

Epitaxiás nano-struktúrák térfogatmeghatározásának néhány aspektusa

Zoltán Farkas, Antal Ürmös, Ákos Nemcsics

Óbudai Egyetem, Mikroelektronikai és Technológiai Intézet, 1084 Budapest,
Tavaszmező utca 17. farkas.zoltan@uni-obuda.hu, urmos.antal@uni-obuda.hu,
nemcsics.akos@uni-obuda.hu.

Abstract: Jelen munkában az epitaxiálisan növesztett nano-struktúrák térfogatmeghatározás néhány vonatkozását tárgyaljuk. A csepp-epitaxia lehetővé teszi a változatos formájú és térfogatú nanostruktúrák előállítását. Ezt a változatos formavilágot írjuk le hiperbolikus függvényekkel. A nano-struktúrák folyonos-átmenetű leírását valósítjuk meg állandó térfogat feltétel mellett a függvény-paraméter-függvények meghatározásával. Ez lehetőséget ad számunkra a térfogat analitikus meghatározására. A dolgozat végén a hiperbolikus burkológörbéjű nano-objektumok térfogatmeghatározásának néhány aspektusát említjük meg.

Keywords: epitaxia, nano-struktúrák, napelem

1 Bevezetés

Az alacsony-dimenziós rendszerek, ezen belül a zéró-dimenziós (0D) nano-strutúrák a félvezető-tudományi kutatások és a félvezetőeszköz-fejlesztések homlokterében állnak. Ezen alacsony-dimenziós struktúrák félvezetőeszközökben való alkalmazása a tulajdonságokat drasztikusan javítja. Két-dimenziós (2D) rendszer a tranzistorban megnöveli a működési frekvenciát. Optikai eszközökben a hatásfokot. 2D nélküli LED-et már nem is lehet kapni. A napelem hatásfokát a 2D-ből álló szuperrács 40 % fölé emeli [1]. Újabb lépcső az epitaxiális 0D struktúrák. A napelemekben ez 60-80 %-os hatásfok-növekedést eredményez. De megoldás lehet a számítástechnika jelen problémáira is [2].

A 0D epitaxiás nano-struktúrák előállításának ipari méretekben alkalmazott módja s feszültség-indukált eljárás. Ennek a módszernek mind anyagválasztás mind pedig az eredményül kapott struktúrát illetően korlátai vannak. E módszer alternatívája a csepp-epitaxia. E módszer lehetővé teszi változatos formájú, felületi sűrűségű és térfogatú nano-objektumok előállítását [3].

Az eszközökben való alkalmazást illetően alapvető fontosságú, hogy a felületen megjelenő nano-struktúrák alakját és térfogatát meg tudjuk határozni. Ezek mind elektromos-struktúra-meghatározás, mind pedig technológiai szempontból fontosak. A változatos formát összetett hiperbolikus függvényekkel írhatjuk le [4]. Dolgozatunkban bemutatjuk a struktúrák átmeneteinek állandó térfogat feltétel mellett meghatározott függvény-paraméter függvényeit. A dolgozat végén a térfogati integrálás néhány aspektusát tárgyaljuk.

2 A változatos nano-struktúra formák leírása

A korábbi munkáinkban a nano-struktúrák geometriai jellemzésére négy paramétert (A , B , C , D) használtunk [5]. A paraméterek definíciója az 1. ábrán látható. Első közelítésben a nano-struktúrákat körszimmetrikusnak vesszük, így keresztmetszetük által leírhatóak.

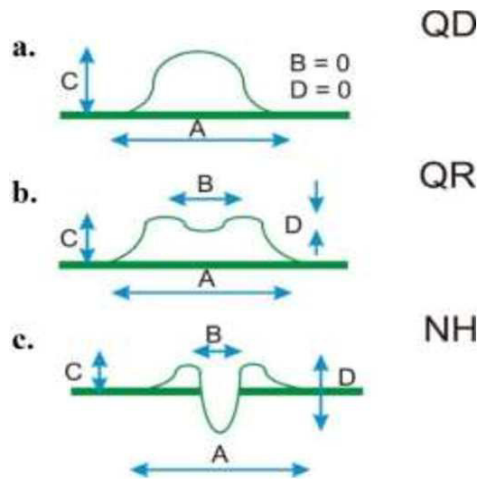


Figure 1

Az epitaxiális nano-struktúrák geometriai paraméterei [5].

A számításainkban a nano-struktúrák geometriai paraméterei helyett összetett hiperbolikus függvény paramétereket használtunk [4]. A hiperbolikus függvényekkel ill. paramétereivel nem csak a jellemző ill. szinguláris pontok távolságait adjuk meg hanem a struktúra alakját is megadjuk. A számításainkban használt összetett hiperbolikus függvények az alábbiakban látható.

$$y = A_1 * \operatorname{sech}^2(\alpha_1 x) - 2A_2 * \operatorname{sech}^4(\alpha_2 x) + 4 * A_2 * \operatorname{sech}^2(\alpha_2 x) * \tanh^2(\alpha_2 x)$$

$$y = A_1 \left(\frac{2}{e^{\alpha_1 x} + e^{-\alpha_1 x}} \right)^2 - 2A_2 \left(\frac{2}{e^{\alpha_2 x} + e^{-\alpha_2 x}} \right)^4 + 4A_2 \frac{(e^{\alpha_2 x} - e^{-\alpha_2 x})^2}{(e^{\alpha_2 x} + e^{-\alpha_2 x})^4}$$

A függvény négy paraméterét (A_1 , A_2 , α_1 , α_2) változtatva azt tűztük ki, hogy a kvantumpont – kvantumgyűrű – nanolyuk (QD - QR - NH) spektrumon keresztülhaladva olyan struktúrák keresztmetszetét kapjuk meg, amelyek magassága 7 egység, alapkörének sugara pedig 30 egység. A magasság 0 szinthez képest egyértelműen meghatározható, viszont a szóban forgó hiperbolikus függvényre jellemző, hogy semmilyen véges x értékre nem ad pontosan 0-t. Így ha ragaszkodunk az alapkör azon definíciójához, hogy az alapkör annak a tartománynak az átmérője, ahol a függvény 0, akkor a legtöbb esetben végtelent kapunk erre a mennyiségre. Ezért az általános műszaki (matematikai) gyakorlatnak megfelelően az alapkör definíciójaként azt választottuk, hogy „annak a tartománynak az átmérője, ahol a struktúra magassága nagyobb, mint a magasság 5%-a”. A modellünk szerint egy egységnek egy nanométert feleltetünk meg.

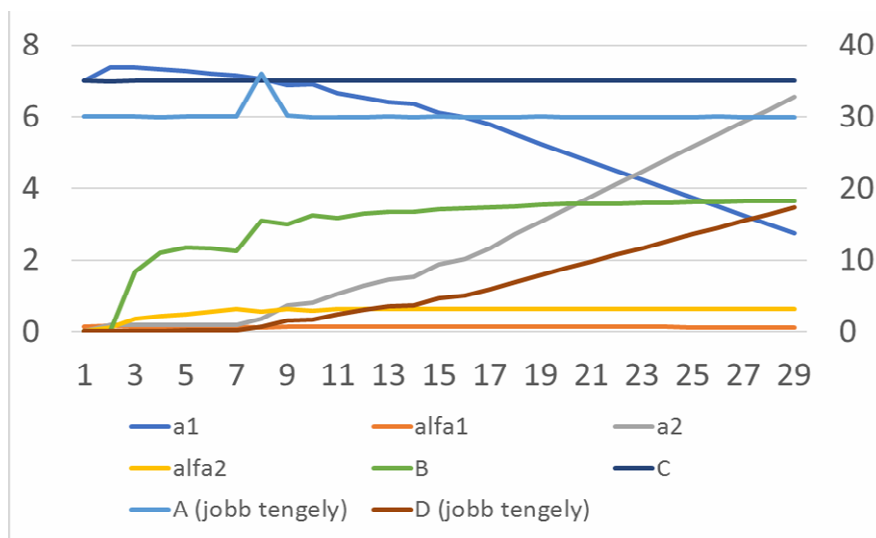
3 A függvény-paraméter függvények meghatározása

Négy kísérletsorozatot végeztünk, mindegyikhez mellékeljük a beállított hiperbolikus paraméterek négy oszlopát, az eredményül kapott geometriai paraméterek négy oszlopát tartalmazó táblázatot.

A táblázatból látható, hogy az a_1 paraméter lassan csökken, az a_2 paraméter lassan nő, az α_1 és α_2 , eltekintve a kezdeti (QD, alacsony D paraméterű QR) ingadozásoktól, gyakorlatilag változatlan. A geometriai A paraméter (alapkör átmérő) és a C paraméter (struktúramagasság) a fentieknek megfelelően állandó, hiszen ez volt a cél a hiperbolikus paraméterek beállításánál. A B paraméter (gyűrűátmérő) lassan nő, de nagyjából 3 nm körül alakul, a D paraméter (gyűrű illetve nanolyuk középső „bemélyedése” a struktúra legmagasabb pontjához képest) lassan nő.

1. Táblázat

hiperbolic parameters				geometric parameters			
a1	alfa1	a2	alfa2	A (jobb tengely)	B	C	D (jobb tengely)
7.002	0.145	0	dont care	30.04	-	7.002	-
7.37	0.157	0.195	0.107	30.04	0	6.98	0
7.375	0.146	0.195	0.357	30.02	1.68	6.999	0.014
7.32	0.147	0.195	0.425	29.94	2.2	6.996	0.066
7.27	0.146	0.195	0.495	30.08	2.34	7.01	0.13
7.21	0.146	0.195	0.56	30.04	2.32	7.002	0.182
7.165	0.146	0.195	0.624	30	2.26	7	0.225
7.065	0.121	0.37	0.566	36.06	3.1	7.005	0.68
6.871	0.144	0.74	0.644	30.12	3	7.001	1.61
6.896	0.145	0.811	0.588	29.92	3.26	7.002	1.728
6.666	0.144	1.066	0.636	29.9	3.18	6.999	2.465
6.526	0.143	1.281	0.625	29.96	3.3	6.995	3.031
6.411	0.142	1.451	0.625	30.04	3.34	7	3.491
6.351	0.142	1.531	0.625	29.98	3.36	6.995	3.706
6.111	0.14	1.886	0.625	30.1	3.42	7.009	4.67
5.996	0.14	2.031	0.625	29.98	3.44	6.995	5.061
5.791	0.139	2.326	0.625	29.92	3.46	7	5.861
5.506	0.137	2.731	0.625	29.98	3.5	7.008	6.964
5.251	0.135	3.081	0.625	30.06	3.54	7.007	7.918
5.001	0.134	3.426	0.625	29.9	3.56	7.004	8.855
4.75	0.132	3.776	0.625	29.96	3.56	7.007	9.809
4.5	0.13	4.121	0.625	29.98	3.58	7.006	10.748
4.25	0.128	4.466	0.625	29.98	3.6	7.006	11.688
4	0.126	4.816	0.625	29.96	3.6	7.008	12.64
3.75	0.124	5.16	0.625	29.9	3.62	7.005	13.575
3.5	0.121	5.51	0.625	30.04	3.62	7.008	14.528
3.25	0.119	5.855	0.625	29.88	3.64	7.005	15.465
3	0.116	6.195	0.625	29.94	3.64	6.999	16.389
2.745	0.113	6.55	0.625	29.9	3.64	6.998	17.353



2. ábra

A hiperbolikus függvény paramétereinek változása állandó struktúra-térfogat mellett. A nano-struktúra közepén lévő bemélyedés nagyjából a B paraméter mellett történt.

A következő táblázatban a hiperbolikus paraméterek hasonlóképpen változnak, mint az első táblázatban. Az a_1 csökken, a_2 nő, az α_1 némileg magasabb szinten, az α_2 pedig alacsonyabb szinten stabilizálódott, mint az első táblázatban. Az A és C geometriai paraméterek a fentiek szerint állandóak, azonban a B paraméter folyamatosan növekszik (egyre „tágabb” a gyűrű), a D paraméter pedig nő (mélyül a kvantumgyűrű illetve a nanolyuk).

A harmadik táblázatban éppen a másodikkal ellentétes folyamat figyelhető meg. A B paraméter csökkenésével jár együtt a D paraméter növekedése („csökkenő gyűrűátmérő mellett nő a középső bemélyedés”). Ezt az a_1 paraméter csökkenésével, az a_2 és az α_2 növelésével tudtuk elérni.

2. táblázat

drilling hole with widening ring

hiperbolic parameters				geometric parameters			
a1	alfa1	a2	alfa2	A	B	C	D
7.002	0.145	0	dont care	30.04	-	7.002	-
7.427	0.147	0.24	0.354	30.047	2.24	6.993	0.046
7.377	0.147	0.24	0.401	30	2.5	6.999	0.102
7.467	0.147	0.455	0.379	30.08	3.52	7.001	0.444
7.477	0.147	0.5	0.379	30.08	3.66	7.013	0.236
7.477	0.147	0.55	0.372	30.08	3.8	7	0.623
7.477	0.147	0.6	0.369	30.08	3.94	7	0.723
7.477	0.147	0.645	0.366	30.08	4.04	7	0.813
7.477	0.147	0.7	0.362	30.1	4.18	7	0.923
7.462	0.147	0.745	0.362	30.08	4.26	6.999	1.027
7.442	0.147	0.8	0.362	30.06	4.34	6.998	1.156
7.442	0.147	0.85	0.358	30.06	4.44	7	1.258
7.422	0.147	0.9	0.358	30.04	4.52	7.001	1.379
7.377	0.147	1	0.358	30	4.64	7	1.623
7.302	0.147	1.15	0.358	29.92	4.8	7	1.998
7.207	0.146	1.3	0.358	30.04	4.96	7.001	2.394
7.022	0.145	1.6	0.358	30.06	5.18	7.01	3.188
6.847	0.144	1.85	0.358	30.08	5.32	7.012	3.865
6.732	0.144	2	0.358	29.98	5.4	7.001	4.269
6.542	0.143	2.25	0.358	29.98	5.5	7	4.958
6.362	0.142	2.5	0.358	29.98	5.6	7.012	5.65
6.167	0.141	2.75	0.358	29.98	5.68	7.013	6.346
5.967	0.14	3	0.358	29.94	5.76	7.012	7.045
5.535	0.137	3.5	0.358	30.06	5.88	6.998	8.463

5.13	0.135	4	0.358	29.94	5.98	6.999	9.869
------	-------	---	-------	-------	------	-------	-------

A negyedik táblázatban szereplő beállításokkal a B paraméter nagy értékének előállítása volt a cél. Ezt az a_1 és a_2 paraméterek magas értékének beállításával érték el, az α_1 értéke is magasabb, mint az eddigi kísérletsorozatokban.

4. táblázat

hiperbolic parameters				geometric parameters			
a1	alfa1	a2	alfa2	A	B	C	D
7.002	0.145	0	dont care	30.04	-	7.002	-
14.2	0.25	5	0.183	30	8.12	6.998	2.798
16.245	0.4	9.31	0.201	30.02	10.46	7	9.375
15	0.475	10.03	0.204	29.94	10.84	7	12.062

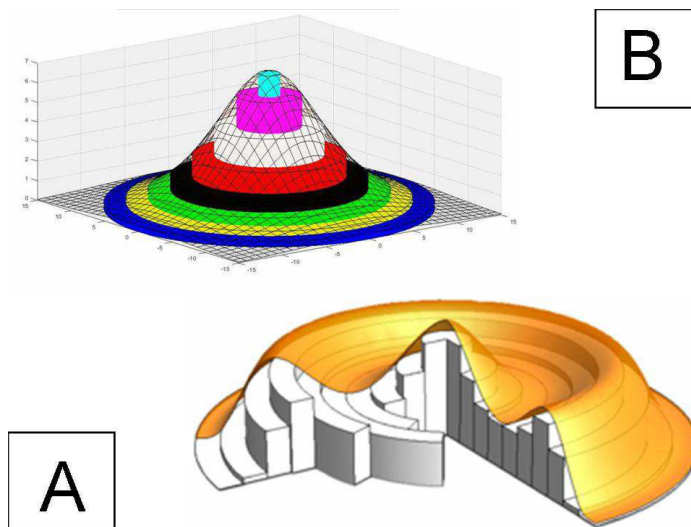
A hiperbolikus paraméterek szerepét a nano-struktúra alakításban az alábbiakban lehet összefoglalni.

- (a) a_1 növelése csökkenti a nano-lyuk (kvantumgyűrű mélységét) és magasítja a struktúrát.
- (b) a_2 növelése mélyíti a nano-lyukat és magasítja a struktúrát.
- (c) α_1 növelése csökkenti a struktúra átmérőjét és csökkenti a nano-lyuk mélységét, a középső bemélyedést akár túbe is átviheti.
- (d) α_2 növelése csökkenti a struktúra átmérőjét és a gyűrű belső átmérőjét, valamint csökkenti a kvantumgyűrűben, nano-lyukban kialakuló tű magasságát.

1 Konklúzió és kitekintés

A különböző alakú nano-struktúrák formájának analitikus leírása, mind technológiai, mind pedig alkalmazás szempontjából fontos. Az analitikus leírás lehetőséget teremt egyrészt a térfogat meghatározására, ami a leválasztott anyagmennyiség számításához, kontrolállásához segítség. Példának említhetjük, hogy a számítás a vertikálisan sorolt QD-ok technológiájánál (NH feltöltés) is segítségre lehet [6]. Alkalmazástechnikai segítség lehet az energetikai struktúra

számolásokat támogató az újfajta ill. nagyobb hatásfokú eszközök tervezésénél (band-gap-engineering). Jelen dolgozatban az adott leválasztott anyag térfogat morfológiai változásait követtük az a_1 , a_2 , α_1 , α_2 paraméterek függvényeinek meghatározásával.



3. ábra

A térfogat-meghatározás illusztrálása (A) térfogat meghatározás összetett forgástest esetén (ábra forrása: https://en.wikipedia.org/wiki/Shell_integration) és (B) QD esetén

Amint a fentiekből látható a következő lépés a térfogat-meghatározás, hiszen a különböző struktúrák előállításánál az anyagmennyiség (eltekintve a deszorpciótól) állandó. Első közelítésben forgásszimmetrikusnak tekinthetjük a nano-objektumot [7]. Forgástest térfogatának kiszámítására, az ismert téglányösszeges numerikus integrálás 3D megfelelője az egymásba ágyazott koaxiális hengerek térfogatösszegének kiszámítása. (Egy változat a konstans magasságú téglányok helyettesítése trapézokkal, így a trapézmódszer forgástestre való alkalmazásával a térfogatszámítás ugyan bonyolultabb de pontosabb lenne.) A technológiailag releváns (001) kristályfelületet használjuk, ami zink-blende struktúra esetén köztudottan anizotróp. Így a jobb közelítés érdekében az ellipszis tengelymetszetű térfogat-számítás is fontos, ahol a megnyúlás mértéke szintén technológiától függő.

Hivatkozások

- [1] Nemcsics Ákos: A napelem és fejlesztési perspektívái; Akadémiai Kiadó, Budapest, 2001
- [2] Ákos Nemcsics: Droplet Epitaxy as a Tool for the QD-Based Circuit Realization, Book chapter in Nonmagnetic and Magnetic Quantum Dots ; InTech (2018) pp. 43-59.
- [3] Ákos Nemcsics: Quantum Dots Prepared by Droplet Epitaxial Method, Book chapter in Quantum Dots - Theory and Applications ; InTech (2015) pp. 119-149.
- [4] J. Takács, Á. Nemcsics: QD to NH; Mathematical Modelling of Nanostructure Formations; Scientific Review, vol. 4, pp. 74-79, (2018)
- [5] 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. 14, pp. 207-224, (2017)
- [6] A. Ürmös, Z. Farkas, Á. Nemcsics: Contribution to the understanding of GaAs based nanohole filling; American Journal of Condensed Matter Physics, vol. 7, pp. 50-56, (2017)
- [7] G.A. Korn, T.M. Korn: Matematikai kézikönyv műszakiaknak; Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1975