

GaAs hordozón növesztett nano-szerkezetek modellezése

Farkas Zoltán¹, Ürmös Antal¹, Takács Jenő², Nemcsics Ákos¹

¹Mikroelektronikai és Technológiai Intézet, Óbudai Egyetem, 1084 Budapest, Tavaszmező utca 17. Budapest, Magyarország

²Department of Engineering Science, University of Oxford, Parks Road, Oxford OX1 3PJ, Oxford, United Kingdom

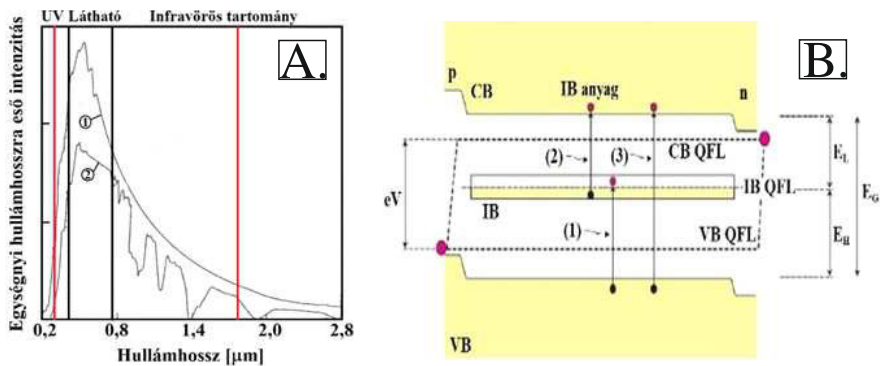
e-mail: urmos.antal@kvk.uni-obuda.hu

Kivonat: Jelen cikkben az önszerveződés útján kialakuló GaAs-alapú nano-szerkezetek alakjának matematikai leírásával és a valós formához való függvényillesztéssel foglalkozunk. Az alkalmazás szempontjából rendkívül fontos, hogy adott tulajdonságú (geometriájú és felületi sűrűségű) nano-szerkezeteket tudjunk tervezni és előállítani. Cikkünkben először röviden bemutatjuk a témában végzett kutatásaink előzményeit. Ezt követően vegyület-félvezető hordozón (AlGaAs ill. GaAs), csepp-epitaxia útján, önszerveződéssel kialakuló nulla-dimenziós nano-struktúrák matematikai leírását mutatjuk be, mely függvényillesztés koefficienseinek meghatározására egyedi szoftvert készítettünk.

Keywords: nanoszerkezet; önszerveződés; csepp-epitaxia; GaAs;

1 Bevezetés

Ismeretes, hogy az önszerveződés útján kialakuló nano-szerkezetek segítségével újfajta félvezető eszközök készíthetők (pl. kvantum-pont sejtautomaták [1] [2]), vagy a jelenleg már alkalmazott eszközök paramétereit is jelentős mértékben javítani lehet ezekkel a nano-szerkezetekkel. Utóbbira egy jó péla a nagyhatásfokú napelemek [3] [4]. Az egyszerű pn-átmenetes GaAs alapú napelemek hatásfoka maximum 30% lehet a Schockley-Queisser korlát következtében [5]. További jelentős mértékű hatásfok-növekedés, pl. III-V-alapú nano-szerkezeteket tartalmazó struktúrával érhető el. Ezen nano-szerkezetek alkalmazásával a napelemek, a napsugárzás spektrumából egy szélesebb hullámhossz-tartományt képesek hasznosítani (1/A. ábra).

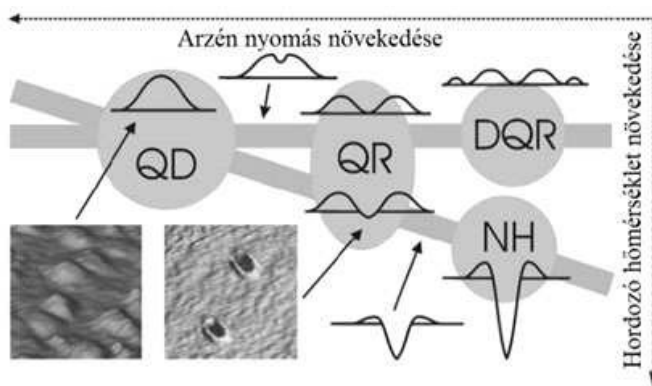


1. ábra

(A) A napsugárzás spektrumából hasznosított hullámhossz-tartomány, hagyományos c-Si napelem (fekete vonalak közötti tartomány) és GaAs-alapú nano-struktúrák napelem esetén (piros vonalak közötti tartomány). (B) Egy (IBQD - Intermediate Band Quantum Dot) napelem sávábrája [4].

A tiltott sávban közbenső kvantum-pont rétegeket hozunk létre (IBQD - Intermediate Band Quantum Dot) [4]. E kvantum-pont rétegek hatására a napelem nemcsak a (3) energiájú fotonokat tudja abszorbeálni, hanem az (1) és a (2) energiájú fotonokat is (lásd. 1/B ábra). A szélesebb hasznosuló spektrum-tartomány következtében e napelemek hatásfoka akár 60-80% is lehet.

Ezeket a nano-szerkezeteket a molekulásugár-epitaxia (molecular-beam epitaxy, MBE) egy változatával, az ún. csepp-epitaxiával (droplet-epitaxy, DE) lehet előállítani. Az eljárás működésének a lényege, hogy atom vagy molekulásugarat irányítunk ultranagy-vákuum (UHV) környezetben egy fűthető mintatartóra. Az atomok a minta felületén kondenzálódnak. A csepp-epitaxia elgondolását Koguchi és munkatársai dolgozták ki először az 1990-es évek elején [6] [7] [8] [9]. A technológia lényege, hogy az első lépésben a hordozóra (pl. GaAs-ra) egy a III-főcsoportból származó fém (pl. Ga-ot) választunk le. A második lépésben a minta hőmérsékletének és a háttérben lévő V-főcsoportból származó maradékgáz (pl. As) nyomásának a függvényében különféle nano-struktúrák alakulnak ki a cseppesedő Ga kristályosodásának során. Ezek a struktúrák a technológia függvényében nemcsak a konvencionális kvantum-pont-formák, de kvantum-gyűrűk és további egzotikus nano-méretű formák lehetnek (2. ábra).



2. ábra

Csepp-epitaxia során kialakuló nanoszerkezetek, különböző növesztési paraméterek esetén [6].

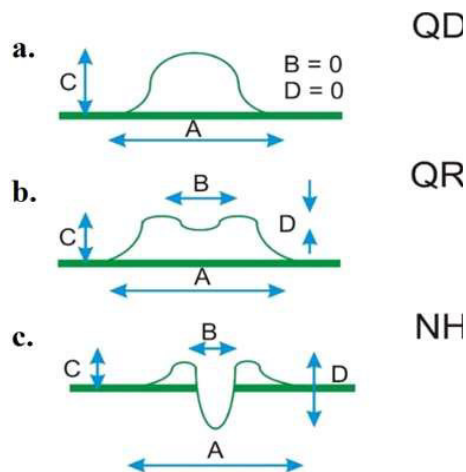
A csepp-epitaxia segítségével félvezető eszközök például nagyhatásfokú napelemek, kvantum-pont-sejtautomaták [10] vagy egyéb áramkörök, például memóriaelemek [11] is készíthetők.

A újszerű elektronikus eszközök készítéséhez kontrollált méretű és sűrűségű nanostruktúrákra van szükség [12] [13] [14] [15] [16]. A célunk egy eljárást kidolgozni a struktúrához tartozó technológia meghatározására, azaz egy kívánt struktúra milyen paraméterek (pl. Ga részecskeáram, As nyomás, hordozó hőmérséklete stb.) esetén formálódik. Ehhez először ezen nanoszerkezetek formájának analitikus leírásával és a megvalósult alakok illeszkedésének vizsgálatával foglalkozunk.

2 Kutatásaink előzményei

A különféle nulla-dimenziós nano-szerkezetek leírása nem egyszerű feladat, mivel közöttük az átmenet folyamatos, tehát nem létezik éles határ, ami a különféle nano-szerkezetek osztályokat egyértelműen elkülönítené. Első közelítésben ezen nano-szerkezetek osztályozásának kvantitatívva tételéhez egy ún. formatényezőt vezettük be. A formatényező segítségével az egyes nano-szerkezetekhez egy leíró vektort rendeltünk. E formatényezőt Kohonen leképezéssel [17] és fuzzy következtető rendszer alkalmazásával [18] [19] is meghatároztuk. A nano-szerkezetek alakját négy geometriai adattal írjuk le, melyek a 3. ábrán láthatók. A geometriai paraméterek értelmezése a következő: Az A méret a nano-stuktúra alapkörének az átmérője, amit következő módon defináltuk:

$$A = A(d) = \begin{cases} d, & \text{ha } C \geq 0,1 \text{ nm} \\ 0, & \text{máshol} \end{cases} \quad (1)$$



3. ábra

A nulla-dimenziós nano-szerkezetek geometriai paraméterei kvantum-pont (a.), kvantum-gyűrű (b.) és nano-lyuk (c.) esetén [12].

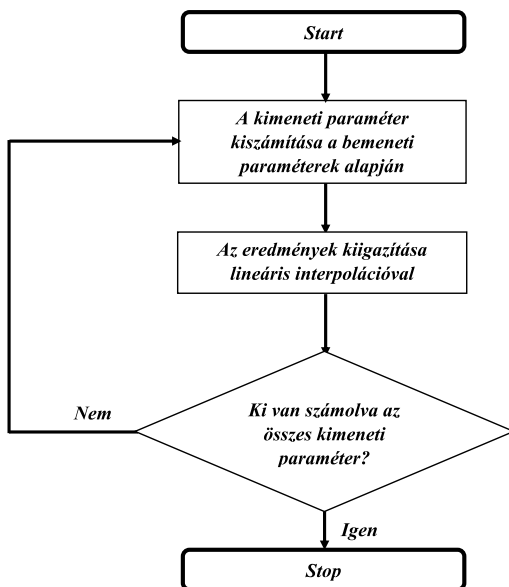
A B méret a nano-szerkezet belső körének az átmérője, a C méret a nano-szerkezet legfelső pontjának és a hordozónak a távolsága. A D méret a nano-szerkezet legfelső pontjának és a lokális vagy globális minimumának a távolsága, abszolút értékben.

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 kvantum-pontnak, kvantum-gyűrűnek vagy nano-lyuknak [12] [13] [15].

A nulla-dimenziós nano-szerkezetek fuzzy-alapú osztályozásáról egy korábbi cikkben [13] már beszámoltunk. Első közelítésben feltételezzük, hogy a nano-struktúrák fejlődése a hordozó felületét tekintve izotróp. Ez azt jelenti, hogy a méretek hordozó síkjával párhuzamosan (B -méret) és hordozó síkjára merőlegesen (C és D -méretek) ugyanolyan arányban változnak. Emiatt a korábbi munkában az osztályozásnál csak a C és a D paraméterek viszonyát vizsgáltuk meg. Egy további modellben már figyelembe vettük a B , C és D -méretek változását is [14]. A fuzzy-alapú osztályozásnál a formatényező egy 0 és 1 közötti szám.

Megvizsgáltuk ugyanezen nulla-dimenziós nano-szerkezetek fuzzy-alapú tervezésének lehetőségét is. A továbbiakban bemeneti paraméterek alatt a geometriai méreteket és a nano-szerkezetek felületi sűrűségét értjük, míg tervezési

esetben a kimeneti paraméterek a hordozó hőmérséklete, Ga fluxusa, As háttérnyomása, hőkezelés ideje és a hőmérséklete. Megjegyzendő, hogy technológiai szemszögből nézve a kimeneti és a bemeneti paraméterek felosztása fordított. A kimeneti paraméterek kiszámításának menete a 4. ábrán látható. A geometriai adatokat és a felületi sűrűség értékeket több szerző munkáiból [20] [21] [22] [23] [24] [25] vettük. A modellt valós technológiai adatokkal ellenőriztük és jó egyezést adtak [14].



4. ábra

A kimeneti paraméterek kiszámításának folyamatábrája.

3 Új modell a nanoszerkezetek leírására

A cikkben tárgyalt új modellben szétválasztottuk a nulladimenziós nanoszerkezetek geometriai paramétereinek és felületi sűrűségének leírását. Itt csak a nano-szerkezetek geometriájának a leírásával foglalkozunk. Ebben a modellben 2x2 paramétert (a_1 , a_2 , α_1 , α_2) tartalmazó hiperbolikus függvénycsaláddal írjuk le a nano-szerkezetek alakját [26]. Ez a függvény két részre osztható fel: egy kvantum-pontot és egy nano-lyukat leíró részre. A kvantum-pontot leíró rész kifejezése a következő:

$$y_{QD} = a_1 * \operatorname{sech}(\alpha_1 * x)^2, \quad (2)$$

ahol az a_1 paraméter a nano-szerkezet magasságával kapcsolatos, az α_1 paraméter

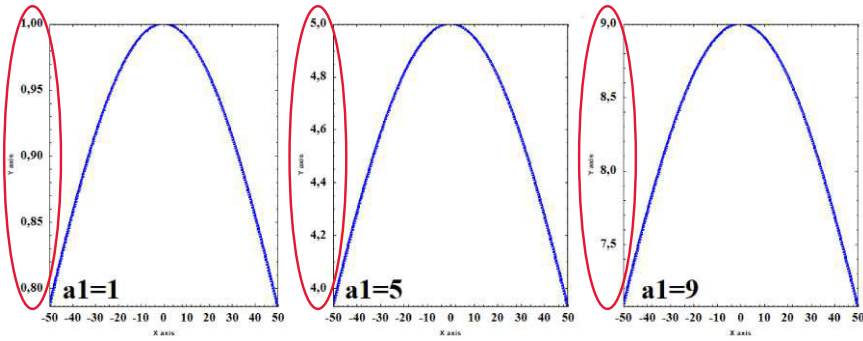
egy karcsúsággal kapcsolatos tényező. A nano-lyukat leíró rész kifejezése a következő:

$$y_{NH} = 2 * a_2 * \text{sech}(\alpha_2 * x)^4 + 4 * a_2 * \text{sech}(\alpha_2 * x)^2 * \tanh(\alpha_2 * x)^2 \quad (3)$$

ahol az a_2 paraméter a nano-szerkezet mélységével kapcsolatos, az α_2 paraméter szintén egy karcsúsági tényező. A nano-szerkezet eredő alakját az (2)-es és a (3)-as kifejezések összege adja:

$$Y = y_{QD} - y_{NH} \quad (4)$$

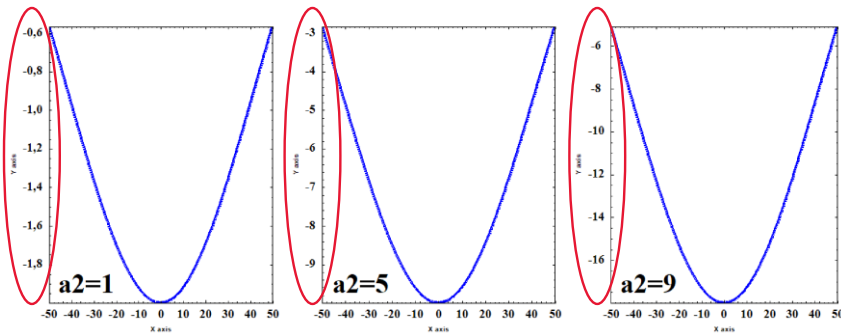
A következő ábrákon az a_1 , az a_2 paraméterek változását láthatjuk. Ez a két paraméter az adott görbe magasságát befolyásolja. Az a_1 paraméter esetében az $\alpha_1 = 0.1$, az $a_2 = 0$ és az $\alpha_2 = 0$ változatlanok (5. ábra).



5. ábra

Az a_1 paraméter változása.

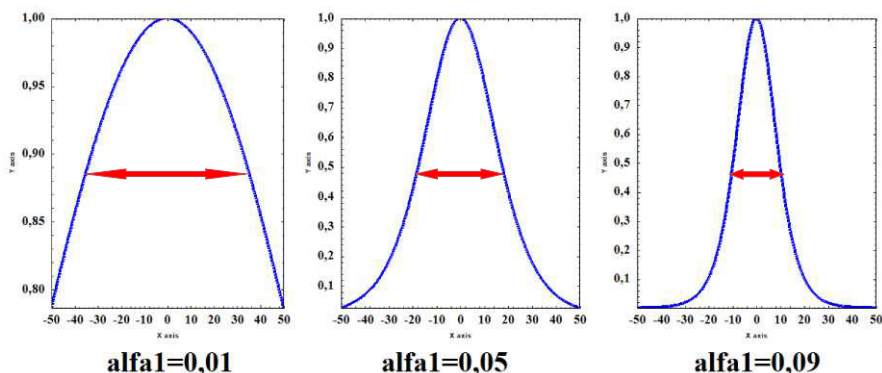
Az a_2 paraméter esetében az $a_1 = 0$, az $\alpha_1 = 0$, és az $\alpha_2 = 0.01$ változatlanok (6. ábra).



6. ábra

Az a_2 paraméter változása.

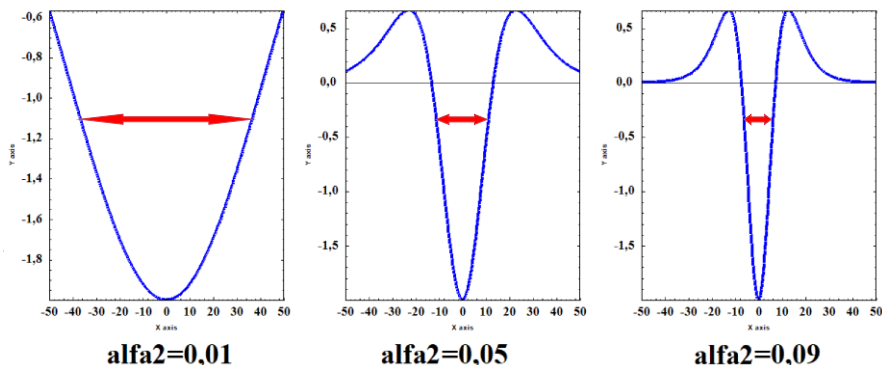
A következő ábrákon az α_1 , az α_2 paraméterek változását láthatjuk. Ez a két paraméter az adott görbe karcsúságát jellemzi. Az α_1 paraméter esetében az $a_1 = 1$, az $a_2 = 0$, és az $\alpha_2 = 0$ változatlanok (7. ábra).



7. ábra

Az α_1 paraméter változása.

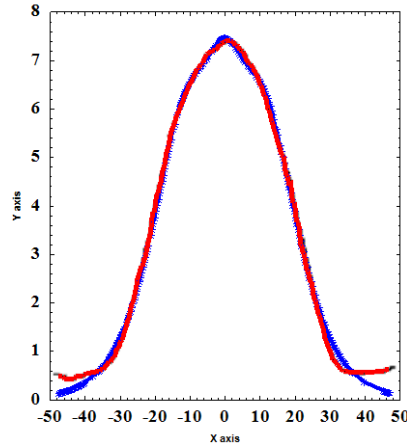
Az α_2 paraméter esetében az $a_1 = 0$, az $a_2 = 1$, és az $\alpha_1 = 0$ változatlanok (8. ábra). A következő két ábrán a görbeillesztés eredménye látható tipikus kvantum-pont és nano-lyuk esetére. A görbéket a [27] [28] [29] [30] [31] [32] [33] cikkekben található atomerő-mikroszkópos (Atomic Force Microscopy, AFM) keresztmetszeti adatokra illesztettük. Mindkét esetben a piros színnel jelölt görbe az eredeti digitalizált görbe, míg a kék színnel jelölt görbe az illesztett görbe. Az ábrák (001)-es orientációjú GaAs felületen készültek, [-110] kristálytani irányból nézve.



8. ábra

Az α_2 paraméter változása.

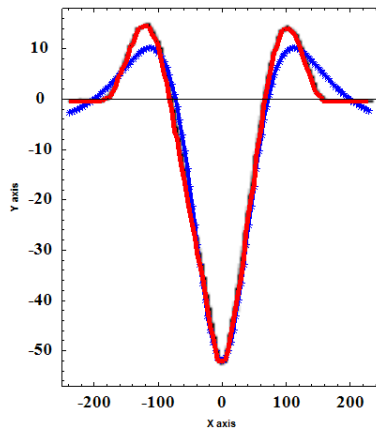
Kvantum-pont esetén a következő illesztési paraméterek adódtak (9. ábra): $a_1 = 16,8933$, $\alpha_1 = 0,1067$, $a_2 = 4,7188$, $\alpha_2 = 0,067$. Az illesztés jósága a következő: SSE: 5,175, R^2 : 0,996, Adjusted R^2 : 0,996, RMSE: 0,1608.



9. ábra

A görbeillesztés eredménye kvantum pont esetén. A piros színnel jelölt görbe az eredeti digitalizált görbe, míg a kék színnel jelölt görbe az illesztett görbe.

Nano-lyuk esetén a következő illesztési paraméterek adódtak (10. ábra): $a_1 = -5,4413$, $\alpha_1 = 3,02 \cdot 10^{-7}$, $a_2 = 23,3132$, $\alpha_2 = 0,0102$. Az illesztés jósága a következő: SSE: 1103,3156, R^2 : 0,9732, Adjusted R^2 : 0,973, RMSE: 3,0708.



10. ábra

A görbeillesztés eredménye nanolyuk esetén. A piros színnel jelölt görbe az eredeti digitalizált görbe, míg a kék színnel jelölt görbe az illesztett görbe.

Konklúzió

Az önszerveződés útján kialakuló nano-struktúrák segítségével a félvezető-eszközök paramétereit jelentős mértékben javítani lehet. Emiatt fontos, hogy adott tulajdonságú (geometriájú és felületi sűrűségű) nano-szerkezeteket tudjunk tervezni és előállítani. Sikerült jól egyező illesztést készíteni a hiperbolikus függvényen alapuló leírásra, mely függvény koefficienseinek meghatározására egyedi szoftvert készítettünk. Következő kutatási tervünk technológiai paraméterek meghatározása illetve hozzárendelése az illesztési paraméterek alapján. További célunk az ismertetett függvény pontjainak a meghatározása a nano-szerkezetek geometriai paramétereire alapján.

Irodalomjegyzék

- [1] G.L. Snider, A.O. Orlov, I. Amlani, X. Zuo, G.H. Bernstein, C.S. Lent, J.L. Merz and W. Porod, "Quantum Cellular Automata," *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, vol. 17, pp. 1394-1398, 1999.
- [2] G.L. Snider, A.O. Orlov, I. Amlani, X. Zuo, G.H. Bernstein, C.S. Lent, J.L. Merz and W. Porod, "Quantum-dot cellular automata: Review and recent experiments (invited)," *Journal of Applied Physics*, vol. 85, pp. 4283-4285, 1999.
- [3] K.W.J. Barnham, I. Ballard, J.P. Connolly, N.J. Ekins-Daukes, B.G. Klufthinger, "Quantum well solar cells," *Physica E*, vol. 14, pp. 27-36, 2002.
- [4] A. Luque, A. Martí, C. Stanley, "Understanding intermediate-band solar cells," *Nature Photonics*, vol. 6, pp. 146–152, 2012.
- [5] 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, 1961.
- [6] Á. Nemcsics, "Growth of GaAs and related materials based nano-structures by droplet epitaxial method," *Recent Res. Devel. Mat. Sci. Eng.*, vol. 4, 2011.
- [7] N. Koguchi, S. Takahashi, T. Chikyow, "New MBE growth method for InSb quantum well boxes," *J. of Crystal Growth*, pp. 688-692, 1991.
- [8] 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, p. 2052, 1993.
- [9] S. Sanguinetti, N. Koguchi, "Droplet Epitaxy of Nanostructures," in *Molecular Beam Epitaxy: From Research to Mass Production*, 1st Edition. Waltham, MA, USA: Elsevier Science, pp. 95-111, 2013.

- [10] Nemcsics Akos, Urmos Antal, Toth Lajos, "Droplet Epitaxy and its Possibilities in Nano-electronics," in IEEE, vol. International Symposium on Next-Generation Electronics (ISNE 2018), Taipei, Taiwan, pp. 122-124, 2018.
- [11] S. Panyakeow, "Quantum Nanostructures by Droplet Epitaxy," Engineering Journal, vol. 13, pp. 51-56, 2009.
- [12] 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.
- [13] 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, pp. 000365-000369, 2017.
- [14] 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, pp. 123-127, 2017.
- [15] 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, pp. 313-318, 2013.
- [16] 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, pp. 1-19, 2016.
- [17] T. Kohonen, Self-Organizing Maps, 3rd ed.: Springer, 2001.
- [18] L. A. Zadeh, "Fuzzy sets," Information and Control, vol. 8, pp. 338–353, 1965.
- [19] L. T. Kóczy, D. Tikk, Fuzzy systems. Budapest, Hungary, 2007.
- [20] Á. Nemcsics, 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.
- [21] Á. Nemcsics, 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.
- [22] Á. Nemcsics, 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.

- [23] C. Heyn, D. Sonnenberg, and W. Hansen, "Local Droplet Etching: Self-assembled Nanoholes for Quantum Dots and Nanopillars," in *Nanodroplets*. New York: Springer Science, pp. 363-383, 2013.
- [24] 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, 2015.
- [25] 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.
- [26] J. Takács, Á. Nemesics, "Scientific Review," vol. 4, no. pp. 74-79, 2018.
- [27] C. Heyn, A. Stemann, A. Schramm, H. Welsch, W. Hansen, Á. Nemesics, "Faceting during GaAs quantum dot self-assembly by droplet epitaxy," *Applied Physics Letters*, vol. 90, p. 203105, 2007.
- [28] Ákos Nemesics, "On the shape formation of the droplet epitaxial quantum dots," *Microelectronics Reliability*, vol. 56, pp. 73-77, 2016.
- [29] Á. Nemesics, L. Tóth, L. Dobos, Ch. Heyn, A. Stemann, A. Schramm, H. Welsch, W. Hansen, "Composition of the "GaAs" quantum dot, grown by droplet epitaxy," *Superlattices and Microstructures*, vol. 48, pp. 351-357, 2010.
- [30] A. Stemann, Ch. Heyn, T. Köppen, T. Kipp, and W. Hansen, "Local droplet etching of nanoholes and rings on GaAs and AlGaAs surfaces," *Applied Physics Letters*, vol. 93, p. 123108, 2008.
- [31] Alvason Zhenhua Li, Zhiming M. Wang, Jiang Wu, Yanze Xie, Kim A. Sablon and Gregory J. Salamo, "Evolution of Holed Nanostructures on GaAs (001)," *Cryst. Growth Des.*, vol. 9, pp. 2941–2943, 2009.
- [32] Ch. Heyn, A. Stemann, R. Eiselt, W. Hansen, "Influence of Ga coverage and As pressure on local droplet etching of nanoholes and quantum rings," *Journal of Applied Physics*, vol. 105, p. 054316, 2009.
- [33] Ch. Heyn, A. Stemann, W. Hansen, "Nanohole formation on AlGaAs surfaces by local droplet etching with gallium," *Journal of Crystal Growth*, vol. 311, pp. 1839-1842, 2009.