind a három dimenzióban behatárolt. Emiatt a kvantum pontok állapotsűrűsége egy delta függvénnyel írható le [144]. Emiatt a kvantum pontokat mesterséges atomoknak is hívjuk [139].

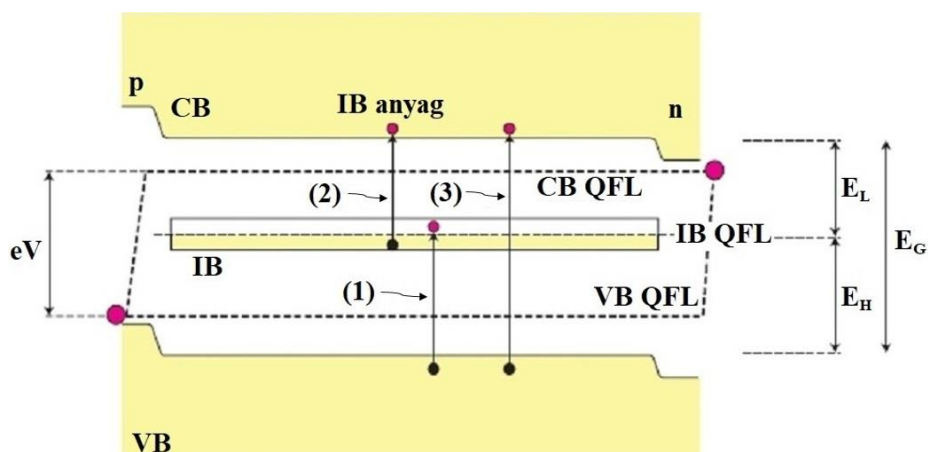


64. ábra. A tömbi anyag (a.), kvantum völgy (b.), kvantum huzal (c.), kvantum pont (d.) és állapotsűrűségeik (forrás: [144]).

A nagy hatásfokú, közbenső kvantum pont rétegekkel (IBQD - Intermediate Band Quantum Dot) készült napelemről számos szerző közölt már tanulmányt [14] [145] [146] [147]. Ezek a kvantum pont rétegek két szokványos n és p típusú réteg közé vannak szendvicsszerűen beékelve. A közbenső sávot a hagyományos tiltott sávban létrehozott megengedett állapotok jellemzik, ami a tiltott sávot két alsávra osztja. Ezek az alsávok lehetővé teszik, hogy az eszköz többlet elektron-lyuk párokat generáljon. E feltevés alapján az első foton a vegyértéksávból egy elektront gerjeszt a közbenső sávba, ezzel párhuzamosan egy másik foton a közbenső sávból egy másik elektront gerjeszt a vezetési sávba. A közbenső sávot (Intermediate Band) úgy tekinthetjük, mint három napelem cellát, melyek közül kettőt sorba van kapcsolva és a harmadikat ezekkel a sorba kapcsolat cellákkal párhuzamosan kapcsoljuk.

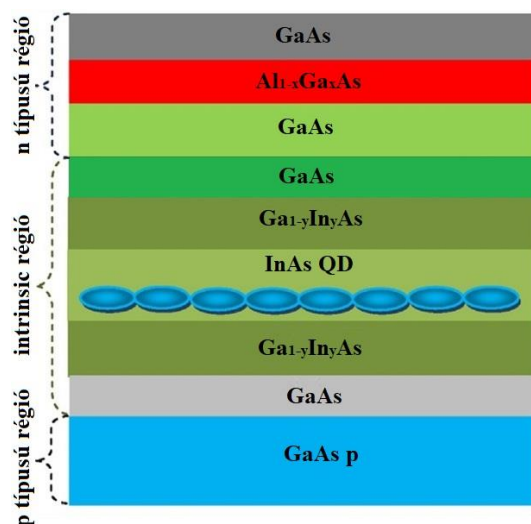
A 65. ábrán az IBQD napelem sávdiagramja látható [14], ahol az E_G a tiltott sáv, az E_L és az E_H a tiltott alsávok. A CB QFL (Quasi Fermi Level) a vezetési sáv kvázi Fermi-szintje, míg a VB QFL a vegyérték sáv kvázi Fermi-szintje. Az (1) és a (2) jelölések a tiltott sáv alatti, míg a (3) a tiltott sáv feletti foton abszorpciót reprezentálja. Egy közbenső réteggel készült anyagnál, az al-tiltott sáv energiaszintjének megfelelő energiájú fotonok fotonokat abszorbeálja a vegyérték sáv-közbenső sáv, ill. a közbenső sáv-vezetési sáv között. Ezek az átmenetek fellépő fotoáram hozzáadódik a hagyományosan a vegyérték sáv-vezetési sáv között fellépő fotoáramhoz.

Egy optimális IBQD napelem teljes tiltottsáv szélessége 1,95 eV. Ebből a felső E_L tiltott sáv 0,71 eV széles, míg az alsó E_H tiltott sáv 1,24 eV széles. A tiltott sávot úgy kell felosztani, hogy minél szélesebb spektrumtartományt fedjen le.



65. ábra. Az IBQD napelem sávdiagramja, ahol az E_G a tiltott sáv, az E_L és az E_H al-tiltott sávok. A CB QFL a vezetési sáv kvázi Fermi-szintje, míg a VB QFL a vegyérték sáv kvázi Fermi-szintje. Az (1) és a (2) jelölések a tiltott sáv alatti, míg a (3) a tiltott sáv feletti foton abszorpciót reprezentálja (forrás: [14]).

Közbenső sávként, a kvantum pontok megengedett állapotainak az energiaszintjeit használhatjuk. Az első ilyen napelemet, amely ezen az elven működik, 2004-ben fejlesztették ki. A 66. ábrán ennek a napelemnek a rétegei láthatók [146]. A közbenső sáv a kvantumpontok csatolása miatt keletkezik. Ennél a napelemnél molekulásugár epitaxiával InAs kvantumpontokat növesztettek GaAs mátrixban Stransky-Krastanov módon.



66. ábra. Az IBQD napelem rétegábrája. (forrás: [146]).

A napelem elektromos és optikai tulajdonságai az InAs kvantumpontok méretétől, eloszlásától és alakjától függenek [148] [149]. Utóbbi cikkekben gömb alakú InAs kvantum pontok elektromos és optikai tulajdonságát vizsgálták empirikus pszeudopotenciál módszerrel.

Ez a módszer pl. az abszorpció meghatározásánál is pontos eredményeket ad nano méret tartományban, kisebb számításiigénnyel a sűrűség funkcionál alapú eljárásokhoz képest [150] [151]. A szerzők a [149] cikkben a lokális empirikus pszeudopotenciál módszert alkalmazták [152]. Ennél a módszernél a pszeudopotenciál Hamilton operátora a következő:

$$H = -\left(\frac{\hbar^2}{2*m}\right)\Delta + V(r), \quad (37)$$

ahol a \hbar a redukált Planck állandó, az m az elektron tömege, a $V(r)$ a potenciál, a Δ pedig a Laplace operátor. A $\varphi_{n,k}$ tömbi sajátfüggvény az időfüggetlen Schödinger egyenlettel a következő:

$$H\varphi_{n,k} = E_{n,k}\varphi_{n,k}, \quad (38)$$

ahol az $E_{n,k}$ az energia sajátérték, az n az energianívó száma, a k a hullámszám. Az empirikus pszeudopotenciál módszere az elektron környezetének a dimenzió csökkentését igényli, ami ebben az esetben az elektronok mozgási szabadsági fokának a csökkentését jelenti háromról (tömbi anyag) nulla dimenzióra (kvantum pont). A kvantumpontok csökkentett mozgási szabadsági fokának a következtében az energiaszintek diszkrété lesznek, ami molekulyszerű diszkrét pályae energiákat jelent a sávszerkezet helyett [150]. Ezeket az energiaszinteket a hullámfüggvények megfelelő határfeltételeinek előírásával kaphatjuk meg. Így a határfeltételeknek (kvantum pont méretének, alakjának) megfelelő megengedett k hullámszám értékek a következő képlettel kaphatók meg:

$$k = \frac{\pi}{\sqrt{3*a}} * n, \quad (39)$$

ahol a a gömb sugara. E_g a tiltott sáv szélessége, ami InAs kvantumpontok esetén a következő, ha a a gömb sugara a [153]:

$$E_g = E_g^0 + \frac{\hbar^2 * \pi^2}{2 * a^2} \left[\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right] - \frac{1.8 * e^2}{\epsilon * a}, \quad (40)$$

ahol az E_g a kvantum pontok tiltott sáv szélessége, az E_g^0 a megfelelő tömbi tiltott sáv energia, az ϵ a dielektromos állandó, m_e^* az elektron, míg az m_h^* a nehéz lyuk effektív tömege a tömbi InAs-ben.

Az átmenet energiáját a [146] cikk alapján a következő módon határozhatjuk meg:

$$E_{tr} = E_g + E_e + E_h, \quad (41)$$

ahol az E_{tr} az átmenet energiája, E_g a kvantum pontok tiltott sáv szélessége, E_e az elektron kvantált energiája, míg E_h a nehéz lyukak kvantált energiája.

Az $\alpha(E)$ abszorpciós tényezőt, a következő módon határozhatjuk meg [154]:

$$\alpha(E) = \alpha_0 * \frac{\sqrt{E-E_g}}{E}, \quad (42)$$

ahol a beeső foton energiája E és a tiltott sáv szélessége E_g , míg az α_0 egy állandó. Az elektronok a nehéz és a könnyű lyukak sávjában abszorbeálják a beeső fény energiáját, úgy, hogy a vegyértéksávból a vezetési sávba kerülnek át. Ebből következik, hogy a teljes abszorpciós tényező a nehéz lyukak és a könnyű lyukak abszorpciós tényezőjének az összege, azaz:

$$\alpha_{teljes} = \alpha_{e-hh} + \alpha_{e-lh}, \quad (43)$$

ahol az α_{e-hh} nehéz, míg az α_{e-lh} a könnyű lyukak abszorpciós tényezője. Ez a két tényező a következő módokon határozható meg [12]:

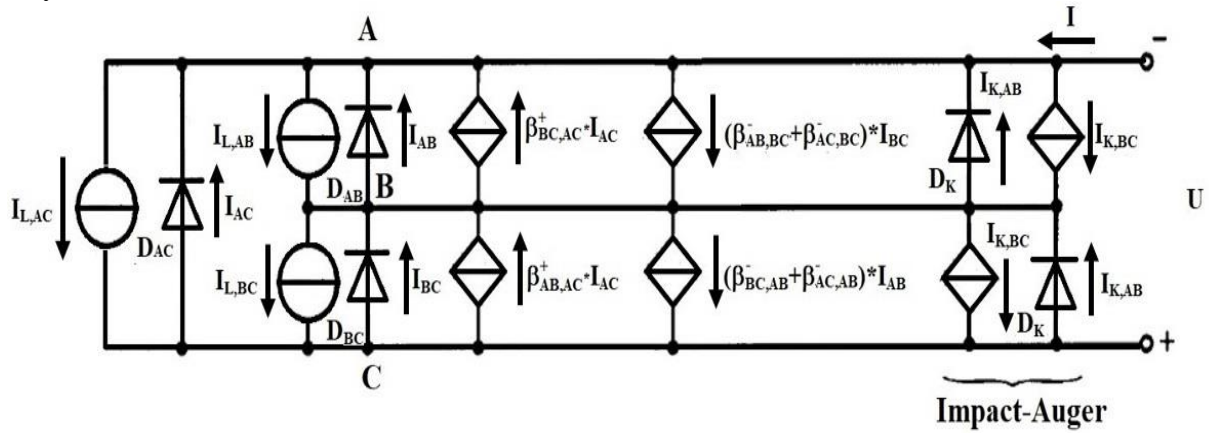
$$\alpha(E)_{e-hh} = \alpha_0 * \frac{m_{rhh}^{3/2}}{E} * \frac{\sqrt{E-E_{tr}}}{q}, \quad (44)$$

$$\alpha(E)_{e-lh} = \alpha_0 * \frac{m_{rlh}^{3/2}}{E} * \frac{\sqrt{E-E_{tr}}}{q}, \quad (45)$$

ahol a α_0 értéke $2,2 * 10^6$ és a q értéke $1,6 * 10^{-19}$ C.

Az 67. ábrán e struktúra villamos helyettesítőképét láthatjuk [155]. Ez a modell jelentős számú fizikai hatást tartalmaz, többek között a sávok sugárzásos csatolását és az Auger rekombinációs mechanizmusok hatását. A helyettesítőképben három csomópontot van. Az A csomópont megfelel a vezetési sávnak, a C csomópont megfelel a vegyérték sávnak, míg az B csomópont a közbenső sávnak felel meg. A $I_{L,AC}$ az átmenetek teljes fotóárama, a I_{AC} a DAC dióda fotóárama, a I_{AB} a D_{AB} dióda fotóárama, a I_{BC} a D_{BC} dióda fotóárama, a $I_{L,AB}$ a D_{AB} dióda és a D_{AC} dióda együttes fotóárama, a $I_{L,BC}$ a D_{BC} dióda és a D_{AC} dióda együttes fotóárama. A $\beta_{a,b}^{\pm}$ az AB , a BC vagy a AC potenciálok közötti áramerősítési tényező. A $I_{K,AB}$ a $D_{K,AB}$ dióda fotóárama, $J_{K,BC}$ a $D_{K,BC}$ dióda fotóárama. A helyettesítőkép elemeinek részletes magyarázata a [155] cikk I. táblázatában található meg. A független áramforrások a külső megvilágítás

hatására keletkező töltéshordozókat, míg a vezérelt források a sávok közötti csatolásokat jelképezik. Utóbbi jelenséget a fény újraelnyelése és az ütközési ionizációs mechanizmusok okozzák. A diódák a rekombinációs folyamatokat jelképezik, beleértve a nem sugárzó jellegű folyamatokat is.



67. ábra. A nanostrukturás napelemek ekvivalens helyettesítőképe (forrás: [155]).

A diódák áramát a következő összefüggéssel kaphatjuk meg:

$$I_{XY} = I_{0,XY} * \left(e^{\frac{e*U_{YX}}{k*T}} - 1 \right), \quad (46)$$

ahol az I_{XY} az X és az Y csomópontok között folyó áram, a $I_{0,XY}$ az X és az Y csomópontok között folyó záró irányú áram, a U_{YX} az Y és az X csomópontok közötti potenciál különbség, az e az elektron töltése, a k a Boltzmann állandó és a T a hőmérséklet.

A sávdiaagrammal ekvivalens helyettesítőképben az $I_{I,BC}$ fotoáram az 65. ábrán megfelel az (1) foton által generált fotoáramnak, a $I_{I,AB}$ fotoáram az 67. ábrán megfelel a (2) foton által generált fotoáramnak, míg a $I_{I,AC}$ fotoáram az 67. ábrán megfelel a (3) foton által generált fotoáramnak.

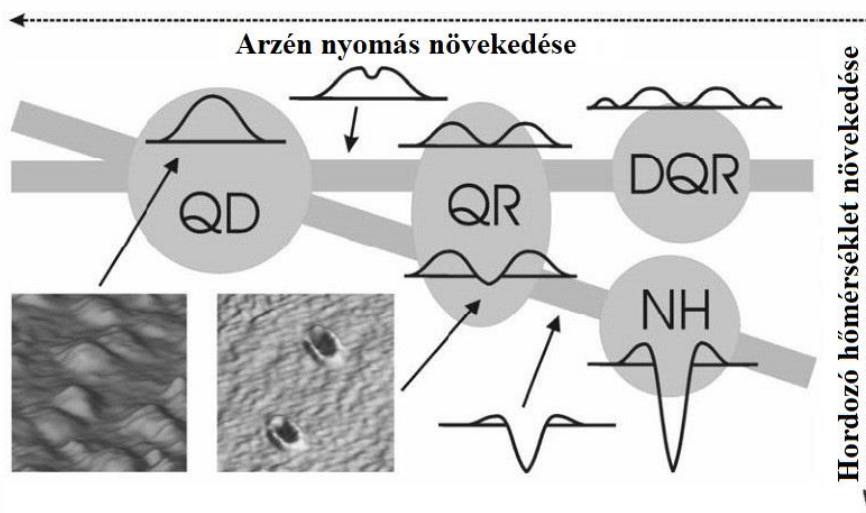
A villamos helyettesítőkép bonyolultságát a sugárzásos rekombináció mechanizmusa okozza a CB és a VB között. Az így keletkezett fotonok újra abszorbeálódnak más átmeneten, pl. a VB és az IB között. Amennyiben ez a hatás elhanyagolható, akkor a $\beta_{a,b}^{\pm}$ áramerősítési tényező értéke 0 lesz és az Auger-hatás is elhanyagolhatóan tekinthető. Ebben az esetben a helyettesítőkép egyszerűsödik. Ellenben, ha a diódák idealitási tényezője nem egy, akkor a modell bonyolultabb lesz, mert más hatásokat, pl. a tértöltés rétegben fellépő nem sugárzásos hatásokat is figyelembe kell venni.

5 Droplet epitaxiás nanostrukturák

5.1 QD előállítás

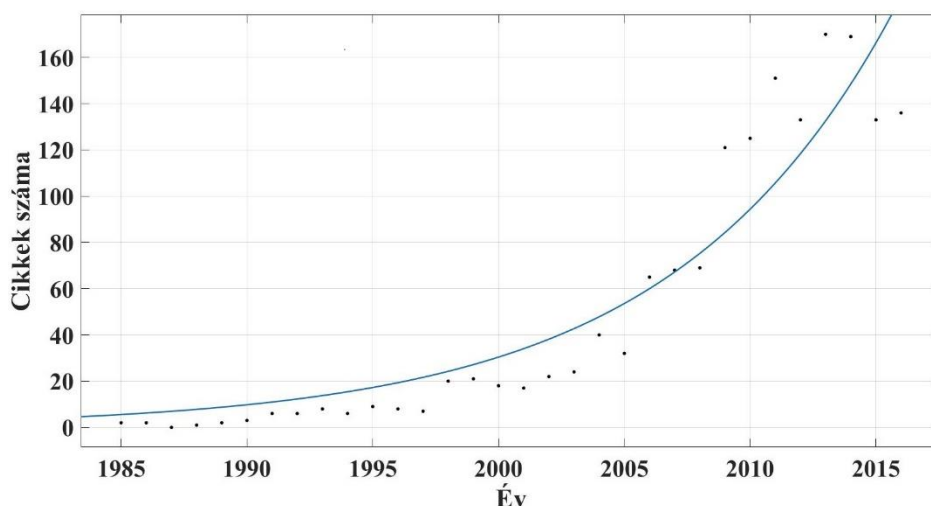
3.1-es fejezetben ismertetett növekedési típusokkal csak hagyományos rétegek vagy klaszterek, dotok alakulhatnak ki, más típusú nanostrukturák (pl. kvantum gyűrűk, dupla kvantum gyűrűk, nanolyukak) nem. Ezeket a nanostrukturákat egy másik módszerrel, az úgynevezett csepp-epitaxiával lehet növesztetni.

A csepp-epitaxia elgondolását Koguchi és munkatársai dolgozták ki először az 1990-es évek elején [148] [156] [157] [158] [159]. A technológia lényege, hogy az első lépésben a hordozó (pl. GaAs) felületére egy a III. főcsoportból származó fém cseppet (pl. Ga) választunk le. A második lépésben a minta hőmérsékletének és a háttérben lévő V. főcsoportból származó maradékgáz (pl. As) nyomásának a függvényében különféle nanostruktúrák alakulnak ki úgy, hogy a Ga cseppek teljes mértékben kikristályosodnak (68. ábra).



68. ábra. A különféle nanostruktúrák kialakulása az arzén nyomás és a hordozó hőmérsékletének a függvényében (forrás: [148]).

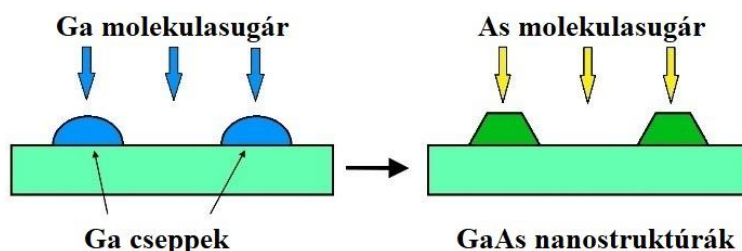
A csepp-epitaxia témakörében megjelent cikkek számának alakulását a 69. ábrán követhetjük nyomon. Az ábrán látható, hogy 1985 és 2016 között az évek során, a csepp-epitaxiával kapcsolatban megjelent publikációk száma exponenciálisan növekszik. Ebből arra következtethetünk, hogy a csepp-epitaxia az évek során egyre inkább a kutatók figyelmének a középpontjában került. A technológiáról és lehetőségeiről [160] irodalomban olvashatunk bővebben.



69. ábra. A csepp-epitaxiával kapcsolatos publikációk száma 1985 és 2016 között.

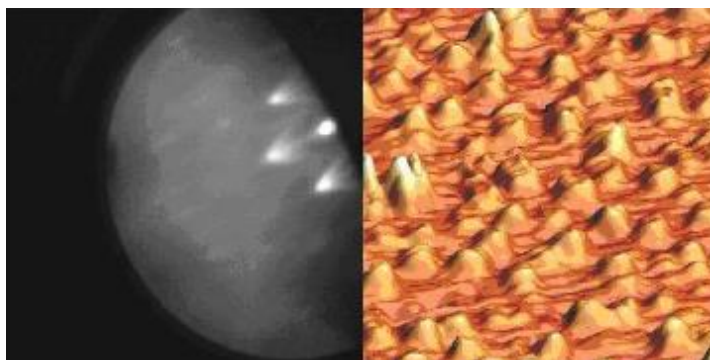
A kialakuló nanostuktúrák jellege több tényezőtől függ. A csepp-epitaxia során alacsony hőmérsékleten, nagy arzén háttérnyomás esetén a cseppbe érkező Ga atomok nem tudnak a cseppből eldiffundálni, mert az As atomok megkötik őket. Így a csepp

kikristályosodik, és kvantum pontok alakulnak ki. A folyamat a 70. ábrán követhető nyomon. A Ga cseppek mérete a Ga részecskeáramával, a sűrűségük a Ga felületi befedettségével, az eloszlásuk a hordozó hőmérsékletével szabályozható. A nanostruktúra morfológiája szintén a hordozó hőmérsékletével és az As háttérnyomásával szabályozható [159].



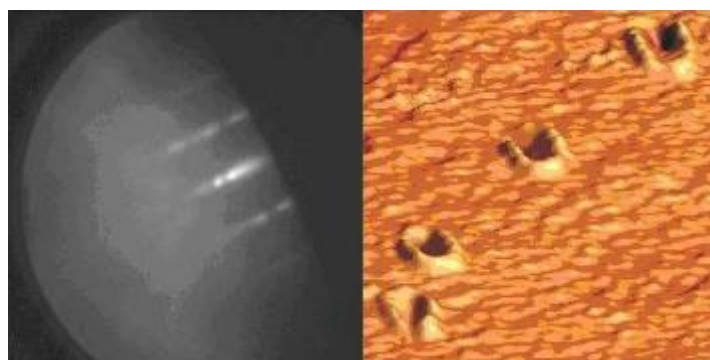
70. ábra. Nanostruktúrák kialakulása a csepp-epitaxia folyamata során (forrás: [159]).

A csepp-epitaxiával készült kikristályosodott kvantum pontok RHEED és AFM képei a 71. ábrán láthatók [161].



71. ábra. Kikristályosodott csepp-epitaxiával készült kvantum pontok. A bal oldali kép a QD-k RHEED felvétele, a jobb oldali kép a QD-k AFM felvétele (forrás: [161]).

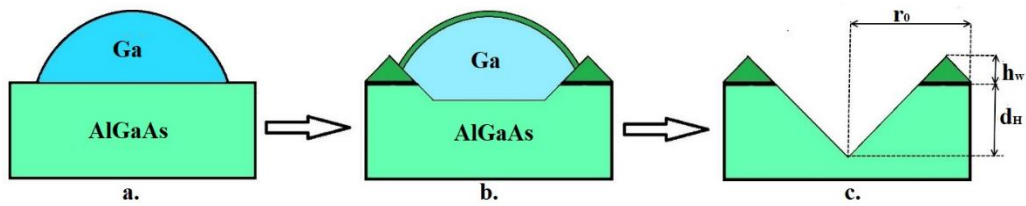
Ugyancsak csepp-epitaxiával készült kikristályosodott kvantum gyűrűk RHEED és AFM képei az 72. ábrán láthatók [161].



72. ábra. Kikristályosodott csepp-epitaxiával készült kvantum gyűrűk. A bal oldali kép a QR-ek RHEED felvétele, a jobb oldali kép a QR-ek AFM felvétele (forrás: [161]).

Ahogy a 68. ábra is mutatja nanolyukak magas hőmérsékleten, minimális As háttérnyomás esetén alakulnak ki [162]. A nanolyukak kialakulása a következő: a GaAs hordozóra Ga cseppet választunk le (a.). A hordozóból az arzén atomok a Ga cseppbe diffundálnak koncentrációgradiens miatt, és a csepp felületére kijutva deszorbeálódnak, eközben a gallium atomok felületi diffúzió útján eltávoznak a cseppből (b.). Végül nanolyuk alakul ki

(c.). Ezt a folyamatot a 73. ábrán láthatjuk.

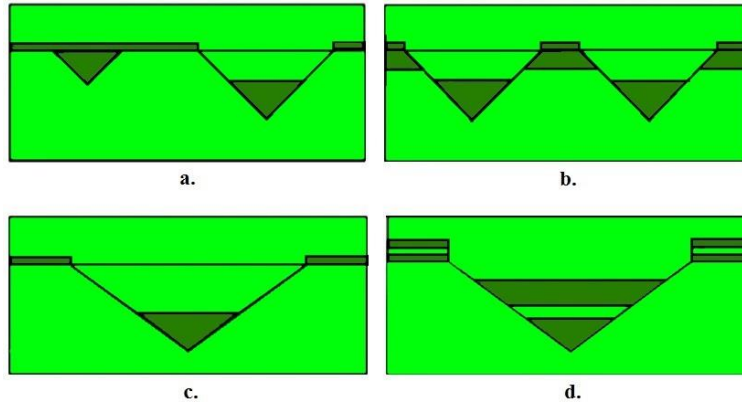


73. ábra. A nanolyukak kialakulása (az eredeti ábra forrása: [162]).

A 73/c. ábrán az r_0 a külső sugár (nanolyuk körül lévő gyűrű), h_w a gyűrű magassága, a d_H a nanolyuk mélysége. Ha az így kialakult nanolyukat fém (pl. Ga) atomokkal betemetjük, akkor invertált kvantum pontról beszélünk. Az invertált kvantum pontoknak 4 fajtája van: 1-es típusú QD (fehér fény emitterek), 2-es típusú (egyenletes kvantum pontok), 3-as típusú (ultra-alacsony sűrűségű kvantum pontok), függőlegesen halmozott kvantum pont molekulák [162].

A 74/a. ábrán látható 1-es típusú kvantum pontok (fehér fény emitterek) lokális csepp marással készültek AlGaAs felületen $T=550-620$ °C hőmérsékleten. Ezzel a módszerrel bimodális sekély és mély nanolyukak keletkeznek. E lyukak betemetésekor a sekély lyukak teljesen, a mély lyukak részlegesen temetődnek be. A hőmérsékletet növelve, lokális csepp marással 2-es típusú (egyenletes) kvantum pontok készülnek (74/b. ábra) és a sekély lyukak sűrűsége lecsökken. Ezek a kvantum pontok részben betemetettek, és méretük pontosan szabályozható a leválasztott GaAs mennyiségével. A GaAs betemetett, ultra-alacsony sűrűségű (ULD, 3-as típusú) kvantum pontokra még kisebb sűrűség és még mélyebb lyukak jellemzők (74/c. ábra). Érdekesség, hogy az eltemetett ultra-alacsony sűrűségű kvantum pontok jelenlétét a felületen néhány nanométer magas dombocskák jelzik. A 74/d ábrán függőlegesen halmozott kvantum pont molekula látható, ami két szorosan elhelyezett kvantum pont. Ez a legegyszerűbb nanostrukturából álló kölcsönható rendszer. Ez a struktúra két duplán betemetett ultra-alacsony sűrűségű kvantum pont. A két pont egy jól definiált szélességű AlGaAs barrierrel van elválasztva [162]. A 74. ábrán a világoszöld színnel az AlGaAs réteget jelöltem és a GaAs réteget sötétzölddel.

Ebben a fejezetben eddig az egyszerű nanostrukturákról (kvantum pont, kvantum gyűrű, nanolyuk, invertált kvantum pont) volt szó. Komplexebb nanostrukturák a pulzus csepp-epitaxiával (pulsed droplet epitaxy) készíthetők. Ebben az eljárásban a fémes Ga csepp leválasztása után a rendes csepp-epitaxiához képest kisebb mennyiségű arzénnel részben kikritályosítjuk a cseppet [159]. Ezen eljárást követve lehetőség nyílik kvantumpon-tkvantumgyűrű hibridek, kvantum diszkek, csatolt kvantum pontok és egyéb komplex struktúrák növesztésére is [163].



74. ábra. A nanolyukak kialakulása. Az (a) 1-es típusú kvantum pont, a (b) egy 2-es típusú kvantum pont, a (c) egy 3-as típusú kvantum pont, a (d) egy függőlegesen halmozott kvantum pont molekula. Az AlGaAs réteget világoszöld színnel, a GaAs réteget sötétzölddel jelöltem (forrás: [162]).

5.2 Új modell, a dinamikai viszkozitás mikroszkópikus értelmezésére (1. tézis)

Jelen fejezetben a nanolyukak betöltődésének dinamikájával foglalkozom [164] [165] [166] [167], mely az invertált kvantum pontos napelemek előállításának része.

Ismert tény, hogy makroszkópikus megközelítésben a dinamikai viszkozitás egy, a folyadék tulajdonságaitól függő arányossági tényező, ami kapcsolatot teremt a csúsztatófeszültség és a deformációsebesség között:

$$\tau = \mu * \frac{dy}{dt}, \quad (47)$$

ahol a τ csúsztatófeszültség, μ a dinamikai viszkozitás, $\frac{dy}{dt}$ a deformáció sebessége. Ezt a viszkozitást folyékony fémek esetén, többféle módon is meghatározhatjuk [168] [169] [170] [171] [172]. Jelen esetben az Arrhenius-Andrade egyenlet használom [172], melynek a képlete a következő:

$$\mu(T) = \mu_0 * e^{\frac{E_0}{R*T}}. \quad (48)$$

A képletben $\mu(T)$ a dinamikai viszkozitás a hőmérséklet függvényében, T a hőmérséklet (Kelvinben), a μ_0 egy pre-exponenciális tényező (értéke galliumnál 0,436), E_0 a tömbi aktivációs energia (értéke galliumnál $4000 \frac{J}{mol}$), az R az univerzális gázállandó (értéke $8,3144 \frac{J}{K*mol}$).

Mikroszkópikus megközelítésben a dinamikai viszkozitás meghatározásához először írjuk fel egy esemény bekövetkezésének valószínűségét, atomi szinten [27] [28]:

$$P(E_a, T) = e^{-\frac{E_a}{R*T}}, \quad (49)$$

ahol az E_a az adott esemény aktivációs energiája, T a hőmérséklet (Kelvinben), R az univerzális gázállandó (értéke $8,3144 \frac{J}{mol*K}$). E formula segítségével meghatározhatjuk a k helyváltoztatási frekvenciát:

$$k = k_0 * e^{-\frac{E_a}{R*T}}, \quad (50)$$

ahol a k_0 az atomi vibrációs frekvencia. Ezt a következő módon határozhatjuk meg:

$$k_0 = \frac{2*k_B*T}{h}, \quad (51)$$

ahol, a k_B a Boltzmann állandó, h a Planck állandó. Ezután vezessük be a geometriai tényezőt, $\rho = \rho(E_a, T)$ a következő módon [173]:

$$\rho(E_a, T) = l * e^{-\frac{2E_a}{R*T}}, \quad (52)$$

ahol, az l egy skalár érték, de lehet egy vagy többváltozós függvény is. Legyen $E_0 = E_a[n]$, ahol az E_0 a tömbi aktivációs energia és $E_a[n]$ pedig egy sűrűségfüggvény, mely megadja az n atomos sokaság kötési energiáját, az atom-atom, atom-elektron és elektron-elektron kölcsönhatások figyelembe vételével.

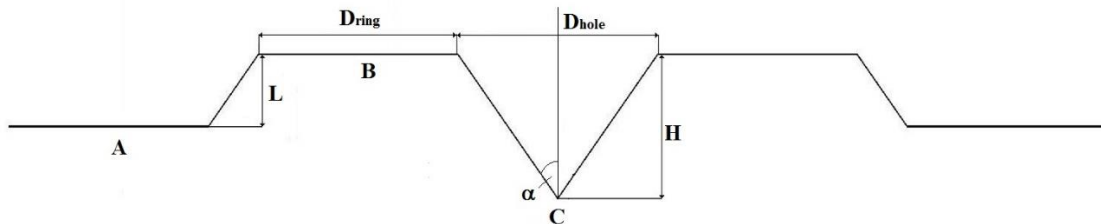
Ebből következik, hogy a dinamikai viszkozitás

$$\mu(T) = \rho(E_0, T) * k = k_0 * l * e^{-\frac{E_0}{R*T}}, \quad (53)$$

ahol a $k_0 * l$ szorzat megfeleltethető a μ_0 pre-exponenciális tényezőnek. Így a mikroszkópikus viszkozitás képletét visszavezettem a makroszkópikus viszkozitás egyenletére (48-as egyenlet) [165] [166].

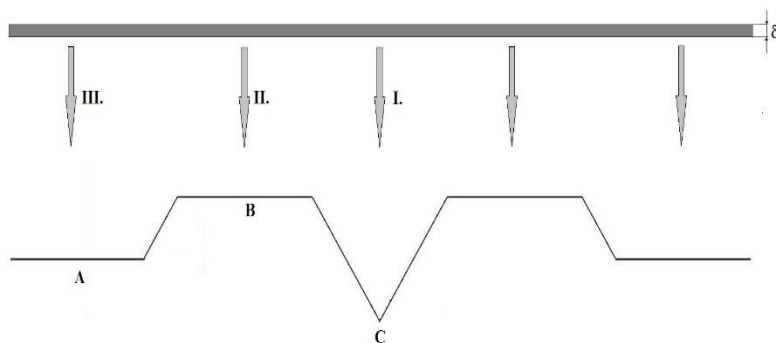
5.3 Effektív modellezési algoritmus a III-V alapú nanolyukak feltöltődésére (2. tézis)

A szimulációnál a kiindulási adat 75. ábrán látható nanolyuk [164] [165] [166] [167]. Az „A” pont a nanolyuk melletti terület, a „B” pont a gyűrű, a „C” pont maga a nanolyuk. A D_{ring} a gyűrű szélessége, a D_{hole} a lyuk átmérője, az L a gyűrű magassága a hordozó felületétől, a H a gyűrű magassága a nanolyuk aljától számítva. Az α szög a nanolyuk nyílásának félszöge, amely értéke 55° , ami megfelel az $\{111\}$ kristálytani síknak.



75. ábra. A vizsgált nanolyuk alapfelépítése.

A szimuláció során első lépésben galliumot választottam le a hordozóra (76. ábra). Ebben a fejezetben azt az ideális esetet vizsgálom, amikor nincs felületi diffúzió, tehát a leválasztott atomok nem mozognak a felületen.



76. ábra. A rétegleválasztás során a nanolyuk egyes részeire jutó teljes térfogat részei (az alapréteg).

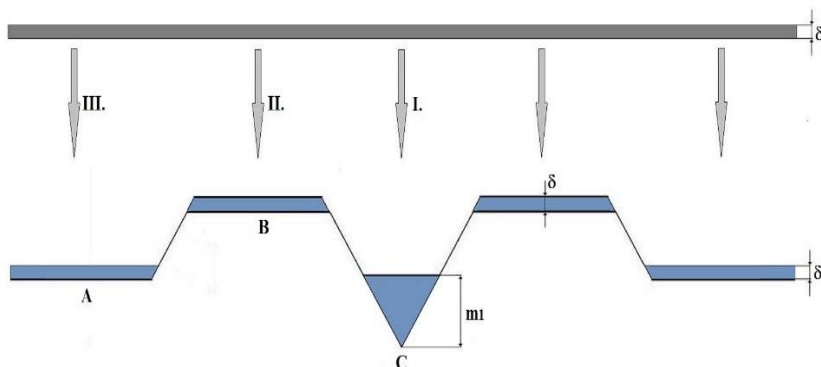
A leválasztott réteg térfogatából az *I.* térfogat közvetlenül a nanolyukba jut V_I . A közvetlenül a nanolyukba jutó térfogat a következő módon számítható:

$$V_I = r_{lyuk}^2 * \pi * \delta, \quad (54)$$

ahol az r_{lyuk} a nanolyuk sugara és δ a leválasztott réteg vastagsága. A lyukban lévő térfogat magassága a forgáskúp képletével számítható ki:

$$m = \sqrt[3]{\frac{3 * V_I}{\pi * t * g^2 * \alpha}}, \quad (55)$$

ahol az m a feltöltött magasság és a V_I a közvetlenül a lyukba jutó térfogat, az α a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke 55°). A *II.* térfogat a gyűrűre jutó térfogat, *III.* térfogat a gyűrű mellé jutó térfogat, δ a réteg vastagsága (77. ábra).



77. ábra. A rétegleválasztás során a nanolyuk részeire jutó teljes térfogat részei (az első réteg). A gyűrűn és a gyűrű mellett a réteg vastagsága δ .

A második lépésben szintén δ vastag réteget párologtatok fel (78. ábra). A gyűrűre és a gyűrű mellé ismét ugyanakkora térfogat jut és a rétegvastagság szintén δ lesz. A nanolyukban a feltöltött magasság kétféle módon számolható ki.

Az egyik módszernél a forgáskúp térfogatával számolva a következő módon határozhatjuk meg (78. ábra):

$$m_2 = \sqrt[3]{\frac{3 * (V_{I,1} + V_{I,2})}{\pi * t * g^2 * \alpha}}, \quad (56)$$

ahol m_2 a feltöltött magasság a második lépésben, $V_{I,1}$ az első lépésben feltöltött térfogat, míg $V_{I,2}$ a második lépésben feltöltött térfogat, az α a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke 55°). Ezt a képletet a következő módon általánosíthatjuk:

$$m_i = \sqrt[3]{\frac{3 * \sum_{k=1}^i V_{I,k}}{\pi * tg^2 \alpha}}, \quad (57)$$

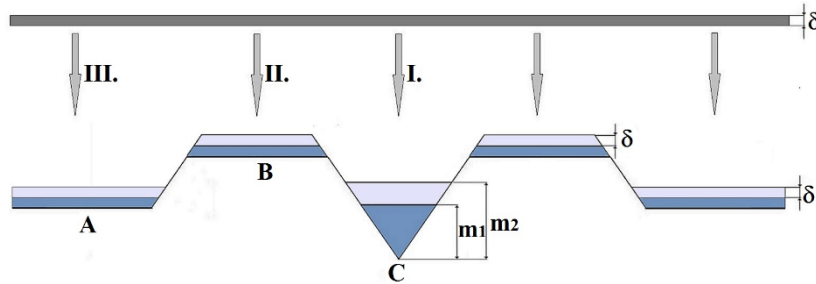
ahol m_i az i . lépésben feltöltött magasság, a $\sum_{k=0}^i V_{I,k}$ az i . és az azt megelőző térfogatok összege, α a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke 55°).

A másik lehetséges megoldás az, hogy egy harmadfokú egyenletet megoldva kiszámolhatjuk a második lépésben, a lyukban lévő csonkakúp magasságát. Ez az egyenlet a következő:

$$m_k^3 * \left(\frac{\pi}{3} * tg^2 \alpha\right) + m_k^2 * (\pi * r_{k-1} * tg^2 \alpha) + m_k * (\pi * r_{k-1}^2) - V_k = 0, \quad (58)$$

ahol m_k a csonkakúp magassága, r_{k-1} az előző lépésben kiszámolt feltöltött kör sugara, α a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke 55°), V_k a csonkakúp térfogata, ami megegyezik a k . lépésben tehát a közvetlenül a lyukba jutó $V_{I,k}$ térfogattal. Ezután ezt a magasságot hozzáadjuk az előző lépés(ek)ben kiszámolt összes feltöltött magasságértékekhez:

$$m_i = \sum_{k=1}^i m_k. \quad (59)$$



78. ábra. A rétegleválasztás során a nanolyuk részeire jutó teljes térfogat részei (a második réteg). A gyűrűn és a gyűrű mellett a réteg vastagsága δ .

A VII. gyűrűre jutó térfogatot úgy számolhatjuk ki, hogy a teljes térfogatból kivonjuk a belső csonkakúp térfogatát (V_{itc}). A ferde falakra jutó anyagmennyiséget elhanyagolhatónak tekintetem, mivel az GaAs {111} felületen nagy a felületi diffúzió sebessége.

A V_{itc} direkt térfogat a következő módon számolható ki:

$$V_{itc} = \frac{\pi}{3} m_{itc} (R_{itc}^2 + r_{itc}^2 + R_{itc} * r_{itc}), \quad (60)$$

ahol R_{itc} a nagyobbik sugár, míg r_{itc} a kisebbik sugár, m_{itc} a belső csonkakúp magassága.

Az r_{itc} kisebbik sugár a

$$r_{itc} = H * tg \alpha, \quad (61)$$

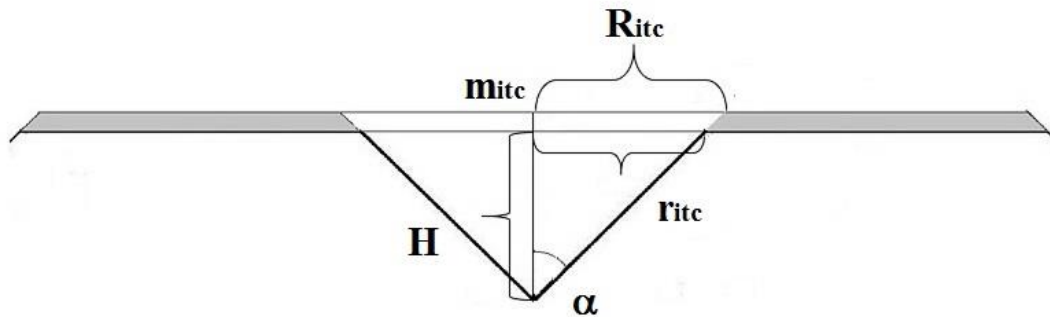
képlettel számítható, ahol H a lyuk aljától mért távolság, α a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke 55°). Az R_{itc} nagyobbik sugár a

$$R_{itc} = H * tg\alpha + m_{itc} * tg\alpha, \quad (62)$$

ahol H a nanolyuk mélysége, m_{itc} a belső csonkakúp magassága (ez ebben az esetben a leválasztott réteg vastagsága), α a lyuk nyílásának félszöge. Ebből következően a belső csonkakúp térfogata:

$$V_{itc} = m_{itc}^3 * \left(\frac{\pi}{3} * tg^2\alpha\right) + m_{itc}^2 * (H * \pi * tg^2\alpha) + m_{itc} * (H^2 * \pi * tg^2\alpha). \quad (63)$$

A paraméterek értelmezése a 79. ábrán látható. Az ábrán R_{itc} nagyobbik sugár, a r_{itc} kisebbik sugár, m_{itc} a belső csonkakúp magassága, α a lyuk nyílásának félszöge, H a nanolyuk mélysége.



79. ábra. A paraméterek értelmezése a belső csonkakúp térfogatának a számításához. Az R_{itc} nagyobbik sugár, a r_{itc} kisebbik sugár, az m_{itc} a belső csonkakúp magassága, az α a lyuk nyílásának félszöge, H a nanolyuk mélysége.

A teljes (direkt + a gyűrű) térfogat a következő módon számolható ki:

$$V_{tc} = \frac{\pi}{3} m_{tc} (R_{tc}^2 + r_{tc}^2 + R_{tc} * r_{tc}), \quad (64)$$

ahol az R_{tc} a nagyobbik sugár, míg az r_{tc} a kisebbik sugár, az m_{tc} a teljes csonkakúp magassága.

Az r_{tc} kisebbik sugár a

$$r_{tc} = H * tg\alpha + d - m_{tc} * tg\alpha, \quad (65)$$

képlettel számítható, ahol a H a lyuk aljától mért távolság, m_{tc} a teljes csonkakúp magassága az α a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke 55°). A R_{tc} nagyobbik sugár a

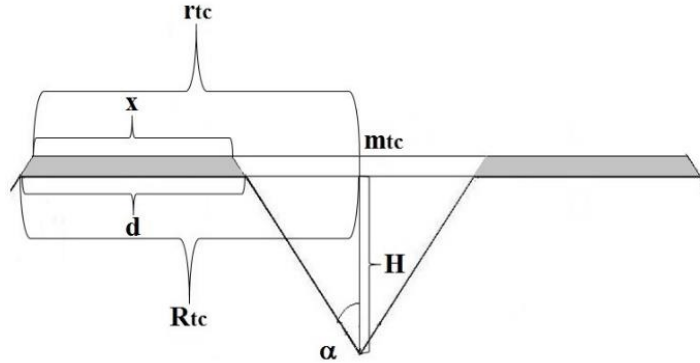
$$R_{tc} = H * tg\alpha + m_{tc} * tg\alpha, \quad (66)$$

ahol a H a lyuk aljától mért távolság, m_{tc} a teljes csonkakúp magassága (ez ebben az esetben a leválasztott réteg vastagsága) az α a lyuk nyílásának félszöge. Ebből következően a teljes csonkakúp térfogata:

$$V_{tc} = m_{tc}^3 * \left(\frac{\pi}{3} * tg^2 \alpha \right) - m_{tc}^2 * (d * \pi * tg \alpha - H * \pi * tg^2 \alpha) + m_{tc} * (d^2 * \pi + 2 * d * H * \pi * tg \alpha + H^2 * \pi * tg^2 \alpha), \quad (67)$$

ahol m_{tc} a teljes csonkakúp magassága (ez ebben az esetben a leválasztott réteg vastagsága), d a gyűrű alsó platója, az α a lyuk nyílásának félszöge, H a nanolyuk mélysége.

A paraméterek értelmezése a 80. ábrán látható. Az ábrán R_{tc} nagyobbik sugár, a r_{tc} kisebbik sugár, az m_{tc} a teljes csonkakúp magassága, d a gyűrű alsó platójának hossza, x a gyűrű felső platójának hossza, az α a lyuk nyílásának félszöge, H a nanolyuk mélysége.



80. ábra. A paraméterek értelmezése a teljes csonkakúp térfogatának a számításához. Az R_{tc} nagyobbik sugár, a r_{tc} kisebbik sugár, az m_{tc} a teljes csonkakúp magassága, d a gyűrű alsó platójának hossza, x a gyűrű felső platójának hossza, az α a lyuk nyílásának félszöge, H a nanolyuk mélysége.

Mindezek ismeretében V_{II} gyűrűre jutó térfogatot már egyszerűen számolhatjuk:

$$V_{II} = V_{tc} - V_{itc}, \quad (68)$$

ahol V_{tc} a teljes csonkakúp térfogata, V_{itc} a belső csonkakúp térfogata. Ezt a kivonást elvégezve V_{II} gyűrűre jutó térfogat a következő módon számolható:

$$V_{II} = -m_{ring}^2 * (d * \pi * tg \alpha + 2 * H * \pi * tg^2 \alpha) + m_{ring} * (d^2 * \pi + 2 * d * H * \pi * tg \alpha), \quad (69)$$

ahol m_{ring} a gyűrű magassága (ez ebben az esetben a leválasztott réteg vastagsága), d a gyűrű alsó platója, az α a lyuk nyílásának félszöge, H a nanolyuk mélysége.

A kutatási munkám során a viszkozitás hatását úgy vettem figyelembe, hogy a gyűrűre jutó térfogatot megszoroztam egy $\eta(T)$ térfogat arányossági tényezővel, amit a következő módon számolok ki:

$$\eta(T) = \frac{\mu(T)}{\mu(T_m)}, \quad (70)$$

ahol T a hőmérséklet (Kelvinben), $\eta(T) = \eta$ a térfogat arányossági tényező, $\mu(T)$ a dinamikai viszkozitás a hőmérséklet függvényében, $\mu(T_m)$ a dinamikai viszkozitás a fém olvadási hőmérsékletének (T_m) függvényében. Ennek alapján V_{II} gyűrűre jutó térfogatnak az

$$V'_{II} = \eta * V_{II}. \quad (71)$$

része marad a gyűrűn, ahol a V_{II} a gyűrűre jutó térfogat, V'_{II} a gyűrűn maradó térfogat és η a térfogat arányossági tényező. A gyűrűn maradó réteg vastagsága egyenesen arányos a viszkozitással, tehát $m_{ring} = \eta * \delta$. Ebből az következik, hogy

$$V'_{II} = -(\eta * \delta)^2 * (d * \pi * tg\alpha + 2 * H * \pi * tg^2\alpha) + (\eta * \delta) * (d^2 * \pi + 2 * d * H * \pi * tg\alpha), \quad (72)$$

ahol η a térfogat arányossági tényező, δ a leválasztott réteg vastagsága, d a gyűrű alsó platója, az α a lyuk nyílásának félszöge, H a nanolyuk mélysége. Ebből az következik, hogy a nanolyukba jutó térfogat a közvetlenül a lyukba jutó térfogat és a közvetetten a lyukba jutó térfogat összege, azaz:

$$V'_I = V_I + V''_{II}, \quad (73)$$

ahol V_I a közvetlenül a lyukba jutó térfogat, V'_{II} a közvetetten a lyukba jutó térfogat, a gyűrűről. Ezt a térfogatot a következő képlettel lehet számítani:

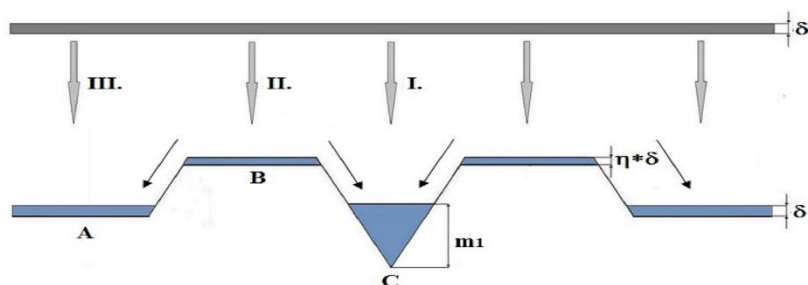
$$V''_{II} = \frac{(1-\eta)}{2} * V_{II}, \quad (74)$$

ahol V'_{II} a közvetetten a lyukba jutó térfogat a gyűrűről, V_{II} a gyűrűre jutó térfogat. Az $\frac{1}{2}$ -es szorzónak az az oka, hogy a gyűrűről lefolyó térfogat fele a lyukba, fele a gyűrű mellé folyik.

Hasonlóan az előző fejezethez, itt is az első lépésben δ vastag réteget párologtatok fel (81. ábra). Az ábrán a nyilak azt jelölik, hogy a gyűrűn lévő térfogat $\frac{(1-\eta)}{2} * 100$ százaléka a nanolyukba és ugyanennyi része a gyűrű mellé kerül. A gyűrűn a réteg vastagsága $\eta * \delta$, a gyűrű mellett δ . A lyukban lévő térfogat m feltöltött magassága egyrészt a forgáskúp képletével számítható ki:

$$m = \sqrt[3]{\frac{3 * V'_I}{\pi * tg^2\alpha}}, \quad (75)$$

ahol m a feltöltött magasság és V'_I a lyukba jutó térfogat, melyet az (73) képlettel számíthat ki, α a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke 55°).



81. ábra. A rétegleváltság során a nanolyuk részeire jutó teljes térfogat részei (az első réteg). A nyilak azt jelölik, hogy a gyűrűn lévő térfogat $\frac{(1-\eta)}{2}$ része a nanolyukba és ugyanennyi része a gyűrű mellé kerül. A gyűrűn a réteg vastagsága $\eta * \delta$, a gyűrű mellett δ .

A második lépésben szintén δ vastag réteget párologtatok fel (82. ábra). A nyilak az ábrán azt jelölik, hogy a gyűrűn lévő térfogat $\frac{(1-\eta)}{2}$ része a nanolyukba és ugyanennyi része a gyűrű mellé kerül. A gyűrűn a réteg vastagsága $\eta * \delta$, a gyűrű mellett δ . A nanolyukban a feltöltött magasság – hasonlóan az előző fejezethez - kétféle módon számolható ki.

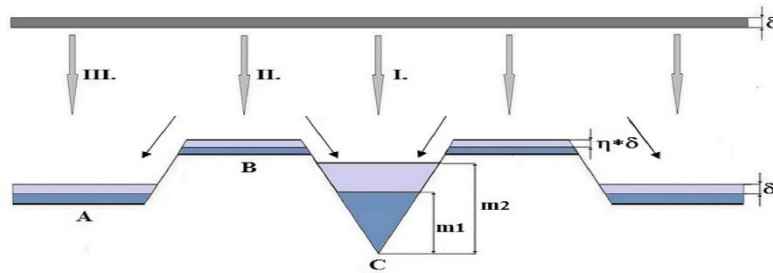
A forgáskúp térfogatával számolva a következő módon határozhatjuk meg:

$$m_2 = \sqrt[3]{\frac{3 * (V'_{I,1} + V'_{I,2})}{\pi * t g^2 \alpha}}, \quad (76)$$

ahol m_2 a feltöltött térfogat a második lépésben, $V'_{I,1}$ az első lépésben feltöltött térfogat, míg $V'_{I,2}$ a második lépésben feltöltött térfogat, α a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke 55°). Ezt a képletet a következő módon általánosíthatjuk:

$$m_i = \sqrt[3]{\frac{3 * \sum_{k=1}^i V'_{I,k}}{\pi * t g^2 \alpha}}, \quad (77)$$

ahol m_i az i . lépésben feltöltött magasság, a $\sum_{k=0}^i V'_{I,k}$ az i . és az azt megelőző térfogatok összege, α a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke 55°).



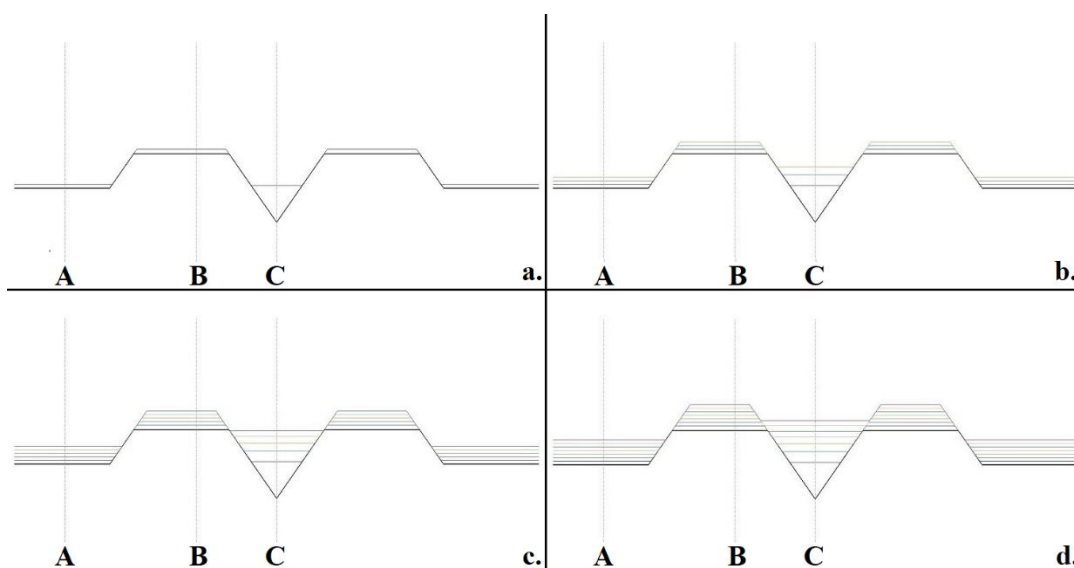
82. ábra. A rétegleválasztás során a nanolyuk részeire jutó teljes térfogat részei (a második réteg). A nyilak azt jelölik, hogy a gyűrűn lévő térfogat $\frac{(1-\eta)}{2}$ része a nanolyukba és ugyanennyi része a gyűrű mellé kerül. A gyűrűn a réteg vastagsága $\eta * \delta$, a gyűrű mellett δ .

5.4 III-V alapú nanolyukak feltöltődés-kinetikájának szimulációja (Ga esetén, ill. In esetén) (3. tézis)

A szimuláció futtatása során azt vizsgáltuk, hogy a hordozó hőmérséklete függvényében hogyan tölti fel a nanolyukat a felületre érkező gallium a kristályosítás után, úgy, hogy az egyes rétegek egymásra épülésénél a nanolyuk melletti gyűrű magassága is növekszik [164] [165] [166] [167]. Más szavakkal azt néztük, hogy nanolyuk feletti feltöltött réteg magassága, hányadik rétegnél lesz egyenlő a szintén növekvő gyűrű magasságával. Ez a két magasság értéket akkor tekintjük egyenlőnek, ha a különbségük nulla és egy közé esik. E két érték átlaga az úgynevezett egyensúlyi magasság. A szimuláció futtatása során azt a hőmérsékletet kerestük, ahol az adott réteghez tartozó magasságkülönbség minimális.

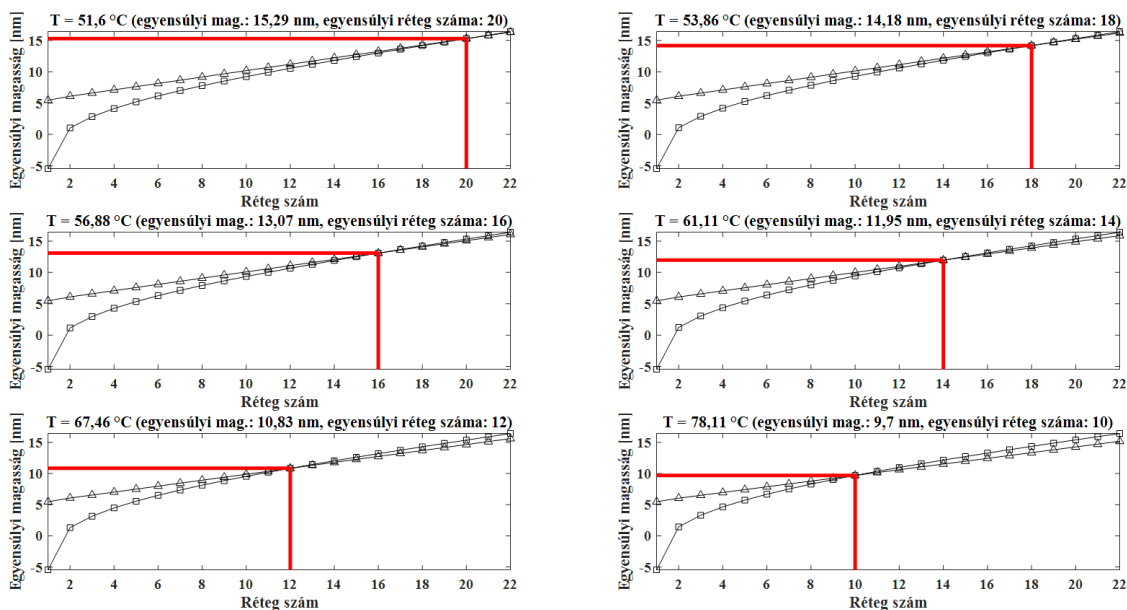
A 83. ábrán a nanolyuk feltöltődésének a folyamatát láthatjuk 1 (a.), 3 (b.), 5 (c.) és 7 (d.) réteg esetén. Ha a viszkozitás hőmérsékletfüggését elhanyagoljuk, akkor ez a pont a 22. rétegnél lép fel, ha minden rétegnél 2 atomi réteg vastag a galliumréteget párologtatok fel.

Megjegyzendő, hogy gallium-arszenid hordozó esetén a rácsállandó 0.526 nanométer, ami 2 monorétegnek felel meg (mivel a két komponensből áll). A szimulációhoz használt programban 1 monorétegnek 10 pixel feleltetünk meg, ami $\frac{0,284}{10} = 0,0284$ nanométer.



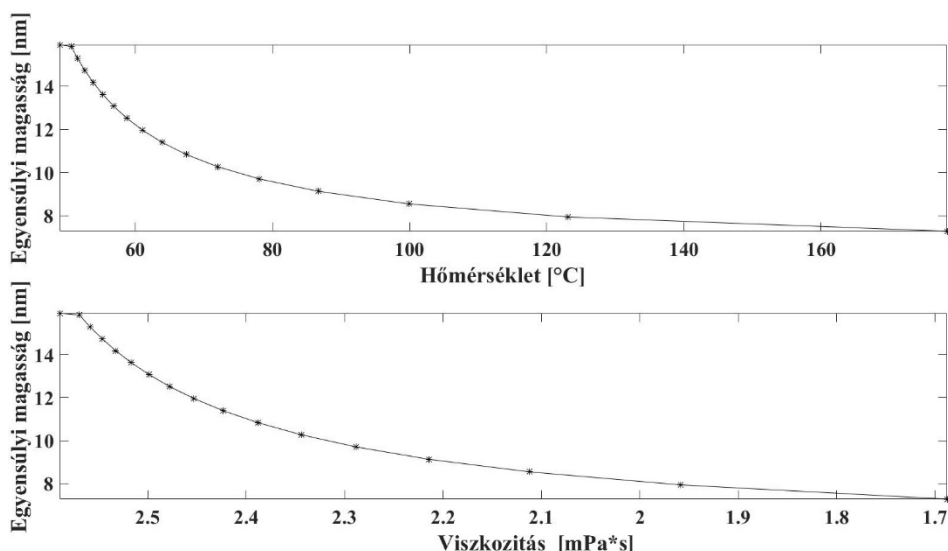
83. ábra. A nanolyuk feltöltődése 1 (a.), 3 (b.), 5 (c.) és 7 (d.) réteg esetén.

Ez az ideális eset 49 °C hordozó hőmérsékletig áll fenn. E hőmérséklet felett az egyensúlyi magasság, valamint az egyensúlyi rétegszám csökkenni kezd. Ahogy a 84. ábrán is látható 51,6 °C hőmérsékleten a 20 rétegnél töltődik fel teljesen a nanolyuk, ahol az egyensúlyi magasság 15.2945 nm. Az alsó vonal a nanolyukban lévő betöltési magasság („C” mérőpont), míg a felső a gyűrűn lévő magasság („B” mérőpont). Ahol ez a két vonal egymást metszi ott van az egyensúlyi magasság. Az egyes részabrákon az egyensúlyi magasság és egyensúlyi rétegszám értékpárokat piros vonallal jelöltük meg. Az ábrán az is látható, hogy az egyensúlyi magasság egységnyi csökkenéséhez egyre nagyobb hőmérsékletváltozás tartozik. A referenciapontnak (a 0 magasság) az „A” mérőpontot választottuk.



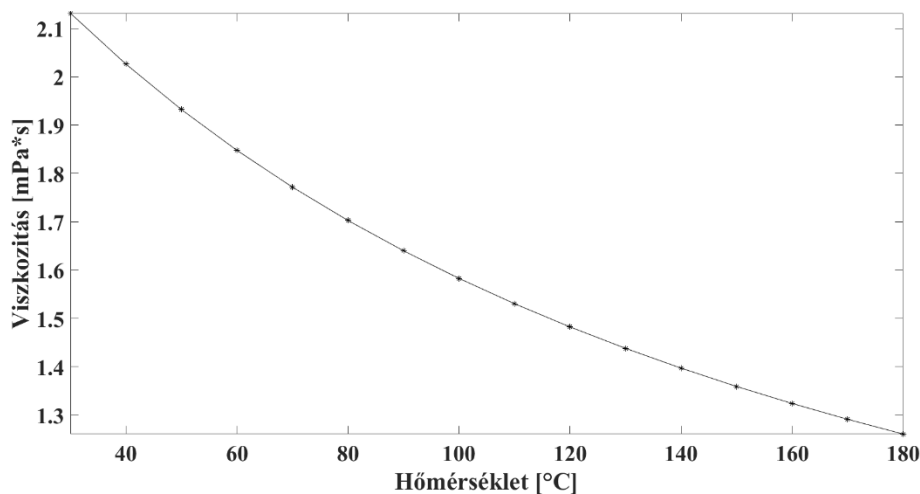
84. ábra. Rétegszám, egyensúlyi magasság diagramok, különböző hőmérsékleteken, Ga estén.

A 85. ábrán a hőmérséklet-egyensúlyi magasság (felső), ill. a viszkozitás-egyensúlyi magasság (alsó) diagramok láthatók a vizsgált hőmérséklet-tartományban.



85. ábra. Makroszkópikus hőmérséklet-egyensúlyi magasság (felső) és viszkozitás-egyensúlyi magasság (alsó) diagramok Ga estén.

A dolgozatban a gallium makroszkópikus viszkozitását az Arrhenius-Andrade összefüggéssel számolom ki (47-es egyenlet). E fém makroszkópikus hőmérséklet-viszkozitás diagramja a 86. ábrán látható.



86. ábra. Gallium makroszkópikus hőmérséklet-viszkozitás diagramja.

Ahhoz, hogy meghatározzuk a mikroszkópikus hőmérséklet-viszkozitás diagramját, először ki kell számolni a mikroszkópikus viszkozitás maximális értékét. Ennek a meghatározásához a (47) egyenletből indultam ki. Először meghatároztam a gallium részecskék aktivációs energiáját a következő összefüggést felhasználva [174]:

$$E_p = E_0 * \left(1 - 6\alpha * \frac{r}{D}\right), \quad (78)$$

ahol az E_0 a szilárdtestek kohéziós energiája (ez az úgynevezett tömbi aktiválási energia, amely értéke galliumnál $4000 \frac{J}{mol}$), E_p a fémcseppek kohéziós energiája, az α az alaktényező

(gömb formájú részecskékénél e tényező értéke 1), az r az atom sugara, a D pedig a részecske mérete. Legyen a gallium-cseppecskék olvadási hőmérséklete 254 Kelvin (-19,15 °C) [175]. A részecske méretét a következő formulával határoztuk meg [176]:

$$D = \frac{9 \cdot r \cdot T_{mb}}{T_{mb} - T_{mp}}, \quad (79)$$

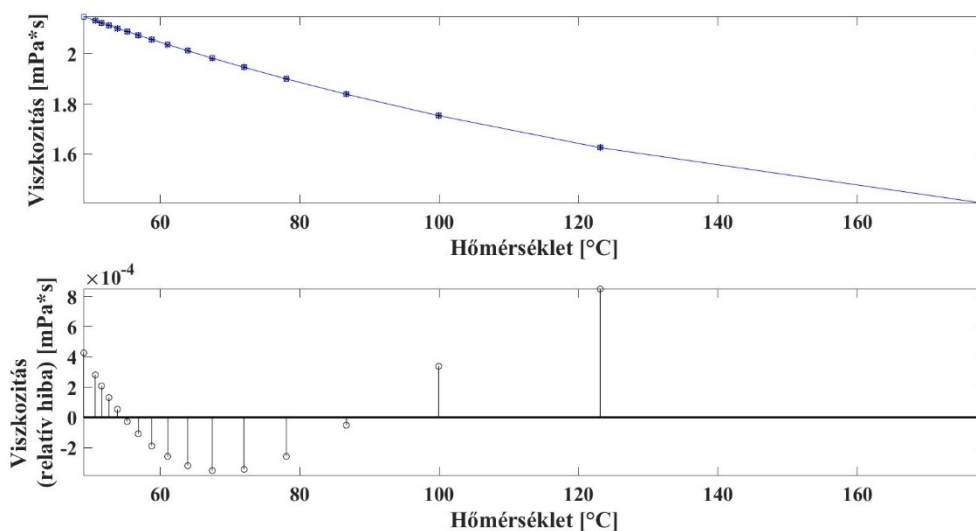
A gallium atomsugara $1,36 \cdot 10^{-10}$ m. A (78) képlettel számolva részecske mérete (254 Kelvin hőmérsékletnél) $7,5688 \cdot 10^{-9}$ m. Az $E_p = 3568$ J/mol aktivációs energiával és a $T_{mp} = 254$ K olvadási hőmérséklettel számolva, maximális mikroszkopikus viszkozitás értéke 2,3626 lesz.

Mikroszkopikus szinten a gallium hőmérséklet-viszkozitás értékpárjai a 87. és a 88. ábrákon láthatók. Ha erre a pontpár sorozatra egytagú hatványfüggvényt illesztünk, akkor az illesztés maximális relatív hibája 1,8%, míg exponenciális függvényénél 3,5% lesz. Ellenben kéttagú hatványfüggvény és exponenciális összeg függvény már jól illeszthetők, mert a relatív hibák maximális értékei mindkét esetben 1% alatt lesznek.

Ha kéttagú hatványfüggvényt illesztünk a pontsorozatra (87. ábra), akkor a viszkozitás-hőmérséklet képlet a következő lesz [177]:

$$\mu_{p,Mi}(T) = a \cdot x^b + c = a \cdot T^b + c, \quad (80)$$

ahol $\mu_{p,Mi}(T)$ a hőmérséklet-viszkozitás érték a hőmérséklet függvényében, az a , b , c értékek illesztési állandók, az $x = T$, ahol a T a hőmérséklet (mértékegysége °K). Az a paraméter értéke $7,766 \cdot 10^5$, b paraméter értéke -2,292, a c paraméter értéke -0,7616. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban. Az illesztés maximális abszolút hibája 0,0008515 (a relatív hiba 0,05 %), ami 123,15 °C (396,3 °K) hőmérsékletnél található.



87. ábra. Mikroszkopikus viszkozitás a hőmérséklet függvényében diagram Ga esetén. Itt a pontsorozatra hatványfüggvényt illesztettünk. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban.

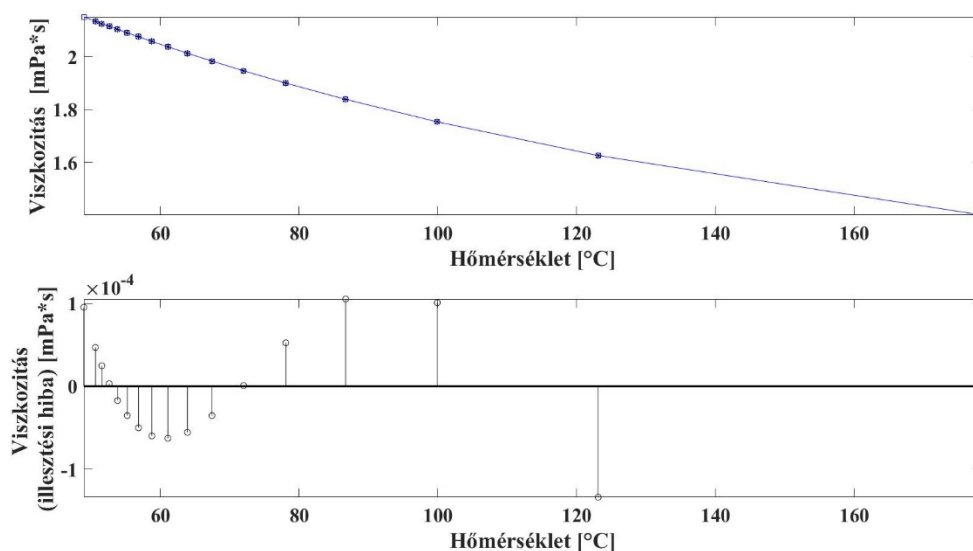
Amennyiben a együttható értékét $k_0 \cdot l = \tau_0$ -ra, b együttható értékét 1-re, c együttható értékét

0-ra, választjuk és az $x = e^{\frac{E_0}{R \cdot T}}$, akkor visszkapom a 48-es egyenletet. Ebből arra következtetek, hogy az 80-as egyenlet a 48-as egyenlet mikroszkopikus alakja.

Amennyiben exponenciális összeg függvényt illesztünk a pontsorozatra (88. ábra), akkor a viszkozitás-hőmérséklet képlet a következő lesz:

$$\mu_{e,Mi}(T) = a * e^{bx} + c * e^{dx} = a * e^{bT} + c * e^{dT}, \quad (81)$$

ahol $\mu_{e,Mi}(T)$ az exponenciális hőmérséklet-viszkozitás érték a hőmérséklet függvényében, az a , b , c , d értékek anyagfüggő tapasztalati állandók, míg az $x = T$, a T a hőmérséklet (mértékegysége °K). Az a paraméter értéke 41,77, b paraméter értéke -0,01341, c értéke 2,63, d értéke -0,001554. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban. Az illesztési abszolút hiba maximális értéke 0,0001338 (a relatív hiba 0,008%) ami 123,15 °C (396,3 °K) hőmérsékletnél található.



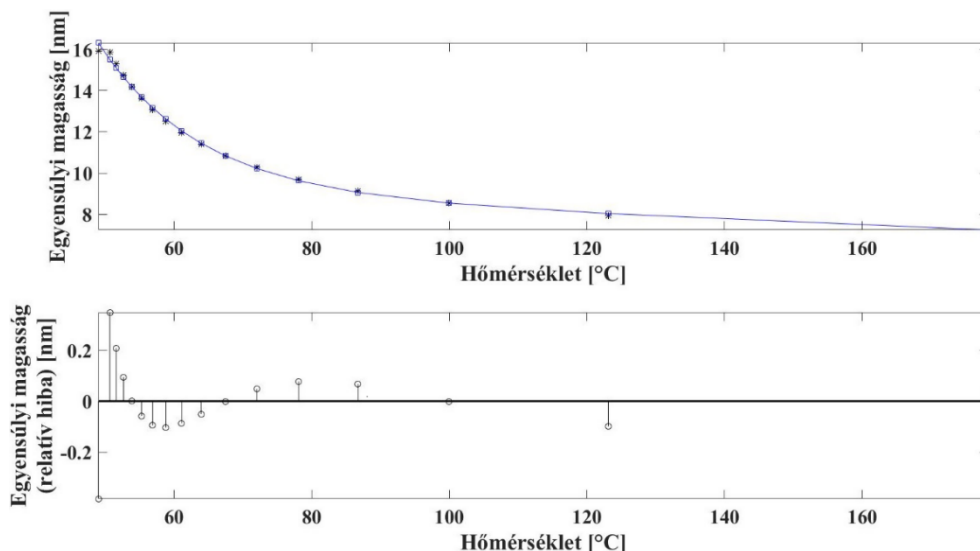
88. ábra. Mikroszkopikus viszkozitás a hőmérséklet függvényében diagram Ga esetén. Itt a pontsorozatra exponenciális függvényt illesztettünk. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban.

Amennyiben a együttható értékét $k_0 * l = \tau_0$ -ra, b együttható értékét 1-re, a c együttható értékét 0-ra, választjuk és az $x = E_0 / (R * T)$, akkor visszkapom a 48-as egyenletet. Ebből arra következtetek, hogy az 81-es egyenlet is a 48-as egyenlet mikroszkopikus alakja.

Az egyensúlyi magasság analitikus meghatározásához a hőmérséklet-egyensúlyi magasság pontsorozatra szintén hatványfüggvényt és exponenciális összeg függvényt is illesztettünk. Ha egytagú hatványfüggvényt választok, akkor az illesztés maximális relatív hibája 36,31%, míg exponenciális függvényénél 39,81% lesz. Kéttagú hatványfüggvény a pontsorozatra nem illeszthető, amennyiben a hőmérsékletnél Kelvin skálát használók. Ellenben exponenciális összeg függvény jól illeszthető (89. ábra), így az egyensúlyi magasság - hőmérséklet összefüggés a következő lesz:

$$h_e(T) = a * e^{bx} + c * e^{dx} = a * e^{b \cdot T} + c * e^{d \cdot T}, \quad (82)$$

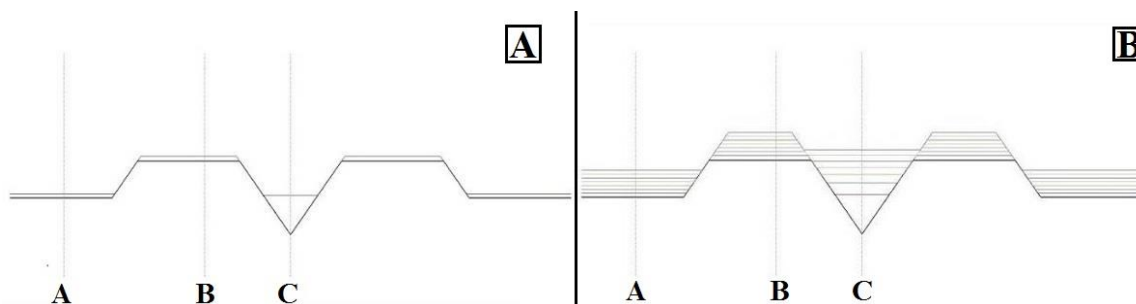
ahol $h_e(T)$ az egyensúlyi magasság a hőmérséklet függvényében, az a, b, c, d értékek anyagfüggő empirikus állandók, míg az $x = T$, ahol a T a hőmérséklet (mértékegysége °K). Az a paraméter értéke $3,278 \cdot 10^{10}$, b paraméter értéke $-0,06904$, c paraméter értéke $16,2$, d paraméter értéke $-0,001783$. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban. Az illesztési abszolút hiba maximális értéke $0,3822$ (a relatív hiba $2,4\%$), ami $48,95\text{ °C}$ ($322,1\text{ °K}$) hőmérsékletnél található.



89. ábra. Egyensúlyi magasság a hőmérséklet függvényében diagram Ga esetén. Itt a pontsorozatra exponenciális összeg függvényt illesztettünk. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban.

A szimuláció futtatása során azt is megvizsgáltam, hogy hogyan tölti fel a nanolyukat a felületre érkező indium a kristályosítás előtt, úgy, hogy az egyes rétegek egymásra épülésénél a nanolyuk melletti gyűrű magassága is növekszik [166]. A 90. ábrán a nanolyuk feltöltődésének a folyamatát láthatjuk. Ha a viszkozitás hőmérsékletfüggését elhanyagolom, akkor ez a pont a 21. rétegnél lép fel, ha minden rétegnél 2 monoréteg vastag indiumréteget párologtatók fel.

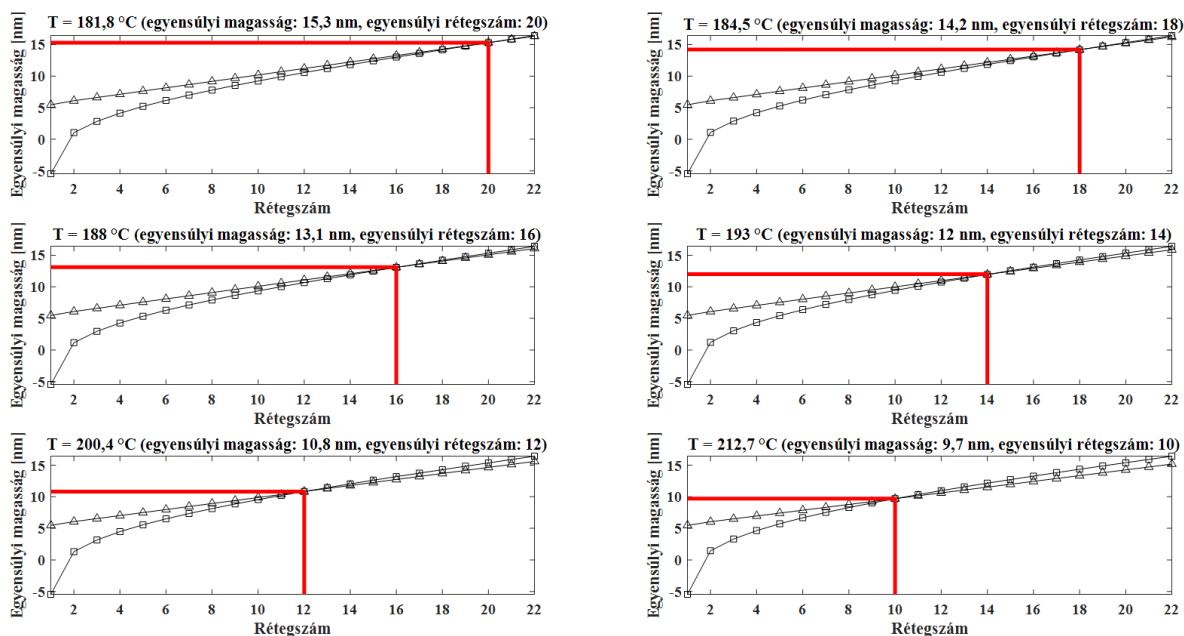
Ha a GaAs mátrixba teszünk InGaAs inverz dotot, akkor kis In koncentráció esetén, ill. kisméretű dot esetén nincs rácsállandó eltérés. Az InGaAs rácsa torzul. A mátrix rácsállandójával számoltam.



90. ábra. A nanolyuk feltöltődése 1 (A.) és 7 (B.) réteg esetén.

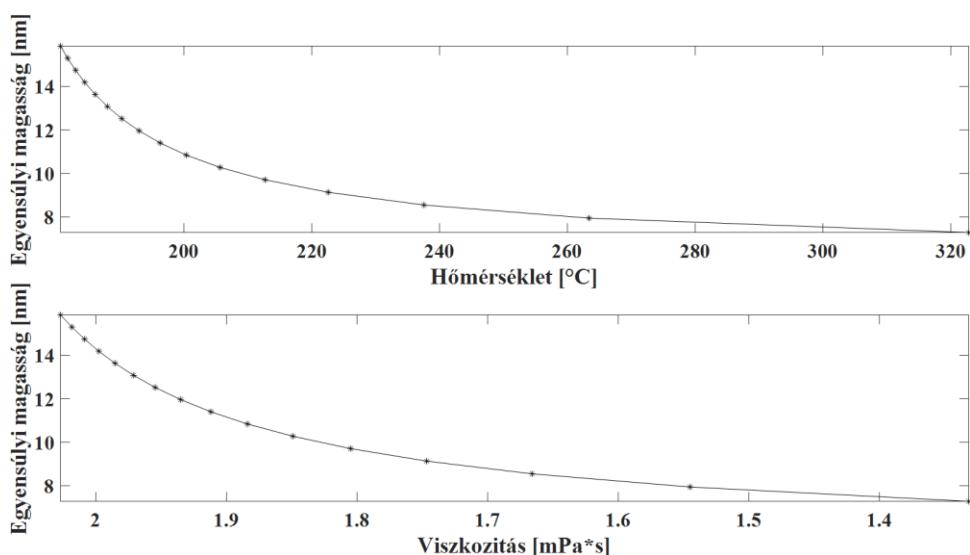
Ez az ideális eset 180 °C hordozó hőmérsékletig áll fenn. E hőmérséklet felett az egyensúlyi magasság, valamint az egyensúlyi rétegszám csökkenni kezd. Ahogy a 91. ábrán is látható

188 °C hőmérsékleten a 16 rétegnél töltődik fel teljesen a nanolyuk, ahol az egyensúlyi magasság 13,1 nm. Az alsó vonal a nanolyukban lévő betöltési magasság („C” mérőpont), míg a felső a gyűrűn lévő magasság („B” mérőpont). Ahol ez a két vonal egymást metszi, ott van az egyensúlyi magasság. Az egyes részabrákon az egyensúlyi magasság és egyensúlyi rétegszám értékpárokat piros vonallal jelöltük meg. Az ábrán az is látható, hogy az egyensúlyi magasság egységnyi csökkenéséhez egyre nagyobb hőmérsékletváltozás tartozik. A referenciapontnak (a 0 magasság) az „A” mérőpontot választottuk.



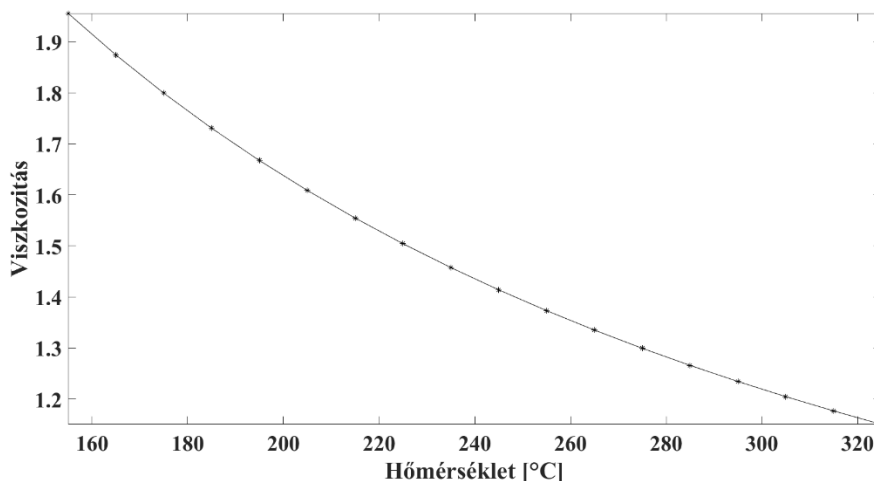
91. ábra. Rétegszám, egyensúlyi magasság diagramok, különböző hőmérsékleteken, In esetén.

A 92. ábrán a makroszkópikus hőmérséklet-egyensúlyi magasság (felső), ill. a viszkozitás-egyensúlyi magasság (alsó) diagramok láthatók a vizsgált hőmérséklet-tartományban.



92. ábra. A makroszkópikus hőmérséklet-egyensúlyi magasság (felső) és viszkozitás-egyensúlyi magasság (alsó) diagramok In esetén.

Az indium makroszkópikus viszkozitását az Arrhenius-Andrade összefüggéssel számoljuk ki (48) [172]. E fém makroszkópikus hőmérséklet-viszkozitás diagramja a 93. ábrán látható.

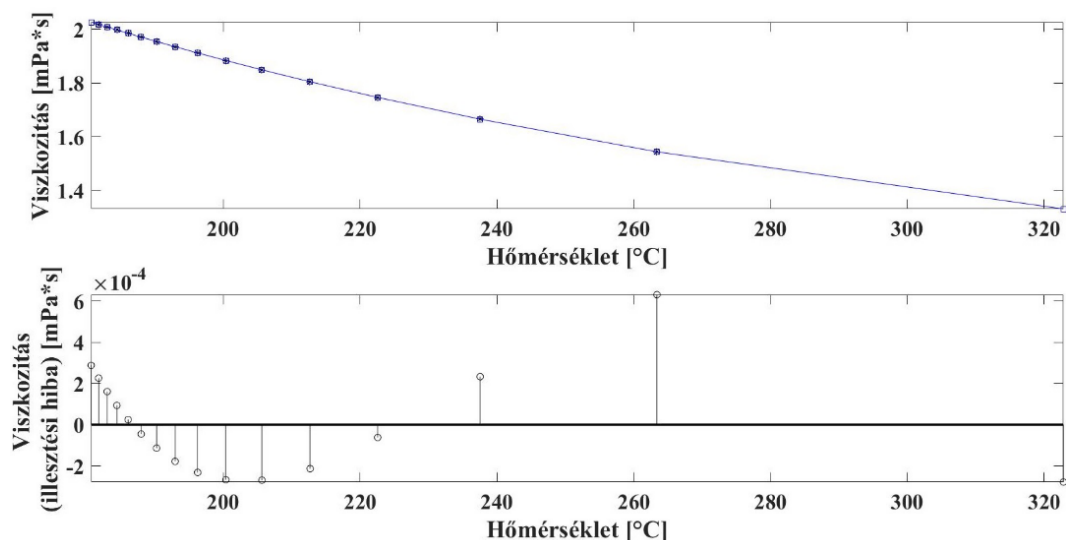


93. ábra. Indium makroszkopikus hőmérséklet-viszkozitás diagramja.

Ahhoz, hogy meghatározzuk a mikroszkopikus hőmérséklet-viszkozitás diagramját, először ki kell számolni a mikroszkopikus viszkozitás maximális értékét. Ennek a meghatározásához a (48) egyenletből indultam ki. Először meghatároztuk az In részecskék aktivációs energiáját a (78) összefüggést felhasználva [174]. A képletben az E_0 a szilárdtestek kohéziós energiája (ez az úgynevezett tömbi aktiválási energia, amely értéke indiumnál $6650 \frac{J}{mol}$), E_p a fémcseppek kohéziós energiája, a az alaktényező (e tényező értéke 1, a gömb formájú részecskékénél), az r az atom sugara, a D pedig a részecske mérete. Legyen az indium-cseppecskék olvadási hőmérséklete 349,42 Kelvin (76,27 °C). A részecske méretét a (77) formulával határoztuk meg [176]. E képletből kiindulva, indium esetén az atomsugár $1,55 \cdot 10^{-10}$ m és a részecske mérete (349,42 Kelvin hőmérsékletnél) $7,5688 \cdot 10^{-9}$ m. Az $E_p = 3568$ J/mol aktivációs energiával és a $T_{mp} = 349,42$ K olvadási hőmérséklettel számolva, maximális mikroszkopikus viszkozitás értéke 2,2449 lesz.

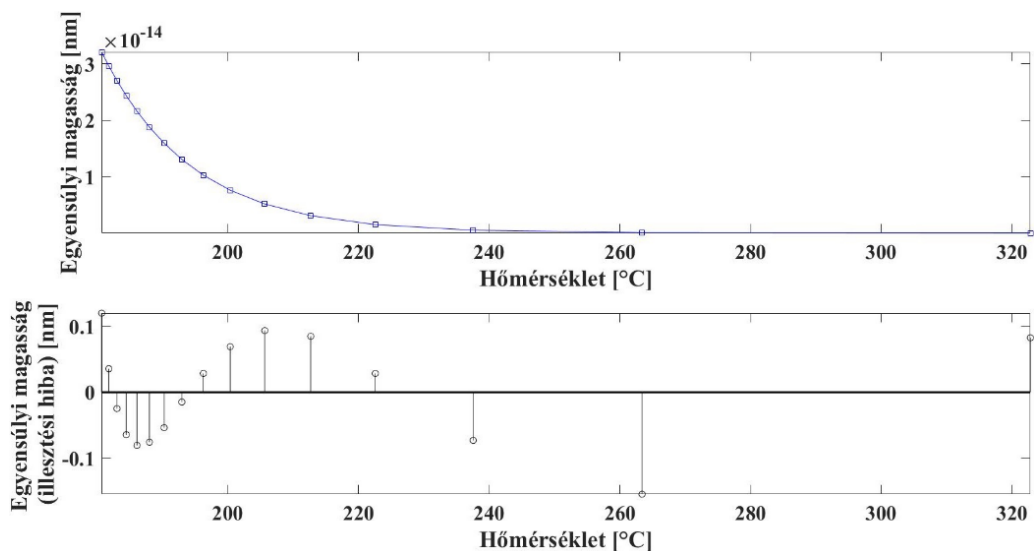
Mikroszkopikus szinten az In hőmérséklet-viszkozitás értékpárjai a 94. ábrán láthatók. Erre a pontpár sorozatra kéttagú hatványfüggvényt illesztve az illesztés maximális relatív hibája 1% alatti. Ha kéttagú hatványfüggvényt illesztünk a pontsorozatra, akkor a viszkozitás-hőmérséklet függése a (80) képlettel adható meg [177]. A képletben, a $\mu_{p,Mi}(T)$ a hőmérséklet-viszkozitás érték a hőmérséklet függvényében, az a , b , c értékek illesztési állandók, az $x = T$, ahol a T a hőmérséklet (mértékegysége °K). Az a paraméter értéke $9,089 \cdot 10^6$, b paraméter értéke -2,566, a c paraméter értéke 0,645. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban. Az illesztés maximális abszolút hibája 0,0006 (a relatív hiba 0,04 %), ami 263,35 °C (536,5 °K) hőmérsékletnél található.

Amennyiben a együttható értékét $k_0 \cdot l = \tau_0$ -ra, b együttható értékét 1-re, a c együttható értékét 0-ra, választjuk és az $x = e^{\frac{E_0}{R \cdot T}}$, akkor a , b , c, d visszakapom a (48) egyenletet. Ebből arra következtetek, hogy a formula a (48)-as egyenlet mikroszkopikus alakja.



94. ábra. Nanoszkopikus viszkozitás a hőmérséklet függvényében diagram In esetén. Itt a pontsorozatra hatványfüggvényt illesztettünk. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban.

Az egyensúlyi magasság analitikus meghatározásához a hőmérséklet-egyensúlyi magasság pontsorozatra szintén exponenciális összeg függvényt illesztettünk. Exponenciális összeg függvény illeszthető a pontsorozatra (95. ábra), így az egyensúlyi magasság - hőmérséklet összefüggés a (81) lesz. A képletben a $h_e(T)$ az egyensúlyi magasság a hőmérséklet függvényében, az a, b, c, d értékek anyagfüggő empirikus állandók, míg az $x = T$, ahol a T a hőmérséklet (mértékegysége $^{\circ}\text{K}$). Az a paraméter értéke $1,398 \cdot 10^{14}$, b paraméter értéke $-0,06$, c paraméter értéke $22,8$, d paraméter értéke $-0,002$. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban. Az illesztési abszolút hiba maximális értéke $0,15$ (a relatív hiba $1,94\%$), ami $263,4\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($536,5\text{ }^{\circ}\text{K}$) hőmérsékletnél található.



95. ábra. Egyensúlyi magasság a hőmérséklet függvényében diagram In esetén. Itt a pontsorozatra exponenciális összeg függvényt illesztettünk. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban.

6 Lágyszámítási módszerek a technológia támogatására

6.1 Fuzzy következtetési rendszer és a Kohonen leképezés elmélete

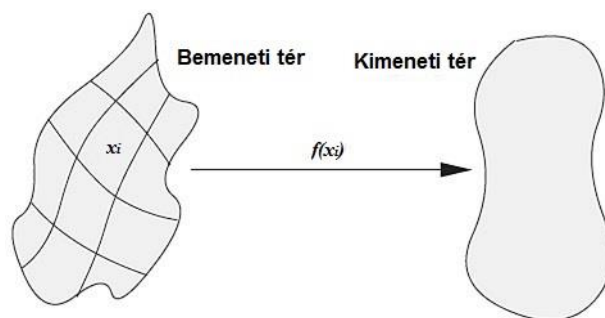
A kvantumponthoz napelemek készítéséhez kontrollált méretű és sűrűségű nanostruktúrákra van szükségünk. Ezek előállításának támogatását tűztem ki célul [178] [179] [180] [181] [182]. Ebben a kutatásban az a célom, hogy egy eljárást dolgozzak ki arra, hogy megállapíthassam, hogy adott környezeti feltételek (pl. a gallium adott részecskeárama, az arzén adott nyomása, a szubsztrát adott hőmérséklete stb.) esetén milyen kvantum struktúrák alakulnak ki. Az egyes nanostruktúrák kialakulását számos tényező befolyásolja, ráadásul két struktúra kialakulási feltételei között az átmenet folytonos. Így nem lehet egy egyszerű szabályrendszert kidolgozni a megkülönböztetésükre. Emiatt a különféle kvantum struktúra klaszterek felismerésére neurális hálót és fuzzy következtetési rendszert alkalmaztam.

A neurális hálókat a hagyományos módszerektől (szabályrendszer felállítása) eltérően nem beprogramozzák, hanem betanítják a mintaosztályok (klaszterek) felismerésére. Ez a tanítás történhet felügyelt vagy nem felügyelt módon. A felügyelt tanítás esetén a be- és a kimenet egyaránt ismert (pl. függvény approximáció) így a leképezés hibája könnyen meghatározható.

Sajnos a kimenet nem minden esetben ismert. Ilyen esetekben a neurális hálózatot nem felügyelt módon tanítjuk be. Ebben az esetben az leképezést a bemenetek egyes statisztikai jellemzői alapján állapítjuk meg.

A neurobiológiai kutatások kimutatták, hogy a különböző érzékszervi bemenetek (ingerek, pl. hallás, látás, motorikus stb.) szabályos módon leképezhetők az agykéreg megfelelő területeinek a működésére. Ezt topografikus leképezésnek nevezzük. Jó példa erre az emlősök látásának esete [183].

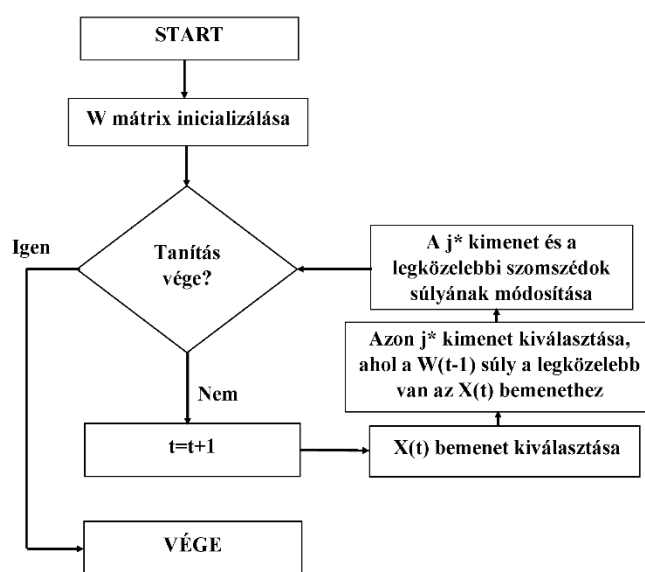
Az önszerveződő leképezés (Self-Organizing Map, SOM) egy neurobiológiai kutatások által inspirált mesterséges topografikus leképezés (96. ábra). Lényege az, hogy egy tetszőleges dimenziójú bemenetet egy egy vagy kétdimenziós kimeneti térbe képezzük le, topologikusan rendezett formában. E leképezés pontjait neuronoknak nevezzük, melyek szelektív módon különféle bemeneti mintákra (vagy mintaosztály(ok)ra) vannak hangolva. Ez azt jelent, hogy adott bemenet hatására adott neuron lép működésbe. Ezt nyertes neuronnak nevezzük.



96. ábra. A topografikus leképezés.

A Kohonen-féle önszerveződő leképezés elméletét először egy finn tudós, Teuvo Kohonen professzor (1934-) dolgozta ki 1981-ben [184]. Az algoritmus a felügyeletet nem igénylő neurális hálózatok családjába tartozik. Ez azt jelenti, hogy a bemenethez rendelt kimenet nem ismert. Ez a leképezés egy előreccsatolt (feedforward) kétrétegű (bemeneti és számítási (kimeneti) réteg) struktúra. A bemeneti rétegben található összes bemenet a számítási rétegben lévő összes neuronnal össze van kötve.

Az önszerveződő leképezés folyamata a következő: (1) Inicializáció, (2) Verseny, (3) Kooperáció, (4) Adaptáció. A topológikus rendezettség e folyamat többszöri megismétlésével jön létre. Az 97. ábrán ezen algoritmus folyamatábrája látható.



97. ábra. A Kohonen SOM algoritmus folyamatábrája.

A fuzzy következtető rendszerek esetén a fuzzy logika azon alapul, hogy az emberi gondolkodásmód és bizonyos jelenségek nem írhatóak le pontosan a kétértékű logikával. Ez azt jelenti, hogy nemcsak igaz és hamis logikai értékeket használhatunk, hanem lehetőség van átmenetek definiálására. Ennek az az oka, hogy sok olyan állítás van, amelyekről nem lehet élesen eldönteni, hogy igaz-e vagy hamis, hanem csak valamilyen mértéket tudunk mondani az igazságtartalmáról. E gondolat vezette el a múlt század 60-as éveiben L. Zadeh-t a fuzzy logika megalkotásához [185].

Az X fuzzy halmazt az úgynevezett tagsági függvénnyel adhatjuk meg. A tagsági függvény minden egyes x alaphalmazbeli értékhez egy a $[0,1]$ intervallumból vett értéket rendel aszerint, hogy az adott x érték mekkora mértékben eleme (tagja) az X fuzzy halmaznak:

$$\gamma_x \in X \rightarrow [0,1] \quad (83)$$

ahol γ_x az X fuzzy halmaz tagsági függvénye, mely egyértelműen megadja a halmazt. Különböző alakú tagsági függvények léteznek, a kutatásomban a leggyakrabban használt háromszög és a trapéz alakú tagsági függvényeket alkalmazok.

A fuzzy elmélet egyik gyakorlati alkalmazása az ún. fuzzy következtetési rendszer.

Ezek a rendszerek egy szabálybázis alapú modellen alapulnak. Ez a modell fuzzy halmazokból és „ha a bemenet „A”, akkor a kimenet „B” típusú szabályokból áll. A fuzzy következtetési rendszer röviden úgy működik, hogy a bemeneti értéket fuzzy számmá alakítom (megállapítom a tagsági értékét egy tagsági függvényvel). Ezt követően szabálybázis segítségével megkeresem, hogy a bemenethez milyen kimeneti érték tartozik. Végül visszaalakítom az így kapott értéket, ami a fuzzy modell által adott számszerű kimeneti érték [186].

6.2 Nanostruktúrák osztályozása Kohonen leképezéssel és fuzzy következtető rendszer alkalmazásával (4. tézis)

Amint azt a 6.1-es fejezetben is megemlítettem a különféle 0 dimenziós nanostruktúrák között az átmenet folyamatos, tehát nem létezik éles határ, ami a különféle nanostruktúra osztályokat egyértelműen elkülöníti. Emiatt a nanostruktúrák osztályozására az úgynevezett formatényezőt vezettem be. A formatényező segítségével lehet megmondani, hogy az adott bemeneti vektor milyen nanostruktúrának felel meg. E formatényezőt Kohonen leképezéssel és fuzzy következtető rendszer alkalmazásával határozom meg.

Az önszerveződő leképezés és a fuzzy következtető rendszer bemeneti vektorai a II. táblában láthatók [178] [179] [182]. Ebben a táblában található adatok a szakirodalomból származnak [161] [164] [187] [188] [189] [190] [191]. Az (I.) sorszám, a (II.) a hordozó hőmérséklete. A (III.) Ga, In, Al stb. részecskeáram, a (IV.) a felületi fedettség. A (V.) az arzén háttérnyomása, a VI. és VII. a hőkezelés ideje és hőmérséklete. A nanoszerkezet jellemző geometriai méretei (alapkör átmérője (VIII.), a csúcskör átmérője (IX.), a hordozó és a nanostruktúra tetejének a távolsága (X.), a nanoszerkezet legmagasabb és legalacsonyabb pontjának a távolsága (XI.)) és a nanoszerkezetek felületi sűrűsége (XII.).

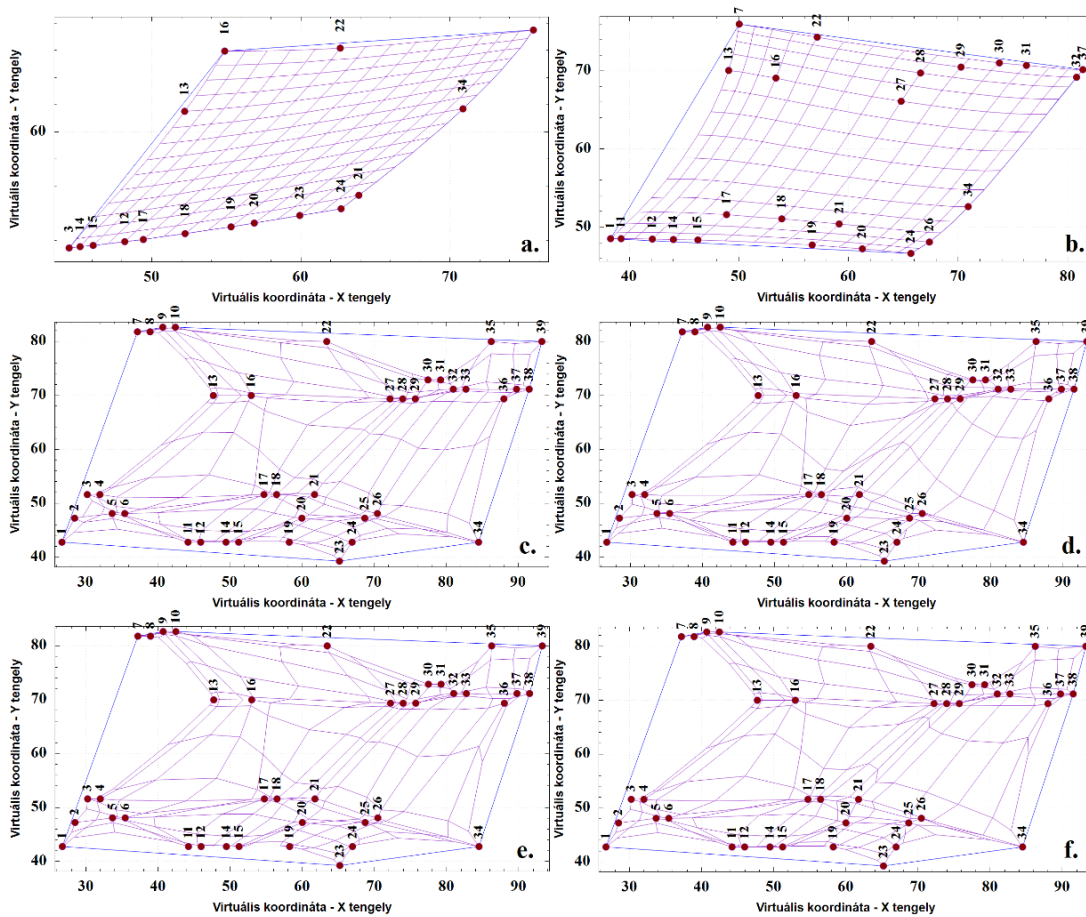
<i>I.</i>	<i>II.</i>	<i>III.</i>	<i>IV.</i>	<i>V.</i>	<i>VI.</i>	<i>VII.</i>	<i>VIII.</i>	<i>IX.</i>	<i>X.</i>	<i>XI.</i>	<i>XII.</i>
<i>1</i>	200	0,19	2,75	1,00E-04	10	350	60	0	7	0	1,20E+10
<i>2</i>	250	0,025	2,75	1,00E-04	10	350	107,5	0	37	0	4,40E+08
<i>3</i>	200	0,75	3,75	5,00E-05	1	350	50	0	5	0	3,60E+10
<i>4</i>	300	0,75	3,75	4,00E-06	5	300	60	40	2	2	1,50E+09
<i>5</i>	300	0,05	1,75	1,00E-05	0,33	300	100	40	20	15	1,30E+08
<i>6</i>	260	0,025	3,75	2,00E-04	10	350	167	0	50	0	1,60E+08
<i>7</i>	260	0,025	3,75	2,00E-04	10	350	250	0	35	0	1,60E+08
<i>8</i>	620	0,4	3,2	7,00E-07	5	620	350	150	25	55	8,00E+06
<i>9</i>	620	0,4	3,2	9,00E-07	5	620	350	150	25	45	9,00E+06
<i>10</i>	640	0,8	2	1,00E-07	3	640	200	200	15	82,4	9,00E+06
<i>11</i>	640	0,8	2,4	1,00E-07	3	640	200	200	15	91,12	9,00E+06
<i>12</i>	650	0,8	3,2	1,00E-07	3	600	15,8	15,8	11	22	8,00E+06
<i>13</i>	650	0,8	2	1,00E-07	2	650	300	200	2	62	8,00E+06
<i>14</i>	200	0,19	3,75	6,40E-05	10	350	60	0	7,5	0	1,50E+10
<i>15</i>	200	0,19	3,75	5,00E-05	1	350	60	0	7	0	1,20E+10
<i>16</i>	250	0,025	3,75	5,00E-05	10	350	110	0	32	0	4,40E+08
<i>17</i>	300	0,75	3,75	4,00E-06	5	300	80	35	3,6	3,6	1,50E+09
<i>18</i>	200	0,19	3,75	6,40E-05	10	350	40	0	7	0	3,60E+10

19	200	0,19	3,75	4,00E-06	10	300	60	60	2	2	1,50E+09
20	507	0,08	3,2	1,00E-07	2	620	210	200	4	16,5	7,50E+07
21	507	0,08	3,2	1,00E-07	2	620	200	200	0,5	3	1,60E+08
22	300	0,75	10,5	1,00E-06	0,33	300	40	10	3,3	3,3	1,50E+09
23	300	0,75	10,5	1,00E-06	1	300	70	30	3,3	7,3	4,50E-07
24	200	0,19	6	1,00E-06	1	350	40	40	2,5	2,5	8,00E+09
25	500	0,04	4	3,00E-09	30	500	290	150	15	25	4,50E+07
26	520	0,8	2,4	1,00E-07	0,05	520	200	100	3	16	5,00E+06
27	520	0,8	2,4	1,00E-07	0,05	520	200	100	4	24	1,25E+07
28	620	0,47	2,82	9,00E-07	3	620	160	10	0	5	4,00E+08
29	160	0,79	3,75	1,00E-04	10	350	60	0	7,5	0	2,00E+11
30	200	0,79	3,75	1,00E-04	10	350	60	0	7,5	0	9,00E+10
31	250	0,79	3,75	1,00E-04	10	350	250	0	35	0	1,00E+10
32	260	0,79	3,75	1,00E-04	10	350	250	0	35	0	8,00E+10
33	500	1	3	5,00E-09	0	600	185	54	4	21,5	4,50E+07
34	500	1	3	5,00E-09	0	620	185	54	3	20,5	4,50E+07
35	500	1	3	5,00E-09	1	620	185	64	2	19,5	4,50E+07
36	540	0,8	3,2	1,00E-06	2	620	200	100	2,5	9,5	4,00E+07
37	540	0,8	3,2	1,00E-07	2	620	200	100	2,5	16,5	9,00E+07
38	520	0,8	8	3,00E-06	2	620	200	100	2	5	5,00E+06
39	520	0,8	8	1,00E-07	2	620	200	100	2	20	1,25E+07

2. táblázat. Az önszerveződő leképezés bemeneti adatai.

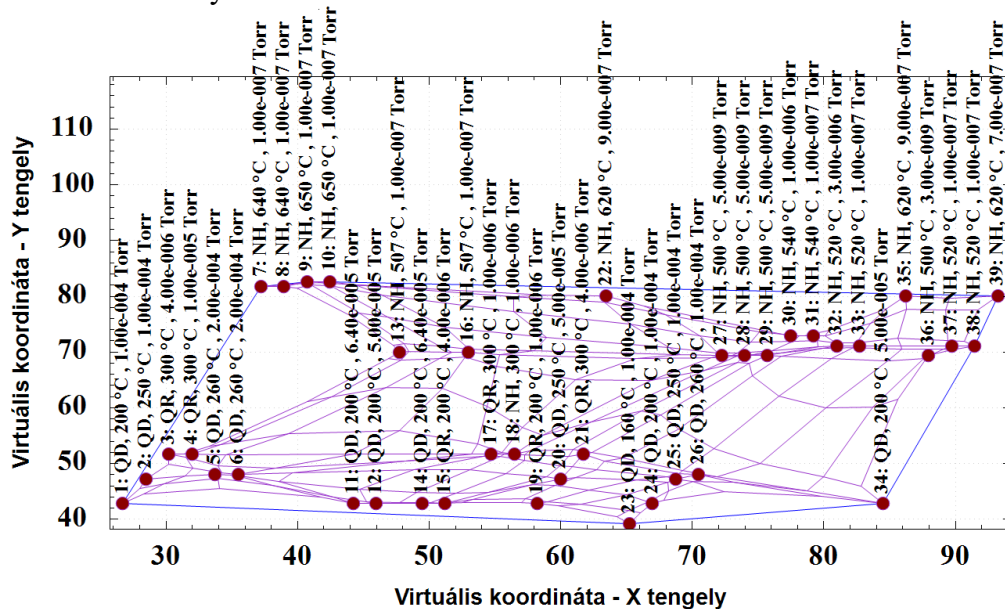
A Kohonen-féle önszerveződő leképezés egy iteratív algoritmus, ami a bemeneti vektorokat jelen esetben kétdimenziós térbe képezi le. Emiatt a formatényező egy (x,y) virtuális koordinátájú pont. Ennek a pontnak a helye megadja, hogy a hozzá tartozó bemeneti vektor milyen mértékben hasonlít a többi ponthoz (a többi bemeneti vektorhoz). Az egyes bemeneti pontok egymáshoz képest való elhelyezkedése megadja, hogy az adott pont (bemeneti vektor) a leképezés alapján milyen mértékben számít kvantumpontnak, kvantumgyűrűnek vagy nanolyuknak.

Az algoritmus futási eredménye a 98. ábrán látható. Ezen az ábrán a leképezés eredményét, a Kohonen gráf kialakulását láthatjuk, (a.) 5 lépés után, (b.) 10 lépés után, (c.) 100 lépés után, (d.) 500 lépés után, (e.) 1000 lépés után és (f.) 2000 lépés után. Az algoritmus a programban beállított számú iteráció után leáll.



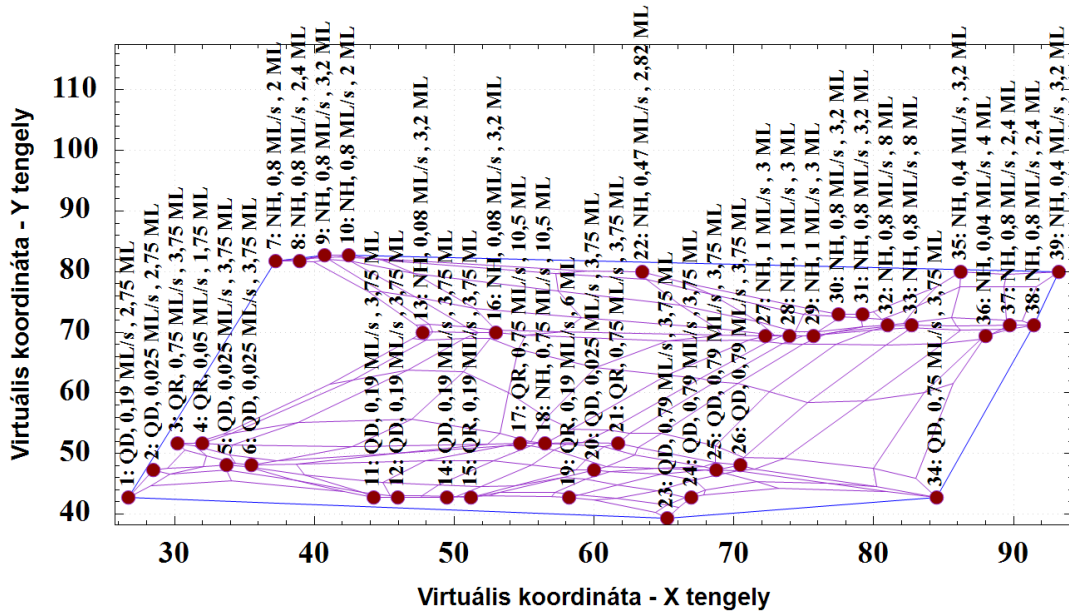
98. ábra. A Kohonen-féle önszerveződő leképezés eredménye (a.) 5 lépés után, (b.) 10 lépés után, (c.) 100 lépés után, (d.) 500 lépés után, (e.) 1000 lépés után és (f.) 2000 lépés után.

A 99. ábrán az látható, hogy a szubsztrát hőmérséklete alulról felfelé növekszik és balról jobbra az arzén háttérnyomása statisztikus értelemben csökken.



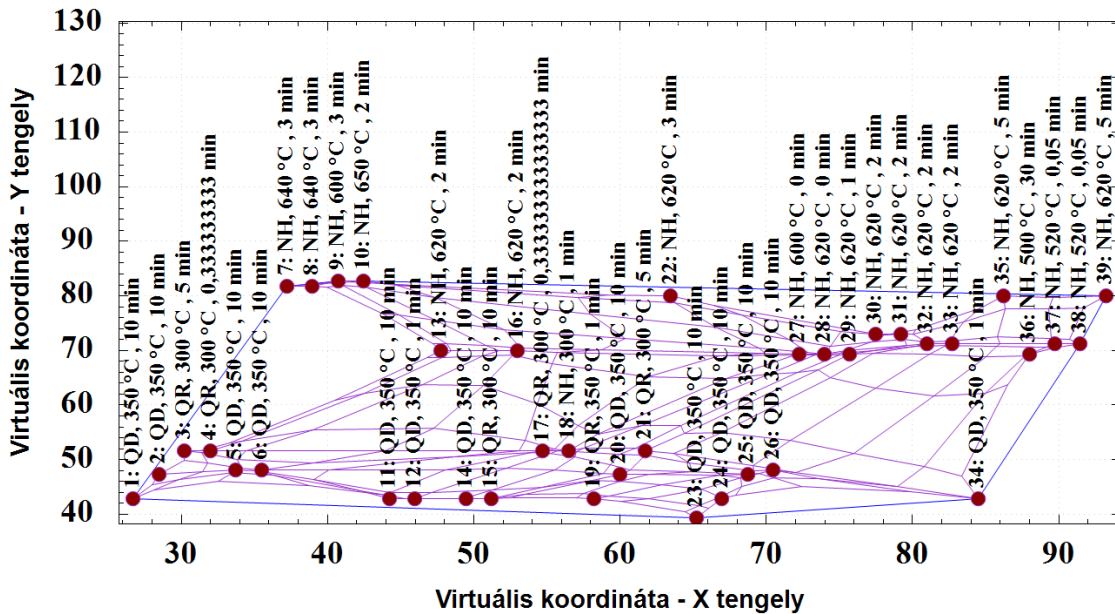
99. ábra. Az ábrán a szubsztrát hőmérséklete alulról felfelé növekszik és balról jobbra az arzén háttérnyomása statisztikus értelemben csökken.

A 100. ábrán az látható, hogy a komponens fluxus alulról felfelé növekszik és balról jobbra az felületi befedettség statisztikus értelemben növekszik.



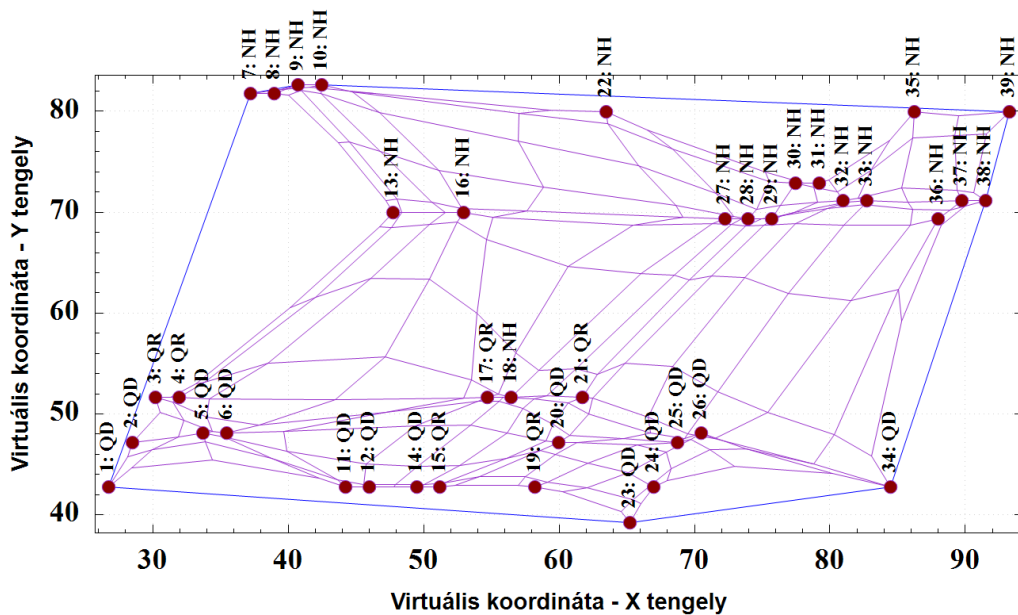
100. ábra. Az ábrán az látható, hogy a komponens fluxus alulról felfelé növekszik és balról jobbra az felületi befedettség statisztikus értelemben növekszik.

A 101. ábrán az látható, hogy a hőkezelés hőmérséklete alulról felfelé növekszik és balról jobbra a hőkezelés időtartama statisztikus értelemben csökken.



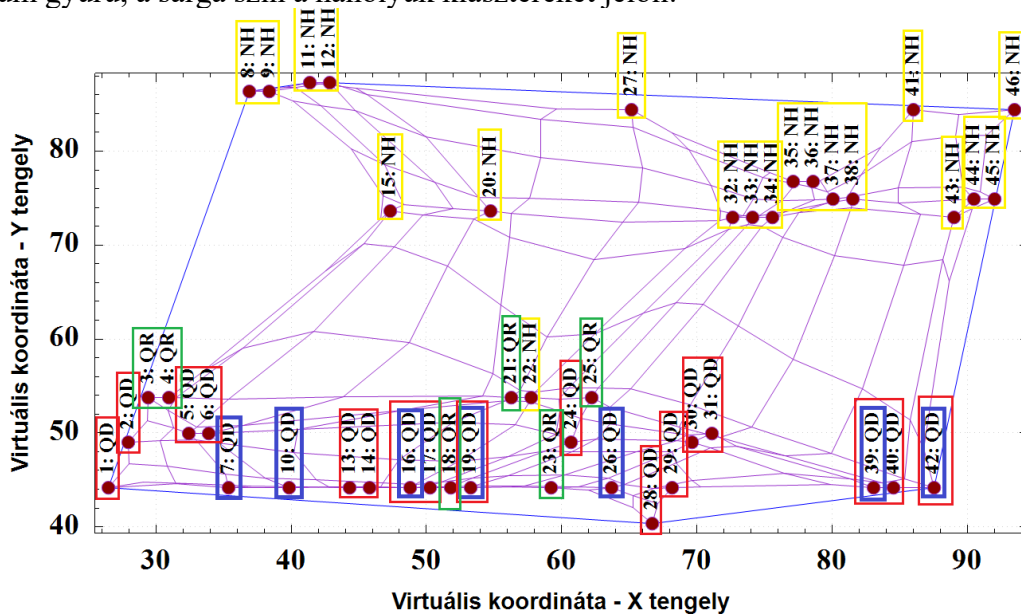
101. ábra. A hőkezelés hőmérséklete alulról felfelé növekszik és balról jobbra a hőkezelés időtartama statisztikus értelemben csökken.

A szakirodalomból vett eredeti osztályozás a bemeneti adatok alapján a 102. ábrán látható.



102. ábra. A nanostrukturák eredeti osztályozása a szakirodalmi adatok alapján.

A 103. ábrán a Kohonen leképezéssel való osztályozás eredménye látható. Az osztályozást nem az eredeti, hanem egy kibővített tanítóadathalmazzal végeztem. Az újonnan hozzáadott tanítóadatokat kék színnel kereteztem be. A piros szín a kvantumpont, a zöld a kvantum gyűrű, a sárga szín a nanolyuk klasztereket jelöli.

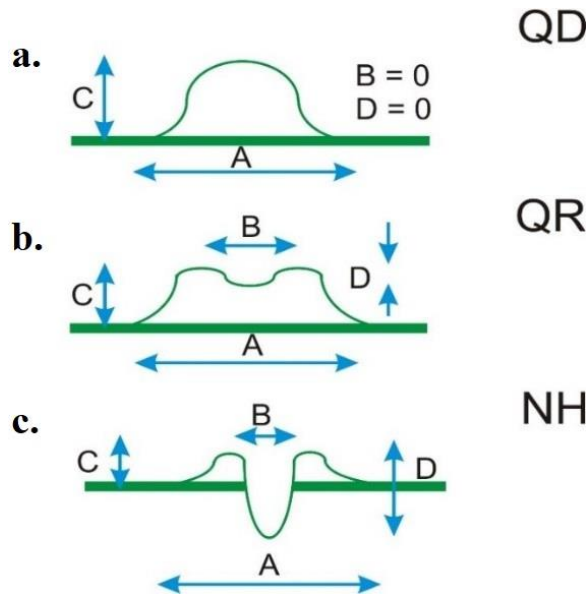


103. ábra. A nanostrukturák kibővített osztályozása a szakirodalmi adatok alapján.

A formatényezőt a fuzzy következtető rendszer alkalmazása esetén egy szám. Ebben az esetben a formatényező meghatározása pl. az adott nanostruktúra geometriai adatai alapján lehetséges (104. ábra). A geometriai paraméterek értelmezése a következő:

- Az A méret a nanostruktúra alapkörének az átmérője, amit következő módon defináltam: $A = A(d) = \begin{cases} d, & \text{ha } C \geq 0,1 \text{ nm} \\ 0, & \text{máshol} \end{cases}$.
- A B méret a nanostruktúra belső körének az átmérője.
- A C méret a nanostruktúra tetejének és a hordozó távolsága.

- A D méret a nanostruktúra tetejének és a lokális vagy globális minimumának a távolsága, abszolút értékben.



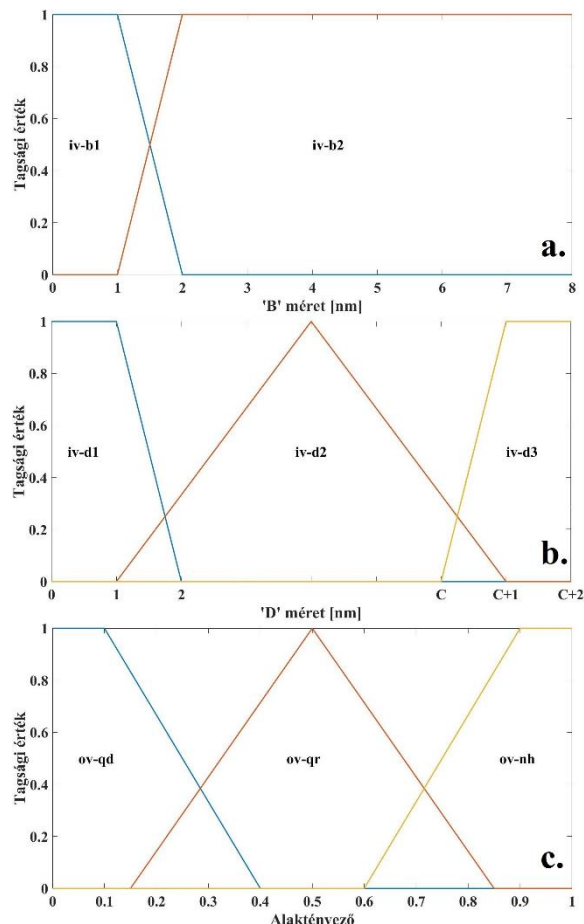
104. ábra. A nanoszerkezetek geometriai paramétereit.

A nanostruktúrák osztályozásáról egy korábbi cikkben [179] már ismertettem egy modellt. Ebben a cikkben első közelítésben feltételeztük, hogy a kvantum pontok átalakulása nanolyukakká izotróp. Ez azt jelenti, hogy a méretek vízszintesen („B” méret) és függőlegesen („C” és „D” méretek) ugyanolyan arányban változnak. Emiatt a korábbi munkában az osztályozásnál csak a C és a D paraméterek viszonyát vizsgáltam meg.

Egy újabb modellben [180] egyaránt figyelembe veszem a „B” méret és „C” és „D” méretek változását is. A 105. ábrán az új modell bemeneti és kimeneti fuzzy változói és halmazai láthatók. Az 105/a. részábrán a „B” méret fuzzy halmazai (iv-b1 és iv-b2) láthatók. A 105/b. részábrán a „D” méret „C” mérettel parametrizált fuzzy halmazai (iv-d1, iv-d2, iv-d3) láthatók. A parametrizált fuzzy halmaz alkalmazását az indokolta, hogy a „C” és a „D” paraméterek nem függetlenek egymástól. Amennyiben a „D” méret nagyobb, mint a „C” méret, akkor nanolyukról van szó, ellenkező esetben kvantum gyűrűről vagy kvantum pontról van szó. A 105/c. részábrán a kimenet fuzzy halmazait (ov-qd, ov-qr, ov-nh) tüntettem fel, amelyet önkényesen származtattam. A bemeneti és a kimeneti változók között a kapcsolatot a fuzzy szabályok írják le, melyeket az III. táblázatban tüntettem fel.

	if Size „B” is	and Size „D” is	then Shapefactor is
1	iv-b1	iv-d1	ov-qd
2	iv-b2	iv-d1	ov-qr
3	iv-b1	iv-d2	ov-qr
4	iv-b2	iv-d2	ov-qr
5	iv-b1	iv-d3	ov-nh
6	iv-b2	iv-d3	ov-nh

3. táblázat. A nanostruktúrák osztályozását leíró fuzzy szabályok.



105. ábra. Az új modell bemeneti és kimeneti fuzzy változói és halmazai. Az a. részában a „B” méret fuzzy halmaza, a b. részában a „D” méret „C” mérettel parametrizált fuzzy halmaza, a c. részában a formátényező kimeneti fuzzy halmaza látható.

Ha a fuzzy modell által adott számszerű kimeneti érték a ov-qd tartományba esik, akkor kvantum dotot, ha ov-qr tartományba esik, akkor kvantum gyűrűt, ha ov-nh tartományba esik, akkor a fuzzy modell nanolyukatt detektált. A fuzzy terminológiában, ha egy (vagy több) szabály érvényessé válik akkor az a szabály „tüzel”. Abban az esetben, ha csak egy szabály érvényes (tüzel), akkor tiszta nanostruktúrának tekintjük. Ellenben, ha két szabály tüzel, akkor a modell hibrid nanostruktúra átmenetet detektált [178] [179].

Mindkét modellben az alapértelmezett beállításokat alkalmaztunk, tehát az AND műveletre és az implikációra a MIN operátor, OR műveletre és az aggregációra a MAX operátort használtuk és centroid defuzzifikációs módszert alkalmaztam.

A 106. ábrán a fuzzy következtetési rendszerrel meghatározott nanostruktúrák osztályozásának eredménye látható, a nanostruktúrák geometriája alapján. Az ábrán azt is feltüntettem, hogy milyen arányban tartozik az adott minta egy adott nanostruktúra osztályhoz. Az újonnan hozzáadott tanítóadatokat kék színnel kereteztem be. A piros szín a kvantumpont, a zöld a kvantum gyűrű, a sárga szín a nanolyuk klasztereket jelöli.

A 100% arány azt jelenti, hogy tiszta nanostruktúráról (pl. kvantum pontról) beszélünk, nem pedig nanostruktúra átmenetről (pl. kvantum pont és kvantum gyűrű átmenete). Utóbbi esetben azt tüntetjük fel, hogy az adott minta pl. milyen arányban kvantum

pont és milyen arányban kvantum gyűrű. Ezt az arányt a kimeneten kapott defuzzifikált érték a hozzá tartozó értéktartomány határához képest vett relatív hibájával számoljuk ki. Ezt az arányt kvantum pont és kvantum gyűrű átmenet esetén a következő módon számoljuk ki:

$$QD(\%) = \frac{(Df - QR_{min})}{(QD_{max} - QR_{min})} * 100, \quad (84)$$

ahol a Df a fuzzy modell crisp kimenete (a defuzzifikált érték), a QR_{min} a kvantum gyűrű tartományának a minimum értéke, míg a QD_{max} a kvantum pont tartományának a maximum értéke és a $QD(\%)$ a kvantum pont aránya százalékban. A kvantum gyűrű arányát (szintén százalékban) a következő összefüggéssel állapíthatjuk meg:

$$QR_1(\%) = 100 - QD(\%) = \frac{(QD_{max} - Df)}{(QD_{max} - QR_{min})} * 100, \quad (85)$$

ahol $QR_1(\%)$ a kvantum gyűrű aránya százalékban, a többi paraméter értelmezése ugyanaz, mint az 84-es egyenletben.

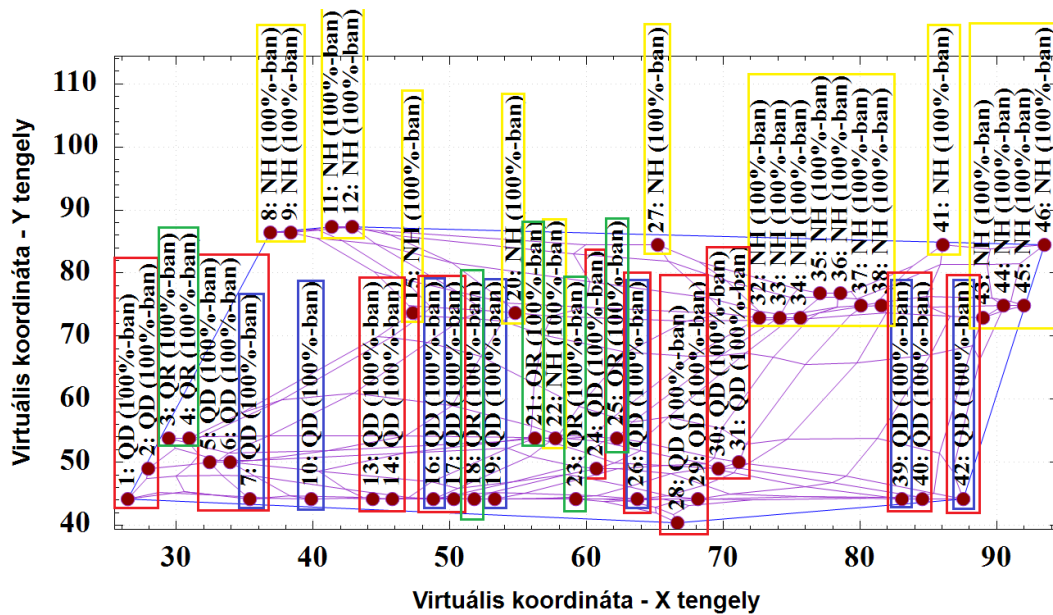
Ugyanezt az arányt, kvantum gyűrű és nanolyuk átmenet esetén az előző esethez hasonló módon számoljuk ki:

$$QR_2(\%) = \frac{(Df - NH_{min})}{(QR_{max} - NH_{min})} * 100, \quad (86)$$

ahol a Df a fuzzy modell crisp kimenete (a defuzzifikált érték), a NH_{min} a nanolyuk tartományának a minimum értéke, míg a QR_{max} a kvantum gyűrű tartományának a maximum értéke és a $QR(\%)$ a kvantum gyűrű aránya, százalékban. A nanolyuk arányát (szintén százalékban) a következő összefüggéssel állapíthatjuk meg:

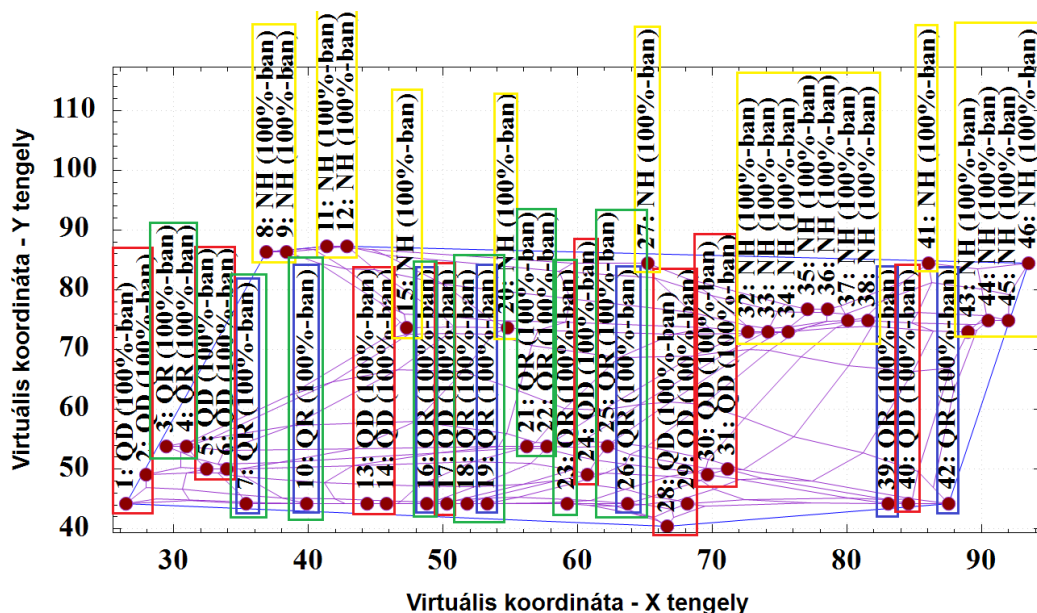
$$NH(\%) = 100 - QR_2(\%) = \frac{(QR_{max} - Df)}{(QR_{max} - NH_{min})} * 100, \quad (87)$$

ahol $NH(\%)$ a nanolyuk aránya százalékban, a többi paraméter értelmezése ugyanaz, mint az 86-os egyenletben. E megoldás két előnye, hogy egyrészt egyszerű, másrészt pontosan osztályoz.



106. ábra. A nanostruktúrák osztályozásának eredménye fuzzy következtetési rendszerrel, a nanostruktúrák geometriája alapján.

Egy másik lehetőség a nanostruktúrák formatényezőjének a megállapítására, ha az elsődleges, a közvetlen módon szabályozható paramétereket vizsgálom meg. Ezek a paraméterek a hordozó hőmérséklet, a komponens fluxus, az arzén háttérnyomása, a hőkezelés hőmérséklete és időtartama. A 107. ábrán a fuzzy következtetési rendszerrel meghatározott nanostruktúrák osztályozásának eredménye látható, két elsődleges paraméter alapján (hordozó hőmérséklete és az arzén háttérnyomása). A 100% arány ugyanazt jelenti, mint az geometriai osztályozás esetén, ill. a nanostruktúra átmenetek arányát is ugyanúgy tudjuk meghatározni. E megoldás előnye, hogy az osztályozás a közvetlenül szabályozható paraméterek alapján történik. A 103. és a 106. ábrához hasonlóan, az újonnan hozzáadott tanítóadatokat kék színnel kereteztem be. A piros szín a kvantumpont, a zöld a kvantum gyűrű, a sárga szín a nanolyuk klasztereket jelöli.



107. ábra. A nanostruktúrák osztályozásának eredménye fuzzy következtetési rendszerrel, két közvetlenül szabályozható paraméter, a hordozó hőmérséklete és az arzén háttérnyomása alapján.

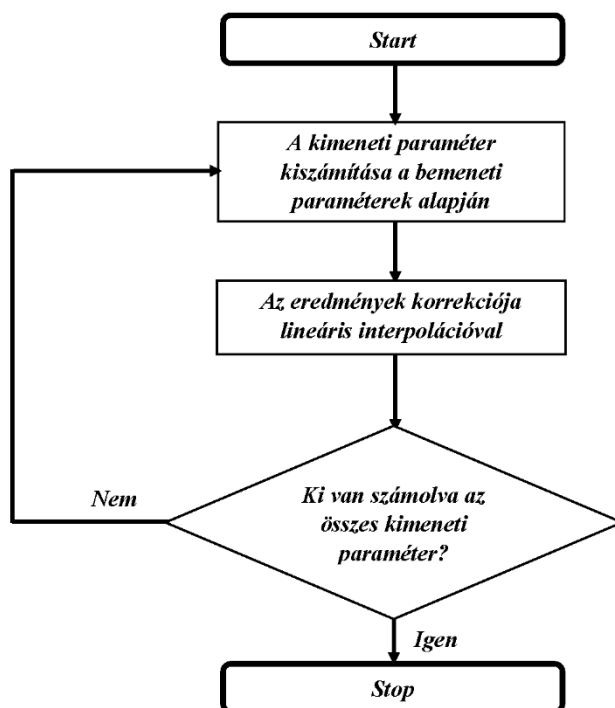
Ha megvizsgáljuk az ábrát, a 22-es bemeneti vektornál az eredeti osztályozáshoz képest eltérést tapasztalhatunk, mivel tévesen kvantum gyűrűként azonosítja a nano lyukat. Ez egy szokatlan minta (pl. gyűrű-lyuk átmenet), hiszen a nanolyukak általában 500 °C felett és 10^{-7} Torr nyomás alatt alakulnak ki. Ezzel ellentétben, ez a nanolyuk egy alacsony hőmérsékleten ($T_{\text{hordozó}} = 300$ °C) és közepes arzén nyomással ($P_{\text{as}} = 10^{-6}$ Torr), 1 percig tartó, $T = 300$ °C fokos hőkezelés nyomán alakult ki [192]. A másik különbség, hogy az összes utólag hozzáadott tanítóadatot kvantumgyűrűként azonosítja. Ennek az az oka, hogy ezeknél a bemeneti vektoroknál az arzén háttérnyomása 10^{-5} Torr alatt van.

6.3 Fuzzy modell, a nanostruktúra tervezés támogatására (5. tézis)

Itt a kvantumpontok méretezésére adok egy lehetséges példát. A különféle nanostruktúrák geometriai paraméterei az 104. ábrán láthatók. A továbbiakban bemeneti paraméterek alatt a geometriai méreteket és a nanostruktúrák felületi sűrűségét értem, míg tervezési esetben a kimeneti paraméterek a hordozó hőmérséklete, Ga fluxusa, As háttérnyomás, hőkezelés ideje és a hőmérséklete. Megjegyzendő, hogy technológiai szemszögből nézve a kimeneti és a bemeneti paraméterek felosztása fordított.

A geometriai paraméterek értelmezése a következő: az **A** méret a nano-struktúra alapkörének az átmérője, a **B** méret a nano-gyűrű gerinckörének az átmérője. A **C** méret a nanostruktúra tetejének és a hordozónak távolsága. A **D** méret a nano-struktúra tetejének és a lokális vagy globális minimumának a távolsága, abszolút értékben.

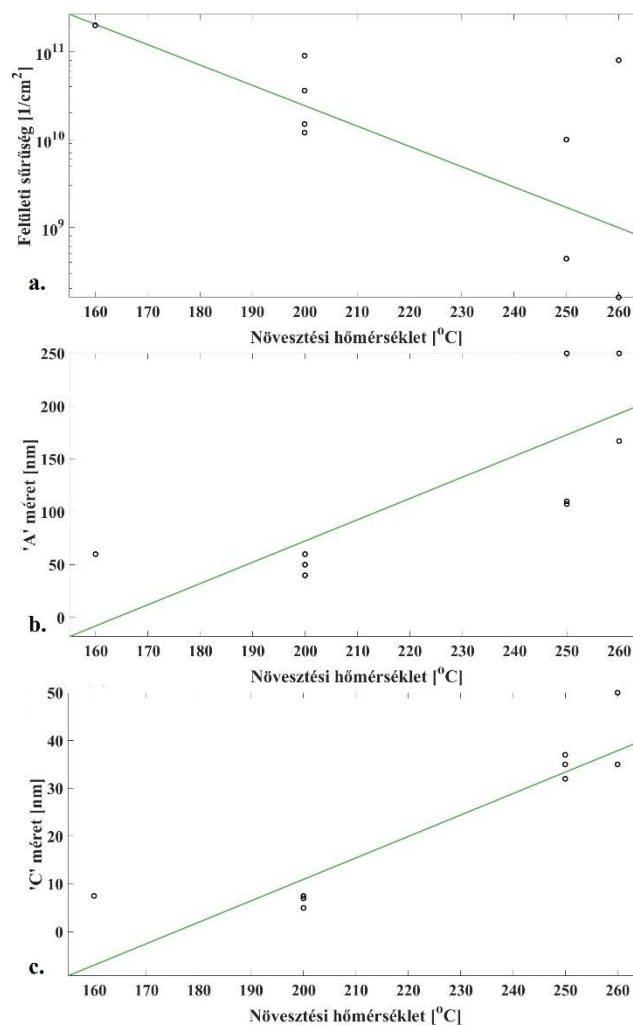
A bemeneti paraméterek kiszámításának menete a 108. ábrán látható. A geometriai adatokat és a felületi sűrűség értékeket több szerző munkáiból, pl. Nemcsics et. al. [161] [164] [193], Heyn et. al. [180-181], ill. Kuroda et. al. [190] vettem.



108. ábra. A kimeneti paraméterek kiszámításának menete.

Ebben az alfejezetben a kimeneti paraméter kiszámítására a növesztési hőmérséklet esetében adok példát. Egy fontos dolog, hogy – sajnos – nem ismertek azok a struktúrafüggvények, amelyek leírják a geometriai adatok és a nanostrukturák felületi sűrűsége és a növesztési hőmérséklete és más technológiai paraméterek (Ga részecskeáram, hőkezelés ideje stb.) közötti kapcsolatot. Egy másik probléma, hogy viszonylag kevés kísérleti eredmény található a megfelelő irodalomban. Emiatt fuzzy következtető rendszert alkalmaztam azért, hogy meghatározzam a kapcsolatot a kért geometriai paraméterek és a nanostrukturák felületi sűrűsége között.

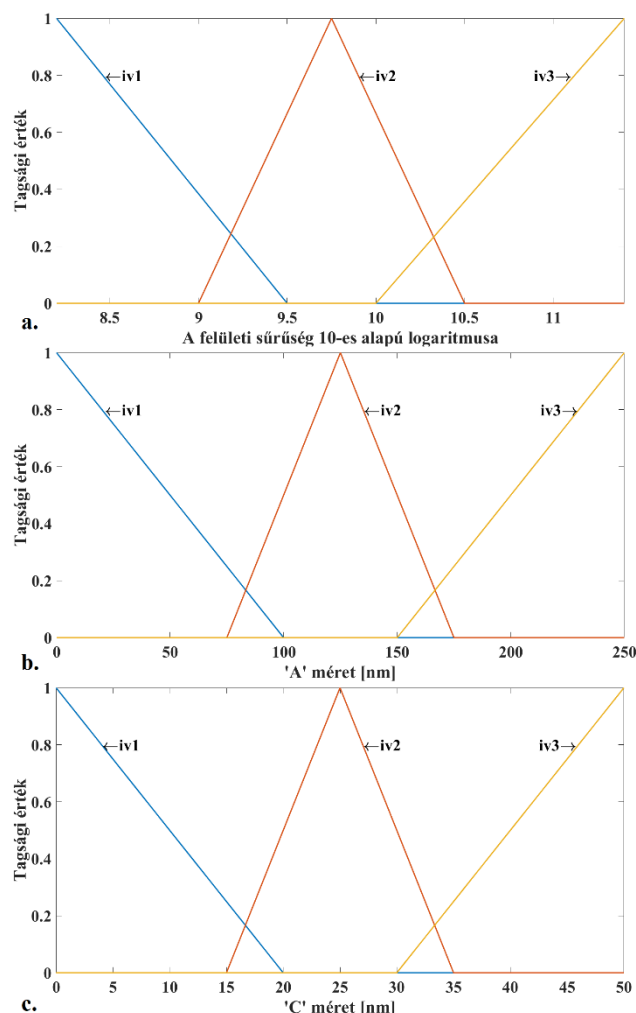
Ha közelebbről megvizsgáljuk a bemeneti változók és a növesztési hőmérséklet kapcsolatát a 109/a. részábrán, akkor az látható, hogy a felületi sűrűség csökkenő tendenciát mutat a növesztési hőmérséklet növekedésével. Ugyanakkor a báziskör átmérője (“A” méret) és a nanostruktúra magassága (“C” méret) növekedő tendenciát mutat (109/b. és 109/c. részábrák). A 109. ábrán a folytonos lineáris függvényt illesztettem az értékpárookra, amely jelzi a tendenciát.



109. ábra. A bemeneti paraméterek és a hordozó hőmérséklet viszonya, a felületi sűrűség (a.), az alapkör átmérője (b.) és a nanostruktúra magassága (c.) esetén.

A 109. ábrán látható relációk alapján a következőket feltételezzük. Az “A” és a “C” méretek (109/b. és 109/c. részábrák) növekednek a hordozó hőmérsékletének függvényében. E két részábrán a pontsorozatra illesztett egyenes meredeksége pozitív, így a +1 numerikus értéket rendeltem e függvényekhez némileg önkényesen. A felületi sűrűség a növesztési

hőmérséklet függvényében csökken (109/a. részábra). Más szavakkal e függvény meredeksége negatív, így ehhez az -1 értéket rendeljük, ismét némileg tetszőlegesen. A fuzzy modell bemeneti változói a következők: 110/a. ábrán a nanostruktúrák felületi sűrűségének tizes alapú logaritmusa, a 110/b. ábrán a nanostruktúra alapkörének az átmérője (Size 'A') míg a 110/c. ábrán a hordozó síkjának és nanostruktúra maximum pontjának a távolsága (Size 'C'). Mindhárom részábránál a 110. ábrán a iv1, iv2, iv3 a megfelelő fuzzy halmazok neve. Az „iv” az „input variable” rövidítése, az 1, 2, 3 a bemeneti halmaz száma.



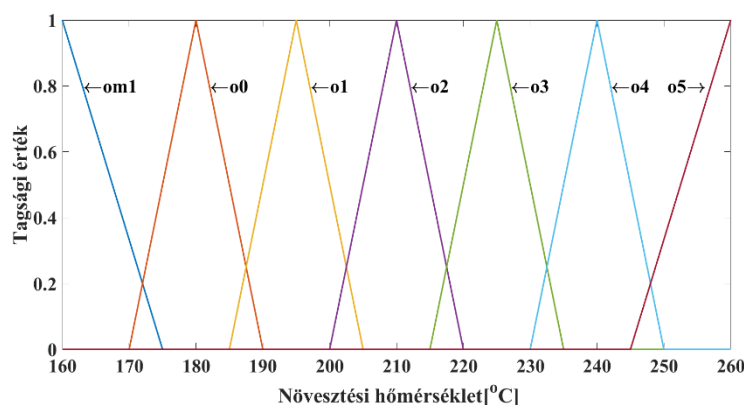
110. ábra. A nano-struktúra hordozó hőmérsékletének a kiszámítására használt fuzzy bemeneti változók. Az (a.) ábrán a nanostruktúrák felületi sűrűségének tizes alapú logaritmusa, a (b.) ábrán a nanostruktúra alapkörének az átmérője (Size 'A') míg a (c.) ábrán a hordozó síkjának és nanostruktúra maximum pontjának a távolsága (Size 'C').

E fuzzy modell bemenete és kimenete között a fuzzy szabályok teremtenek kapcsolatot. Az alkalmazott modellben a bemeneti és a kimeneti változók fuzzy halmazait összerendelő szabályokat a következő képlettel generáltam:

$$k = a * x_{Sd} + b * x_{SizeA} + c * x_{SizeC}. \quad (88)$$

Az x_{Sd} változó értéke -1, mert a pontsorozatra illesztett egyenes meredeksége negatív. Az x_{SizeA} , x_{SizeC} változók értéke +1, mert a báziskör átmérője ("A" méret) és a nanostruktúra magassága ("C" méret) növekedő tendenciát mutat. Az a , b , c változók értéke 1, 2, 3 lehet,

ami nem más, mint az adott bemeneti halmaz száma. Mindegyik a , b , c értékhez hozzárendelhetjük az 1, 2, 3 értékeket. A (87) képletben mindegyik szabályban az x_{Sd} , x_{SizeA} , x_{SizeC} változókat súlyoztam az a , b , c értékekkel. Ha ezeket az értékeket behelyettesítjük a (87) képletbe, akkor a kimeneti változó fuzzy halmazának a „k.” sorszámát kapjuk meg. A szabályokban a bemeneti változók „fuzzy vagy” kapcsolatban vannak. A fuzzy halmazok elnevezésénél az „o” jelölés a kimeneti változóhoz tartozó fuzzy halmazt jelöli, a szám az adott kimeneti halmaz száma („k”). A legelső halmaz nevében „m1”, a mínusz egyes számú kimeneti halmazt jelöli. A k lehetséges értékei 1, 2, 3, 4, 5. A kimeneti fuzzy halmazok a 111. ábrán láthatók. A vízszintes tengelyen a növesztési hőmérséklet értéktartománya látható (160-260 °C között), a függőleges tengelyen a fuzzy tagsági függvények értékei vannak feltüntetve. A fuzzy modell a bemeneti értékek, ill. a bemenetet és a kimeneti halmazokat öszerrendelő szabálybázis alapján és e kimeneti fuzzy halmazok alapján megállapítja növesztési hőmérsékletet.



111. ábra. A kimeneti fuzzy halmaz a növesztési hőmérséklet meghatározására. A fuzzy halmazok elnevezésénél az „o” jelölés a kimeneti változóhoz tartozó fuzzy halmazt jelöli, a szám az adott kimeneti halmaz száma („k”). Balról a legelső halmaz nevében om1, hogy a mínusz egyes számú kimeneti halmazt jelöli.

A növesztési hőmérséklet közelítési hibáját lineáris interpolációval határoztuk meg. Az interpolálási pontokat a II. táblázatban látható tanítóadatok alapján generáltam.

Megvizsgáltam a fuzzy alapú nanostruktúra tervezési modell működését. Az ellenőrző adatsor a [188] és a [191] cikkekből származik, ahol a megfelelő bemeneti adatokat átlagoltam. Ez az ellenőrző adatsor a következő: a hordozó hőmérséklet 230 °C, Ga fluxus 0,76 ML/sec, As háttérnyomás $1,05 \cdot 10^{-4}$ Torr, hőkezelési ideje 10 perc és hőkezelés hőmérséklete 350 °C-t. A modell kimenete: a hordozó hőmérséklet 215,97 °C, Ga fluxus 0,703 ML/sec, As háttérnyomás $1,01 \cdot 10^{-4}$ Torr, hőkezelési ideje 10 perc és hőkezelés hőmérséklete 350 °C-t. A kimenet eltérése az ellenőrző adatoktól a hordozó hőmérsékleténél 6,09%, a Ga fluxusnál 7,72% és a As háttérnyomásé 3,65%, a hőkezelés hőmérséklete és hőmérséklete esetén a eltérés 0%. A közelítési hibáknak két oka van: (1) kevés adat áll rendelkezésre a szakirodalomban interpolációhoz, (2) a fuzzy modellben az alapértelmezett beállításokat alkalmaztam.

7 GaAs napelemek kontaktusai

7.1 A kontaktusok elektromos tulajdonságai

Energiaszintek

A III-V alapú vegyület-félvezetőknek számos kontaktus rendszere van [194] [195]. Ezeknek a kontaktus-rendszereknek minősége fontos szerepet játszik a különféle integrált áramkörök és a félvezető eszközök működésében. Ezeket a rendszereket két alaptípusra bonthatjuk fel: Schottky és Ohmos kontaktusok.

A Schottky-hatás tárgyalásánál a fémek kilépési munkájának meghatározásából indulok ki [194] [195]. A kilépési munka a vákuum szint és a Fermi-szint energiájának különbsége. Ez az a legkevesebb mozgási energia, ami ahhoz szükséges, hogy az elektron kiszabaduljon a fém felületéről a szabad térbe, $T = 0$ Kelvin hőmérsékleten. Az elektron kilépésének valószínűsége az elektron felületre merőleges sebességkomponensétől függ, azaz

$$\frac{1}{2} m_0 * v_l^2 \geq q * \Phi_m, \quad (89)$$

ahol az m_0 a szabadelektron tömege, a v_l az elektron mozgási energiájának felületre merőleges sebességkomponense, a q az elektron töltése Φ_m az elektron kilépési munkája. Amennyiben külső elektromos teret kapcsolunk a fém felületére, akkor az ún. Schottky (másnéven „image-lowering”) hatás lép fel. Ekkor a fémből kiszökni kívánó elektronra kétféle erő hat. Az egyik ilyen erő az ún. hasonmás erő, ami Coulomb erőből származik. Ez egy vonzó típusú erő, ami „visszahúzza” az elektront a fémben [194] [195]. Ebből az erőből a potenciál energiát a következő módon számíthatjuk:

$$V_i(x) = - \int_{\infty}^x \frac{q^2}{16 * \pi * \epsilon_0 * x^2} dx = - \frac{q^2}{16 * \pi * \epsilon_0 * x}, \quad (90)$$

ahol a q az elektron töltése, ϵ_0 a vákuum permittivitása, az x a helykoordináta.

A másik erő a Lorentz erő, ami a külső elektromos térerősségtől származik, amit a következő képlettel számíthatunk [194] [195]:

$$V_a(x) = -q * E * x, \quad (91)$$

ahol a q az elektron töltése, E az elektromos térerősség és az x a helykoordináta. A teljes potenciális energia (90) és a (91) egyenletek összege:

$$V(x) = V_i(x) + V_a(x) = - \frac{q^2}{16 * \pi * \epsilon_0 * x} - q * E * x. \quad (92)$$

A (91) egyenletben megadott potenciális energia az x_m pontban maximális, amit a következő módon számolhatunk ki:

$$x_m = \sqrt{\frac{q}{16 * \pi * \epsilon_0 * E}}, \quad (93)$$

ahol a q az elektron töltése, ε_0 a vákuum permittivitása, az x_m a maximális potenciál helykoordinátája, az E az elektromos térerősség [194] [195]. A hasonmás erő és az elektromos tér hatása csökkenti a kilépési munkát azaz

$$q * \Phi'_m = q * \Phi_m - q * \Delta\Phi_m = q * \Phi_m - q * \sqrt{\frac{q * E}{16 * \pi * \varepsilon_0}}. \quad (94)$$

Elektronok nemcsak elektromos tér hatására, hanem melegítés hatására is kiléphetnek (termoemisszió) [194] [195]. Amennyiben a fémot katódnak tekintjük és az összes, a fémfelületről emittált elektront a vákuumdióda anódja összegyűjti, akkor a katód a vákuumemissziós módban van. Az emittált áramsűrűséget szaturációs áramsűrűségnek nevezzük. Ezt az áramsűrűséget, amely kapcsolatban van a katód hőmérsékletével és a fém kilépési munkájával, a Richardson egyenlettel határozhatjuk meg:

$$J_s = A_0 * T^2 * e^{\left(-\frac{q * \Phi_m}{k_B * T}\right)}, \quad (95)$$

ahol az $A_0 = \frac{4 * \pi * q * m_0 * k_B^2}{h^3}$ a Richardson állandó, mely értéke 120 A/(cm²*K²) elektronokra, vákuumban [194] [195]. Ha külső teret kapcsolunk a fém felületére, akkor a termoelektromos hatásban figyelembe kell venni a hasonmás (image-lowering) hatást is. Ebben az esetben a szaturációs áramsűrűség egyenlete a következő lesz:

$$J'_s = J_s * e^{\left(\frac{4.39 * \sqrt{E}}{T}\right)}. \quad (96)$$

A Schottky-Mott modell szerint, a potenciálgát magassága (Φ_{Bn}) ideális fém/n-típusú félvezető Schottky kontaktus esetén egyenlő a kilépési munka (Φ_m) és a félvezetőben elektron affinitás (χ_s) különbségével [194] [195]:

$$\Phi_{Bn} = \Phi_m - \chi_s. \quad (97)$$

Ehhez hasonlóan a potenciálgát magassága (Φ_{Bp}) ideális fém/p-típusú félvezető Schottky kontaktus esetén

$$\Phi_{Bn} = \frac{E_g}{q} - (\Phi_m - \chi_s) = \frac{E_g}{q} - \Phi_{Bn}. \quad (98)$$

ahol E_g a tiltott sáv szélessége, q az elektron töltése [194] [195]. A kontaktpotenciál (másképpen diffúziós potenciál) a következő formulával számítható:

$$V_D = \Phi_m - \Phi_s = \Phi_{Bn} - V_n, \quad (99)$$

ahol V_D a kontaktpotenciál, $V_n = (E_c - E_f)/q$ a Fermi (másképpen kémiai) potenciál (E_c a vezetési sáv energiája, E_f a Fermi energia, q az elektron töltése).

A potenciált, az elektromos teret, a kiürített réteg vastagságát és az átmenet kapacitását a Poisson egyenlet megoldásával határozhatjuk meg:

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = \frac{\rho}{\varepsilon_0 * \varepsilon_s}, \quad (100)$$

ahol $V(x)$ a potenciálfüggvény, az x a helykoordináta, ε_0 a vákuum permittivitása, a ε_s a félvezető dielektromos állandója [194] [195]. A ρ töltéssűrűség, a $0 \leq x \leq W$ tartományon a

$$\rho = q * [N_D - n(x)], \quad (101)$$

ahol a q az elektron töltése, N_D az adalékatomok sűrűsége [194], az $n(x)$ az elektronok sűrűsége a tértöltés tartományban. A $n(x) = 0$ az $x = 0$ pontban és $n(x) = n_0 * \exp(-q * V_D / k_B * T)$, az $x = W$ pontban, ahol a W a kiürített réteg szélessége.

A Poisson egyenlet megoldásaként az elektromos térerősség a következő:

$$E(x) = \left(\frac{q * N_D}{\varepsilon_0 * \varepsilon_s} \right) * (x - W). \quad (102)$$

A potenciál a következő:

$$V(x) = - \left(\frac{q * N_D}{\varepsilon_0 * \varepsilon_s} \right) * \left(\frac{x^2}{2} - W * x \right) - \Phi_{Bn}. \quad (103)$$

A potenciál értékei az $x = 0$ pontban és $x = W$ pontban a következők lesznek:

$$V(0) = -\Phi_{Bn}, \quad (104)$$

$$V(W) = \left(\frac{q * N_D * W^2}{2 * \varepsilon_0 * \varepsilon_s} \right) - \Phi_{Bn}. \quad (105)$$

A kiürített réteg szélessége:

$$W = \sqrt{\frac{2 * \varepsilon_0 * \varepsilon_s * (V_D - V_a)}{q * N_D}}, \quad (106)$$

ahol a V_a az átmenet nyitóirányú előfeszítése. Az átmenet kapacitása a következő egyenlettel kapható meg:

$$C_d = \sqrt{\frac{q * N_D * \varepsilon_0 * \varepsilon_s}{2 * (V_D - V_a)}}. \quad (107)$$

A Schottky kontaktusok aszimmetrikus I-V karakterisztikát mutatnak [194] [195]. Nyitó irányú feszültség esetén, a félvezető oldalán a potenciál gát $V_D - V_a$ értékre csökken. Ekkor a félvezető irányából a fém felé jelentős mértékben megnő az áram, míg az ellenkező irányban nem változik a vezetés. Záró irányú feszültség esetén, a félvezető oldalán a potenciál gát $V_D + V_a$ értékre növekszik. Ekkor a félvezető irányából a fém felé az áram elhanyagolhatóan kicsi lesz a fém/(vegyület)félvezető irányhoz képest. Ennek az áramnak a nagyságát többféle modellel is leírhatjuk [195]. A teljes áramsűrűséget nyitóirányú feltételek esetén, a következő egyenlettel számíthatjuk:

$$J = J_{sm} + J_{ms} = J_0 * \left(e^{\frac{q*V_a}{k_B*T}} - 1 \right), \quad (108)$$

ahol

$$J_0 = A_0 * T^2 * e^{-\frac{q*\Phi_{Bn}}{k_B*T}}. \quad (109)$$

Az ohmos kontaktusnak a Schottky kontaktussal szemben lineáris I-V karakterisztikája van [196]. A gyakorlatban azt a kontaktust tekintjük ohmosnak, amelynél a fém/félvezető átmeneten a feszültségesése kisebb, mint a tömbi félvezetőben. Az ohmos kontaktus az R_c kontaktusellenállással jellemezhető, azaz

$$R_c = \left(\frac{dJ}{dV} \right)^{-1} \Big|_{V=0}, \quad (110)$$

ahol J az áramsűrűség és a V a feszültségesés. A fém/közepesen adalékolt n-típusú félvezető esetén a kontaktusellenállás értékét rendszerint a termikus emisszió határozza meg domináns mértékben [195], azaz

$$R_c = \frac{k_B}{q*A*T} * e^{\frac{q*\Phi_{Bn}}{k_B*T}}. \quad (111)$$

Ha kicsi kontaktus ellenállás a cél, akkor minél kisebb potenciálgát magasság szükséges a fém/félvezető átmeneten. Amennyiben az félvezető erősen adalékolt, abban az esetben a téremisszió (azaz az alagúthatás) dominál. Ebben az esetben a kontaktusellenállás értékét az

$$R_c \approx e^{\left(\frac{2*\Phi_{Bn}}{\hbar} \right) * \left(\sqrt{\frac{\epsilon_0*\epsilon_S*m_0}{N_D}} \right)} \quad (112)$$

képlettel lehet kiszámítani [195].

Ohmos kontaktust többféle módon lehet készíteni [195]. Egyik megoldás, hogy olyan fémet választunk, amelynek a kilépési munkája kisebb, mint az n-típusú félvezetőnek, így a potenciálgát a fém és a félvezető között eléggé kicsi ahhoz, hogy a termikus emisszió miatt az elektronok át tudnak alagutazni az átmeneten. Másik megoldás, hogy vékony, erősen adalékolt epitaxiás réteget készítünk ugyanabból az anyagból, mint a hordozó. Ennek az a célja, hogy egy n++/n vagy p++/p magas/alacsony adalékoltságú átmenet jöjjön létre a félvezető felületén. Ez lecsökkenti a potenciálgát szélességét a fém-félvezető kontaktuson, így az áram kvantummechanikai alagúteffektus útján át tud jutni a vékony potenciálgáton kis kontaktusellenállással. Harmadik megoldás az, hogy kis tilossávú anyagból készítünk fokozatos, azaz InAs/n-GaAs vagy n+Ge/n-GaAs heteroátmenetet MBE technikával [195]. Negyedik megoldás az, hogy nem ötvözött, rövid periódusú szuperrácsot használunk. Ez a szuperrács GaN-ből és keskenysávú InN-ből áll, ami szendvicsszerűen be van ékelve a GaN csatorna és az InN fedőréteg közé azért, hogy GaN-en ohmos kontaktus alakuljon ki [195]. Ötödik megoldás az, hogy a rekombinációs centrumok számát megnöveljük a felületen. [195].

I-V karakterisztika

A Schottky kontaktusok kilépési munkáját többféle módon is meg lehet mérni. Itt háromféle módszert említünk meg [194]: (1) foto válasz mérésével, (2) I-V mérésével, (3) C-V mérésével.

A foto válasz mérése az egyik legrégebbi módszer a kilépési munka megmérésére, az elektronok fénnel való gerjesztésével a Fermi-szintről a vezetési sávba [185-186]. A módszer lényege, hogy a Schottky diódát monokromatikus fénnel megvilágítjuk. Legyen $E_f = h * \nu$ a foton energiája. Ha ez az $E_f > q * \Phi_m$ akkor a dióda foto árama hirtelen megváltozik. Amennyiben $E_f > E_g$ akkor a foto áram nagyon gyorsan változik a sávtól-sávig való gerjesztésnél. Ha az elnyelt fotononként keletkező I_p fotoáram $3*k*T$ -vel nagyobb $q * \Phi_m$ -nél, de kisebb a tiltottsáv szélességénél, akkor a fotoemisszió a következő lesz:

$$I_p \propto (h * \nu - q * \Phi_m)^2. \quad (113)$$

A kilépési munka is többféle módon meghatározható az egyenirányító Schottky dióda I-V karakterisztikájából. A legegyszerűbb módszer a dióda áramsűrűségének a megmérése nyitóirányú feszültség hatására, fix hőmérsékleten. Ha az n idealitási tényező közel egy, akkor az áramsűrűség (J_{0T}) termoemisszióból származik és a potenciálgát magassága nulla előfeszítés esetén:

$$\Phi_{m1} = \frac{k_B * T}{q} * \ln(J_{0T} * A_0 * T^2)^{-1}. \quad (114)$$

Egy alternatív módszer a kilépési munka kísérleti meghatározására a J_0 mérése a T hőmérséklet függvényében, fix nyitófeszültségnél [194]. Ha a termikus emisszió a domináns, akkor a $J_0 = J_{0T}$ a következő módon határozható meg:

$$J_{0T} = A_0 * T^2 * e^{\left(-\frac{q * \Phi_{m1}}{n * k_B * T}\right)}, \quad (115)$$

ahol az n az idealitási tényező, ami megmutatja, hogy az adott karakterisztika mennyire közelíti meg az ideális dióda karakterisztikáját. Ideális esetben az n értéke egységnyi. Ez a tényező a következő módon számolható:

$$n = \frac{1}{1 - \beta}. \quad (116)$$

A hasonmás erő és az interfészréteg miatt a $\beta = \frac{\partial \Phi_m}{\partial V} < 0$, így az n értéke nagyobb egynél. Közepes adalékolás esetén a termikus emisszió a domináns így az n értéke 1,010 és 1,025 között van n-típusú GaAs-re [197].

A harmadik lehetőség a Schottky dióda C-V karakterisztikájának a mérése [194] [195]. Az ideális Schottky dióda kapacitása a következő módon határozható meg:

$$C^{-2} = \left(\frac{2}{q * \epsilon_s * N}\right) * (V_r - V_l), \quad (117)$$

ahol $V_l = \Phi_{m1} - \zeta - (k_B * T)/q$.

Az ohmos kontaktusok r_c fajlagos kontaktusellenállását is többféle módon lehet megmérni. Itt négyféle módszert említünk meg [194]: (1) Cox-Strack módszer, (2) négy pont módszer, (3) Schockley extrapolációs módszer, (4) távíróegyenlet módszer. Homogén A kontaktus felületen, egyenletes áramsűrűség esetén az R_c kontaktusellenállás értéke a következő:

$$R_c = \frac{r_c}{A}. \quad (118)$$

Az R mért ellenállás megközelítőleg egyenlő a R_c ellenállással a legtöbb geometria esetén, ha $r_c \geq 0.01 \Omega \cdot \text{cm}^2$. Az r_c kisebb értékeire a félvezető R_b szétterjedő ellenállására és a R_0 csatlakozó huzalok és a félvezető hordozójának soros ellenállására kell figyelembe venni. Ennek következtében az R mért ellenállás:

$$R = R_c + R_b + R_0, \quad (119)$$

ahol az R_b és az R_0 a vizsgált fém/(vegyület)félvezető geometriájától függ.

A Cox-Strack módszernél [194] [198] feltételezzük, hogy adott egy a sugarú, kör alakú kontaktus ρ fajlagos ellenállású n -típusú filmréteg t vastagsággal. A réteg szétterjedő ellenállása a következő módon számítható:

$$R_b = \frac{\rho}{a} * F, \quad (120)$$

ahol az F az a/t arány függvénye, ami a kísérleti eredmények alapján megközelítőleg

$$F\left(\frac{a}{t}\right) \approx \frac{1}{\pi} * \arctan\left(\frac{2*t}{a}\right). \quad (121)$$

Számos esetben szükség lehet az F értékének pontosabb meghatározására is [199]. Ha ez az érték ismert akkor a fajlagos kontaktusellenállás a következő lesz:

$$r_c = \pi * a^2 * \left(R - \frac{\rho}{a} * F\left(\frac{a}{t}\right) - R_0\right). \quad (122)$$

A négy pont módszer [200] az r_c mérésére csak a szelet egyik oldalára szükséges fémezés. A réteg vastagsága t , ami egy epitaxiális réteg is lehet szigetelő hordozón vagy egyenletesen adalékolt tömbi anyag. Ebben az esetben a fajlagos kontaktusellenállás a következő lesz:

$$r_c = \pi * a^2 * \left(\frac{V_1}{I} - \frac{V_2}{I} - F\left(\frac{a}{t}\right)\right), \quad (123)$$

ahol a V_1 az 1-es és a V_2 a 2-es pont potenciálja [200]. Más szerzők szerint a potenciál eloszlás a felületen inkább logaritmikus, mint lineáris [201]. Ebben az esetben a fajlagos kontaktusellenállás a következő lesz:

$$r_c = \pi * a^2 * \left(\frac{V_1}{I} - \frac{V_2}{I} * \frac{\ln\left(\frac{3*s-1}{2*a-2}\right)}{2*\ln 2} - F\left(\frac{a}{t}\right)\right), \quad (124)$$

ahol s a mérési pontok közötti távolság.

A Shokley technika lényege [202] [203], hogy a $V(x)$ feszültségesezt mérjük a félvezető réteg felülete mentén koplánár ohmos kontaktusokkal és extrapolált V_0 feszültséget használunk a kontaktuson keresztül, így megtaláljuk az r_c ellenállást. Az epitaxiális réteg R_s sheet ellenállása miatt az kontaktus ellenállás szintén nem nulla és az áram nem egyenletesen oszlik el és az áram összezsúfolódik minden kontaktus alatt. Az r_c kontaktusellenállást a lineáris feszültségesezt extrapolálásával található meg két kontaktus között, vagyis

$$r_c = R_b * L_T^2, \quad (125)$$

ahol az L_T az ún. transzferhossz, melynek értéke $L_T = -x / \ln(V(x)/V_0)$.

A távvezeték technika [204] [205] lényege az, hogy a planáris kontaktust egy rezisztív távvezetéknek tekintjük, egyenletes R_s sheet ellenállással és specifikus r_c kontaktusellenállással. A távíróegyenlet alapján az R_e teljes ellenállás a következő módon számolható:

$$R_e = \frac{(r_c * R_s)^{\frac{1}{2}}}{W} * \coth \left(d * \left(\frac{R_s}{r_c} \right)^{\frac{1}{2}} \right), \quad (126)$$

ahol a W a távvezeték szélessége, d a távvezeték hossza. Mivel általában a $d * \left(\frac{R_s}{r_c} \right)^{\frac{1}{2}} \geq 2$ így az r_c kontaktusellenállás a következő módon számolható:

$$r_c = \frac{R_e^2 * W^2}{R_s}. \quad (127)$$

Az I-V karakterisztika az ún. Gummel grafikonon (Gummel plot) is ábrázolható [206]. Ezen a grafikonon egyszerre ábrázoljuk a npn bipoláris tranzisztor bázis és a kollektor áramát a bázis-emitter feszültség függvényében. A bázis és a kollektor áramok léptéke logaritmikus. Ebből a grafikonból az npn bipoláris tranziszturnak sok paramétere meghatározható, pl. az egyenáramú erősítés, vagy az idealitási faktor [207]. Utóbbi jelenléte térfogati vagy felületi rekombinációs centrum jelenlétére utal, ami különféle problémákat pl. Fermi-szint felhajlást okozhat.

Egy további lehetőség a fém/félvezető átmenet vizsgálatára a kapacitás-tranziens spektroszkópia (capacitance transient spectroscopy) [208]. Ezzel a módszerrel a töltéssűrűség időbeli változását követhetjük nyomon a dióda kiürített rétegében. Ennek a rétegnek a vastagsága független a töltéssűrűségtől. A kötött töltéshordozók termikus emissziója miatt a tértöltés tartományban kapacitásváltozást okoz, ezáltal információt kapunk a csapdaállapotokról, úgymint a csapda aktivációs energiájáról, a csapdaállapotok keresztmetszetéről, ill. a csapdakoncentrációról is. A termikus emisszió során a kiürített réteg kapacitása a következő egyenlet szerint változik:

$$C(t) = C_r * \left(1 - \frac{n_{T0}}{2 * N_D} * e^{\left(\frac{-t}{\tau_e} \right)} \right), \quad (128)$$

ahol a n_{T0} a betöltött csapdák sűrűsége $t = 0$ sec időpillanatban, C_r a dióda kapacitása, ha az összes csapda üres V_r feszültségnél, τ_e az emisszió időállandója ($\tau_e = 1 / e_n$, ahol az e_n az emissziós arány).

A mélyszint tranzien spektrószkópia (Deep-level transient spectroscopy, DLTS) egy jól használható és széleskörben alkalmazott mérési módszer a félvezetőkben lévő elektromosan aktív csapdák kimutatására [209] [210]. A DLTS egy korrelációs technika, ahol a kapacitás tranzienst megszorozzuk egy korrelációs függvényrel (a referencijellel) és kiintegráljuk. Legyen pl. a korrelációs függvény a következő:

$$F_{corr}(t) = \delta(t - t_1) - \delta(t - t_2), \quad (129)$$

ahol a $\delta(t-t_i)$ az ún. Kroneckel delta, a t_1 valamint a t_2 két különböző időpont. A végeredményként kapott jel a következő lesz:

$$S(t) = \frac{1}{T} \int_0^T C(t) * F_{corr}(t) dt. \quad (130)$$

Legyen $T = t_2 - t_1$ a korrelációs függvény periódusideje. Ha a (130) integrált kiértékeljük, a DLTS kimeneti jel a következő lesz:

$$S(t) = C(t_2) - C(t_1). \quad (131)$$

A két különböző időpont egy arányablakot (rate window) definiál. Az arányablak információt hordoz az emissziós arányról, amit referencia értéként veszünk figyelembe. Az emissziós arány hőmérsékletfüggő. Ha ez az emissziós arány megfelel a csapdacsúcs maximumának, akkor ott a DLTS jelben egy csúcsot látunk, mert ott egy csapdaállapot van. Ha a (127) egyenletet behelyettesítjük a (131) egyenletbe, akkor a következő kimeneti jelet kapjuk:

$$S(t) = C_r * \frac{n_{r0}}{2 * N_D} * \left(e^{\left(-\frac{t_2}{\tau_e}\right)} - e^{\left(-\frac{t_1}{\tau_e}\right)} \right). \quad (132)$$

Ha kiszámoljuk ennek a függvénynek a maximumát, akkor az arányablak a következő lesz:

$$\tau_e = \frac{t_1 - t_2}{\ln\left(\frac{t_1}{t_2}\right)}. \quad (133)$$

A DLTS mérések segítségével több dolgot is megmérhetünk, pl. a defektusok aktivációs energiáját, a csapdakeresztmetszetet, valamint a csapdakoncentrációt is.

7.2 III-V anyagrendszer kontaktusfémezéseinek geometriai tulajdonságainak vizsgálata (6. tétel)

A napelemek fontos részei a kontaktusok. A hőkezelés hatására keletkezett fémes morfológia eléggé struktúrált. Ezért a felület mintázatát a fraktálmélet segítségével elemeztem [211] [212]. A fraktálok végtelenül összetett – statisztikus értelemben „önhasonló” – matematikai alakzatok, melyek számtalan különféle formájában legalább egy matematikai eszközzel leírható ismétlődés tapasztalható [213] [214] [215].

Fraktálmélet eredményeit hasznosító elemzések [216] [211] a kontaktusok felszínéről, a hőkezelés során készített in situ SEM fényképfelvételeken alapulnak. Ezeket L. Dobos et. al [216] készítették egy átalakított SEM berendezésben. Ebben a berendezésben a szerzők megoldották a gyors, max. 700 °C-os hőmérsékletű hőkezelést. A SEM fényképeket

digitalizálva számítógépes bittérkép formátumú (BMP) képeket hoztak létre, amelyet egy szoftverrel értékelték ki [217].

Egy adott, nem folytonos vékonyréteg felületét akkor tekintjük fraktálmintázatúnak, ha a róla készült, fekete-fehér kép dimenziója 1 és 2 között van. Minél szabályosabb és teljesebb a sík kitöltöttsége, az alakzat fraktáldimenziója annál közelebb kerül a 2-höz.

A matematikai értelemben vett fraktálok (pl. a kétszínű képek) fraktál-dimenziójának mérésére az egyik legelterjedtebb módszere az úgynevezett dobozszámlálási (box counting) eljárás, melynek kidolgozói B. Mandelbrot [218] és Hausdorff [219] voltak.

Kutatásaink során, az InP felületére Au, Pd és Au/Pd vékonyréteget vittünk fel [211]. A vizsgált anyagrendszerek adatai az IV. táblázatban vannak.

<i>Vékonyréteg és hordozó típusa ill. orientációja</i>	Au/InP(111)	Pd/InP(100)	Au/Pd InP(100)
<i>Vékonyréteg vastagsága [nm]</i>	60	50	85/50

4. táblázat. A vizsgált anyagrendszerek adatai.

A célom az volt, hogy részletesen megvizsgálom azt, hogy az Au, Pd és az Au/Pd rétegek felületi morfológiáját, abból a szempontból, hogy a felület fraktálos tulajdonságokat mutat-e.

A kutatás során az eredeti felvételeket megvágtam. Ezt követően az ImageJ programmal a megvágott felvételeket bináris formára konvertáltam, a Hausdorff mérték szerint. Megszámoltam, hogy hány darab n átmérőjű box szükséges ahhoz, hogy a fehér pixeleket lefedjük. Majd megismételtem meg ezt az eljárást úgy, hogy $n/2$ átmérőjű boxokat alkalmazok, addig, amíg elérjük az egy pixeles átmérőt. Amennyiben ezeket a box darabszámok logaritmusát feltüntetem egy diagramon a lépésszám függvényében és egy egyenest illesztünk rá, akkor megkapom a fraktáldimenziót [211].

A fraktálmatematika módszer mellett ugyanezeket a felületeket a betöltési tényező (filling factor) és a struktúrális entrópia módszerével is megvizsgáltam. A struktúrális entrópia [220] [221] [222] [223] a rácson értelmezett valószínűségi eloszlások lokalizáció típusát adja meg, azaz megmondja, hogy az eloszlás csomósodásai milyen függvény szerint csengenek le.

Legyen n darab rácsponunkt, melyek közül valójában csak m darab van betöltve, ahol a betöltöttség azonos $p_i = 1/m$, a többin pedig $p_i = 0$. A struktúrális entrópia a rendszer entrópiájának az a része, ami megadja, hogy a d számú betöltött pont milyen függvény szerinti cseng le. Ennek a lecsengésnek az alakját jellemzi a struktúrális entrópia, ami a

$$S_{\text{str}} = S - \ln d = \sum_{i=1}^n p_i \ln p_i - \ln \frac{1}{\sum_{i=1}^n p_i^2}, \quad (134)$$

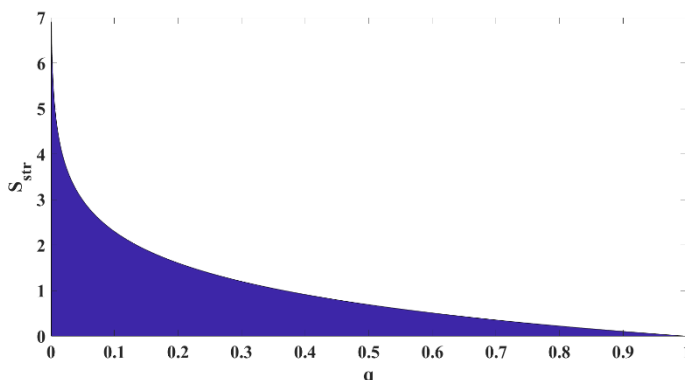
képlettel definiálható. Két értéket felvevő lépcsős eloszlások esetén (pl. bittérképek) ez a

mennyiség nulla lesz, mivel ilyenkor a *Shannon-entrópia* pontosan az $\ln d$ -vel lesz egyenlő. Emiatt ezeket a számításokat szürkeárnyalatos képeken végeztük.

Vezessük be az egy rácspont átlagos betöltöttségét jellemző

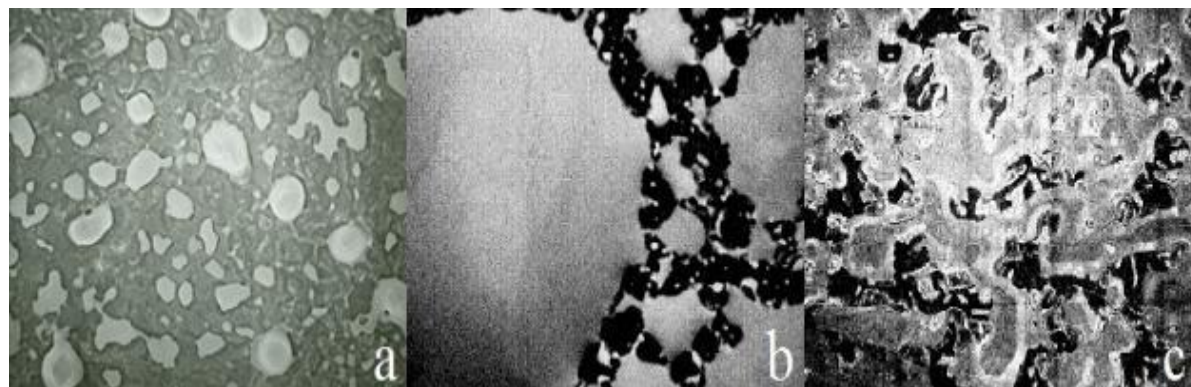
$$q = \frac{d}{n} = \frac{1}{n \sum_{i=1}^n p_i^2} \quad (135)$$

betöltési arányt. Ha az eloszlás strukturális entrópiáját a betöltési arány függvényében ábrázoljuk akkor azt látjuk, hogy minden lecsengő függvény (pl. az e^{-r^2} Gauss-függvény, az $r^{-\alpha}$ hatványfüggvények, ...) egy-egy jól meghatározható görbét rajzol ki a $q - S_{str}$ síkon (112. ábra). Ha megvizsgáljuk, hogy az eloszlásunk pontja melyik ilyen görbére illeszkedik, akkor meghatározhatjuk a lecsengés típusát [220] [224]. A módszer elmélete részletesebben a [221] cikkben található meg. Az 111. ábrán az árnyékos terület azt a tartományt reprezentálja, ami kielégíti a $0 < q < 1$ a $0 < S_{str} < -\log(q)$ feltételeket. A strukturális entrópia és a lokalizációs faktor nemcsak SEM (112. ábra), hanem AFM-mel letapogatott felületek elemzésére is használhatók [225] [226].



112. ábra. A strukturális entrópia diagram megengedett tartománya.

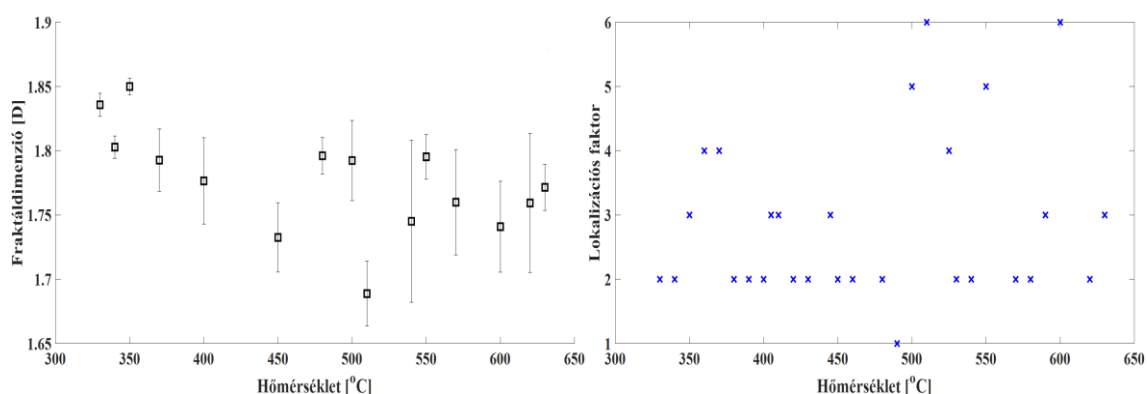
A 113. ábrán különféle InP(111) hordozóra felpárolgatott vékonyrétegek (arany, palládium, arany-palládium) felületi mintázata látható.



113. ábra. Az (a) arany réteg InP(111) hordozón (460 °C hőmérsékleten), a (b) palládium réteg InP(100) hordozón (510 °C hőmérsékleten), a (c) arany-palládium réteg InP(100) hordozón (460 °C hőmérsékleten).

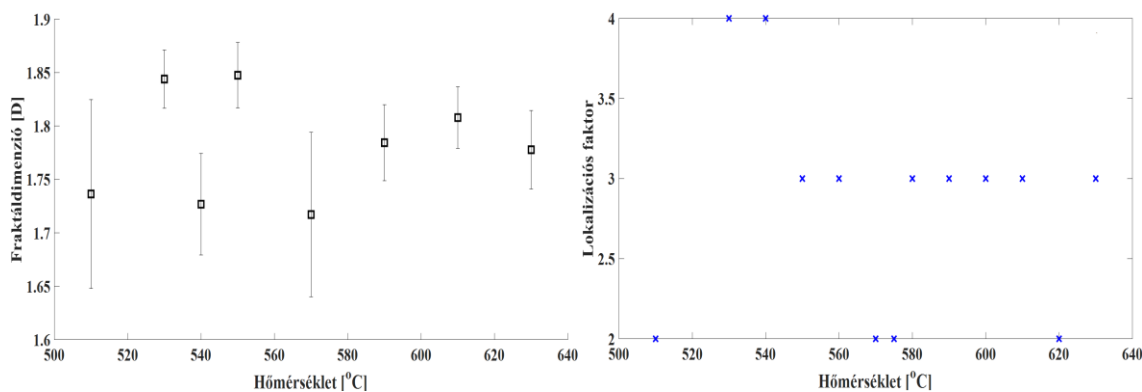
A 114. ábrán láthatóan az Au/InP anyagrendszer a fraktáldimenziója 1.82 és 1.74 között

változik, tehát a hőmérséklet függvényében csökken.



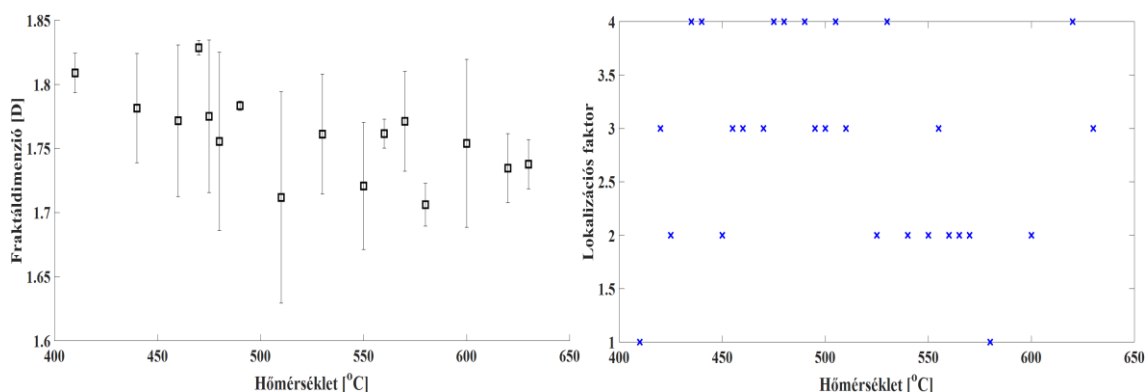
114. ábra. A D fraktáldimenzió (bal oldali kép) és az α lokalizációs faktor (jobb oldali kép) 60 nm-es Au vékonyrétegen, a hőmérséklet függvényében.

A 115. ábrán a Pd/InP anyagrendszer felületi mintázatát vehetjük szemügyre. Ennek az anyagrendszernek a fraktáldimenziója 1.75 és 1.8 között változik: azaz a hőmérséklet függvényében nő.



115. ábra. A D fraktáldimenzió (bal oldali kép) és az α lokalizációs faktor (jobb oldali kép) 50 nm-es Pd vékonyrétegen, a hőmérséklet függvényében.

Ahogy a 116. ábra is igazolja, az itt a fraktáldimenzió 1.7 és 1.8 között változik, vagyis a hőmérséklet függvényében csökken.



116. ábra. A D fraktáldimenzió (bal oldali kép) és az α lokalizációs faktor (jobb oldali kép) 85 nm Au, 50 nm Pd vékonyrétegen, a hőmérséklet függvényében.

8 Összefoglalás, kitekintés

Napjainkban, a vegyület-félvezető (pl. GaAs, InP) hordozón, önszerveződés útján kialakuló nanostruktúrákat az alap és az alkalmazott tudományokban egyaránt intenzíven vizsgálják. A különféle epitaxiás eljárások segítségével növesztett alacsony-dimenziós nanostruktúrák forradalmasították a mindennapokban is használt elektronikus eszközeink hatékonyságát (napelem, kék színű LED), valamint a jövő számítástechnikájára is hasonló hatással lesz (pl. kvantumszámítógépek). Ezek a nanostruktúrák (kvantum pontok, kvantum gyűrűk, kvantumvölgyek, inverz kvantum pontok stb.) elsősorban (molecular-beam-epitaxy, MBE) segítségével hozhatók létre, III-V-ös vegyület-félvezető (pl. GaAs, InP) hordozón.

Az itt bemutatott GaAs-alapú nanostruktúrák előállításának feltétele a félvezető-kristályrétegek és nanoszerkezetek kontrollált növesztése. Ezek a néhány atomsor vastagságú rétegek (ill. más nano objektumok) elsősorban MBE technológiával, csepp-epitaxiás módon növeszthetők [4] [5] [112] [123] [159]. A technológia lényege, hogy az első lépésben a hordozó (pl. GaAs) felületére egy a III. főcsoportból származó fém cseppet (pl. Ga) választunk le. A második lépésben a minta hőmérsékletének és a háttérben lévő V. főcsoportból származó maradékgáz (pl. As) nyomásának a függvényében különféle nanostruktúrák alakulnak ki úgy, hogy a gallium cseppek teljes mértékben kikristályosodnak.

E nanostruktúrák tényleges alkalmazására számos kiváló példa hozható fel. Egyik jó példa a III-V alapú félvezető eszközök, pl. a GaN alapú kék színű LED-ek, amiért Isamu Akasaki, Hiroshi Amano and Shuji Nakamura és társai 2014-ben Nobel díjat kaptak [227]. Ezeknek az eszközöknek az aktív tartományában egy vagy több InGaN kvantum völgy található, melyek szendvicsszerű módon, vastagabb GaN rétegek közé vannak beékelve. Az InGaN völgyben InN-GaN tartományok változtatásával a kibocsátott fény hullámhossza az ultraibolyától az ibolyáig változik. Másik megoldás a kvantum völgyek helyett kvantum pontok alkalmazása. A LED-ek nagy fényerejét, a fázis szétválasztás által előidézett InGaN kvantum pontok idézik elő [228].

Egy további példa a dolgozatban tárgyalt nagy hatásfokú napelemek. A napelemek fejlesztésében két különböző irányvonal van. Az egyik, az olcsó vékonyréteg ($\eta = 5 - 10\%$ hatásfokkal) vagy kristályos szilícium alapú ($\eta < 30\%$ hatásfokkal) napelemek, otthoni, földi felhasználásra. Ide tartozik pl. a tandem, az amorf szilícium napelem. A másik kutatási irány a nagy hatásfokú napelemek fejlesztése, többek között űrbéli felhasználásra. Ide tartozik a GaAs heterostruktúra alapú ($\eta \approx 30\%$), a kvantum völgyeket ($\eta > 40\%$), ill. a kvantum pontokat ($\eta > 60\%$) tartalmazó napelemek [12] [14] [154].

Az 5. fejezetben a nanolyukak feltöltődésével kapcsolatos kutatási eredményeimről számolok be. A feltöltődés modellezését a folyékony Ga és In viszkozitásának a figyelembevételével végeztem. Először bevezettem a viszkozitás egy lehetséges mikroszkópikus értelmezését (5.2-es fejezet), ezt követően megalkottam egy szimulációs algoritmust (5.3-as fejezet), amely a feltöltődését szimulálja. A szimulációs eredményekről az 5.4-es fejezetben írtam.

A kvantum pontok legmegbízhatóbban a nanolyukak feltöltődésével állíthatók elő. A 6. fejezetben az önszerveződés útján kialakuló nanoszerkezetek klaszterezésével, osztályozásával és tervezésével foglalkozom. Ezen nanoszerkezetek alakja, mérete, eloszlása jelentősen befolyásolja a velük készült eszközök a tulajdonságait, működését. Emiatt a

növesztés során fontos tudni, hogy adott technológiai paraméterek esetén hogyan és milyen tulajdonságú nanostrukturák alakulhatnak ki. Itt egyrészt ezen nanostrukturák osztályozási lehetőségeit vizsgáltuk meg, az adott nanoszerkezet formatényezője alapján. E formatényező meghatározására több módszert is megvizsgálunk, pl. a Kohonen-féle önszerveződő hálózatokat ill. a fuzzy következtető rendszerek alkalmazását.

Az első elképzelés alapján a 6.2-es fejezetben megvizsgáltam, hogyan határozható meg ez a formatényező a Kohonen-féle önszerveződő leképezéssel (SOM – Self-Organizing Mapping). Az elért eredmények alapján látható, hogy ez a módszer jelenleg a kvantum-pontokra jól működik, de a további nanostrukturák osztályozására még fejlesztenünk kell a rendszert. A jelen állapotban a nanolyukak elkülöníthetők a kvantum pontoktól és a kvantum gyűrűktől, ugyanakkor a kvantum pontok és a kvantum gyűrűk egymástól való elkülönítése a bonyolult technológiai függés okán nehézkes.

Az osztályozás megoldására a második elképzelésem az volt, hogy a formatényező meghatározására fuzzy-féle következtető rendszert alkalmazok. A fuzzy következtető rendszernél két különféle megközelítést is megvizsgáltam. Az egyik az volt, hogy a formatényezőt a közvetlenül megváltoztatható bemeneti paraméterek (pl. a hordozó hőmérséklete, As nyomása stb.) alapján számolom ki. Ha ezzel a modellel megvizsgálom a tanítóadatokat, akkor az eredeti osztályozáshoz képest eltérést tapasztalhatók. Ennek az az oka, hogy ez egy szokatlan minta (pl. gyűrű-lyuk átmenet), hiszen a nanolyukak általában $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ felett és 10^{-7} Torr nyomás alatt alakulnak ki. Ezzel ellentétben, ez a nanolyuk egy alacsony hőmérsékleten ($T_{\text{hordozó}} = 300\text{ }^{\circ}\text{C}$) és közepes arzénnyomással ($P_{\text{As}}=10^{-6}$ Torr), 1 percig tartó, $T = 300\text{ }^{\circ}\text{C}$ fokos hőkezelés nyomán alakult ki. A másik az volt, hogy ezen rendszer alkalmazásával a formatényezőt a kialakult nanostrukturák geometriai méretei alapján határoztam meg.

A 6.3-as fejezetben megvizsgáltam, hogy milyen módon alkothatok egy olyan fuzzy modellt, ami segíti a technológust ezen nanoszerkezetek tervezésében. Valós technológiai adatokkal ellenőriztem (a modellem a növesztési hőmérsékletre $6,09\%$, a Ga részecskeáramra $7,72\%$, az As háttérnyomásra $3,65\%$, a hőkezelés idejére és hőmérsékletére 0% -os eltéréssel ad eredményt).

A 7.2-es fejezetben a III-V típusú vegyület-félvezető kontaktusok morfológiai tulajdonságaival foglalkoztam. A kontaktás minden félvezető eszköznek, így a napelemnek is alapvető része. A bevezető után részletesen foglalkoztam az ohmos és kontaktusok elektromos tulajdonságaival, mérés technikájával, a különféle fémezések típusaival. Megvizsgáltam a fémezések felületén kialakuló mintázatokat. Jelen munkában összefoglaltam a kontaktus elektromos tulajdonságait, a laterális inhomogenitásért felelős tényezőket és a kialakult morfológiákat vizsgáltam. A munka jövőben sorrakerülő fázisa a különböző morfológiák és a kontaktus elektromos viselkedésének összekapcsolása lesz.

9 *Tézisek*

Első tézis: Új modell, a dinamikai viszkozitás mikroszkópikus értelmezésére

Kidolgoztam egy módszert ill. formulát a dinamikai viszkozitás mikroszkópikus értelmezésére, melyben az atomi vibrációs frekvenciát és a tömbi aktivációs energiát használtam paraméterként. A tézishoz kapcsolódó publikációk: [164] [165] [166].

Második tézis: Effektív modellezési algoritmus a III-V alapú nanolyukak feltöltődésére

Megalkottam egy modellt, melyben a leválasztott réteg térfogata az 1. tézisben említett dinamikai viszkozitásnak megfelelően megoszlik: egy része a nanolyukba, másik része a nanolyukat körülvevő gyűrűre, míg a harmadik része e gyűrű melletti felületre kerül, figyelembe véve a $\{001\}$ és az $\{111\}$ felületek diffúziós különbségeit. Az algoritmussal végzett szimuláció eredménye jól egyezik a [164]-es cikkben lévő transzmissziós elektronmikroszkópos felvételen látható struktúrával. A tézishoz kapcsolódó publikációk: [164] [165] [166].

Harmadik tézis: III-V alapú nanolyukak feltöltődés-kinetikájának szimulációja

A kinetikus modell segítségével meghatároztam a nanolyukak időbeli feltöltődését a hőmérséklet függvényében, arra az esetre, ha a felületre Ga ill. In atomok érkeznak. A modellben a kristályosítás utáni állapotot vettem figyelembe. A rétegek egymásra épülésénél a nanolyuk melletti gyűrű magassága is növekszik. A modellezéshez bevezettem az ún. egyensúlyi magasság fogalmát. Továbbá megadtam egy matematikai leírást a Ga ill. az In hőmérséklet-viszkozitás és a hőmérséklet-egyensúlyi magasság értékpárjaira. A fentiekkel végzett szimuláció eredménye jól egyezik a [164]-es cikkben lévő transzmissziós elektronmikroszkópos felvételen látható struktúrával. A tézishoz kapcsolódó publikációk: [164] [165] [166].

Negyedik tézis: Nanostruktúrák osztályozása Kohonen leképezéssel és fuzzy következtető rendszer alkalmazásával

Önszerveződő, ill. lágyszámítási leképezést alkalmaztam a csepp epitaxiás technológia támogatására, ahol kidolgoztam a nanostruktúrák osztályozásának és klaszterezésének lehetséges modelljeit Kohonen-féle önszerveződő hálózatok és fuzzy következtető módszerek alkalmazásával. Az osztályozás igen fontos, mivel ezen nanoszerkezetek alakja, mérete, eloszlása jelentősen befolyásolja a velük készült eszközök a tulajdonságait, működését. Emiatt a növesztés során fontos tudnunk, hogy adott technológiai paraméterek esetén hogyan és milyen tulajdonságú nanostruktúrák alakulhatnak ki.

A megoldás során alkotó módon alkalmaztam a lágyszámítást anyagtudományi feladatra. Meghatároztam a nanostruktúrák formatényezőjét Kohonen leképezéssel és fuzzy következtető rendszer alkalmazásával. A tézishoz kapcsolódó publikációk: [178] [180] [181].

Ötödik tézis: Fuzzy modell, a nanostruktúra tervezés támogatására

Modellt alkottam a nanostruktúra tervezés támogatására. Előállítottam egy olyan fuzzy modellt, ami segít ezen nanoszerkezetek tervezésében. Valós technológiai adatokkal ellenőrizve (növesztési hőmérséklet 230 °C, Ga részecskeáram 0,76 ML/sec, As háttérnyomás $1,05 \cdot 10^{-4}$ Torr, hőkezelés ideje 10 min, a hőkezelés hőmérséklete 350 °C) a modell a növesztési hőmérsékletre 6,09 %, a Ga részecskeáramra 7,72 %, az As háttérnyomásra 3,65 %, a hőkezelés idejére és hőmérsékletére 0 %-os eltérést ad. A tézishez kapcsolódó publikáció: [180].

Hatodik tézis: III-V anyagrendszer kontaktusfémezéseinek geometriai tulajdonságainak vizsgálata

Megállapítottam, hogy a InP-alapú félvezetőeszközök kontaktálásához használt Au/InP, Pd/InP és Au-Pd/InP kontaktus-rendszerek bizonyos hőmérséklet tartományokban önhaszonlóan klasztereződik és nem ad folytonos struktúrát a felületen. Meghatároztam, hogy az Au/InP anyagrendszer a fraktáldimenziója 1,82 és 1,74 között valamint a Pd/InP fraktáldimenziója 1,75 és 1,8 között változik. Az Au-Pd/InP fraktáldimenziója pedig 1,7 és 1,8 között változik. A tézishez kapcsolódó publikációk: [211] [212].

10 Köszönetnyilvánítás

Értekezésem elkészítésében köszönetet mondok témavezetőmnek Dr. Nemcsics Ákos Dsc. professzor úrnak (OE-MTI) az értekezés elkészítésében, ill. a felkészülésben nyújtott sok segítségét. Szeretném megköszönni Dr. Lovassy Rita Évának és Dr. Fried Miklós Dsc. egyetemi docensnek (OE-MTI) az értekezésem átolvasását és a segítő észrevételeit. Szeretnék köszönetet mondani az értekezésem házi-védése bírálóinak, Dr. Kovács Balázs egyetemi docensnek (OE-MTI) és Dr. Plesz Balázs egyetemi docensnek (BME-EET). Szeretném megköszönni továbbá Dr. Lendvay Marianna egyetemi docens (OE-MTI) és Dr. Turmezei Péter egyetemi docens (OE-MTI) intézetigazgatóknak, hogy lehetővé tették, hogy az intézetben végezhessem a kutatásaimat, valamint Dr. Vajda István (OE-ATDI és OE-KVK) professzor úrnak támogatását ill., hogy figyelemmel kísérte kutatásaimat. Végül, de nem utolsó sorban szeretnék köszönete mondani édesanyámnak és édesapámnak, hogy segítségükkel idáig eljutottam.

11 Irodalomjegyzék

- [1] Nemcsics Á., *A napelem és fejlesztési perspektívái*. Budapest, Magyarország: Akadémiai Kiadó, 2001.
- [2] Nemcsics Á., *A napelem működése, fajtái és alkalmazása*. Budapest: BMF-KVK, 2005.
- [3] W. Shockley, H. J. Queisser, "Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells," *Journal of Applied Physics, Volume 32 (March 1961)*, vol. 32, pp. 510-519, March 1961.
- [4] M. A. Herman, H. Sitter, *Molecular Beam Epitaxy, Fundamentals and Current Status 2nd. ed.* Berlin: Springer, 1996.
- [5] H. Mohamed, Ed., *Molecular Beam Epitaxy: From Research to Mass Production.*

Elsevier Science, 2012.

- [6] M. Shur, "Chemical Bonds and Crystal Structure," in *GaAs Devices and Circuits.*: Springer Science+Business Media New York, 1987, pp. 1-10.
- [7] J. Wood, D. V. Morgan, "Gallium Arsenide and Related Compounds for Device Applications," *Acta Physica Polonica*, vol. 79, no. 1, pp. 97-116, 1991.
- [8] K. Kim, H-D. Nguyen, S. Mho, J. Lee, "Enhanced Efficiency of GaAs Single-Junction Solar Cells with Inverted-Cone-Shaped Nanoholes Fabricated Using Anodic Aluminum Oxide Masks," *International Journal of Photoenergy*, vol. 2013, pp. 1-5, April 2013.
- [9] S. Moon, K. Kim, Y. Kim, J. Heo; J. Lee, "Highly efficient single-junction GaAs thin-film solar cell on flexible substrate," *Scientific Reports*, vol. 6, p. 30107, February 2016.
- [10] N. Al Wahshi, A. Nayfeh, "Single junction GaAs - Ge stacked tandem cell,".
- [11] M. Yamaguchi, T. Takamoto, K. Araki, N. Ekins-Daukes, "Multi-junction III-V solar cells: Current status and future potential," *Solar Energy*, vol. 79, no. 1, pp. 78-85, July 2005.
- [12] S. Hegedus A. Luque, Ed., *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*, 2nd ed. England: Wiley, 2010.
- [13] J. Poortmans, V. Arkhipov, *Thin film solar cells: fabrication, characterization and applications.*: NJ:Wiley, 2006.
- [14] A. Luque, A. Martí, C. Stanley, "Understanding intermediate-band solar cells," *Nature Photonics*, vol. 6, pp. 146–152, February 2012.
- [15] C. Kerestes, S. Polly, D. Forbes, C. Bailey, A. Podell, J. Spann, P. Patel, B. Richards, P. Sharps, S. Hubbard, "Fabrication and analysis of multijunction solar cells with a quantum dot (In)GaAs junction," *Progress in Photovoltaics Research and Applications*, vol. 22, no. 11, pp. 1172–1179, 2013.
- [16] Á. Nemcsics, "Novel Alternative for the GaAs-based Self-organized Quantum-structure," *Óbuda University e-Bulletin*, pp. 193-199, 2011.
- [17] C-F. Lin, J-S. Huang, S-J. Syu, J-J. Chao, C-Y. Chou, C-Y. Hsiao, C-Y. Lee, "Nano-Structured and Micro-Structured Semiconductors for Higher Efficiency Solar Cells," in *IEEE*, vol. 2008 IEEE PhotonicsGlobal@Singapore, Singapore, 2008, pp. 1-4.
- [18] Nemcsics Á., "Új irányok a napelemes technológiában," *Elektronikai Technológia, Mikrotechnika*, pp. 39-45, 2009.
- [19] K.W.J. Barnham, I. Ballard, J.P. Connolly, N.J. Ekins-Daukes, B.G. Klufftinger, "Quantum well solar cells," *Physica E*, vol. 14, pp. 27-36, 2002.
- [20] F. K. Rault, A. Zahedi, "Ideal quantum well solar cell designs," *Physica E*, vol. 21, pp. 61-70, 2004.
- [21] S.J. Lade, A. Zahedi, "A revised ideal model for AlGaAs/GaAs quantum well solar cells," *Microelectronics Journal*, vol. 35, pp. 401–410, 2004.
- [22] N. J. Ekins-Daukes, J. Adams, I. M. Ballard, K. W. J. Barnham, B. Browne, J. P. Connolly, T. Tibbits, G. Hill, J. S. Roberts, "Physics of Quantum Well Solar Cells," *Proc. SPIE 7211, Physics and Simulation of Optoelectronic Devices*, vol. 7211, p. 72110L , 2009.
- [23] H. Welker, "Über neue halbleitende Verbindungen," *Zeitschrift für Naturforschung A*, vol. 7a, p. 744, 1952.

- [24] M. J. Howes, D. V. Morgan, *Gallium Arsenide: Materials, Devices, and Circuits*. Chichester, United Kingdom: John Wiley and Sons, 1985.
- [25] Á. Nemcsics, "III-V-based Low-dimensional Structures," Hungarian Academy of Sciences, Research Institute for Technical Physics and Materials Science, Budapest, DSc Theses of HAS 2011.
- [26] D. N. Nasleolov, F. P. Kesamanly, *Gallium Arsenide. Fabrication, Properties and Application*. Nauka, Moscow, 1973.
- [27] W. Miller, "Simulation of Epitaxial Growth by Means of Density Functional Theory, Kinetic Monte Carlo, and Phase Field Methods," in *Handbook of Crystal Growth: Fundamentals (Volume I, Part A: Thermodynamics and Kinetics)*, 2nd ed. New York: Elsevier B.V, 2015, pp. 521-559.
- [28] L. Nurminen, A. Kuronen, K. Kaski, "Kinetic Monte Carlo simulation of nucleation on patterned substrates," *Phys. Rev. B*, vol. 63, p. 035407, 2000.
- [29] C.-F. Lin, A. B. H. Hammouda, H.-C. Kan, N. C. Bartelt, R. J. Phaneuf, "Directing self-assembly of nanostructures kinetically: Patterning and the Ehrlich-Schwoebel barrier," *Physical Review B*, vol. 85, p. 085421, February 2012.
- [30] Axel Groß, "Kinetic Modeling of Processes on Surfaces," in *Theoretical Surface Science: A Microscopic Perspective*. Berlin, Heidelberg, Germany: Springer Verlag , 2009, ch. 8, pp. 239-273.
- [31] G. S. Petrich, A. M. Dabiran, P. I. Cohen, "Enhanced surface cation mobility on Sn delta-doped (Ga,Al)As," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 61, pp. 162-164, 1992.
- [32] K. Shiraishi, "Ga adatom diffusion on an As-stabilized GaAs(001) surface via missing As dimer rows: First-principles calculation," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 60, pp. 1363-1365, 1992.
- [33] T. Ito, K. Shiraishi, "A Theoretical Investigation of Migration Potentials of Ga Adatoms near Step Edges on GaAs(001)-c(4×4) Surface," *Japanese Journal of Applied Physics, Volume 35, Part 2, Number 8B*, vol. 35-2, pp. 1016-1018, 1996.
- [34] T. Shitara, T. Nishinaga, "Surface Diffusion Length of Gallium during MBE Growth on the Various Misoriented GaAs(001) Substrates," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 21, pp. 1212-1216, 1989.
- [35] T. Nishinaga, X. Q. Shen, "Surface diffusion and adatom stoichiometry in GaAs MBE studied by microprobe-RHEED/SEM MBE," *Applied Surface Science*, vol. 82-83, pp. 141-148, 1994.
- [36] M. Tanaka, T. Suzuki, T. Nishinaga, "Surface Diffusion of Al Atoms on GaAs Vicinal Surfaces in Molecular Beam Epitaxy," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 29, pp. L706-8, 12990.
- [37] Y. Horikoshi, H. Yamaguchi, M. Kawashima, "Surface Migration of Ga and Al Atoms on (100) GaAs and AlAs during Migration-Enhanced Epitaxy," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 28, pp. 1307-1311, 1989.
- [38] D. J. Fisher, Ed., *Surface Diffusion and Surface Structure - 10 Years of Research*.: Trans Tech Publication, 1988.
- [39] M. A. Herman, W. Richter, H. Sitter, *Epitaxy (Physical Principles and Technical Implementation)*. Berlin, Heidelberg, Germany: Springer-Verlag , 2004.
- [40] J. P. LaFemina, "Theory of Insulator Surface Structures," in *Handbook of Surface Science*, W.N. Unertl, Ed. Amsterdam, Netherland: Elsevier, 1996, vol. 1, ch. 4.

- [41] D. Sholl, J. A. Steckel, "DFT Calculations for Surfaces of Solids," in *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. New Jersey: John Wiley and Sons, 2009, pp. 83-112.
- [42] K. Oura, V. G. Lifshits, A. A. Saranin, A. V. Zotov, M. Katayama, *Surface Science: An Introduction*. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 2003.
- [43] B. A. Joyce, J. H. Neave, J. Zhang, P. J. Dobson, "RHEED Intensity Oscillations During MBE Growth of III-V Compounds - An Overview," in *Reflection High-Energy Electron Diffraction and Reflection Electron Imaging of Surfaces*, P. J. Dobson P. K. Larsen, Ed. Boston, MA: Springer, 1988, vol. 188, pp. 397-417.
- [44] H. Yamaguchi, Y. Horikoshi, "Surface structure transitions on InAs and GaAs (001) surfaces," *Phys. Rev. B.*, vol. 51, pp. 9836-9854, 1995.
- [45] C. T. Foxon, B. A. Joyce, "Interaction kinetics of As₂ and Ga on
- [46] C. T. Foxon, B. A. Joyce, "Interaction kinetics of As₄ and Ga on
- [47] E. S. Tok, J. H. Neave, F. E. Allegretti, J. Zhang, T. S. Jones, B. A. Joyce, "Incorporation kinetics of As₂ and As₄ on GaAs(110)," *Surface Science*, vol. 371, pp. 277-288, 1997.
- [48] B. A. Joyce, P. J. Dobson, J. H. Neave, K. Woodbridge, J. Zhang, P. K. Larsen, B. Bölger, "RHEED studies of heterojunction and quantum well formation during MBE growth — from multiple scattering to band offsets," *Surface Science*, vol. 168, pp. 423-438, 1986.
- [49] B. A. Joyce, D. D. Vvedensky, "Quantum Dots in the InAs/GaAs System," in *Quantum Dots: Fundamentals, Applications, and Frontiers*, P. C. Kelires, A. G. Naumovets, D. D. Vvedensky B. A. Joyce, Ed.: Springer, Dordrecht, 2005, vol. 190, ch. 1, pp. 1-26.
- [50] W.G. Schmidt, F. Bechstedt, "GaAs(001) surface reconstructions: geometries, chemical bonding and optical properties," *Applied Surface Science*, vol. 190, pp. 264–268, 2002.
- [51] C. B. Duke, "Semiconductor Surface Reconstruction: The Structural Chemistry of Two-Dimensional Surface Compounds," *Chem. Rev.*, vol. 96, pp. 1237–1260, 1996.
- [52] O. Stier, M. Grundmann, D. Bimberg, "Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band k-p theory," *Phys. Rev. B*, vol. 59, pp. 5688-, 1999.
- [53] S. Tsukamoto, N. Koguchi, "Magic numbers in Ga clusters on GaAs (0 0 1) surface," *Journal of Crystal Growth*, vol. 209, pp. 258-262, 2000.
- [54] K. Watanabe, S. Tsukamoto, Y. Gotoh, N. Koguchi, "Photoluminescence studies of GaAs quantum dots grown by droplet epitaxy," *Journal of Crystal Growth*, vol. 227-228, pp. 1073-1077, 2001.
- [55] A. Ohtake, "Surface reconstructions on GaAs(001)," *Surface Science Reports*, vol. 63, pp. 295-327, 2008.
- [56] Á. Nemesics, J. Olde, M. Geyer, R. Schnurpfeil, R. Manzke, M. Skibowski, "MBE Growth of Strained In_xGa_{1-x}As on GaAs(001)," *Phys. Stat. Sol. A*, vol. 155, p. 427, 1996.
- [57] J. S. Blakemore, "Semiconducting and other major properties of gallium arsenide," *Journal of Applied Physics*, vol. 53, p. R123, 1982.
- [58] H. Ehrenreich, "Band Structure and Electron Transport of GaAs," *Physical Review*, vol. 120, no. 6, pp. 1951-1963, 1960.
- [59] M. D. Sturge, "Optical Absorption of Gallium Arsenide between 0.6 and 2.75 eV,"

Phys. Rev., vol. 127, no. 3, p. 768, 1962.

- [60] S. M. Sze, *Modern Semiconductor Device Physics.*: John Wiley & Sons, 1998.
- [61] A. W. Bett, F. Dimroth, G. Stollwerck, O. V. Sulima, "III-V compounds for solar cell applications," *Appl. Phys. A*, vol. 69, pp. 119-129, 1999.
- [62] H. K. Zimmermann, "Basics of Optical Emission and Absorption," in *Integrated Silicon Optoelectronics (Part of the book series).*: Springer Verlag, 2010, vol. Springer Series in Optical Sciences, ch. 1, pp. 1-9.
- [63] H. Landolt and R. Börnstein, "Gallium arsenide (GaAs), refractive index, absorption index, absorption coefficients," in *Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds. Part b*, A. M. Hellwege K.-H. Hellwege, Ed.: Springer, 1970, vol. 41A1b, pp. 1-11.
- [64] J. G. Mendoza-Alvarez, F. D. Nunes, N. B. Patel, "Refractive index dependence on free carriers for GaAs," *Journal of Applied Physics*, vol. 51, no. 8, pp. 4365-4367, 1980.
- [65] P. M. Amirtharaj, D. G. Seiler, "Optical Properties of Semiconductors," in *Handbook of Optics Volume II Devices , Measurements and Properties*, David R. Williams, William L. Wolfe Eric W. Van Stryland, Ed. New York, USA, NY: McGraw Hill, 1994, vol. 2, ch. 26, pp. 1-96.
- [66] C. E. Stillmann M. R. Brozel, Ed., *Properties of Gallium Arsenide*, 3rd ed. London, United Kingdom: INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, 1996.
- [67] A. Majumdar, "Electron drift velocity versus electric field in III-V semiconductors," *Solid-State Electronics*, vol. 39, no. 8, pp. 1251-1252, 1996.
- [68] Jerry C. Whitaker, Ed., *The Electronics Handbook*, 2nd ed.: Taylor & Francis Group, 2005.
- [69] K. Brennan, K. Hess, "High field transport in GaAs, InP and InAs," *Solid-State Electronics*, vol. 27, no. 4, pp. 347-357, 1984.
- [70] T.R. Jervis, "Temperature Dependence of the Electron Mobility in GaAs," *Phys. Stat. Sol. (a)*, vol. 53, no. 2, pp. K199-K202, 1979.
- [71] E. E. Mendez, P. J. Price, M. Heiblum, "Temperature dependence of the electron mobility in GaAs/GaAlAs heterostructures," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 45, no. 294, pp. 294-296, 1984.
- [72] S. N. Mohammad, "Unified model for drift velocities of electrons and holes in semiconductors as a function of temperature and electric field," *Solid-State Electronics*, vol. 36, no. 10, pp. 1677-1683, 1993.
- [73] S. N. Mohammad, A. V. Bemis, R. L. Carter, R. B. Renbeck, "Temperature, electric field, and doping dependent mobilities of electrons and holes in semiconductors," *Solid-State Electronics*, vol. 36, no. 2, pp. 1677-1683, 1993.
- [74] J. G. Ruch, G. S. Kino, "Transport Properties of GaAs," *Phys. Rev. 174, 921* , vol. 174, no. 3, pp. 921-931, 1968.
- [75] M. Gershenson, "Radiative Recombination in the III-V Compounds," in *Semiconductors and Semimetals*, L. Wang, C. Jagadish Z. Mi, Ed., 1966, vol. 2, ch. 13, pp. 289-369.
- [76] J. I. Pankove, *Optical Processes in Semiconductors*, 1st ed. Dover, USA: Courier Corporation, 1971.
- [77] W. Jantz, M. Baeumler, Z.M. Wang, J. Windscheif, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*

- (USA), vol. 325, p. 409, 1994.
- [78] H. Hess, E. Betzig, *Semiconductor Characterization*, D.G. Seiler, A.C. Diebold W.M. Bullis, Ed. NY, USA: AIP Press, Woodbury, 1996, p. 395.
- [79] L. Samuleson, J. Lindahl, L. Montelius, M.-E. Pistol, *Inst. Phys. Conf Ser.* UK, 1994, vol. 135, p. 51.
- [80] J. P. Fillard, *Inst. Phys. Conf. Ser.*, 1995, vol. 149, p. 195.
- [81] N. P. Khuchua, L. V. Khvedelidze, M. G. Tigishvili, N. B. Gorev, E. N. Privalov, I. F. Kodzhespirova, "Deep-Level Effects in GaAs Microelectronics: A Review," *Russian Microelectronics*, vol. 32, no. 5, pp. 257-274, 2003.
- [82] B. K. Meyer, "Electron nuclear double resonance (ENDOR) spectroscopy of the EL2 defect in GaAs," *Rev. Phys. Appl.*, vol. 23, no. 5, pp. 809–816, May 1988.
- [83] G. M. Martin, S. Makram-Ebeid, *Deep centers in semiconductors: a state-of-the-art approach*, 2nd ed., S. T. Pantelides, Ed. Philadelphia, Pa., USA: Gordon and Breach Science Publishers, 1992.
- [84] G. A. Baraff, M. Lannoo, "Modelling the electronic structure of EL2," *Revue de Physique Appliquee*, vol. 23, no. 5, pp. 817-831, 1988.
- [85] T. Ikoma, M. Taniguchi, Y. Mochizuki, "Mid-gap electron traps (EL2 family) in GaAs," *Microelectronic Engineering*, vol. 2, no. 1-3, pp. 137-143, October 1984.
- [86] J. B. Gunn, "Microwave oscillations of current in III–V semiconductors," *Solid State Communications*, vol. 1, no. 4, pp. 88-91, September 1963.
- [87] R. V. Zyl, W. Perold, R. Botha, "The Gunn-diode: fundamentals and fabrication," , COMSIG '98. Proceedings of the 1998 South African Symposium on, 1998, pp. 1-7.
- [88] J. S. Blakemore, *Gallium Arsenide*, John S. Blakemore, Ed. New York, USA: American Institute of Physics, 1987.
- [89] M. Rohlffing, P. Krüger, J. Pollmann, "Quasiparticle band-structure calculations for C, Si, Ge, GaAs, and SiC using Gaussian-orbital basis sets.," *Phys. Rev. B. Condens Matter*, vol. 48, no. 24, pp. 17791-17805, 1993.
- [90] D.W. Pashley, "A Historical Review of Epitaxy," in *Epitaxial Growth, part A*. Academic, New York, USA, 1975, p. 2.
- [91] M.L. Frankenheim, *Ann. Phys.*, vol. 37, p. 516, 1836.
- [92] H.J. Scheel, "Historical Introduction," in *Growth, Handbook of Crystal*, D.T.J. Hurle, Ed. North-Holland, Amsterdam, Netherland, 1993, vol. 1a, p. 36.
- [93] L. Royer, *Bull. Soc. Franc. Min.*, vol. 51, p. 7, 1928.
- [94] R. A. Swalin, *Thermodynamics of Solids*, 2nd ed. New York, USA: Wiley, 1972.
- [95] A. M. Alper, *Phase Diagrams: Materials Science and Technology*. New York, USA: Academic, 1970.
- [96] A. Reisman, *Phase Equilibria*. New York, USA: Academic, 1970.
- [97] M. L. Hitchman, K. F. Jensen, *Chemical Vapor Deposition - Principles and Applications*. London, UK: Academic Press, 1993.
- [98] K. F. Jensen, *Transport Phenomena in Vapor Phase Epitaxy Reactors, in Handbook of Crystal Growth*, D.T.J. Hurle, Ed. Amsterdam, Netherland: Elsevier, 1994, vol. 3b, ch. 13.
- [99] R. B. Bird, W. E. Steward, E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*. New York, USA: Wiley, 1960.

- [100] Y. Saito, *Statistical Physics of Crystal Growth*. Singapore: World Scientific, 1996.
- [101] K. Nishioka, J. Harada, A. Sasaki, H. Takei T. Nishinaga, Ed., *Advances in the Understanding of Crystal Growth Mechanisms*. Amsterdam, Netherland: Elsevier , 1997.
- [102] W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond*. San Francisco , USA: Freeman Co., 1980, ch. 7.
- [103] I. V. Markov, *Crystal Growth for Beginners Fundamentals of Nucleation, Crystal Growth and Epitaxy*, 3rd ed.: World Scientific, 2016.
- [104] G. B. Stringfellow, *Rep. Prog. Phys.*, vol. 45, p. 469, 1982.
- [105] R. Kern, G. Le Lay, J.J. Metois, "Basic Mechanisms in the Early Stages of," in *Current Topics in Material Science*, E. Kaldis, Ed. North-Holland, Amsterdam, NetherLand, 1979, vol. 3, p. 131.
- [106] W. Seifert, N. Carlsson, M. Miller, R. Wallenberg, "In-situ growth of quantum dot structures by the Stranski-Krastanow growth mode," *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, vol. 33, no. 4, pp. 423-471, 1996.
- [107] F. Boxberg, J. Tulkki, "Theory of the electronic structure and carrier dynamics of strain-induced (Ga, In)As quantum dots," *Rep. Prog. Phys.*, vol. 70, p. 1425, 2007.
- [108] Md. M. Rahman, Md. N. Hasan, "Compound Semiconductor Epitaxial Growth Techniques," *Int. J. Thin. Fil. Sci. Tec*, vol. 5, no. 1, pp. 45-49, 2016.
- [109] S. Bohátka, *Vacuum Physics and Technology (in Hungarian)*. Budapest, Hungary: Rolando Eötvös Physics Association, 2008.
- [110] P. Frigeri, L. Seravalli, G. Trevisi G, S. Franchi, "Molecular Beam Epitaxy: An Overview," in *Comprehensive Semiconductor Science and Technology*, 3, F. Roberto, K. Hiroshi B. Pallab, Ed. Amsterdam, Netherland, 2011, pp. 480–522.
- [111] C. L. Jaws, "Coefficients for Vapor Pressure Equation," in *Handbook of Vapor Pressure: Volume 4: Inorganic Compounds and Elements*, C. L. Yaws, Ed.: Gulf Professional Publishing, 1995, ch. Appendix C, p. 348.
- [112] H. E. Stanley A. L. Barabási, "Basic phenomena of MBE," in *Fractal Concepts In Surface Growth*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995, ch. 12, pp. 128-230.
- [113] W. Kohn, "Nobel Lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functionals," *Reviews of Modern Physics*, vol. 71, no. 5, pp. 1253-1266, 1999.
- [114] W. Koch, M. C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory, 2nd Edition.*: Wiley-VCH Verlag GmbH, 2001.
- [115] M. Biehl, "Lattice gas models and Kinetic Monte Carlo simulations of epitaxial growth," in *Birkhäuser Basel*, vol. 149, ISNM International Series of Numerical Mathematics, 2004, pp. 3-18.
- [116] T. Volkmann, "Lattice Gas Models and Simulations of Epitaxial Growth," Würzburg, 2004.
- [117] A. Gerisch, A. T. Lawniczak, R. A. Budiman, H. Fukás, H. E. Ruda, "Surface Roughening in Homoepitaxial Growth: A Lattice Gas Cellular Automaton Model," in *Cellular Automata: 6th International Conference on Cellular Automata for Research and Industry, ACRI 2004*. Amsterdam, The Netherlands: Springer-Verlag Heidelberg, 2004, pp. 286-295.
- [118] W. Miller and S. Succi, "Lattice gas modeling of nanowisker growth," *PHYSICAL REVIEW E*, vol. 76, no. 3, pp. 031601-1, 2007.

- [119] Gerisch, A. Lawniczak, A.T. ; Budiman, R.A. ; Ruda, H.E. ; Fuks, H., "Lattice gas cellular automaton modeling of surface roughening in homoepitaxial growth in nanowires," in *Electrical and Computer Engineering, 2003.*: IEEE, 2003, vol. 2, pp. 1413-1416.
- [120] Nemcsics Á., "In-Situ Investigation of the Growth of Low-Dimensional Structures," in *Towards Intelligent Engineering and Information Technology. Studies in Computational Intelligence*, Fodor J., Kacprzyk J. Rudas I.J., Ed. Berlin, Heidelberg: Springer, 2009, pp. 557-572.
- [121] A. Y. Cho, "Morphology of Epitaxial Growth of GaAs by a Molecular Beam Method: The Observation of Surface Structures," *Journal of Applied Physics*, vol. 41, pp. 2780-2786, 1970.
- [122] A. Y. Cho, "GaAs Epitaxy by a Molecular Beam Method: Observations of Surface Structure on the (001) Face," *Journal of Applied Physics*, vol. 42, pp. 2074-2081, 1971.
- [123] J. R. Arthur, "Molecular beam epitaxy," *Surface Science*, vol. 500, no. 1-3, pp. 189-217, March 2002.
- [124] Á. Nemcsics, I. Réti, M. Serényi, G. V. Tényi, R. Hodován, J. Gábor, G. I. Taar, J. Pántos, J. Bozsik, S. Molnár, M. Jankóné Rózsa, "Report of the Installation of MBE Equipment," *Elektronikai Technológia, Mikrotechnika (In Hungarian)*, vol. 1, pp. 33-35, 2009.
- [125] Á. Nemcsics, I. Réti, G. Tényi V., P. Kucsera, L. Tóth, P. Harmat, A. Mieville, M. Csutorás, B. Kupás-Deák, T. Sándor, J. Bozsik, "Technical Conditions for the Formation of Molecular-Beam-Epitaxial Nanostructures," *Gép (In Hungarian)*, vol. 8, pp. 29-32, 2010.
- [126] Kucsera P, Tényi G, Sándor T, Ürmös A, Nemcsics Á, "A molekulásugár-epitaxiás berendezéssel kapcsolatos mechatronikai fejlesztések," in *Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT)*, vol. XXIV., Déva, 2016, pp. 283-286.
- [127] P. Kucsera, G. Tényi, Á. Nemcsics, I. Réti, "Control of the MBE Equipment for Growth of Nano Structures," in *IEEE*, vol. Intelligent Systems and Informatics (SISY), 2010 8th International Symposium on, Subotica, Serbia, 2010, pp. 659-661.
- [128] Réti István, "Nagy hatásfokú félvezető alapú napelemek," SZENT ISTVÁN EGYETEM, Gödöllő, Magyarország, Phd. értekezés 2015.
- [129] Á. Nemcsics, M. Csutorás, G. Tényi, T. Sándor, "Real Time RHEED Evaluation with the Help of Image Processing," , Subotica, Serbia, 2010, pp. 631-633.
- [130] Kucsera P, Sándor T, Tényi V G, Csutorás M, Bátori G, Kupás-Deák B, Réti I, Ürmös A, Nemcsics Á, "Nanostructure Growth Supported by In Situ RHEED Evaluation," *MATERIALS SCIENCE FORUM*, vol. 885, pp. 234-238, 2017.
- [131] Motál György, "A félvezető-alapú mikroelektronikai elemek fő gyártástechnológiai műveletei," in *Mikroelektronika és technológia*, Mojzes Imre, Ed. Budapest, Magyarország: Műegyetemi kiadó, 2005, ch. 3, pp. 34-38.
- [132] Szabó Zsolt, "Litográfias eljárások," in *Mikroelektronika és technológia*. Budapest, Magyarország: Mojzes Imre, 2005, ch. 3.6, pp. 57-66.
- [133] S. Franssila, L. Sainiemi, "Reactive Ion Etching (RIE)," in *Encyclopedia of Microfluidics and Nanofluidics*, D. Li, Ed. USA: Springer US, 2014, pp. 1-13.
- [134] S. Franssila, *Introduction to Microfabrication*, 2nd ed. The Atrium, Southern Gate, Chichester, West Sussex PO19 8SQ , England: John Wiley & Sons Ltd, 2010.

- [135] Illyefalvi-Vitéz Zsolt, "Lézeres technológiák," in *Mikroelektronika és technológia*. Budapest, Magyarország: Műegyetemi kiadó, 2005, ch. 3.10, pp. 83-86.
- [136] E. J. Swenson, C. N. Berglund, "Lasers in microelectronics manufacturing: past, present, and future," in *IEEE*, vol. 90, Proceedings of the IEEE, 2002, pp. 1611 - 1613.
- [137] S. Metev, "Trends of Laser Technology in Microelectronics.," in *Trends in Quantum Electronics*, I. Ursu A. M. Prokhorov, Ed.: Springer, Berlin, Heidelberg, 1986, pp. 517-529.
- [138] S. Jenks, R. Gilmore, "Material Selection for the Quantum Dot Intermediate Band Solar Cell," in *Quantum Dot Solar Cells, Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology*, Zhiming M. Wang Jiang Wu, Ed. New York: Springer New York, 2014, ch. 6, pp. 135-166.
- [139] K. E. Jasim , "Quantum Dots Solar Cells," in *Solar Cells - New Approaches and Reviews.*: InTech, 2015, ch. 11, pp. 303-331.
- [140] A. I. Ekimov, A. A. Onushchenko, "Quantum size effect in three-dimensional microscopic," *JETP Lett.*, vol. 34, pp. 345–349, 1981.
- [141] L. E. Brus, "Electronic wave functions in semiconductor clusters: experiment and theory," *J. Phys. Chem.*, vol. 90, pp. 2555-2560, 1986.
- [142] M. A. Reed, J. N. Randall, R. J. Aggarwal, R. J. Matyi , T. M. Moore, A. E. Wetsel , "Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure," *Phys Rev Lett.*, vol. 60, pp. 535–537, 1988.
- [143] R. D. Schaller, V. I. Klimov, "High Efficiency Carrier Multiplication in PbSe Nanocrystals: Implications for Solar Energy Conversion," *Phys. Rev. Letters*, vol. 92, pp. 186601-186614, 2004.
- [144] M. C. Teich B. E. A. Saleh, "Semiconductor Optics," in *Fundamentals of Photonics*, 2nd ed. New Jersey, USA: Wiley-Interscience, 2007, ch. 16, pp. 627-679.
- [145] T. NODA, T. MANO, M. ELBORG, K. MITSUISHI, K. SAKODA, "Fabrication of a GaAs/AlGaAs Lattice-Matched Quantum Dot Solar Cell," *J. Nonlinear Optic. Phys. Mat.*, vol. 19, no. 4, pp. 681-686, 2010.
- [146] A. Benahmed, A. Aissat, A. Benkouider, J. P. Vilcot, "Modeling and simulation of InAs/GaAs quantum dots for solar cell applications," *Optik - International Journal for Light and Electron Optics*, vol. 127, no. 7, pp. 3531–3534, April 2016.
- [147] S. Kremling, C. Schneider, S. Höfling, M. Kamp, A. Forchel, "AlGaInAs Quantum Dots for Intermediate Band Formation in Solar Cell Devices," in *Quantum Dot Solar Cells, Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology*, Z. Wang J. Wu, Ed. New York: Springer, New York, 2014, ch. 7, pp. 167-186.
- [148] Á. Nemesics, "Growth of GaAs and related materials based nano-structures by droplet epitaxial method," *Recent Res. Devel. Mat. Sci. Engg.*, vol. 4, 2011.
- [149] F. Mezrag, N. Bouarissa, M. Boucenna, "The size-dependent electronic and optical properties of InAs quantum dots," *Optik - International Journal for Light and Electron Optics*, vol. 127, no. 3, pp. 1167-1170, 2016.
- [150] G. Bester, "Electronic excitations in nanostructures: an empirical pseudopotential based approach," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 21, no. 2, p. 255705, 2008.
- [151] P. Harrison, A. Valavanis, *Quantum wells, wires, and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*, 4th ed.: Wiley-Interscience,

2016.

- [152] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, 75th ed.: Springer Series in Solid-State Sciences, 1988.
- [153] Y. Kayanuma, "Quantum-size effects of interacting electrons and holes in semiconductor microcrystals with spherical shape," *Phys. Rev. B*, vol. 38, no. 14-15, p. 9797, 1988.
- [154] A. Aissat, M. E. Bey, R. Bestam, J.P. Vilcot, "Modeling and simulation of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{In}_y\text{As}_{1-y}\text{InP}$ quaternary structure for photovoltaic," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 39, pp. 15287-15291, September 2014.
- [155] A. Luque, A. Martí, C. Stanley, N. López, L. Cuadra, D. Zhou, J. L. Pearson, A. McKee, "General equivalent circuit for intermediate band devices: Potentials, currents and electroluminescence," *J. Appl. Phys.* 96, 903 (2004), vol. 96, no. 1, pp. 903-909, July 2004.
- [156] N. Koguchi, S. Takahashi, T. Chikyow, "New MBE growth method for InSb quantum well boxes," *Journal of Crystal Growth*, pp. 688-692, 1991.
- [157] N. Koguchi, K. Ishige, "Growth of GaAs Epitaxial Microcrystals on an S-Terminated GaAs Substrate by Successive Irradiation of Ga and As Molecular Beams," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 32, no. 5A, p. 2052, 1993.
- [158] T. Chikyow, N. Koguchi, "MBE Growth Method for Pyramid-Shaped GaAs Micro Crystals on ZnSe(001) Surface Using Ga Droplets," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 29/2, no. 11, p. 2093, 1990.
- [159] S. Sanguinetti, N. Koguchi, "Droplet Epitaxy of Nanostructures," in *Molecular Beam Epitaxy: From Research to Mass Production, 1st Edition*. Waltham, MA, USA: Elsevier Science, 2013, pp. 95-111.
- [160] Akos Nemesics, , Dr. Vasilios Stavrou, Ed.: InTech, 2015, ch. 5. [Online]. <https://www.intechopen.com/books/quantum-dots-theory-and-applications/>
- [161] Á. Nemesics, C. Heyn, A. Stemmann, A. Schramm, H. Welsch, W. Hansen, "The RHEED tracking of the droplet epitaxial grown quantum dot and ring structures," *Materials Science and Engineering B*, vol. 165, pp. 118-121, 2009.
- [162] C. Heyn, D. Sonnenberg, and W. Hansen, "Local Droplet Etching: Self-assembled Nanoholes for Quantum Dots and Nanopillars," in *Nanodroplets*. New York: Springer Science, 2013, pp. 363-383.
- [163] T. Mano, T. Noda, M. Yamagiwa, N. Koguchi, "Complex Nanostructures by Pulsed Droplet Epitaxy," *Thin Solid Films*, vol. 515, pp. 531-534, 2006.
- [164] Á. Nemesics, B. Pődör, L. Tóth, J. Balázs, L. Dobos, J. Makai, M. Csutorás, A. Ürmös, "Investigation of MBE grown inverted GaAs quantum dots," *Microelectronics Reliability*, vol. 59, pp. 60-63, 2016.
- [165] Antal Ürmös, Zoltán Farkas, Ákos Nemesics, "Modeling of III-V-based Nanohole Filling," *Acta Polytechnica Hungarica*, vol. 17, no. 2, pp. 91-111, 2017.
- [166] Antal Ürmös, Zoltán Farkas, Ákos Nemesics, "Contribution to the understanding of III-V based nanohole filling," *American Journal of Condensed Matter Physics*, vol. 2, pp. 50-56, 2017.
- [167] Ürmös Antal, Farkas Zoltán, Nemesics Ákos, "A GaAs-alapú nanolyukak feltöltődésének modellezése," in *Kandó Kálmán Villamosmérnöki Kar, Óbudai Egyetem*, Budapest, 2016, pp. 1-19.

- [168] L. Battezzati, A. L. Greer, "The viscosity of liquid metals and alloys," *Acta Metallurgica*, vol. 37, no. 7, pp. 1791-1802, 1989.
- [169] C. J. Seeton, "Viscosity-temperature correlation for liquids," *Tribology Letters*, vol. 22, no. 1, pp. 67-78, 2006.
- [170] K. E. Spells, "The determination of the viscosity of liquid gallium over an extended range of temperature," , vol. 48, Proc. Phys. Soc, 1936, pp. 299-311.
- [171] M. J. Assael, I. J. Armyra, J. Brillo, S. V. Stankus, J. Wu, W. A. Wakeham, "Reference Data for the Density and Viscosity of Liquid Cadmium, Cobalt, Gallium, Indium, Mercury, Silicon, Thallium, and Zinc," *J. Phys. Chem. Ref. Data*, vol. 41, no. 3, pp. 033101-1-17, 2012.
- [172] W. F. Gale, T. C. Totemeier, "General physical properties," in *Smithells Metals Reference Book (Eighth Edition)*.: Elsevier Inc., 2004, pp. 1-45.
- [173] L. C. Yang, "Frequency Factor in Arrhenius Decomposition Kinetics for Insensitive Energetic Materials," in *American Institute of Aeronautics and Astronautics Inc.*, 45th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, 2009, pp. 1-28.
- [174] W.H. Qi, M.P. Wang, "Size and shape dependent melting temperature of metallic nanoparticles," *Materials Chemistry and Physics*, vol. 88, no. 2-3, pp. 280-284, 2004.
- [175] G. A. Mansoori, S. A. Rice, "Confined Fluids: Structure, Properties and Phase Behavior," in *Advances in Chemical Physics, Vol. 156*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons Inc., 2014, pp. 1-97.
- [176] D. Xie , M.P. Wang, W.H. Qia, L.F. Cao, "Thermal stability of indium nanocrystals: A theoretical study," *Materials Chemistry and Physics*, vol. 96, no. 2-3, pp. 418-421, 2006.
- [177] I.N. Bronshtein, K.A. Semendyayev, G. Musiol, H. Mühlig, "Arithmetic," in *Handbook of Mathematics*. Berlin Heidelberg: Springer, 2007, p. 8.
- [178] A. Ürmös, Z. Farkas, M. Farkas, T. Sándor, L. T. Kóczy, Á. Nemcsics, "Application of Self-Organizing Maps for Technological Support of Droplet Epitaxy," *Acta Polytechnica Hungarica*, vol. (in press), 2017.
- [179] Z. Farkas, M. Farkas, T. Sándor, L. T. Kóczy, Á. Nemcsics A. Ürmös, "Fuzzy and Kohonen SOM based classification of different 0D nanostructures," in *IEEE, 2017*, vol. SAMI 2017 : IEEE 15th International Symposium on Applied Machine Intelligence and Informatics, Herlany, Szlovákia, 2017, pp. 000365-000369.
- [180] Antal Ürmös, Zoltán Farkas, Tamás Sándor, Ákos Nemcsics, "Soft-computing based classification and design of quantum dot nanostructures on GaAs substrate," in *IEEE*, vol. IEEE 15th International Symposium on Intelligent Systems and Informatics : SISY 2017, Subotica Serbia, 2017, pp. 123-127.
- [181] A. Urmos, M. Farkas, L. T. Kóczy, A. Nemcsics, "Quantum structure classification by Kohonen Self-Organizing Map and by Fuzzy C-Means algorithm," in *IEEE*, Budapest, Hungary, 2013, pp. 313-318.
- [182] Ürmös Antal, Farkas Zoltán, Farkas Márk, Sándor Tamás, Kóczy T. László, Nemcsics Ákos, "Önszerveződő leképezés alkalmazása csepp epitaxia technológiai támogatására," in *Kandó Kálmán Villamosmérnöki Kar* , Budapest, Magyarország, 2016, pp. 1-19.
- [183] R. Rojas, "Kohonen Networks," in *Neural Networks, A Systematic Introduction*. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 1996, pp. 391-412.

- [184] T. Kohonen, *Self-Organizing Maps*, 3rd ed.: Springer, 2001.
- [185] L. A. Zadeh, "Fuzzy sets," *Information and Control*, vol. 8, no. 3, pp. 338–353, 1965.
- [186] L. T. Kóczy, D. Tikk, *Fuzzy systems*. Budapest, Hungary, 2007.
- [187] C. Heyn, T. Bartsch, S. Sanguinetti, D. Jesson, W. Hansen, "Dynamics of mass transport during nanohole drilling by local droplet etching," *Nanoscale Research Letters*, pp. 10-67, Dec. 2015.
- [188] Ch.Heyn, A.Stemmann, A.Schramm, W.Hansen, "Droplet epitaxy of GaAs quantum dots on (001), vicinal (001), (110), and (311)A GaAs," *Journal of Crystal Growth*, vol. 311, pp. 1825-1827, 2009.
- [189] C. Heyn, A. Stemmann, A. Schramm, H. Welsch, W. Hansen, Á. Nemesics, "Faceting during GaAs quantum dot self-assembly by droplet epitaxy," *Applied Physics Letters*, vol. 90, no. 20, p. 203105, 2007.
- [190] T. Kuroda, T. Mano, T. Ochiai, S. Sanguinetti, K. Sakoda, G. Kido, N. Koguchi, "Optical transitions in quantum ring complexes," *PHYSICAL REVIEW B*, vol. 72, p. 205301, 2005.
- [191] M. Jo, T. Mano, K. Sakoda, "Unstrained GaAs Quantum Dashes Grown on GaAs(001) Substrates by Droplet Epitaxy," *Applied Physics Express*, vol. 3, p. 045502, 2010.
- [192] K.H.P. Tung, H.W. Gao, N. Xiang, "Time evolution of self-assembled GaAs quantum rings grown by droplet epitaxy," *Journal of Crystal Growth*, vol. 371, no. 15, pp. 117-121, 2013.
- [193] Á. Nemesics, A. Stemmann, J. Takács, "To the understanding of the formation of the III–V based droplet epitaxial nanorings," *Microelectronics Reliability*, vol. 52, pp. 430-433, 2012.
- [194] G. Y. Robinson, "Schottky Diodes and Ohmic Contacts for the III-V Semiconductors," in *Physics and Chemistry of III-V Compound Semiconductor Interfaces*. New York and London, USA: Springer, 1985, pp. 73-163.
- [195] L. S. Sheng, "Metal–Semiconductor Contacts," in *Semiconductor Physical Electronics*. New York, USA: Springer, 2006, pp. 284-333.
- [196] A. Piotrowska, A. Guivarch, G. Pelous, "Ohmic contacts to III–V compound semiconductors: A review of fabrication techniques," *Solid-State Electronics*, vol. 26, no. 3, pp. 179-197, 1983.
- [197] D. Kahng, "Au-N-type GaAs Schottky barrier and its varactor application," *Bell Labs Technical Journal*, vol. 43, no. 1, pp. 215-224, 1964.
- [198] R.H. Cox, H. Strack, "Ohmic contacts for GaAs devices," *Solid-State Electronics*, vol. 10, no. 12, pp. 1213-1218, December 1967.
- [199] R. D. Brooks, H. G. Mathes, "Spreading resistance between constant potential surfaces," *Bell Syst. Tech. J.*, vol. 50, pp. 775-784, 1971.
- [200] L. E. Terry; R. W. Wilson, "Metalization systems for Si integrated circuits," *Proc. IEEE*, vol. 57, pp. 1580-1586, 1969.
- [201] E. Kuphal, "Low resistance ohmic contacts to n- and p-InP," *Solid-State Electron.*, vol. 24, pp. 69-78, 1981.
- [202] A. Goetzberger; R. M. Scarlett;, "Research and Investigation of Inverse Epitaxial UHF Power Transistor," Palo Alto, CA : NTIS Distributor, Palo Alto, CA, 1964.
- [203] P. L. Hower, W. W. Hooper, B. R. Cairns, R. D. Fairmen, D. A. Tremere, "The GaAs field-effect transistor," in *Semiconductors and Semimetals*, A. C. Beer R. K.

- Willardson, Ed. New York: Academic Press, 1973, vol. 7, ch. 3, pp. 147-200.
- [204] H. H. Berger, "Models for contacts to planar devices," *Solid-State Electron.*, vol. 15, pp. 145-158, 1972.
- [205] H. H. Berger, "Contact resistance and contact resistivity," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 119, pp. 507-514, 1972.
- [206] A. S. Zoolfakar, N. A. Shahrol, "Modelling of NPN Bipolar Junction Transistor Characteristics Using Gummel Plot Technique," *2010 International Conference on Intelligent Systems, Modelling and Simulation*, pp. 396-400, 2010.
- [207] R. Ivental, L. Green, *Semiconductor Modelling*, 1st ed., 2006.
- [208] G. L. Miller, D. V. Lang, L. C. Kimerling, "Capacitance Transient Spectroscopy," *Annual Review of Materials Science*, pp. 377-448, 1977.
- [209] D. V. Lang, "Deep-level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors," *Journal of Applied Physics*, vol. 45, no. 7, p. 3023, 1974.
- [210] G. Papaioannou, G. Kiriakidis, A. Georgakilas, A. Christou, "Comprehensive Investigation of Traps in GaAs/AlGaAs Heterostructures and Superlattices by DLTS," *MRS Proceedings*, vol. 144, 1988.
- [211] Antal Ürmös, Szilvia Nagy, Imre Mojzes Bernadett Varga, "Fractal properties of gold, paladium and gold-palladium thin films on InP," *Vacuum*, 2009.
- [212] A. Ürmös, Z. Farkas, L. Dobos, Sz. Nagy, Á. Nemcsics, "Some contacting problems of the GaAs-based solar cell," *Acta Polytechnica Hungarica*, 2018.
- [213] T. Vicsek, *Fractal Growth Phenomena*, 2nd ed. Singapore, New Jersey: World Scientific, 1992.
- [214] T. Vicsek, *Fractals in Natural Sciences*, 1st ed., M. Shlesinger, M. Matsushita T. Vicsek, Ed. Singapore, New Jersey: World Scientific, 1994.
- [215] F. Family, T. Vicsek, *Dynamics of Fractal Surfaces*, F. Family and T. Vicsek, Ed. Singapore, New Jersey: World Scientific, 1991.
- [216] L. Dobos ; I. Mojzes ; M. Schusztter, "Fractal behaviour of in situ heat treated metal-compound semiconductor structures," in *IEEE*, 1997, pp. 229-232.
- [217] M. Schusztter, Z. Bodnár, L. Dobos, I. Mojzes, "Surface fractal phenomena observed in the investigation of compound semiconductors," *Fizikai Szemle (In Hungarian)*, vol. LI, p. 80, Marcius 2001.
- [218] B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*. New York: W. H. Freeman, 1982.
- [219] F. Hausdorff, "Dimension und äusseres Mass," *Mathematische Annalen*, vol. 79, no. 1, pp. 157-179, 1918.
- [220] J. Pipek, I. Varga, "Mathematical characterization and shape analysis of localized, fractal, and complex distributions in extended systems," *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 51, no. 6, pp. 539-553, 1994.
- [221] J. Pipek, I. Varga, "Universal classification scheme for the spatial-localization properties of one-particle states in finite d-dimensional systems," *Phys. Rev. A*, vol. 46, p. 3148, 1992.
- [222] I. Varga, J. Pipek, "Rényi entropies characterizing the shape and the extension of the phase space representation of quantum wave functions in disordered systems," *Phys. Rev. E.*, vol. 68, p. 026202, 2003.
- [223] I. Varga, J. Pipek, "The generalized localization lengths in one-dimensional systems

- with correlated disorder," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 10, no. 2, pp. 305-331, 1998.
- [224] J. Pipek, I. Varga, "Scaling behavior of energy functionals of highly complex electron distributions," *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 70, no. 1, pp. 125-131, 1998.
- [225] A. Bonyár, L. M. Molnár, G. Harsányi, "Localization factor: A new parameter for the quantitative characterization of surface structure with atomic force microscopy (AFM)," *Micron*, vol. 43, no. 2-3, pp. 305-310, 2012.
- [226] Sz. Nagy, I. Mojzes L. M. Molnár, "Structural entropy in detecting background patterns of AFM images," *Vacuum*, vol. 84, pp. 179-183, 2009.
- [227] Shuji Nakamura, "Background Story of the Invention of Efficient Blue InGaN Light Emitting Diodes," Aula Magna, Stockholm University, Sweden, 2014.
- [228] G. E. Weng, A. K. Ling, X. Q. Lv, J. Y. Zhang and B. P. Zhang, "III-Nitride-Based Quantum Dots and their Optoelectronic Applications," *Nano-Micro Lett.* 3 (3), pp. 200-207, 2011.
- [229] S. Tomić, "Theory of Quantum Dot Arrays for Solar Cell Devices," in *Quantum Dot Solar Cells, Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology*, Z. M. Wang J. Wu, Ed. New York: Springer New York, 2014, ch. 5, pp. 113-134.