

## A GaAs-alapú nanolyukak feltöltődésének modellezése

Ürmös Antal, Farkas Zoltán, Nemcsics Ákos

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

e-mail: urmos.antal@phd.uni-obuda.hu, farkas.zoltan@kvk.uni-obuda.hu, nemcsics.akos@kvk.uni-obuda.hu

---

*Kivonat: A napjainkban használt elektronikus eszközeinkben már egyre több helyen használunk nanostruktúrákkal működő eszközöket. Ezeket az eszközöket molekulásugár-epitaxiával állíthatjuk elő. Ennek egy speciális fajtája a csepp-epitaxia. Ezzel a módszerrel nemcsak kvantum pontok, hanem más nano-objektumok, például kvantumgyűrűk, és nanolyukak feltöltése által keletkező inverz-kvantumpontok is előállíthatók. E dolgozatunkban a célunk, hogy bemutassuk a nanolyukak feltöltődésének egy lehetséges modelljét oly módon, hogy a feltöltő anyagot viszkózus folyadéknak tekintjük. Először a bevezetőben ismertetjük a nanolyukak kialakulásának elméletét. Ezt követően egyrészt részletesen tárgyaljuk a nanolyukak feltöltődésének egy lehetséges modellezését. A szimuláció során első lépésben galliumot és indiumot választottunk le a hordozóra. Először az ideális esetet vizsgáljuk meg, mi történik, amikor nincs felületi diffúzió, tehát a leválasztott atomok nem mozognak a felületen. Ebben az esetben a teljes feltöltő anyag térfogatának egy része a lyukba jut, másik része a nanolyuk körüli gyűrűre, a harmadik része a nanolyuk mellé jut. A második esetben figyelembe vesszük az atomok mozgását. Ez többféle módon megtehetjük, egyik ilyen mód az ún. Kinetik Monte-Carlo algoritmus alkalmazása. A másik, ebben a cikkben is alkalmazott megoldás az, hogy az atomsokaságot (tehát a lyuk feltöltésére alkalmazott feltöltő anyagot) viszkózus folyadéknak tekintjük, amely mozgását megfeleltetjük a felületi diffúzióknak. A cikkben a modellező algoritmus leírása mellett tanulmányozzuk a viszkozitás mikroszkópikus értelmezésének egy lehetséges módját is. Ezen kívül elemezzük a rétegszám-egyensúlyi magasság összefüggést különböző hőmérsékleteken. Továbbá megvizsgáljuk a viszkozitás alakulását a hőmérséklet függvényében, illetve az egyensúlyi magasság alakulását szintén a hőmérséklet függvényében makroszkópikus és mikroszkópikus megközelítésben egyaránt.*

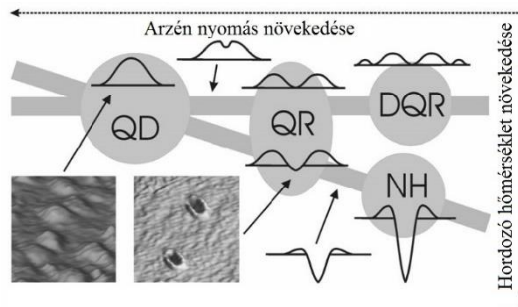
*Keywords: nanostruktúra; csepp-epitaxia; modellezés;*

---

## 1. Bevezetés

Közismert tény, hogy nanostrukturák alkalmazása az elmúlt két évtizedben a tudomány számos ágát forradalmasította, többek között az anyagtudományt és az elektronikát is. A nanostrukturák azok a kisméretű objektumok, melyeknek legalább az egyik kiterjedése a nm-es vagy néhányszor tíznanométeres mérettartományba esik. Attól függően beszélünk 2, 1 illetve 0 dimenziós struktúráról, hogy a kiterjedések közül mennyi található nanométeres tartományban. Ezen struktúrák tulajdonságai jelentős mértékben különböznek a 3 dimenziós, makroszkopikus testek tulajdonságaitól. A kis méretek miatt, ezeket a struktúrákat leginkább az önszerveződés jelenségét kihasználva állítjuk elő<sup>1</sup>. A napjainkban használt elektronikus eszközeinkben már egyre több helyen használunk nanostrukturákat működő eszközöket. Kiváló példa erre a III-N alapú félvezető eszközök, például a GaN alapú kék színű LED-ek vagy a nanostrukturás napelemek.

Ezek a nanostrukturák többféle növesztési módszerrel állíthatók elő. Egyik ilyen módszer a csepp-epitaxia. Ennek a technológiának az elgondolását Koguchi és munkatársai dolgozták ki először az 1990-es évek elején [1] [2] [3] [4]. A technológia lényege, hogy az első lépésben a hordozó (például GaAs) felületén egy a III. főcsoportból származó fém cseppeket (például Ga) hozunk létre. A második lépésben a minta hőmérsékletének és a háttérben lévő V. főcsoportból származó elem háttér (például As) nyomásának a függvényében különféle nanostrukturák alakulnak ki (1. ábra).

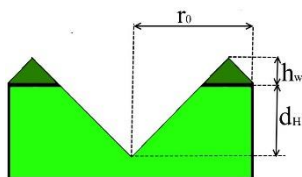


1. ábra

A különféle nanostrukturák kialakulása az arzén nyomás és a hordozó hőmérsékletének a függvényében (forrás: [5]).

<sup>1</sup> Az önszerveződés során, adott környezeti feltételek esetén a rendszer összetevői, az egyes összetevők közötti fellépő erőhatások (kormányzó erők) hatására szabályos mintázatba, struktúrába rendeződnek el.

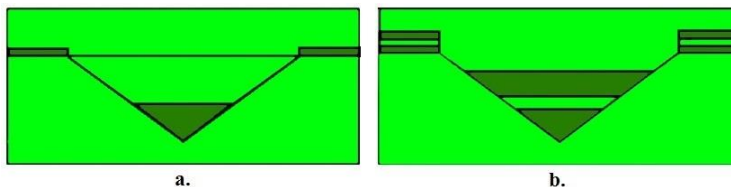
Ahogy a 1. ábra is mutatja nanolyukak magas hőmérsékleten, minimális arzén nyomás esetén alakulnak ki [6]. Ezt a 2. ábrán láthatjuk.



2. ábra.

A nanolyukak kialakulása (az eredeti ábra forrása: [6]).

A 2. ábrán az  $r_0$  a külső sugár (nanolyuk és a ring),  $h_w$  a ring magassága, a  $d_H$  a nanolyuk mélysége. Ha az így kialakult nanolyukat fém (például gallium) atomokkal betemetjük, akkor invertált technológiájú kvantum pontról beszélünk. Az invertált kvantum pontoknak 4 fajtája van: Type 1 QD (fehér fény emitterek), Type 2 (egyenletes kvantum pontok), Type 3 (ultra-alacsony sűrűségű kvantum pontok), függőlegesen halmozott kvantum pont molekulák [6].



3. ábra.

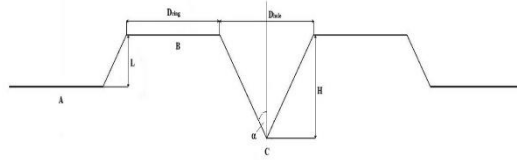
A nanolyukak kialakulása (az eredeti ábrák forrása: [6]). Az a. egy Type 3 típusú kvantum pont, a b. egy függőlegesen halmozott kvantum pont molekulák.

Érdekes, hogy az eltemetett ultra-alacsony sűrűségű kvantum pontok a látható a felületen egy néhány nanométer magas dombocskák jelzik. Az 3.d ábrán függőlegesen halmozott kvantum pont molekulák, ami két szorosan elhelyezett kvantum pont. Ez a legegyszerűbb nanostruktúrákból álló kölcsönható rendszer. Ez a struktúra két duplán betemetett ultra-alacsony sűrűségű kvantum pont. A két pont egy jól definiált szélességű AlGaAs gáttal van elválasztva.

## 2. A szimulációs algoritmus

A szimulációnál a kiindulási adat az 5. ábrán látható nanolyuk [7]. 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

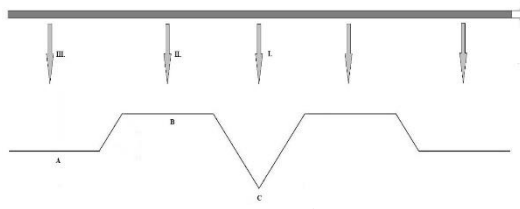
felületétől, a  $H$  a gyűrű magassága a nanolyuk aljától számítva. Az  $\alpha$  szög a nanolyuk nyílásának félszöge, amely értéke  $55^\circ$ .



4. ábra.

A vizsgált nanolyuk alapfelépítése.

A szimuláció során első lépésben galliumot választottunk le a hordozóra (5. ábra). Ebben a fejezetben azt az ideális esetet vizsgáljuk, amikor nincs felületi diffúzió, tehát a leválasztott atomok nem mozognak a felületen.



5. ábra

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

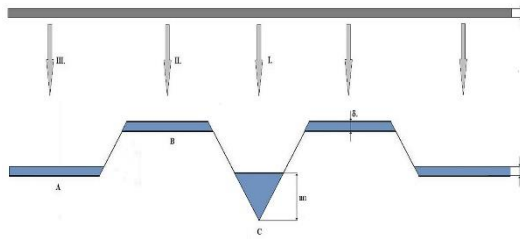
A leválasztott réteg térfogatából az  $I$ . térfogat közvetlenül a nanolyukba jut ( $V_I$ ). A közvetlenül a nanolyukba jutó térfogat a következő módon számítható:

$$V_I = r_{lyuk}^2 * \pi * \delta, \quad (1)$$

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

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

ahol az  $m$  a feltöltött magasság és a  $V_I$  a közvetlenül a lyukba jutó térfogat, az  $\alpha$  a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke  $55^\circ$ ). A  $II$ . térfogat a gyűrűre jutó térfogat, a  $III$ . térfogat a gyűrű mellé jutó térfogat,  $\delta$  a réteg vastagsága (6. ábra).



6. ábra

A rétegleválásztás során a nanolyuk részeire jutó teljes

térfogat részei (az első réteg). A gyűrűn és a gyűrű mellett a réteg vastagsága  $\delta$ .

A második lépésben szintén  $\delta$  vastag réteget párologtatunk fel (7. ábra). A gyűrűn és a gyűrű mellé ismét ugyanakkora térfogat jut és a rétegvastagság szintén  $\delta$  lesz. A nanolyukban a feltöltött magasság kétféle módon számolható ki.

Az egyik módszernél a forgáskúp térfogatával számolva a következő módon határozhatjuk meg:

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

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

$$m_i = \sqrt[3]{\frac{3 \cdot \sum_{k=1}^i V_{I,k}}{\pi \cdot t g^2 \alpha}}, \quad (4)$$

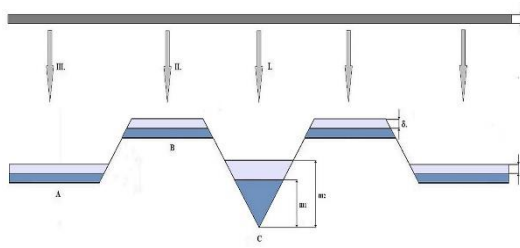
ahol az  $m_i$  az  $i$ -ik lépésben feltöltött magasság, a  $\sum_{k=0}^i V_{I,k}$  az  $i$ . és az azt megelőző térfogatok összege, az  $\alpha$  a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke  $55^\circ$ ).

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

$$m_k^3 \cdot \left(\frac{\pi}{3} \cdot t g^2 \alpha\right) + m_k^2 \cdot (\pi \cdot r_{k-1} \cdot t g^2 \alpha) + m_k \cdot (\pi \cdot r_{k-1}^2) - V_k = 0, \quad (5)$$

ahol az  $m_k$  a csonkakúp magassága, az  $r_{k-1}$  az előző lépésben kiszámolt feltöltött kör sugara, az  $\alpha$  a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke  $55^\circ$ ), a  $V_k$  a csonkakúp térfogata, ami megegyezik a  $k$ -ik 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:

$$m_i = \sum_{k=1}^i m_k. \quad (6)$$



7. ábra.

A rétegleválasztás során a nanolyuk részeire jutó teljes

térfogat részei (a második réteg). A gyűrűn és a gyűrű mellett a réteg vastagsága  $\delta$ .

A  $V_{II}$ . gyűrűre jutó térfogatot úgy számolhatjuk ki, hogy a teljes (ami gyűrűre  $V_{II}$ . és a belső csonkakúp térfogat  $V_{itc}$  összege) kivonjuk a belső csonkakúp térfogatát ( $V_{itc}$ ).

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

$$V_{itc} = \frac{\pi}{3} m_{itc} (R_{itc}^2 + r_{itc}^2 + R_{itc} * r_{itc}), \quad (7)$$

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

Az  $r_{itc}$  kisebbik sugár a

$$r_{itc} = H * tg\alpha, \quad (8)$$

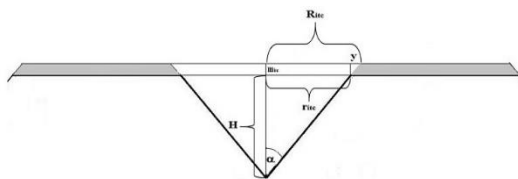
képlettel számítható, ahol a  $H$  a lyuk aljától mért távolság, az  $\alpha$  a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke  $55^\circ$ ). A  $R_{itc}$  nagyobbik sugár a

$$R_{itc} = H * tg\alpha + m_{itc} * tg\alpha, \quad (9)$$

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

$$V_{itc} = m_{itc}^3 * \left(\frac{\pi}{3} * tg^2\alpha\right) + m_{itc}^2 * (H * \pi * tg^2\alpha) + m_{itc} * (H^2 * \pi * tg^2\alpha). \quad (10)$$

A paraméterek értelmezése a 8. ábrán látható. Az ábrán  $R_{itc}$  nagyobbik sugár, a  $r_{itc}$  kisebbik sugár, az  $m_{itc}$  a belső csonkakúp magassága, az  $\alpha$  a lyuk nyílásának félszöge,  $H$  a nanolyuk mélysége, az  $y$  egy segédváltozó, melynek értéke  $y = m_{itc} * tg\alpha$ .



8. 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  $\alpha$  a lyuk nyílásának félszöge,  $H$  a nanolyuk mélysége, az  $y$  egy segédváltozó, melynek értéke  $y = m_{itc} * tg\alpha$ .

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

$$V_{tc} = \frac{\pi}{3} m_{tc} (R_{tc}^2 + r_{tc}^2 + R_{tc} * r_{tc}), \quad (11)$$

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

$$r_{tc} = H * tg\alpha + d - m_{tc} * tg\alpha, \quad (12)$$

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

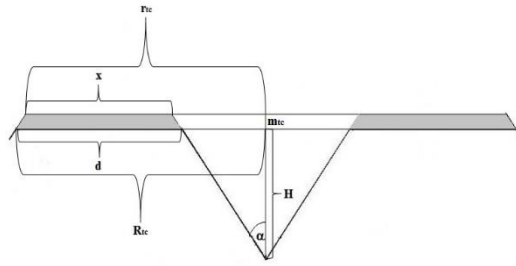
$$R_{tc} = H * tg\alpha + m_{tc} * tg\alpha, \quad (13)$$

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

$$V_{tc} = m_{tc}^3 * \left( \frac{\pi}{3} * tg^2\alpha \right) - m_{tc}^2 * (d * \pi * tg\alpha - H * \pi * tg^2\alpha) + m_{tc} * (d^2 * \pi + 2 * d * H * \pi * tg\alpha + H^2 * \pi * tg^2\alpha), \quad (14)$$

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

A paraméterek értelmezése a 10. 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  $\alpha$  a lyuk nyílásának félszöge,  $H$  a nanolyuk mélysége.



9. 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  $\alpha$  a lyuk nyílásának félszöge,  $H$  a nanolyuk mélysége.

Míndezek ismeretében a  $V_{II}$ . gyűrűre jutó térfogatot már egyszerűen számolhatjuk:

$$V_{II.} = V_{tc} - V_{itc}, \quad (15)$$

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

$$V_{II.} = -m_{ring}^2 * (d * \pi * tg\alpha + 2 * H * \pi * tg^2\alpha) + m_{ring} * (d^2 * \pi + 2 * d * H * \pi * tg\alpha), \quad (16)$$

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

### 3. Az atommozgás mechanizmusa

A valóságban véges ( $n * k * T > E_{kötési}$ ) hőmérsékleten az atomok a hordozó felületén mozgást végeznek a hőmérséklet függvényében. Ezt a mozgást többféle módon is modellezhetjük, például Kinetic Monte-Carlo (KMC) módszerrel [8] [9]. Ebben a dolgozatban nem ezt a módszert használjuk, hanem a folyékony gallium dinamikai viszkozitását vesszük figyelembe a hőmérséklet függvényében.

Makroszkopikus megközelítésben a dinamikai viszkozitás egy, a folyadék tulajdonságaitól függő arányossági tényező, ami kapcsolatot teremt a csúsztatófeszültség és a deformációsebesség között:

$$\tau = \mu * \frac{d\gamma}{dt}, \quad (17)$$



ahol a  $\tau$  csúsztatófeszültség,  $\mu$  a dinamikai viszkozitás,  $\frac{dy}{dt}$  a deformáció sebessége. Ezt a viszkozitást folyékony fémek esetén, többféle módon is meghatározhatjuk [10] [11] [12] [13] [14]. Ebben a dolgozatban az Arrhenius-Andrade egyenletet használjuk [14], melynek a képlete a következő:

$$\mu(T) = \mu_0 * e^{\frac{E_0}{R*T}} \quad (18)$$

A képletben  $\mu(T)$  a dinamikai viszkozitás a hőmérséklet függvényében,  $T$  a hőmérséklet (Kelvinben), az  $\mu_0$  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  $8,3144 \frac{J}{K*mol}$ ).

Mikroszkopikus megközelítésben a dinamikai viszkozitás meghatározásához először írjuk fel egy esemény bekövetkezésének valószínűségét, atomi szinten [9] [15]:

$$P(E_a, T) = e^{-\frac{E_a}{R*T}}, \quad (19)$$

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 az  $k$  helyváltoztatási frekvenciát:

$$k = k_0 * e^{-\frac{E_a}{R*T}}, \quad (20)$$

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

$$k_0 = \frac{2*k_B*T}{h}, \quad (21)$$

ahol, a  $k_B$  a Boltzmann állandó,  $h$  a Planck állandó. Ezután vezessük be a  $\rho = \rho(E_a, T)$  geometriai tényezőt, a következő módon [16]:

$$\rho(E_a, T) = l * e^{\frac{2E_a}{R*T}}, \quad (22)$$

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 sűrűség funkcionál, 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

$$\mu(T) = \rho(E_0, T) * k = k_0 * l * e^{\frac{E_0}{R*T}}, \quad (23)$$

ahol a  $k_0 * l$  szorzat a  $\mu_0$  pre-exponenciális tényező. Így visszakaptuk a 18-as egyenletet.

Ebben a dolgozatban a viszkozitás hatását úgy vesszük figyelembe, hogy a gyűrűre jutó térfogatot megszorozzuk egy  $\eta(T)$  térfogat arányossági tényezővel, amit a következő módon számolhatunk ki:

$$\eta(T) = \frac{\mu(T)}{\mu(T_m)}, \quad (24)$$

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

$$V'_{II} = \eta * V_{II}. \quad (25)$$

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

$$V'_{II} = -(\eta * \delta)^2 * (d * \pi * tg\alpha + 2 * H * \pi * tg^2\alpha) + (\eta * \delta) * (d^2 * \pi + 2 * d * H * \pi * tg\alpha), \quad (26)$$

ahol az  $\eta$  a térfogat arányossági tényező,  $\delta$  a leválasztott réteg vastagsága,  $d$  a gyűrű alsó platója, az  $\alpha$  a lyuk nyílásának félszöge,  $H$  a nanolyuk mélysége. Ebből az következik, hogy a nanolyukba jutó térfogat a közvetlenül a lyukba jutó térfogat és a közvetlen a lyukba jutó térfogat összege, azaz:

$$V'_I = V_I + V''_{II}, \quad (27)$$

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

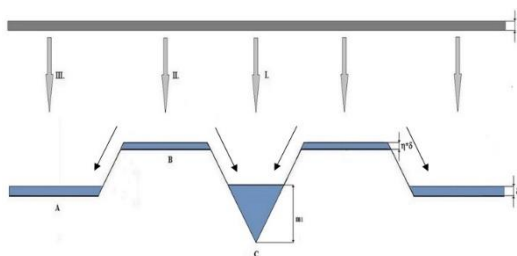
$$V''_{II} = \frac{(1-\eta)}{2} * V_{II}, \quad (28)$$

ahol  $V''_{II}$  a közvetlen 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  $\delta$  vastag réteget párologtatunk fel (10. ábra). Az ábrán nyílak azt jelölik, hogy a gyűrűn lévő térfogat  $\frac{(1-\eta)}{2}$  százaléka a nanolyukba és ugyanennyi része a gyűrű mellé kerül. A gyűrűn a réteg vastagsága  $\eta * \delta$ , a gyűrű mellett  $\delta$ . A lyukban lévő térfogat  $m$  feltöltött magassága egyrészt a forgáskúp képletével számítható ki:

$$m = \sqrt[3]{\frac{3 * V'_I}{\pi * tg^2\alpha}}, \quad (29)$$

ahol az  $m$  a feltöltött magasság és a  $V'_I$  a lyukba jutó térfogat, melyet a 28 képlettel számíthatunk ki, az  $\alpha$  a lyuk nyílásának félszöge (ennek az értéke  $55^\circ$ ).



10. ábra.

A rétegleválasztás 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  $\delta$ .

A második lépésben szintén  $\delta$  vastag réteget párologtatunk fel (11. 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  $\delta$ . A nanolyukban a feltöltött magasság – hasonlóan az előző fejezethez – kétféle módon számolható ki.

Az egyik módszernél a forgáskúp térfogatával számolva a következő módon határozhatjuk meg:

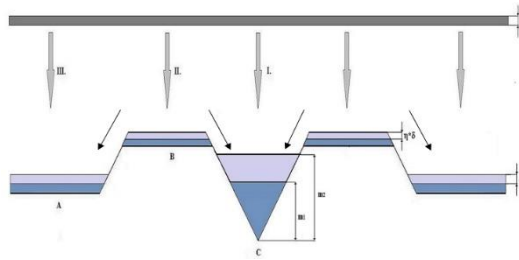
$$m_2 = \sqrt[3]{\frac{3 * (V'_{I,1} + V'_{I,2})}{\pi * t g^2 \alpha}}, \quad (30)$$

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

$$m_i = \sqrt[3]{\frac{3 * \sum_{k=1}^i V'_{I,k}}{\pi * t g^2 \alpha}}, \quad (31)$$

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

A másik lehetséges megoldás, hogy a 5. egyenlettel egy harmadfokú egyenlet megoldva kiszámolhatjuk a keletkező csonkakúp magasságát, majd hozzáadjuk a már a lyukban lévő forgáskúp összmagasságához (6. egyenlet).



11. ábra

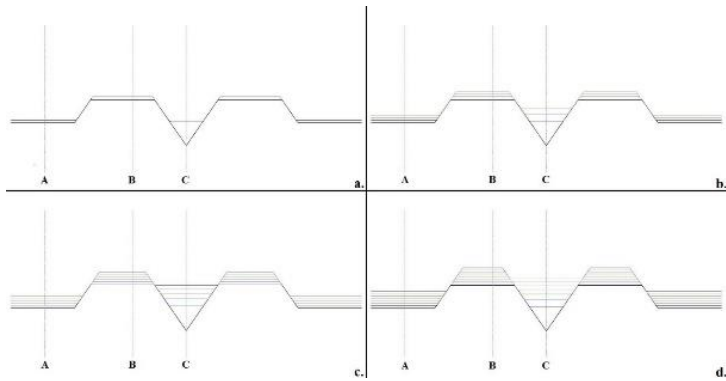
A rétegleválásztás során a nanolyuk részzeire jutó teljes térfogat részei (a második réteg). A nyílak azt jelölik, hogy a gyűrűn lévő térfogat  $\frac{(1-\eta)}{2}$  része a nanolyukba és ugyanennyi része a gyűrű mellé kerül. A gyűrűn a réteg vastagsága  $\eta * \delta$ , a gyűrű mellett  $\delta$ .

## 4. Eredmények kiértékelése

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. 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 12. 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 monoréteg vastag a galliumréteget párologtatunk fel.

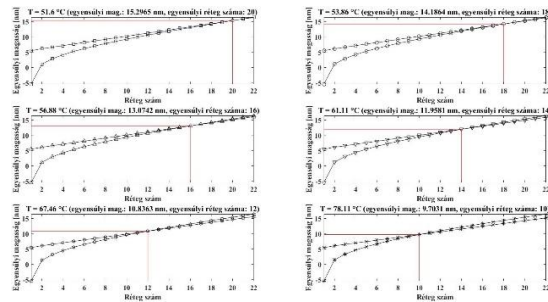
Megjegyzendő, hogy gallium-arszenid hordozó esetén a rácsállandó 0.526 nanométer, ami 2 monorétegnek felel meg (mivel a két komponensből áll). A szimulációhoz használt programban 1 monorétegnek 10 pixel feleltetünk meg, ami  $\frac{0,284}{10} = 0,0284$  nanométer.



12. ábra

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

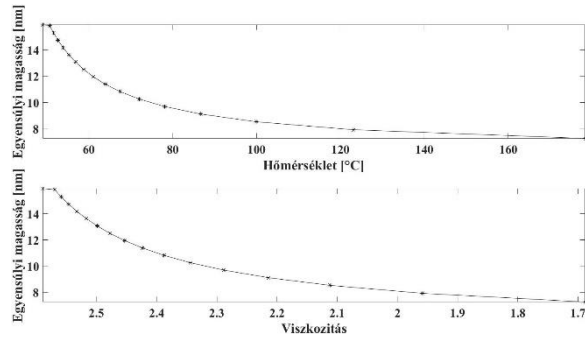
Ez az ideális eset 49 °C hordozó hőmérsékletig áll fenn. E hőmérséklet felett az egyensúlyi magasság valamint az egyensúlyi rétegszám csökkenni kezd. Ahogy a 13. ábrán is látható 51,6 °C hőmérsékleten a 20 rétegnél töltődik fel teljesen a nanolyuk, ahol az egyensúlyi magasság 15.2965 nm. Az alsó vonal 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.



13. ábra

Rétegszám, egyensúlyi magasság diagramok, különböző hőmérsékleteken.

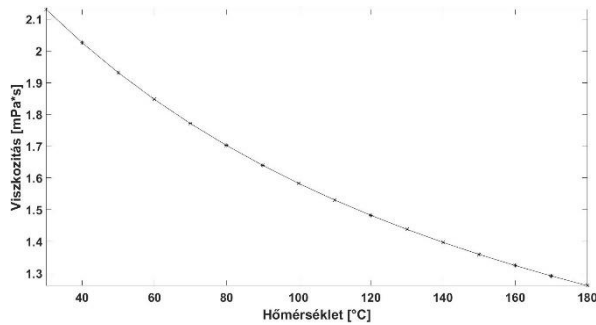
A 14. ábrán a hőmérséklet-egyensúlyi magasság (felső), illetve a viszkozitás-egyensúlyi magasság (alsó) diagramok láthatók a vizsgált hőmérséklet-tartományban.



14. ábra

Hőmérséklet-egyensúlyi magasság (felső) és viszkozitás-egyensúlyi magasság (alsó) diagramok.

Ebben a dolgozatban a gallium makroszkopikus viszkozitását az Arrhenius-Andrade összefüggéssel számoljuk ki (3.2 egyenlet). E fém makroszkopikus hőmérséklet-viszkozitás diagramja a 15. ábrán látható.



15. ábra.

Gallium 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 3.2-es egyenletből indultunk ki. Először meghatároztuk a gallium részecskék aktivációs energiáját a következő összefüggést felhasználva [17]:

$$E_p = E_0 * \left(1 - 6\alpha * \frac{r}{D}\right), \quad (32)$$

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  $\alpha$  az alak tényező (e tényező értéke 1 gömb formájú részecskéknél), az  $r$  az atom sugara, a  $D$  pedig a részecske mérete. Legyen a gallium-cseppecskék olvadási hőmérséklete 254 Kelvin (-19,15 °C) [18]. A részecske méretét a következő formulával határoztuk meg [19]:

$$D = \frac{9 \cdot r \cdot T_{mb}}{T_{mb} - T_{mp}}, \quad (33)$$

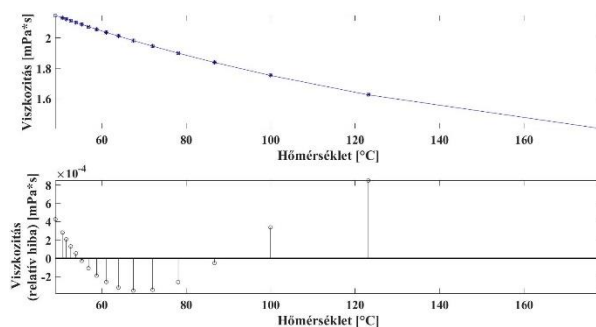
E képletből kiindulva, gallium esetén az atomsugár  $1,36 \cdot 10^{-10}$  m és a részecske mérete (254 Kelvin hőmérsékletnél)  $7,5688 \cdot 10^{-9}$  m. Az  $E_p = 3568 \frac{J}{mol}$  aktivációs energiával és a  $T_{mp} = 254K$  olvadási hőmérséklettel számolva, maximális mikroszkopikus viszkozitás értéke 2,3626 lesz.

Mikroszkopikus szinten a gallium hőmérséklet-viszkozitás értékpárjai a 16. és a 17. ábrákon láthatók. Ha erre a pontpár sorozatra egytagú hatványfüggvényt illesztünk, akkor az illesztés maximális relatív hibája 1,798%, míg exponenciális függvényénél 3,499% 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 (16. ábra), akkor a viszkozitás-hőmérséklet képlet a következő lesz [20]:

$$\mu_{p,Mi}(T) = a \cdot x^b + c = a \cdot T^b + c, \quad (34)$$

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 0,0523 %), ami 123,15 °C (396,3 °K) hőmérsékletnél található.



16. ábra.

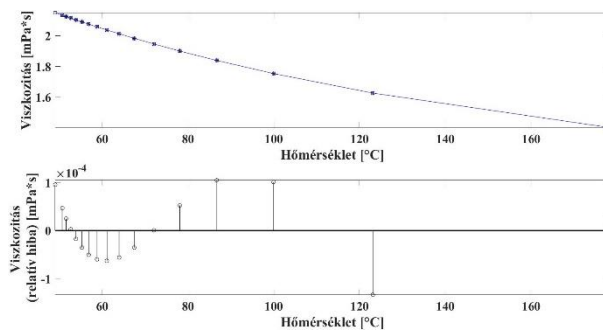
Mikroszkopikus viszkozitás a hőmérséklet függvényében diagram. Itt a pontsorozatra hatványfüggvényt illesztettünk. A felső diagram a pontsorozatra illesztett függvény, az alsó diagram a függvényillesztés abszolút hibáját ábrázolja az egyes pontokban.

Amennyiben  $a$  együttható értékét  $k_0 * l = \tau_0$ -ra,  $b$  együttható értékét 1-re,  $c$  együttható értékét 0-ra, választjuk és az  $x = e^{\frac{E_0}{R*T}}$ , akkor visszkapjuk a 18-as egyenletet. Ebből következhetünk arra, hogy az 34-es egyenlet a 18-as egyenlet mikroszkopikus alakja.

Amennyiben exponenciális összeg függvényt illesztünk a pontsorozatra (24. ábra), akkor a viszkozitás-hőmérséklet képlet a következő lesz:

$$\mu_{e,Mi}(T) = a * e^{bx} + c * e^{dx} = a * e^{bT} + c * e^{dT}, \quad (35)$$

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 2,629,  $d$  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 0,00822%) ami 123,15 °C (396,3 °K) hőmérsékletnél található.



17. ábra.

Mikroszkopikus viszkozitás a hőmérséklet függvényében diagram. 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  $k_0 * l = \mu_0$ -ra,  $b$  együttható értékét 1-re,  $c$  együttható értékét 0-ra, választjuk és az  $x = \frac{E_0}{R*T}$ , akkor visszkapjuk a 18-as egyenletet. Ebből következhetünk arra, hogy az 35-ös egyenlet is a 18-as egyenlet mikroszkopikus alakja.

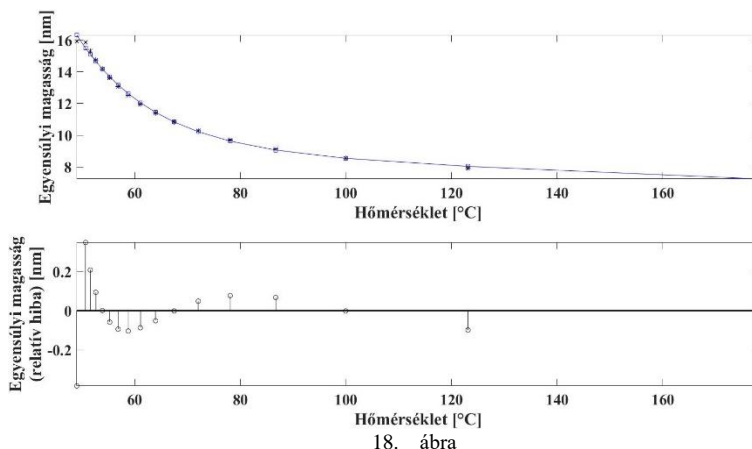
Az egyensúlyi magasság analitikus meghatározásához a hőmérséklet-egyensúlyi magasság pontsorozatra szintén hatványfüggvényt és exponenciális összeg



függvényt is illesztettünk. Ha egytagú hatványfüggvényt választunk, 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 használunk. Ellenben exponenciális összeg függvény jól illeszthető (18. ábra), így az egyensúlyi magasság - hőmérséklet összefüggés a következő lesz:

$$h_e(T) = a * e^{bx} + c * e^{dx} = a * e^{b*T} + c * e^{d*T}, \quad (36)$$

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  $2,39\%$ ), ami  $48,95\text{ °C}$  ( $322,1\text{ °K}$ ) hőmérsékletnél található.



18. ábra

Egyensúlyi magasság a hőmérséklet függvényében diagram. 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.

## Konklúzió

E dolgozatunkban bemutattuk a nanolyukak feltöltődésének egy lehetséges modelljét oly módon, hogy a feltöltő anyagot viszkózus folyadéknak tekintettük. Részletesen tárgyaltuk a nanolyukak feltöltődésének egy lehetséges modellezését. A szimuláció során első lépésben galliumot és indiumot választottunk le a hordozóra. Először az ideális esetet vizsgáltuk meg, mi történik, amikor nincs felületi diffúzió, tehát a leválasztott atomok nem mozognak a felületen. A második

esetben figyelembe vettük az atomok mozgását úgy, hogy az atomsokaságot (tehát a lyuk feltöltésére alkalmazott feltöltő anyagot) viszkózus folyadéknak tekintettük, amely mozgását megfeleltettük a felületi diffúciónak. A cikkben a modellező algoritmus leírása mellett tanulmányoztuk a viszkozitás mikroszkópikus értelmezésének egy lehetséges módját is. Ezen kívül elemeztük a rétegszám-egyensúlyi magasság összefüggést különböző hőmérsékleteken. Továbbá megvizsgáltuk a viszkozitás alakulását a hőmérséklet függvényében, illetve az egyensúlyi magasság alakulását szintén a hőmérséklet függvényében makroszkópikus és mikroszkópikus megközelítésben egyaránt.

### Hivatkozások

- [1] N. Koguchi, S. Takahashi, T. Chikyow, "New MBE growth method for InSb quantum well boxes," *Journal of Crystal Growth*, pp. 688-692, 1991.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] Á. Nemcsics, "Growth of GaAs and related materials based nano-structures by droplet epitaxial method," *Recent Res. Devel. Mat. Sci. Engg.*, vol. 4, pp. 53-87, 2011.
- [6] 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.
- [7] Á. Nemcsics, B. Pödör, 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.
- [8] 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.
- [9] 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.

- [10] L. Battezzati, A.L. Greer, "The viscosity of liquid metals and alloys," *Acta Metallurgica*, vol. 37, no. 7, pp. 1791-1802, 1989.
- [11] Seeton, C. J., "Viscosity–temperature correlation for liquids," *Tribology Letters*, vol. 22, no. 1, pp. 67-78, 2006.
- [12] K. E. Spells, "The determination of the viscosity of liquid gallium over an extended nrange of temperature," , vol. 48, Proc. Phys. Soc, 1936, pp. 299-311.
- [13] 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.
- [14] W.F. Gale,T.C. Totemeier, "General physical properties," in *Smithells Metals Reference Book (Eighth Edition)*.: Elsevier Inc., 2004, pp. 1-45.
- [15] L. Nurminen, A. Kuronen, K. Kaski, "Kinetic Monte Carlo simulation of nucleation on patterned substrates," *Phys. Rev. B*, vol. 63, no. 3, p. 035407, December 2000.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] 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.
- [20] I.N. Bronshtein, K.A. Semendyayev, G. Musiol, H. Mühlig, "Arithmetic," in *Handbook of Mathematics*. Berlin Heidelberg: Springer, 2007, p. 8.