

Önszerveződő leképezés alkalmazása csepp epitaxia technológiai támogatására

**Ürmös Antal¹, Farkas Zoltán¹, Farkas Márk², Sándor Tamás³,
Kóczy T. László⁴, Nemcsics Ákos¹**

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

²Nexogen Kft., 1123 Alkotás utca 6. emelet 53. Budapest, Magyarország

³Műszertechnikai és Automatizálási Intézet, Óbudai Egyetem, 1084 Tavaszmező utca 17, Budapest, Magyarország

⁴Automatizálási Tanszék, Széchenyi István Egyetem, 9026 Egyetem tér 1 Győr, Magyarország

E-mail: urmos.antal@phd.uni-obuda.hu, farkas.zoltan@kvk.uni-obuda.hu,
farkas.mark@nexogen.hu, sandor.tamas@kvk.uni-obuda.hu, koczy@sze.hu,
nemcsics.akos@kvk.uni-obuda.hu

Kivonat: Napjainkban az félvezetős nanostruktúrákat az alap és az alkalmazott tudományokban egyaránt intenzíven vizsgálják. Dolgozatunkban a csepp epitaxiás III-V vegyület félvezető alapú nanostruktúrákat vizsgáljuk. E nanostruktúrák csoportosításához az általunk fejlesztett Quantum Structure Analyzer 1.0 programot használjuk. Ez a szoftver a Kohonen-féle önszerveződő hálók segítségével működik. A dolgozatban bemutatjuk a nanostruktúrák osztályozásának három lehetséges módját. Egyrészt, megvizsgáljuk, hogyan osztályozhatjuk nanostruktúrákat a Kohonen-féle önszerveződő leképezéssel (SOM – Self-Organizing Mapping), másrészt fuzzy-féle következtető rendszer alkalmazásával. Az fuzzy következtető rendszerrel két különféle közelítést is megvizsgálunk. Az egyik megközelítés, hogy a formatényező a kialakult nanostruktúrák méretei alapján határozzuk meg. A másik, egy tervezést segítő mód, azaz azt mutatja meg, hogy a hogy a formatényező a közvetlenül megváltoztatható bemeneti paraméterek (például a hordozó hőmérséklete, arzén nyomása stb.) alapján határozzuk meg.

Keywords: osztályozás; nanostruktúra; GaAs;

1. Bevezetés

Napjainkban, a vegyületfélvezető (pl. GaAs) hordozón, önszerveződés útján kialakuló nanostruktúrákat az alap és az alkalmazott tudományokban egyaránt intenzíven vizsgálják. A különféle epitaxiás eljárások segítségével növesztett alacsony-dimenziós nanostruktúrák forradalmasították az elektronikus

eszközeinkét (LED, lézer, napelemek stb.), valamint a jövő számítástechnikájában is áttörést jelenthet (például kvantumszámítógépek). Ezek a nanostruktúrák elsősorban molekulásugar epitaxia segítségével hozhatók létre. Ezeknek az eszközöknek a tulajdonságai, működésük, a bennü lévő különféle nanoszerkezetek típusától, alakjától, méretétől, eloszlásától függenek. Emiatt a növesztés során fontos tudnunk, hogy adott technológiai paraméterek (például az arzén nyomása, hordozó hőmérséklete, gallium fluxus) hogyan befolyásolják a kialakuló nanostruktúrák formáját, méretét és egyéb tulajdonságait.

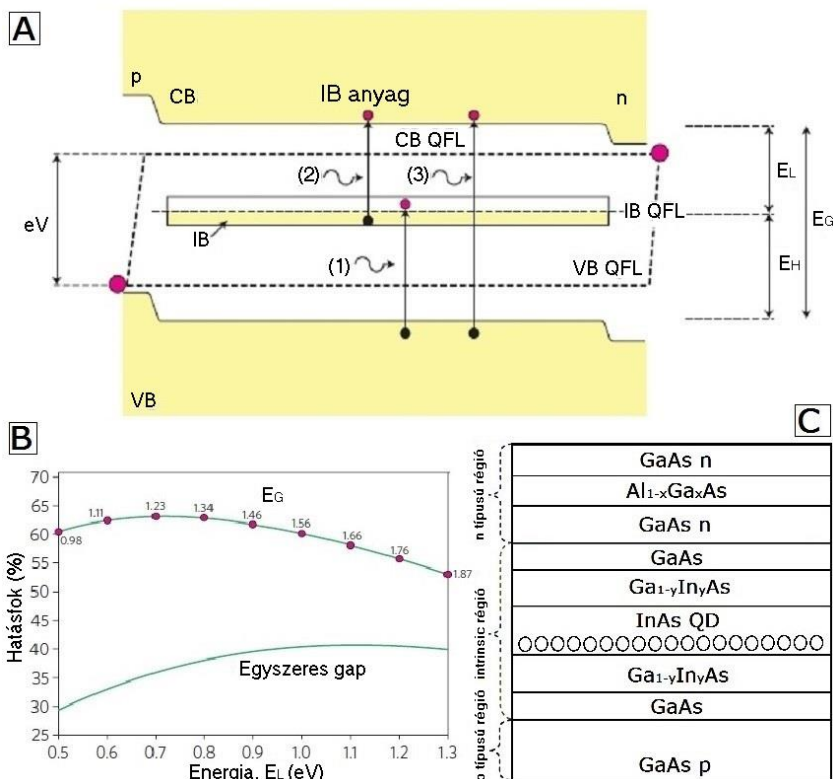
E nanostruktúrák konkrét alkalmazására jó példa az említett nagy hatásfokú napelemek. Ismert tény, hogy a napelemek fejlesztésében két irányvonal van. Az egyik kutatási irány a nagy hatásfokú napelemek fejlesztése, többek között úrbéli felhasználásra. Ide tartozik a GaAs heterostruktúras, a kvantum völgyeket ($\eta > 40\%$), illetve a kvantum pontokat ($\eta > 60\%$) tartalmazó napelemek különleges (például úrbéli) felhasználásra [1] [2].

A nagy hatásfokú, közbenső kvantum pont rétegekkel (IBQD - Intermediate Band Quantum Dot) készült napelemekről (1.A ábra) számos szerző közölt már tanulmányt [3] [4] [5]. Ez a kvantum pont rétegek két szokványos n és p típusú rétegek közé vannak szendvicsszerűen beékelve.

Az 1. A. ábrán az IBQD napelem sávdigramja látható [3], Ezekon az átmeneteken fellépő fotoáram hozzáadódik a hagyományosan a vegyérték sáv-vezetési sáv között fellépő fotoáramhoz, és így igen nagy hatásfok érhető el.

Egy optimális IBQD napelem teljes tiltotsáv szélessége 1,95 eV, ami két al tiltott sávra van felosztva. Ebből az felső E_L tiltott sáv 0,71 eV széles (1.B. ábra), míg az alsó E_H tiltott sáv 1,24 eV széles.

Közbenső sávként, a kvantum pontok megengedett állapotainak az energiaszintjeit használhatjuk. Az első ilyen napelemet, amely ezen az elven működik 2004-ben fejlesztették ki. A 1.C. ábrán ennek a napelemnek a rétegei láthatók. Ennél a napelemnél molekulásugar epitaxiával InAs kvantumpontokat növesztettek GaAs mátrixban Stranski-Krastanov módszerrel.

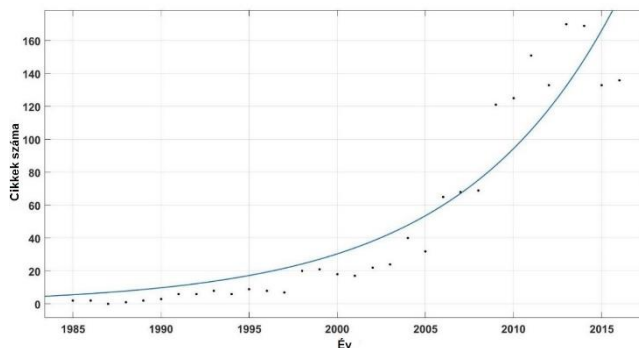


1. ábra.

(A.) Az IBQD napelen sávdiaagramja, 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: [3]). (B) Az IB és a monogap hatásfok az E_L al-tiltott sáv függvényében. (C) Az IBQD napelem rétegtáblája.

Az ebben a fejezetben említett kvantum pontokat (a többi nanostruktúrához hasonlóan) a következő fejezetben ismertetett csepp epitaxia útján is elő lehet állítani.

A csepp epitaxia elgondolását Koguchi és munkatársai dolgozták ki részletesen az 1990-es évek elején [6] [7], de már 1985 és 1991 közötti időszakban is jelentek meg már cikkek ebben a témában. A témakörben megjelent cikkek számának alakulását a 2. ábrán követhetjük nyomon. Az ábrán látható, hogy 1985 és 2016 között az évek során, a csepp epitaxiával kapcsolatban megjelent publikációk száma exponenciálisan növekszik.



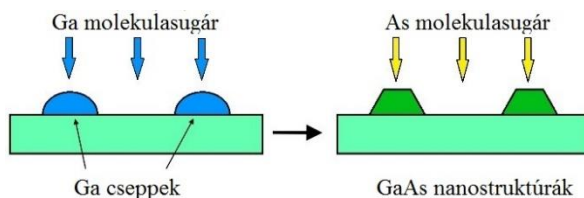
2. ábra.

A csepp epitaxiával kapcsolatos publikációk száma 1985 és 2016 között.

Ezek a nanostruktúrák molekulásugár epitaxiás berendezésben (molecular beam epitaxy, MBE) csepp epitaxiával növeszthetők [6]. A szilárd forrású molekulásugár epitaxiával történő rétegnövesztés lényegében azon alapul, hogy az egykristályos hordozóra egy egykristályos vékonyréteget párologtatunk fel.

A nanostruktúrákat többféle epitaxiális módszerrel is növeszthetjük. Egyik ilyen a már említett módszer a csepp epitaxia. E folyamat eredményeként különféle nanostruktúrák (kvantum pontok (QD), kvantum gyűrűk (QR), dupla kvantum gyűrűk (DQR), kvantumvölgyek (MQW), nanolyukak) jönnek létre.

A technológia lényege, hogy az első lépésben a hordozó (például GaAs) felületére egy a III. főcsoportból származó fémet választunk le, amely cseppesedik. A második lépésben a minta hőmérsékletének és a háttérben lévő V. főcsoportból származó anyag (például arzén) nyomásának a függvényében különféle nanostruktúrák alakulnak ki (3. ábra).



3. ábra.

Nanostruktúrák kialakulása a csepp epitaxia folyamata során (forrás: [7]).

A kialakuló nanostruktúrák jellege több tényezőtől függ. A csepp epitaxia során alacsony hőmérsékleten, nagy arzén háttérnyomás esetén a cseppbe lévő gallium atomok nem tudnak a cseppből eldiffundálni, mert az arzén atomok megkötik őket.

Így a csepp kikristályosodik és kvantum pontok alakulnak ki. A gallium csepp mérete a gallium részecskeáramával, a sűrűsége a gallium felületi befedettségével míg az eloszlása a hordozó hőmérsékletével szabályozható. A nanostruktúra morfológiája szintén a hordozó hőmérsékletével és az arzén háttérnyomásával szabályozható [7].

A rétegnövesztés során fontos tudnunk, hogy adott technológiai paraméterek (például az arzén nyomása, mintahőmérséklet, Ga fluxus) esetén hogyan és milyen nanostruktúrák alakulhatnak ki. E folyamatot az általunk fejlesztett Quantum Structure Analyzer 1.0 programmal modelleztük. E szoftver a Kohonen-féle önszerveződő hálók segítségével működik [8].

2. Kvantum struktúrák klaszterezése

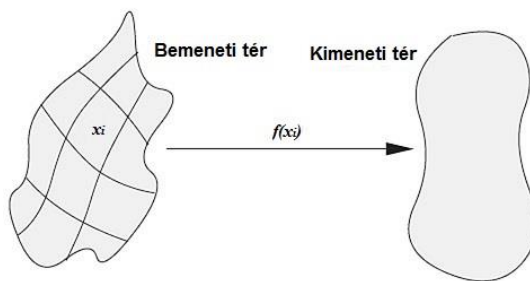
Ebben a dolgozatban célunk, annak megállapítása, hogy adott környezeti feltételek (a Ga adott részecskeárama, az arzén adott nyomása, a szubsztrát adott hőmérséklete stb.) esetén hogyan csoportosíthatóak a kvantum struktúrák. Az egyes nanostruktúrák kialakulását számos tényező befolyásolja, ráadásul két típusú struktúra között az átmenet folytonos. Így nem tudunk egy egyszerű szabályrendszert kidolgozni a megkülönböztetésükre. Emiatt a különféle kvantum struktúra klaszterek felismerésére neurális hálót alkalmazunk. Ezen hálózatokat a hagyományos módszerektől (szabályrendszer felállítása) eltérően nem beprogramozzuk, hanem betanítjuk a mintaosztályok (klaszterek) felismerésére. Ez a tanítás történhet felügyelt vagy nem felügyelt módon. A felügyelt tanítás esetén a be és a kimenet egyaránt ismert (például függvény approximáció) így a leképezés hibája könnyen meghatározható.

Sajnos a kimeneti adatai nem minden esetben ismertek, így nem az $f(x_i)$ leképezés - ebben a formában - nem állapítható meg. Ilyen esetekben a neurális hálózatot nem felügyelt módon tanítjuk be. Ebben az esetben az $f(x_i)$ leképezést a bemenetek egyes statisztikai jellemzői alapján állapítjuk meg [9].

A neurobiológiai kutatások kimutatták, hogy a különböző érzékszervi bemenetek (ingerek, például hallás, látás, motorikus stb.) szabályos módon leképezhetők az agykéreg megfelelő területeinek a működésére. Ezt topografikus leképezésnek nevezzük. Jó példa erre az emlősök látásának esete (4. ábra) [9].

A szem különböző részeiben lévő receptor csoportok a posterior cortex különböző részeire képeződnek le önszerveződő módon, topologikusan rendezett formában (adott receptorcsoport mindig ugyanarra a területre képez le).

Az önszerveződő leképezés (Self-Organizing Map, SOM) egy neurobiológiai kutatások által inspirált mesterséges topografikus leképezés (4. ábra). Lényege az, hogy egy tetszőleges dimenzójú bemenetet egy egy vagy két dimenzós kimeneti térbe képezzük le, topologikusan rendezett formában. E leképezés pontjait neuronoknak nevezzük, melyek szelektív módon különféle bemeneti mintákra (vagy mintaoszály(ok)ra) vannak hangolva. Ez azt jelent, hogy adott bemenet hatására adott neuron lép működésbe. Ezt nyertes neuronnak nevezzük.



4. ábra.

A topografikus leképezés.

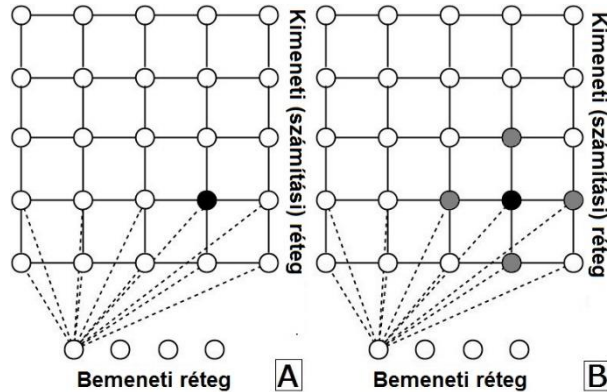
Az Kohonen-féle önszerveződő leképezés elméletét először egy finn tudós, Teuvo Kohonen professzor dolgozta ki 1981-ben [10]. Az algoritmus a felügyeletet nem igénylő neurális hálózatok családjába tartozik. Ez azt jelenti, hogy a bemenethez rendelt kimenet nem ismert. Ez a leképezés egy előrecsatolt (feedforward) 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 négy fő részből áll: inicializáció, verseny, kooperáció, adaptáció. Az inicializáció során az összes összeköttetést véletlenszerű súlyokkal látjuk el.

A neuronok közötti versenynél kezdetben adott egy D dimenziós bemenet $\mathbf{x} = \{x_i, i = 1..D\}$, és az összeköttetések súlya az i -ik bemenet és a j -ik neuron között $\mathbf{w}_j = \{w_{ji}, j = 1..N; i = 1..D\}$, ahol az N a neuronok száma. Ha definálunk egy diszkrimináns függvényt, ami egy Euklideszi távolság az \mathbf{x} bemeneti vektor és a \mathbf{w} súly között ekkor az összes neuronra:

$$d_j(x) = \sum_{i=1}^D (x_i - w_{ji})^2. \quad (1)$$

A képlet azt fejezi ki, hogy az a neuron, amelyik súlyvektora a legközelebb áll a bemeneti vektorhoz, az lesz a nyertes (5.A ábra). A neurobiológiai kutatások azt is kimutatták, hogy a gerjesztett neuronok között laterális kölcsönhatás is fellép vagyis a neuronok kooperálnak. Ez azt jelenti, ha egy neuron “tüzel” [10], akkor a hozzá közeli neuronok is hajlamosak gerjesztett állapotba kerülni (5.B ábra).



5. ábra.

(A) A győztes neuron (fekete), (B) a győztes neuron (fekete) és a gerjesztett neuronok (szürke).

Ez a topologikus szomszédság a távolság függvényében exponenciálisan lecseng. Általában ez a lecsengés exponenciális jellegű függvény szerint történik, de ez más jellegű is lehet. Legyen σ_0 és a τ_σ egy konstans paraméter:

$$\sigma(t) = \sigma_0 * e^{-\frac{t}{\tau_\sigma}}. \quad (2)$$

Legyen S_{ij} a távolság az i -ik és a j -ik neuron között és $I(x)$ a nyertes neuron indexe. Ebben az esetben:

$$T_{j,I(x)} = e^{-\frac{S_{iI(x)}^2}{2\sigma^2}}. \quad (3)$$

Ez a függvény maximális a nyertes neuronnál és $\lim_{t \rightarrow \infty} T_{j,I(x)} = 0$, transláció invariáns szimmetrikus a győztes neuron körül.

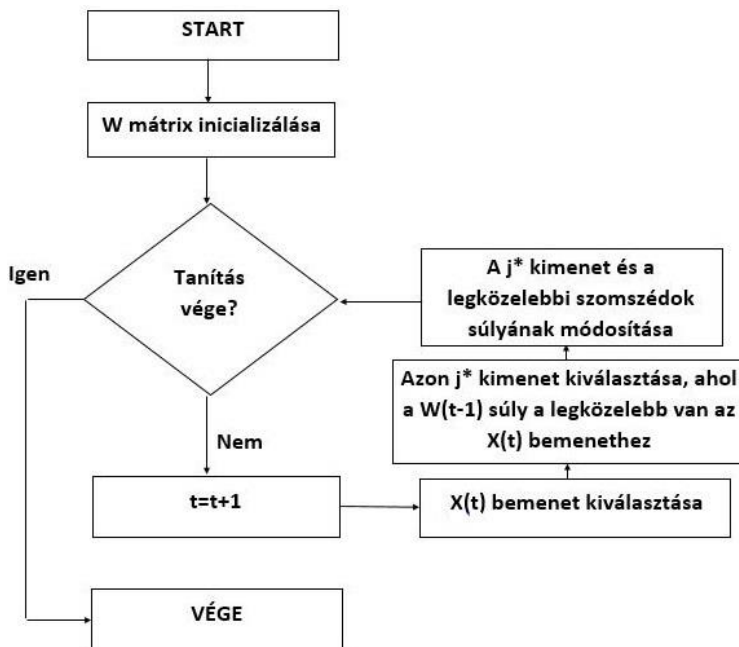
Az önszerveződő hálóknál fontos szerepe van az adaptív, tanuló folyamatoknak, melynek során a neuronok önszerveződnek (adaptáció). A topografikus szomszédság miatt nemcsak a győztes, hanem a szomszédok súlya is változik (természetesen nem olyan mértékben mint a győztesé). Legyen η_0 és a τ_η egy konstans paraméter. A tanulási ráta képlete a következő:

$$\eta(t) = \eta_0 * e^{-\frac{t}{\tau\eta}}. \quad (4)$$

A súlyváltozás egyenlete a következő:

$$w_{ji} = \eta(t) * T_{j,I(x)}(t) * (x_i - w_{ji}) \quad (5)$$

A topológikus rendezettség e folyamat többszöri megismétlésével jön létre. A 6. ábrán e algoritmus folyamatábrája látható.



6. ábra.

A Kohonen SOM algoritmus folyamatábrája.

3. Kvantum struktúrák klasszifikációja fuzzy következtetési rendszerrel

A kvantum struktúrák osztályozására egy lehetséges módja az, hogy egy formafaktort vezetünk be. Mivel a különféle nanostruktúrák között az átmenet folytonos, ezért ezt a formafaktort például egy ún. fuzzy következtetési rendszer segítségével is kiszámolhatjuk.

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 [11] [12].

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:

$$\gamma_x \in X \rightarrow [0,1] \quad (6)$$

ahol γ_x az X fuzzy halmaz tagsági függvénye, mely egyértelműen megadja a halmazt. Különböző alakú tagsági függvények léteznek, a dolgozatunkban a leggyakrabban használt háromszög és a trapéz alakú tagsági függvényeket alkalmazunk [11] [12].

Ezen elmélet egyik gyakorlati alkalmazása az ún. fuzzy következtetési rendszer. Ezek a rendszerek egy szabálybázis alapú modellen alapulnak. Ez a modell fuzzy halmazokból és „ha bemenet A , akkor a kimenet B ” típusú szabályokból áll.

4. Eredmények és diszkusszió

A önszerveződő leképezés bemeneti adatai (másnéven a tanítóadatok) az 1. táblázatban láthatók. Minden egyes mintához egy bemeneti adat vektor tartozik, ami a sorszámot (A), a hordozó hőmérsékletet (B), a komponens (például gallium, indium, alumínium) fluxust (C), a felületi befedettség (D), az arzén háttérnyomása (E), a hőkezelés hőmérséklete (G) és időtartama (F), a nanostruktúra geometriai méretei (alapkör átmérője (H), a nanogyűrű gerinckörének az átmérője (I), szubsztrát felületének és a nanostruktúra tetejének a távolsága (J), nanostruktúra tetejének és a minimumpontjának a távolsága (K)), illetve a nanostruktúrák felületi eloszlását tartalmazza (L).

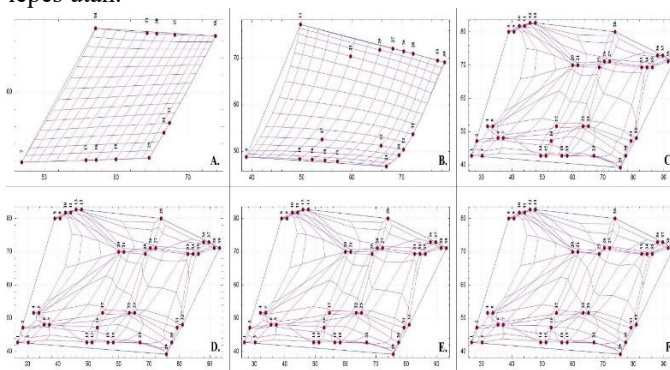
1. táblázat.

A önszerveződő leképezés bemeneti adatai. A táblázat oszlopai sorszámozott (A), a hordozó hőmérséklet (B), a komponens (például gallium, indium, alumínium) fluxust (C), a felületi befedettség (D), az arzén háttérnyomása (E), a hőkezelés hőmérséklete (G) és időtartama (F), a nanostruktúra geometriai méretei (alapkör átmérője (H), a nanogyűrű gerinckörének az átmérője (I), szubsztrát felületének és a nanostruktúra tetejének a távolsága (J), nanostruktúra tetejének és a minimumpontjának a távolsága (K)), illetve a nanostruktúrák felületi eloszlását tartalmazza (L).

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	200	0,19	2,75	1,00E-04	10	350	60	0	7	0	1,20E+10
2	250	0,025	2,75	1,00E-04	10	350	107,5	0	37	0	4,40E+08
3	200	0,75	3,75	5,00E-05	1	350	50	0	5	0	3,60E+10
4	300	0,75	3,75	4,00E-06	5	300	60	40	2	2	1,50E+09
5	300	0,05	1,75	1,00E-05	0,33	300	100	40	20	15	1,30E+08
6	260	0,025	3,75	2,00E-04	10	350	167	0	50	0	1,60E+08
7	260	0,025	3,75	2,00E-04	10	350	250	0	35	0	1,60E+08
8	620	0,4	3,2	7,00E-07	5	620	350	150	25	55	8,00E+06
9	620	0,4	3,2	9,00E-07	5	620	350	150	25	45	9,00E+06
10	640	0,8	2	1,00E-07	3	640	200	200	15	82,4	9,00E+06
11	640	0,8	2,4	1,00E-07	3	640	200	200	15	91,1	9,00E+06
12	650	0,8	3,2	1,00E-07	3	600	15,8	15,8	11	22	8,00E+06
13	650	0,8	2	1,00E-07	2	650	300	200	2	62	8,00E+06
14	200	0,19	3,75	6,40E-05	10	350	60	0	7,5	0	1,50E+10
15	200	0,19	3,75	5,00E-05	1	350	60	0	7	0	1,20E+10
16	250	0,025	3,75	5,00E-05	10	350	110	0	32	0	4,40E+08
17	300	0,75	3,75	4,00E-06	5	300	80	35	3,6	3,6	1,50E+09
18	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

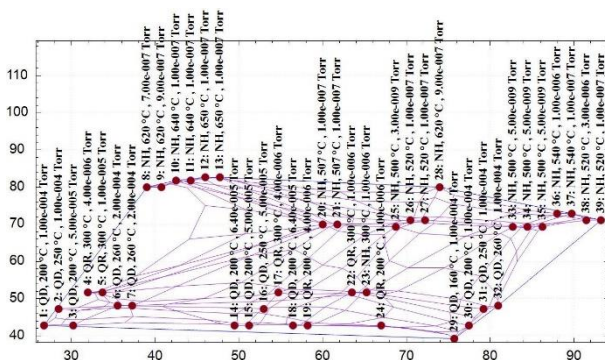
A Kohonen-féle önszerveződő leképezés egy iteratív algoritmus, aminek egy futási eredménye a lépések számának a függvényében 7. ábrán látható. Ezen az ábrán a leképezés eredményét, a Kohonen gráf kialakulását láthatjuk, (A.) 5 lépés után, (B.) 10 lépés után, (C.) 100 lépés után, (D.) 500 lépés után, (E.) 1000 lépés után és (F.) 2000 lépés után.



7. 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.

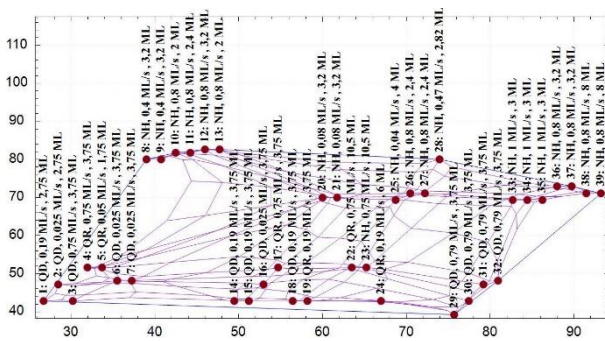
A 8. ábrán az látható, hogy a szubsztrát hőmérséklete alulról felfelé növekszik és balról jobbra az arzén háttérnyomása statisztikus értelemben csökken.



8. ábra.

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

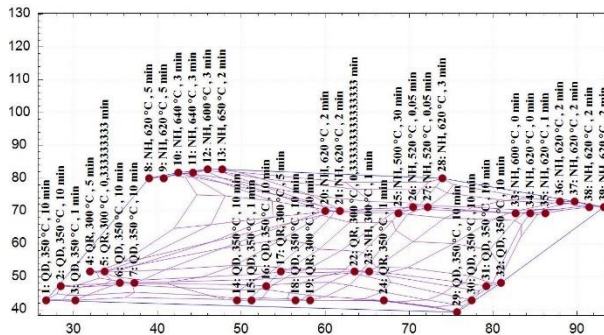
A 9. ábrán az látható, hogy a komponens fluxus alulról felfelé növekszik és balról jobbra az felületi befedettség statisztikus értelemben növekszik.



9. ábra.

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

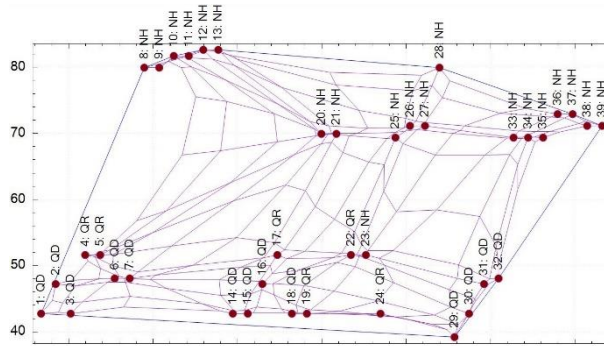
A 10. ábrán az látható, hogy a hőkezelés hőmérséklete alulról felfelé növekszik és balról jobbra a hőkezelés időtartama statisztikus értelemben csökken.



10. ábra.

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

A nanostruktúrák osztályozására többféle módszer is elképzelhető. A szakirodalomból [13] [14] [15] [16] [17] vett eredeti osztályozás a bemeneti adatok [18] alapján a 10. ábrán látható.



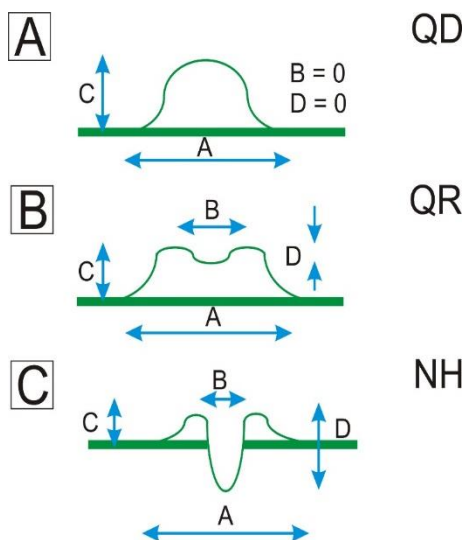
11. ábra.

A nanostruktúrák eredeti osztályozása a szakirodalmi adatok alapján.

A nanostruktúrák osztályozása az adott nanostruktúra geometriai adatai alapján is elemeztük, a hozzátartozó magyarázat a 12. ábrán látható. Az „A” részábra kvantum pontot (QD), a „B” részábra kvantum gyűrűt (QR) és a „C” részábra nanolyukat ábrázol (NH). A geometriai paraméterek értelmezése a következő: az *A* méret a nanostruktúra alapkörének az átmérője, amit következő módon definiálhatunk:

$$A = A(d) = \begin{cases} d, & \text{ha } C \geq 0,1 \text{ nm} \\ 0, & \text{máshol} \end{cases} \quad (7)$$

A *B* méret a nanogyűrű gerinckörének 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.

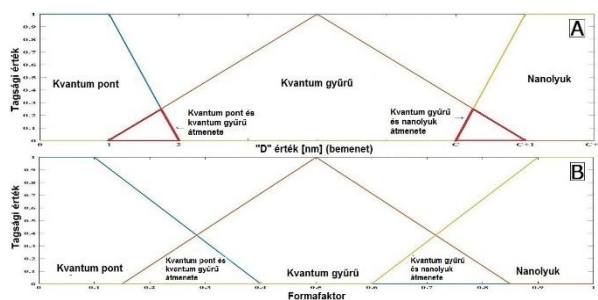


12. ábra.

A különféle nanostruktúrák geometriai adatai. Az „A” részára kvantum pontot (QD), a „B” részára kvantum gyűrűt (QR) és a „C” részára nanolyukat ábrázol (NH).

A formafaktort a B , C és a D geometriai paraméterek alapján határozhatjuk meg. Ha a B paraméter alapján határozzuk meg, akkor a kvantum pontokat el tudjuk különíteni a kvantum gyűrűktől és a nanolyukaktól. Ugyanakkor az utóbbi kettőt nem tudjuk egymástól elkülöníteni valamint a nanostruktúra átmenet típusát sem tudjuk meghatározni.

Ellenben, ha a D paraméter alapján, a C magassággal parametrizált fuzzy halmazokkal határozzuk meg a formafaktort, akkor a kvantum gyűrűket és a nanolyukakat jól el tudjuk különíteni egymástól, valamint a nanostruktúra átmenetek típusát is meg tudjuk határozni (13.A ábra). Az ábrán, a piros színnel bekeretezett részek a nanostruktúra átmenetek (például kvantum pont és kvantum gyűrű, vagy kvantum gyűrű és nano lyuk átmenete). A 13.B ábrán a kimenet tagsági függvényei láthatók. Miután a szabálybázisban egy vagy több szabály (feltétel) igaz értéket adott (vagyis tüzelt), a kapott fuzzy számot a centroid módszerrel defuzzifikáljuk és kapunk egy valós számot. Attól függően, hogy ez a szám a kimeneten melyik intervallumba esik, kvantum pontot, kvantum gyűrűt, nano lyukat, illetve kvantum pont és kvantum gyűrű, vagy kvantum gyűrű és nano lyuk átmenetet detektálunk.



13. ábra.

(A) Tagsági függvények, ha a formafaktor meghatározásához a C és a D paramétert használjuk. Az ábrán, a piros színnel bekeretezett részek a nanostruktúra átmenetek (például kvantum pont és kvantum gyűrű, vagy kvantum gyűrű és nano lyuk átmenete). (B) A kimenet tagsági függvényei. keretezett részek a nanostruktúra átmenetek (például kvantum pont és kvantum gyűrű, vagy kvantum gyűrű és nano lyuk átmenete).

A leképezést ha-akkor típusú fuzzy szabályokkal írjuk le, melyeket a 2. táblázat tartalmazza. Amennyiben ezek közül csak egy szabály (feltétel) igazgá válik (azaz „tüzel” (a fuzzy terminológiában)) akkor a feltételhez tartozó nanostruktúrát (kvantum pontot, kvantum gyűrűt, nano lyukat) detektáltunk. Ha egyszerre két szabály (feltétel) válik igazgá, akkor nanostruktúra átmenetet találtunk (például kvantum pont és kvantum gyűrű, vagy kvantum gyűrű és nano lyuk átmenetet).

2. táblázat.

A formafaktor meghatározását leíró fuzzy szabálybázis.

Bemenet és feltétel	Kimenet
$D < 2\text{nm}$	kvantum pont
$(D \geq 1\text{nm}) \text{ és } (D \leq C+1 \text{ nm})$	kvantum gyűrű
$D > C \text{ nm}$	nanolyuk

A 13. ábrán a fuzzy következtetési rendszerrel meghatározott nanostruktúrák osztályozásának eredménye látható, a nanostruktúrák geometriája alapján. Az ábrán azt is feltüntettük, hogy milyen arányban tartozik az adott minta egy adott nanostruktúra osztályhoz.

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

$$QD(\%) = \frac{(Df - QR_{min})}{(QD_{max} - QR_{min})} * 100, \quad (8)$$

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:

$$QR_1(\%) = 100 - QD(\%) = \frac{(QD_{max} - Df)}{(QD_{max} - QR_{min})} * 100, \quad (9)$$

ahol $QR_1(\%)$ a kvantum gyűrű aránya százalékban, a többi paraméter értelmezése ugyanaz, mint az 8-as egyenletben.

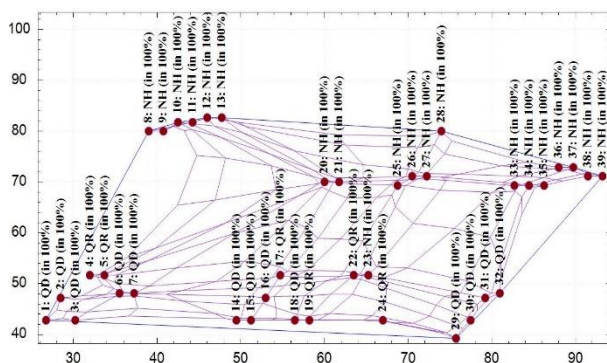
Ugyanezt az arányt, kvantum gyűrű és nanolyuk átmenet esetén az előző esethez hasonló módon számoljuk ki:

$$QR_2(\%) = \frac{(Df - NH_{min})}{(QR_{max} - NH_{min})} * 100, \quad (10)$$

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:

$$NH(\%) = 100 - QR_2(\%) = \frac{(QR_{max} - Df)}{(QR_{max} - NH_{min})} * 100, \quad (11)$$

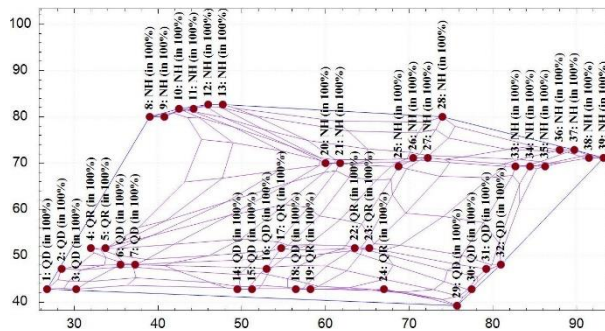
ahol $NH(\%)$ a nanolyuk aránya százalékban, a többi paraméter értelmezése ugyanaz, mint az 10-es egyenletben. E megoldás két előnye, hogy egyrészt egyszerű, másrészt pontosan osztályoz.



14. ábra.

A nanostrukturák osztályozásának eredménye fuzzy következtetési rendszerrel, a nanostrukturák geometriája alapján.

Egy további lehetőség is rejlik a nanostruktúrák osztályozásában. Ha az elődleges, a közvetlen módon szabályozható paraméterek alapján osztályozzuk a nanostruktúrákat, akkor ez tervezési segédletként is felfogható. Ezek a paraméterek a hordozó hőmérséklet, a komponens fluxus, az arzén háttérnyomása, a hőkezelés hőmérséklete és időtartama. A 15. 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, illetve a nanostruktúra átmenetek arányát is ugyanúgy tudjuk meghatározni. E megoldás előnye, hogy az osztályozás a közvetlenül szabályozható paraméterek alapján történik.



15. 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 23-as bemeneti vektornál az eredeti osztályozáshoz képest eltérést tapasztalhatunk, mivel tévesen kvantum gyűrűként azonosítja a nanolyukat. Ez egy szokatlan minta, hiszen általában a nanolyukak általában 500 °C felett és 10^{-7} Torr nyomás alatt alakulnak ki. Ezzel ellentétben, ez a nanolyuk egy alacsony hőmérsékleten ($T_{hordozó} = 300$ °C) és közepes arzén nyomással ($P_{as} = 10^{-6}$ Torr), 1 percig tartó, $T = 300$ °C fokos hőkezelés nyomán alakult ki [19].

Konklúzió

Dolgozatunkban, önszerveződés útján kialakuló nanostruktúrák klasztereződését vizsgáltuk. Ezek a paraméterek az az alakjuk, méretük, eloszlásuk jelentősen befolyásolják 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. Dolgozatunkban, ezen nanostruktúrák önszerveződő osztályozási vizsgáltuk meg, az adott nanoszerkezet

formatényezője alapján. Felvázoltuk a nanostrukturák osztályozásának néhány lehetséges módját is. Egyrészt, megvizsgáltuk, hogyan osztályozhatjuk nanostrukturákat a Kohonen-féle önszerveződő leképezéssel (SOM – Self-Organizing Mapping), másrészt ezt kiegészítve fuzzy-féle következtető rendszer alkalmazásával. Az fuzzy következtető rendszerrel két különféle közelítést is megvizsgáltuk. Az egyik ilyen megközelítés, hogy a formatényezőt a kialakult nanostrukturák geometriai méretei alapján határozzuk meg. A másik, hogy a formatényezőt a közvetlenül megváltoztatható bemeneti paraméterek (például a hordozó hőmérséklete, arzén nyomása stb.) alapján számoljuk ki.

Irodalomjegyzék

- [1] Zerui Zheng, Haining Ji, Peng Yu, Zhiming Wang, "Recent Progress Towards Quantum Dot Solar Cells with Enhanced Optical Absorption," *Nanoscale Res Lett*, vol. 11, pp. 266-234, May. 2016.
- [2] Wu, Jiang; Chen, Siming; Seeds, Alwyn; Liu, Huiyun, "Quantum dot optoelectronic devices: lasers, photodetectors and solar cells," *Journal of Physics D Applied Physics*, vol. 48, p. 363001, 2015.
- [3] A. Luque, A. Martí, C. Stanley, "Understanding intermediate-band solar cells," *Nature Photonics*, vol. 6, pp. 146–152, February 2012.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] N. Koguchi, S. Takahashi, T. Chikyow, "New MBE growth method for InSb quantum well boxes," *Journal of Crystal Growth*, pp. 688-692, 1991.
- [7] 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.
- [8] M. Farkas, L. T. Kóczy, Á. Nemcsics, "A hybrid approach on dimension reduction and fuzzy clustering of droplet epitaxial grown quantum structure experiments," , 3rd Symposium on Computational Intelligence, Győr, 2009.

- [9] R. Rojas, "Kohonen Networks," in *Neural Networks, A Systematic Introduction*. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 1996, pp. 391-412.
- [10] T. Kohonen, *Self-Organizing Maps*, 3rd ed.: Springer, 2001.
- [11] L. A. Zadeh, "Fuzzy sets," *Information and Control*, vol. 8, no. 3, pp. 338–353, 1965.
- [12] L. T. Kóczy, D. Tikk, *Fuzzy systems*. Budapest, Hungary, 2007.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] Á. Nemcsics, Ch. 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.
- [16] Ch. Heyn, A. Stemmann, A. Schramm, H. Welsch, W. Hansen, Á. Nemcsics, "Faceting during GaAs quantum dot self-assembly by droplet epitaxy," *Applied Physics Letters*, vol. 90, no. 20, p. 203105, 2007.
- [17] Ch 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.
- [18] 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.
- [19] 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.