

# **Fejezetek a nanoelektronika mikrofizikájából**

*(kiegészítő vázlat az előadásokhoz)*

*Dr. Zsebők Ottó*

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához  
használható az előadások kiegészítéseként.*

## Tartalomjegyzék

<b>1. Előszó .....</b>	<b>4</b>
<b>2. Rövid történeti áttekintés .....</b>	<b>5</b>
<b>3. Kristályos anyagok .....</b>	<b>13</b>
3.1. Kristályrácsok .....	13
3.2. Kristályrendszerek .....	16
3.3. Kristálytani síkok és Miller-indexek .....	19
<b>4. Kristálytani hibák .....</b>	<b>24</b>
4.1. Kristályhibák típusai .....	25
4.1.1. Ponthibák (0-dimenziós hibák).....	25
4.1.2. Vonalhibák vagy diszlokációk (1-dimenziós hibák).....	26
4.1.3. Síkhibák (2-dimenziós hibák).....	29
4.1.4. Térfogati hibák (3-dimenziós hibák).....	29
<b>5. III-V vegyület-félvezetők.....</b>	<b>31</b>
5.1. Heterostruktúrák.....	31
5.2. III-V vegyület-félvezetők.....	32
5.2.1. III-V biner vegyület-félvezetők .....	32
5.2.2. III-V terner vegyület-félvezetők.....	34
5.2.3. III-V kvaterner vegyület-félvezetők.....	35
5.3. Elektronikai tulajdonságok .....	36
5.3.1. Elektronok három dimenzióban .....	36
5.3.2. Mozgásukban korlátozott elektronok.....	36
5.3.3. Kétdimenziós elektrongáz.....	38
<b>6. Epitaxiális rétegnövesztés.....</b>	<b>40</b>
6.1. Rövid történeti áttekintés.....	40
6.2. Homoepitaxia és rácsillesztett heteroepitaxia .....	40
6.3. Rácsillesztetlen heteroepitaxia.....	41
6.4. Nagy strukturális rácsillesztetlenség.....	43
6.5. Tiltott sávok és sávszerkezetek technológiái.....	44
<b>7. Fém-organikus gőzfázisú epitaxia.....</b>	<b>46</b>
7.1. Bevezetés.....	46
7.2. A MOVPE jellemzői .....	46

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

7.3. A MOVPE fontosabb folyamatai.....	48
7.4. Rétegnövekedés mechanizmusa és folyamata.....	53
7.4.1. A rétegnövekedés termodinamikája.....	54
7.4.2. Felületi tulajdonságok .....	55
7.4.3. Kinetika – Gázfázisú és felületi reakciók .....	56
7.5. Transzportfolyamatok.....	57
7.5.1. Tömeg- és hőszállítás .....	57
7.5.2. Gázáramlás .....	58
7.5.3. Rétegnövekedési sebesség .....	59
7.6. Szennyezők .....	60
7.6.1. Adalékok .....	60
7.6.2. Szennyezők.....	61
<b>8. Molekulasugaras epitaxia.....</b>	<b>63</b>
8.1. Rendszerjellemzők.....	64
8.2. Szennyezők .....	66
8.3. MBE vs. MOVPE.....	66
<b>9. Karakterizálási módszerek .....</b>	<b>68</b>
9.1. Elektronsugaras analízis.....	68
9.1.1. Pásztázó elektronmikroszkópia.....	69
9.1.2. Energiadiszperzív Röntgen-spektrometria.....	71
9.1.3. Auger-elektron spektroszkópia.....	73
9.2. Röntgen-diffrakció.....	76
<b>10. Maratási módszerek.....</b>	<b>79</b>
10.1. Nedves kémiai maratás .....	79
10.2. Száraz maratás .....	81
10.2.1. Plazma–felület kölcsönhatások.....	82
10.2.2. Száraz maratási módszerek.....	84
10.2.3. Kémiaileg segített ionsugaras maratás (CAIBE) .....	85

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

# 1. Előszó

Ez a vázlat a „Mikrofizika” című tantárgy tanulásához és előadásainak követéséhez készült, kizárólag a 2008/2009-es tanév II. félévéhez. A tantárgy egyrészt a napjainkban rohamosan fejlődő elektronikai technológiák alkalmazási területeinek sokféleségét, valamint az ipari és kutatási csúcstechnológiájú mikro- és nanotechnológiai eljárásokat kívánja bemutatni – mikrofizikai szemszögből.

A vázlat központi témája a lehetőség szerint minél nagyobb integráltsági fokot megvalósító elektronikai és optoelektronikai eszközök megvalósíthatósága mikrofizikai összefüggések felhasználásával. A félvezetőanyagokon kívül természetesen a nanotechnológiák egyéb fontos anyagai is bemutatásra kerülnek. A hagyományos és új, világszínvonalú nanotechnológiák is mind átfogóan, mind pedig leendő mérnökök számára érdeklődésre számot tartó részleteikben kerülnek bemutatásra és lehetőség szerint minél szemléletesebben illusztrálva. Az előállítási technológiákon kívül mikrofizikai vizsgálati módszerek ismertetését is tartalmazza a jegyzet a világ élvonalába tartozó kutatásainak és technológiáinak példáin bemutatott vizsgálatokkal és kiértékelt eredményekkel. A vázlat szeretné bemutatni az elektronikai ipar alapanyagféleségeit ezek kompozíciós lehetőségeivel, a választható különféle technológiákat egészen a kvantumhatásokat mutató atomonként felépített nanostruktúrákig, valamint sokéves kutatási eredményeken alapuló segítséget is szeretne adni a jövő mérnökeinek a legmegfelelőbb vizsgálati módszerek kiválasztására, mely segítségével az anyagok és elektronikai struktúrák legbelsőbb és legösszetettebb titkai tárulhatnak fel.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

## 2. Rövid történeti áttekintés

Az alábbi fejezet egy rövid történeti áttekintést kíván adni az elektronikához kapcsolódó mikrofizikai szempontokat figyelembe véve – és természetesen a teljesség igénye nélkül.

Rövid történeti összefoglalónkban egészen i.e. 3000-ig tudunk időben visszamenni, amikor már az első ötvözetet, a bronzot (réz-ón ötvözet) sikerült a Közel-Keleten, Krétán és Egyiptomban is előállítani. Nem csak az általános értékmérés, de a mai elektronikai ipar számára is nagy jelentőséggel bíró arany előállítása is Egyiptomból, illetve Nubiából (azaz „az arany földjéről”) származik. Időszámításunk előtt 2130-tól vannak emlékeink a súlyok, mértékegységek és mérőeszközök alkalmazásáról, melyeket a Közel-Keleten, Egyiptomban és Mezopotámiában használtak először. Az egyiptomiaknál ezt el is vonatkoztatták, mivel feltevésük szerint a túlvilágra bejutás előtt az istenek az emberek szívét is lemérték. A mértékegységek zűrzavara aztán egészen 1791. március 30-ig tartott, amikor a francia nemzetgyűlés a Föld területének 40 milliomod részét választotta a hosszúság mértékegységének – amivel megszületett a párizsi méter. Ezután 1875-ben egységes mértékrendszert alakítottak ki a hosszúságra, tömegre és időre, amivel megszületett az SI rendszer (System International d'Unités).

De most térjünk vissza az időszámítás előtti időszak anyagtudományára és technológiáira. Természetesen mér a későbbi időkben, i.e. 1000-tól már a nagyobb megmunkálási hőmérsékletet igénylő vas előállítása is lehetővé vált faszén és fűjtató felhasználásával, de a szilícium, foszfor és kén tartalmak még gondot okoztak megfelelő minőségű eszközök előállításához. Meglepő módon körülbelül i.e. 1400-ban készült nagytisztaságú vas tör került elő a törökországi Anatólia romjai alól, mely fejlett technológiára utal. A vasérc kezdett elterjedni a kovácsoláson, vörösizzásra hevítésen majd lehűtésen alapuló technológia révén. A XIV. századtól már lehetővé vált olvasztott vasérc feldolgozására megfelelő kemence alkalmazása is, de érdekes módon 1760-ig ez a technológia nem terjedt el. Az iránytű alkalmazására példák már i.e. 1200-tól fellelhetők. Például kis mágneses alakot állítottak arra a differenciálműre, melyet a „délre mutató kocs” tetején helyeztek el. Ez mintegy kiegyenlítette a kocs külső és belső kerekeinek fordulatszámja közti különbséget. A számítástechnika szempontjából fontos abakuszt már i.e. 500-tól használták Egyiptomban, Babilonban, Görögországban, Rómában. Míg Egyiptom már 10-es csoportokat használt, Róma 5-ös számrendszert alkalmazott. Anyagtudományos és elektronikai szempontból az egyik legfontosabb szigetelőanyag a porcelán is megjelenéséről i.e. 618-tól nyomon követhető Kínában. Visszaugorva időrendi áttekintésünkben a számítástechnikához, i.e. 876-tól megjelent a

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

nulla, mint szimbólum, melyet Babilonban (Irak) és a maják is használtak, hiszen ki kellett valahogy fejezni a számjegyek értékét is, így létrejött a helyérték is. A 0 egyébként Nagy Sándor közvetítésével jutott el Indiába.

Az optika alapjainak letétele a bászrai (mai Irak) Ibn al-Haitham nevéhez fűződik 1010-től, aki Kairóban dolgozott. Leírta a szem anatómiáját, a tükröződést és a fénytörést is. A fény tanulmányozására csiszolt lencsét javasolt. Az ásványtan alapjainak lefektetése Avicenna, arab orvos nevéhez fűződik 1020-tól. Négy részre osztotta az ásványokat: vízben oldódó sók; gyúlékony kén típusúak; kőzetek (melyek sem tűz, sem víz hatására nem változnak); és olvasható ércek és fémek. Az 1300-as évektől eredeztethetően kialakuló alkímia alapja a kénsav és szulfátok voltak.

Visszatérve az optikához, a szivárvány rejtélyének részbeni megfejtése Dietrich von Freiburg nevéhez fűződik, aki 1304-ben felismerte, hogy a szivárvány kialakulásánál a fénysugár minden egyes esőcsepről „visszatükröződik”. A magyarázat teljessé válásához René Descartes szolgáltatta a kiegészítést, feltárva a fénytörés jelenségét. A további jelentős optikai fejlődés 1590-re tehető, amikor Zacharias Janssen megalkotta 10-szeres nagyítású mikroszkópját, melyet aztán Antoni van Leewenhoek tudta továbbfejleszteni lencserendszereivel 300-szoros nagyítás eléréséig.

A hőmérő megjelenése 1597-ben Galileo Galilei nevéhez fűződött, aki egy nyílással ellátott, lefordított keskeny nyakú üveget helyezett nyílásával lefelé egy vízzel töltött edénybe. Az üveg nyakában lévő víz szintje attól függött, hogy az üvegbe zárt levegő a hőmérséklettől függően mennyire tágult ki. A hőmérő alapja tehát a gázok hőtágulása volt. 1718-ban Daniel Gabriel Fahrenheit igazította a hőmérsékletmérést a víz forrásához, majd Anders Celsius 1742-ben létrehozta a 100 fokos skálát és felismerte a külső légnyomás tengerszinttől való függését.

Az első számológép már 1623-ban megjelenhetett Wilhelm Schickard révén. Számológépének 10-fogú kerekei még szorzást és osztást is lehetővé tettek. Egyébként Pascal és Leibniz is készített hasonló szerkezeteket. A koordinátageometria alapjait René Descartes fektette le 1637-ben. A napjaink félvezető-technológiái számára nélkülözhetetlen vákuumot Otto von Guericke alkalmazta először híres 1654-es magdeburgi gömbös kísérletében, ahol félgömböt illesztett össze, majd a levegő jelentős részét kiszivattyúzta a gömbből, hogy aztán lovak se tudják széthúzni a külső légnyomás által összetartott félgömböket. Fontos megjegyezni, hogy ebben az időben az emberek a nemlétezés szörnyű gondolatát kapcsolták a vákuumhoz ("horror vacui"), ahogy a latin vacuum szó is üreset jelent. Torricelli és Pascal is foglalkozott a vákuummal, melyre vonatkozóan Pascal gondolata különösen érdekes napjainkban is: „A természet inkább szembenéz a saját elmúlásával, mintsem a legkisebb üres térrel.” Ebben az időben az éter megközelítést próbálták alkalmazni, mely során az étert

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

tekintették a fény szállító médiumának is. Napjainkra már a „legüresebb tér” is különféle mezőkkel van tele.

Az 1654-től megjelenő valószínűségszámítás Pierre de Fermat és Blaise Pascal nevéhez működik. A 0-ra és 1-re épülő bináris számrendszert Gottfried Wilhelm Freiherr von Leibniz dolgozta ki, mellyel a számítástechnika alapjait fektette le – a bináris kódot. Számára a 0 és 1 az ördög és az Istentől valót, a hamisat és az igazat, a nemet és az igent jelentette. A kettes számrendszert alkalmazva gyors összeadási műveleteket alakított ki, ahol az egyesek és nullák mintegy „kiválogatják magukat”. A 7-es decimális számot binárisan felírva 111-et kapott, mellyel a világ teremtését lehetett azonosítani, így a bináris számrendszer alkalmazását pogányok megtérítésre javasolta. Napjainkra a bináris számrendszer lett az elektronikus adatfeldolgozás alapja.

A mozgás és gravitáció törvényei: Isaac Newton nevéhez fűződnek 1687-től. A galvánáramot Luigi Galvani fedezte fel 1791-ben, mikor laboratóriumában az elektrosztatikusságot előállító berendezés közelében tartózkodó segédje a fémrácson elhelyezett békalábhhoz ért és az valamely „állati elektromos folyadék” révén összerándult. Kísérletét szabadtéren villámlásos időben folytatta, a kerti kútból a háztetőre kifeszített huzalra rézkampóval békacombokat rögzítve. Amikor a békacombok a vaskorláthoz értek összerándultak, mivel létrejött az első áramkör: rézkampóval, békalábbal és vaskorláttal. 1799-ben Alessandro Volta szerint már nem kellett békaláb, hanem helyette elektrolitot kellett használni, létrehozva a Volta-cellát. Az újratölthető elem (akkumulátor) már Wilhelm Ritter nevéhez fűződött, 1801-ben ő fedezte fel az ultraibolya fényt is. Isaac Newton 1666-os találmányát, a prizmat felhasználva tanulmányozta a fehér fény színekre bontását, majd az AgCl réteg elszíneződött a lila melletti egyébként sötét területen is. Egy évvel korábban Friedrich Wilhelm Herschel már felfedezte az infravörös tartomány hasonló prizmás kísérlettel, mely során a vörös melletti sötét felületre apró hőmérőt helyezve jelentős hőmérsékletemelkedést tapasztalt.

Az elektromágnes felfedezése Hans Christian Oersted és William Sturgeon nevéhez fűződik, akik megfigyelték, ahogy a „vas mágnessé válik”. Az elektronika alapját képező törvény Georg Simon Ohm nevéhez fűződik 1827-ben, melyet számunkra már érdekes módon csak nagyon nehezen ismertek el, pedig a mérőeszközök alapjait is ez képezi. A távközlés szempontjából mérföldkövet jelentő távíró megszületése Wilhelm Eduard Weber, Carl Friedrich Gauss és Samuel Finley Morse neveihez fűződik. A szilárdtest technológia előtti nagyszámítógépeket működtető relék 1836-os feltalálása Joseph Henry nevéhez fűződik. Az elektrosztatika 1836-as megalkotása Michael Faraday nevéhez fűződik, aki leírta az indukció törvényeit, megalkotta az elektromotor elvét, létrehozta a Faraday-félre kalitkát, mely a villámvédelem és zavarcsökkentés alapjait képezi.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

A fényképezés Louis Jacques Mondé Daguesse nevéhez fűződik, akiről a dagerotípiát is elnevezték. A felvételt ezüsttel bevont rézlemezre készítette, melyet jódgózzal aktivált. Az előhívás higanygózzal, majd nátrium-kloridos (konyhasóoldat) fixálással történt. A negatív-pozitív eljárás kidolgozása William Henry Fox Talbot nevéhez fűződik, aki lehetővé tette korlátlan számú képmásolat előállítását egy elkészített negatív képről.

A hűtőgép 1859-es feltalálása Ferdinand Carré nevéhez fűződik, aki felhasználta Faraday megfigyelését, hogy a párolgó folyadék veszít hőmérsékletéből. Ugyanebben az évben a kémiai összetevők analízise szempontjából fontos színképelemzés is kidolgozásra került Robert Wilhelm Bunsen nagyhőmérsékletű gázégőjével és Gustav Robert Kirchhoff elméletével, mely szerint minden egyes kémiai elem saját színképpel rendelkezik. A szintetikus anyagok 1862-ben jelentek meg, Alexander Parkes természetes gumival kísérletezett és állított elő szintetikus anyagú használati tárgyakat, melyek meglepő módon nem keltették fel egyáltalán az érdeklődést akkortájt. A dinamit (görögül dynamis erőt jelent) 1867-es feltalálásával Alfred Nobel forradalmasította az építési technológiákat, de az 1870-es francia-német háború idején a hadiipar is nagy érdeklődést mutatott a találmány iránt. Így mintegy ennek jóvátételeként is került megalapításra a későbbiekben alapítójáról elnevezett legrangosabb tudományos díj. Az anyagtudomány fejlődése során 1869. mérföldkő az elemek periódusos rendszerének összeállítása, melyet Dimitrij Ivanovics Mengyelejev és tőle függetlenül Julius Lothar Meyer végzett el. Rendszerükben még atomsúly (nem pedig a protonok száma) szerint növekedve kerültek a különféle elemek besorolásra, rendszeresen (periodikusan) felbukkanó kémiai és fizikai tulajdonságokat mutatva. Megjósolhatóvá vált a gallium, germánium, szkandium és rénium léte is, 115 elem vált ismertté, a 113-as, 115-ös, és 117-es helyek üresen maradtak. A 92-es számú elemtől az urán kivételével csak mesterségesen előállíthatók az anyagok. A 101-es Mengyelejev-ről került elnevezésre.

A villanykörte 1879-es feltalálásával Thomas Alva Edison bizonyította be, hogy izzó anyag hosszabban ég légüres térben. Izzószálként még bambusznövényt használt, melyet mára volfrámszál helyettesít, a légüres tér helyett argont és nitrogént használtak mindaddig, míg Bródy Imre 1936-ban be nem mutatta kriptonégőjét, mellyel kisebb méretű, fehérebb fényű és hosszabb élettartamú izzók előállítása vált lehetővé. Polányi Mihállyal pedig megfelelő gyártástechnológiát dolgoztak ki, mely eredménye a kriptonöltésű (csekély xenon gázzal keverve) kettősspirálos izzószállú izzólámpák sorozatgyártása lett.

A robottechnika és számítástechnika előfutáraként 1805-től már Joseph-Marie Jacquard lyukkártyát használt a szövőgépek különféle beállításaihoz. A lyukkártyát Hermann Hollerith 1886-ban népszámlálás adataihoz is használta. Azonban, ha az első programozható eszközök vagy ro-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



botok megjelenéseit keressük, egészen Vaucancon furulyázó juhászáig mehetünk vissza 1738-ba. Nem sokkal később, 1769-ben alkotta meg Kempelen Farkas (egykori győri diák) világhírűvé vált sakkozógépét, mely valójában a pantográf feltalálása volt, mivel a sakkozó török rejtélyének a megoldása az lehet, hogy a rendkívül ötletesen kialakított tükrös-mechanikus szerkezet korának legjobb sakkozóit rejtette. Mivel a sakkozógép eredeti példánya egy philadelphiai tűzben elpusztult, immár csak a találgatások maradhattak. Kempelen Farkas azonban beszélőgépét (fújatókkal és bőrökkel emberi hangot képezve) tekintette legfigyelemreméltóbb művének.

1887: Heinrich Rudolf Hertz 1887-ben felfedezi a rádióhullámokat, mellyel lehetővé válik akusztikus üzenetek elektromágneses hullámokként történő továbbításának lehetősége, amit Guglielmo Marconi 1897-ben már ki is tud használni, amikor egy olasz hajógyárból a „San Martino” páncélos cirkálóra táviratozott. Karl Ferdinand Braun szikramentes antenna áramköreivel a hatótávolságot növelte, így jött létre a csatolt rezgőkörös rádióadó. Braunnak 1874-ben Lipcsében sikerült először szilárd testtel az irányfüggő áramvezetés (egyenirányítás), amikor fém-szulfidokat és higanykontaktust használt. 1909-ben Marconi és Braun együtt Nobel-díjat kapott, hiszen tevékenységük mai szemmel nézve az elektronika kezdetét jelentette, noha még csak polikristályos testekkel – hiszen az egykristályos állapot ismert volt ugyan, de nem elérhető.

Az orvostudomány és az anyagtudományok szempontjából meghatározó jelentőségű volt a röntgensugárzás 1895-ös felfedezése, mely Wilhelm Conrad Röntgen nevéhez fűződött. Katódsugárzást (elektronok fékezési sugárzását) vizsgálva ismerte fel a röntgensugarak hatását, majd találmányát szabadalmaztatás nélkül nagylelkűen és ellenszolgáltatás nélkül elérhetővé tette az emberiségnek. A tudományok számára felbecsülhetetlen értékű felfedezése után 1923-ban halt meg teljes szegénységben.

Az oszthatatlannak hitt atomok elektronjait Joseph John Thomson fedezte fel 1897, majd 1904-re megállapítást nyert, hogy az atom gömbölyű, töltést mutató szerkezet, melynek belsejében pozitív és negatív részecskék vannak. Az atommag szerkezetének 1911-es meghatározása már Ernest Rutherford nevéhez fűződik, mely a mai napig elfogadott atommodell, tartalmazva a neutronokat, protonokat és elektronokat – mellyel a modern fizika alapköve letételre került, előkészítve az utat a nanoelektronika felé. A későbbi elektronikai ipar számára oly fontossá váló alapvető vákuumtechnológiák az atomi részecskék megfigyelésével folyamatosan fejlődtek. Thomson bizonyítékot is talált Albert Einstein 1905-ben publikált korszakalkotó relativitás elméletéhez, mivel kísérletileg bizonyította, hogy vákuumban terjedő elektron tömege megnövekszik.

Lee de Forest vákuumcsőben rácsot alakított ki, mellyel vákuumtriódát hozott létre, és a párizsi Eiffel-torony adóállomáson be is mutatta

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

alkalmazását. Ezzel megindult az elektroncsövek fejlődése, és egyre több elektróda szabályozta a működést. A televízió 1924-ben jött létre, melynek az 1897-ben kifejlesztett Braun-cső volt az alapja. A kísérletek már Gottlieb Nipkow révén 1884-ben elkezdődtek, 1911-ben Vladimir Kosma Zworikynnek először sikerült kizárólag elektromos eszközökkel televíziós képet továbbítania, majd 1919-ben Mihály Dénes is jelentős eredményt ért el, erősítőjével 5 km-re tudott küldeni mozgóképeket. Az első elektronikus képletapogatót Zworikyn már az Egyesült Államokban készítette el, mellyel megteremtette a televízió alapjait. John Logie Baird továbbfejlesztett változatával 1929-ben indult el a BBC televíziós adása.

Vonnevar Bush 1930-ban analóg számítógépet készített, de az nem volt elég pontos. Közben az elektroncsövek tovább fejlődtek, méretük csökkent, már számítógépek és radarok működéséhez is kezdték őket a későbbiekben használni. A problémát nagy hőtermelésük, méretbeli korlátuk és az igényelt nagy működési feszültség jelentette. Felmerült a szilárdtest alapú erősítőeszköz igénye. A Bell Laboratóriumban Bardeen, Brattain és Shockley alkotta meg a félvezető tranzisztort 1948-ban, melyért 1956-ban Nobel-díjat kaptak. Eddig csak egyenirányításra, fényérzékelésre és hőérzékelésre volt lehetőség, de megteremtődött az erősítés lehetősége is. A germánium átforgalmazta az életet. Az újabb, kisebb gondokat az okozta, hogy a Földön kevés a germánium, valamint a germánium eszközök felülete nem stabilizálható – így az eszköz romlik. Azonban elindult a versenyfutás az elektroncső és a tranzisztor között. A szilícium elektronikai megjelenésével a küzdelem kezdett eldőlni, mind az elektroncsővel szemben, de a germániumot is háttérbe szorítva. A szilíciumból sok van a Földön, oxidja stabil, sőt multifunkcionális segédanyagként is lehet használni a technológiák során. A planáris technológiák diffúzióval váltak elvégezhetővé. 1950-től pedig megjelentek a vegyület-félvezetők (félvezető ötvözetek), melyek az igényelt elektromos és optikai tulajdonságok széles skáláját tudták lefedni.

1945 júniusában Neumann János megírta az eredetileg belső anyagnak szánt elgondolását a számítógép-tudomány fejlesztési elveiről. Leírta egy tárolt programú, elektronikus számítógép felépítését, jellemzőit, működési elvét, és fő részeit: aritmetikai egység, központi egység, memória, be- és kimeneti egységek. Napjainkig minden kereskedelmi forgalomba került számítógép Neumann-elvű gép volt. Az ENIAC (Electronic Numerical Integrator And Computer) volt a világ első elektronikus nagyszámítógépe.

A napelemek 1958-ban jelentek meg Gerald Pearson révén, aki félvezetők p-n átmenetében létrejövő fotoelektromos hatást használta, mellyel a fény 6%-át tudta elektromossággá alakítani.

Az integrált áramkörök kialakítása is nagy versenyfutást eredményezett, különös tekintettel a szabadalmaztatásra. Jack Kilby fiatalon került

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

a Texas Instrumentshez, ahol nyári szabadsága hiányában kisméretű áramkörök kialakításán kezdett el dolgozni. 1959. februárjában adta be szabadalmi kérelmét „Miniaturized Electronic Circuits” névvel, mely áramkörökben arany vezetősávok kötötték össze az egyes komponenseket. Vele egyidőben Robert Noyce a Fairchild Laboratories munkatársaként hasonló kis áramkörökön dolgozott, de alumínium vezetősávokkal. Szabadalmi kérelmét 1959. július 30-án adta be „Semiconductor Device-and-Lead Structure” névvel. Mindketten szabadalmat kaptak, de időközben kiderült, hogy az alumínium vezetősávok jobbak voltak a célra, így a Fairchild Electronics nyerte meg a versenyt, de a két cég licenceket cserélt, és megindulhatott az integrált áramkörök (IC-k) fejlesztése Noyce révén az alapított Integrated Electronicsnál, azaz INTEL-nél is. Mivel Noyce 1990-ben elhunyt, ezért kettejük közül csak Kilby kaphatott Nobel-díjat az integrált áramkörök kifejlesztéséért 2000-ben. Azóta a mikroprocesszorok váltak a mérés- és szabályozástechnika meghatározóivá, és a félvezető-alapú memóriák is rohamosan fejlődnek a folytonosan növekvő adattárolási igények kielégítésére.

A stimulált emisszió elvét Einstein már 1917-ben kidolgozta, de az első lézere 1957-ig várni kellett, Gordon Gould, illetve Arthur Leonard Schawlow és Charles Hard Townes a gyakorlatban is igazolta a feltevést, mely az 1964-es Nobel-díjhoz vezetett. A félvezető-alapú lézer 1962-ben jelent meg, azonban még folytonos üzemmód nélkül. A heteroátmenetű lézerek aztán hamarosan elfoglalták helyüket a lézernyomtatókban, CD és DVD lejátszóknak, üvegszálak kommunikációjában, ahol 1955-től alkalmazzák az optikai kábelt, először Narinder Kapany készített ilyet, majd Charles Kao használta először telefonálásra. A molekulásugaras epitaxia (rétegnövesztés) (MBE) és a kémiai gőzfázisú rétegleválasztás (CVD) révén nagytisztaságú félvezetőanyagok előállítása vált lehetővé tökéletes kristályráccsal és atomi átmenetekkel a rétegek között.

A mikroprocesszor 1969-ben jelent meg Marcian Edward Hoff munkájának eredményeképpen, akit a zsebszámológép kifejlesztése motivált az INTEL-nél, ahol Noyce is dolgozott akkor már. A mikroprocesszorra épülve hamarosan megjelent 1972-ben a mobil telefon, majd a laptop és palmtop gépek, végül pedig a személyi számítógép révén.

A folyadékkristályos anyagot Friedrich Reinitzer fedezte fel 1888-ban, majd Otto Lehmann publikálja művét a folyadékkristályokról. Az első folyadékkristályos kijelző Svájcban került előállításra 1971-ben.

Az abszolút nulla fok közelében fémekben fellépő szupravezetést és a hélium szuperfolyadék tulajdonságát Heike Kammerlingh Onnes fedezte fel még 1911-ben. Manapság már sokkal magasabb hőmérsékleten is szupravezetővé válnak a speciális vegyületek, a „zürichi oxidok”. Jelenleg a cél magas hőmérsékleten működő szupravezetővel szuperszámítógépek létrehozása kis elektronvesztéssel, lehetőleg egyatomos működést elér-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

ve. A szupravezetés elektron-fonon kölcsönhatásának elméletét (BCS) Bardeen, Cooper és Schrieffer dolgozta ki, melyért az 1972-es Nobel-díjat kapták.

Az anyagtudomány és az elektronikai technológia fejlődését számos nagy horderejű mikrofizikai felfedezés segítette és segíti napjainkban is, úgyhogy szinte minden nappal újabb és újabb technológiai megoldások jelennek meg, melyek folyamatosan változtatják – és remélhetőleg teszik majd jobba – mindennapjainkat.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

## 3. Kristályos anyagok

Bravais 1848-ban felfedezte, hogy az anyagot alkotó legkisebb részecskék szabályos térbeli „rádspontokban ülnek”. Laue, Friedrich és Knipping 1912-ben röntgenelhajlási kísérletekkel igazolta az izotrópia és anizotrópia jelenségeit. A mikro- és nanoelektronikában használt szilárd anyagok atomjait a vegyértéksáv elektronjai és az ionok között fellépő Coulomb kölcsönhatásból származó erők tartják össze. Ezeknek a kölcsönhatásoknak az alapja minden ilyen közegben ugyanaz, de tapasztalatból tudjuk, hogy a szilárd anyagokat karakterisztikus csoportokba célszerű rendezni, mely alapján meghatározhatunk ionos sókat, kovalens vegyületet, fémeket, stb. Az elkövetkezendő fejezetben egy rövid bepillantás teszünk az anyag periodikus szerkezetébe, illetve ennek leírási módszereire, melyek segítségével könnyebben megérthetővé és kezelhetővé válhatnak az anyag fizikai és elektronikai tulajdonságai.

### 3.1. Kristályrácsok

Kristályos testek: Periodikusan ismétlődő geometriai elrendeződések.

Amorf testek: Nincs az egész testre kiterjedő rendezettség, csak rendezett körzetekről beszélhetünk.

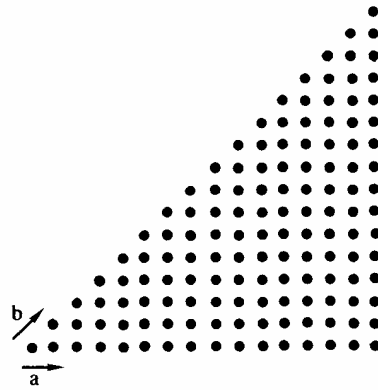
Polimorfia: Többalakúság, ugyanazon kémiai összetételű vegyületek különböző kristályformában is előfordulnak. Vegyületek esetén polimorf módosulatokról, míg elemek esetén allotróp módosulatokról beszélünk. Az egyik módosulatból a másik módosulatba történő átmenethez energiára, módosulatváltozási hőre van szükség.

Tekintsük át az egyes kristályrácsok típusait a rácselemek és a rácsösszetartó erők szempontjából:

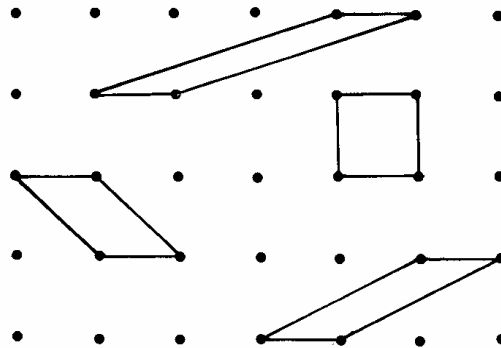
#### 3.1. táblázat: Kristályrácsok típusai

<u>Rácstípus</u>	<u>Rácselem</u>	<u>Rácsösszetartó elem</u>
ionrács	ellentétes töltésű, egyszerű vagy összetett ionok	Coulomb-féle elektrosztatikus vonzóerő
atomrács	atomtörzsek	kovalens kötés
fémrács	pozitív töltésű fémionok	delokalizált elektronok
molekularács	molekulák (polarizáltak)	másodrendű kötőerők

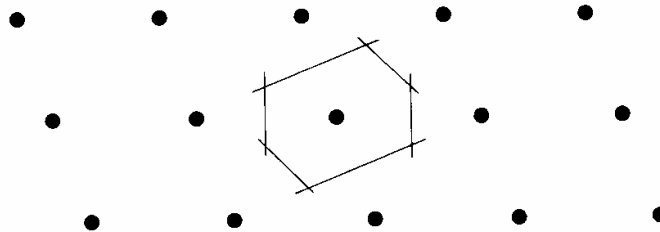
*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



3.1. ábra. Egy síkbeli rács egy részlete két lehetséges bázisvektort jelölve a primitív cella meghatározásához.



3.2. ábra. A primitív cella formája sokféle lehet, de területe vagy térfogata rögzített.



3.3. ábra. A Wigner-Seitz cella, mely minden egyes rácspontot körülvesz – mind síkbeli, mind pedig térbeli példa esetén.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

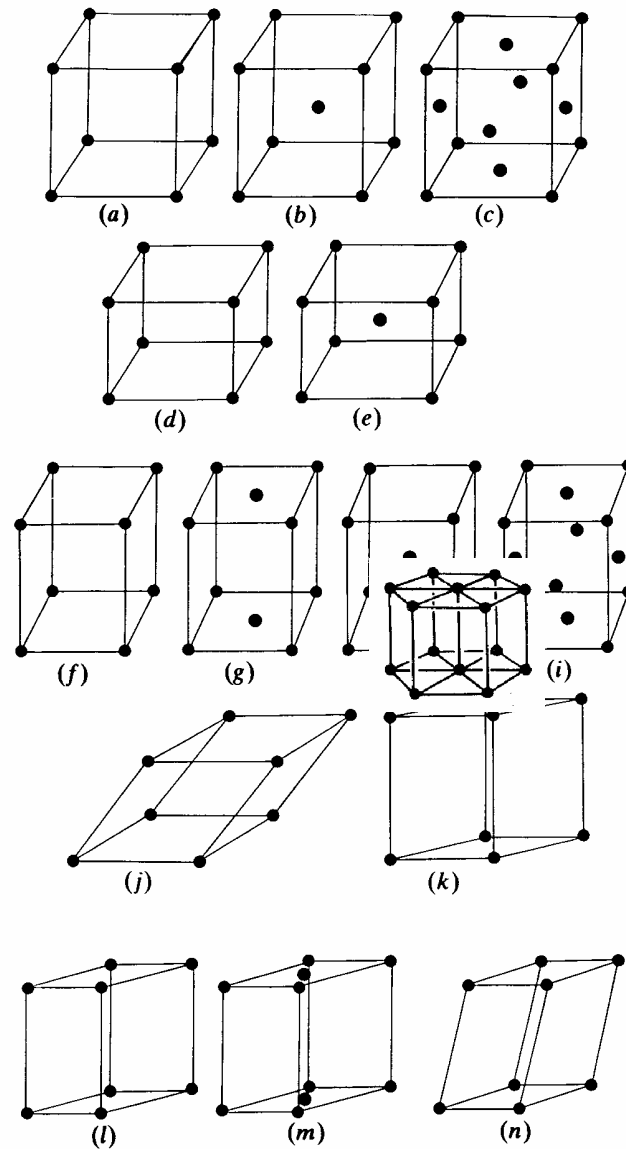
A kristályrácsok létrejöttével kapcsolatos fontos jellemző a rácsenergia, mely 1 mol kristályos anyag kötési energiája. A kristályrács létrejöttével egy térben (az esetek többségében) végtelennek tekinthető pontelrendeződés jön létre, mely oly módon rendezett, hogy minden egyes rács-pontjának környezete azonos. Így létezik egy olyan tökéletes szimmetrikus transzformáció, mellyel mely egy tetszőlegesen kiválasztott rácspontra viszonyítási pontra vonatkozóan az alábbi módon adják meg az összes többi rácspontra az **a**, **b**, **c** bázisvektorok segítségével:

$$\text{Rácspontra: } \mathbf{r}_{123} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c} \text{ ahol } n_1, n_2, n_3 \text{ egész számok. (3.1)}$$

A bázisvektorok kiválasztásánál a vektorok lehetséges legrövidebb hossza, illetve az egységgrács cella legmagasabb szimmetriájának jellemzése lehetnek a fő szempontok. Másrészt, az egyetlen rácspontra vonatkoztatott térfogat egyedi jellemző egy adott rácsra, de egyben széles választék is áll rendelkezésre az alkalmazható **a**, **b** és **c** bázisvektorok kiválasztására vonatkozóan, így nagyon sokféle alakzatot alakítható ki, ahogy azt a 3.1. és 3.2. ábrákon láthatjuk síkbeli (2-dimenziós) rács esetén. Az egyetlen rácsponthoz tartozó térfogat az úgynevezett primitív cella, mely származtatásában és megjelenésében alapvetően kétféle lehet. Az első esetben a rácspontra a primitív cella középpontjába kerül, ahol a cellát a szomszédos rácspontra összekötő szakaszok felező szakaszai alkotják, ahogy ez a 3.3. ábrán is látható. Ezt a primitív cellát Wigner-Seitz cellának hívják. Térbeli Wigner-Seitz cella esetén a cellát a központi rácspontra szomszédos rácspontra összekötő szakaszainak merőleges felezősíkjai képezik. Az így kialakított Wigner-Seitz cellákkal a szomszédos rácspontra irányában haladva a kristály felépíthető. A második esetben az elemi cellát rácspontra összekötőszakaszai is alkotják, ahogy ennek sokféleségét a 3.2. ábra is illusztrálja síkbeli példákkal. Ezen primitív cellákkal párhuzamos és a bázisvektorok irányában történő összeillesztésével a kristály felépíthető.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

### 3.2. Kristályrendszerek



3.4. ábra: A 14 térbeli Bravais-rács megfelelő primitív cellákként tárgyalhatók, azonban egy nagyobb elemi cella alkalmazása több esetben szemléletesebben tükrözi a rács szimmetriáját – például lap- és térközpontú helyeken lévő atomok jelölésével, 7 kristályrendszerbe sorolva a rácsokat. (a), (b), (c) teszerális (kübös v. szabályos); (d), (e) tetragonális (négyzetes); (f), (g), (h), (i) rombos; (j) trigonális (romboéderes); (k) hexagonális; (l), (m) monoklin (egyhajlású); (n) triklin (háromhajlású),

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



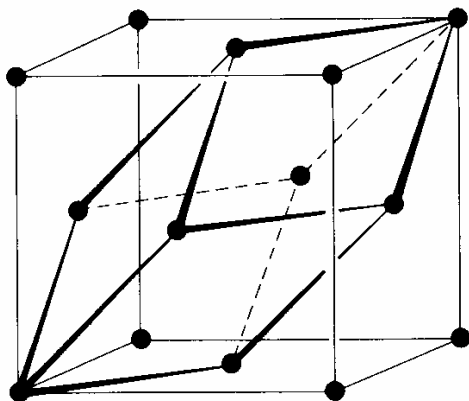
Az előbbieken tárgyalt elvek alapján mindössze 14-féle módon lehet azonos pontokat (jelen esetben rácspontokat) térben (3 dimenzióban) elrendezni úgy, hogy azonosak legyenek a környezetükkel. Ezt a térben kialakítható 14-féle tömböt nevezik Bravais-rácsoknak, melyek részleteikben a 3.4. ábrán kerülnek bemutatásra. Az azonban az egyes Bravais-rácsok megjelenéséből rögtön látható, hogy az így kialakított térfogatelem nem minden esetben primitív cella – azaz a rácsnak nem csak egyetlen elemét (atomját, rácspontját) foglalja magába. Ez azért alakult így, mivel kristálytani szempontokból gyakran szemléletesebb és kényelmesebb egy nagyobb térfogategységet választani, melyet kristálytani elemi cellának neveznek. A természetben előforduló kristályrácsok többnyire többféle rácselemből (atomok) épülnek fel. Erre jó példa a konyhasó (NaCl) felépítése is, melyben  $\text{Na}^+$  és  $\text{Cl}^-$  ionok ülnek a rácspontokban. Ebben az esetben kettő azonos módon felépített és szabályosan egymásba tolt primitív cella tudná az adott kristályrácsot leírni. Az ilyen összetett rácsnak a különféle összetevőket helyes számarányban és megfelelő helyen tartalmazó rácsa az elemi cella. Ezek párhuzamos és a bázisvektorok irányában történő összeillesztésével a kristály ugyanúgy felépíthető, mint a primitív cellák esetén. A vegyület-félfezetők esetén is (GaAs, GaN, stb.) gyakran lap- és térközéppontú helyeken lévő atomok jelölése rendkívül megkönnyíti a szimmetria és fizikai tulajdonságok tanulmányozását. A 14-féle Bravais-rács az **a**, **b**, **c** bázisvektorok szimmetriájára vonatkozó megfontolások alapján 7 kristályrendszerbe sorolható az alábbi táblázat szerint:

### 3.2. táblázat: A 7 kristályrendszerbe sorolt 14 Bravais-rács

Kristályrendszer	Elemi cella	Bravais-rács
<b>I. Triklin</b> (azaz háromhajlású)	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	P (primitív)
<b>II. Monoklin</b> (azaz egyhajlású)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	P (primitív) C (alapcentrált)
<b>III. Rombos</b>	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P (primitív) C (alapcentrált) I (tércentrált) F (lapcentrált)
<b>IV. Tetragonális</b> (azaz négyzetes)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P (primitív) I (tércentrált)
<b>V. Teszerális</b> (azaz köbös vagy szabályos)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	P (primitív) I (BCC – body centered cubic) F (FCC – face centered cubic)
<b>VI. Trigonális</b> (azaz romboéderecs)	$a = b = c$ $120^\circ > \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	R (romboéderecs primitív)
<b>VII. Hexagonális</b> (azaz hatszögös)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	P (primitív)

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

A 3.5. ábrán egy lapcentrált köbös Bravais-rács látható, melyben illusztrálásra került a rácspontokat összekötő primitív cella is. Míg a Bravais-rács négy atomot tartalmaz, addig a primitív cella természetesen egyet – de ennek ellenére is a Bravais-rács sokkal szemléletesebben és könnyebben kezelhetően tükrözi vissza a szimmetriát.



3.5. ábra: Lapcentrált köbös Bravais-rács és primitív cella.

A fémek esetén a kristályrácok szerkezete közvetlenül kapcsolatba hozható a Bravais-rácsokkal. Természetesen ez alapján nem gondolhatjuk, hogy csupán 14 lehetséges kristályszerkezet fordulhat elő a természetben, hiszen atomok csoportjait is rendelhetjük az egyes rácspontokhoz. Ezzel azonnal új szerkezeti lehetőségek egész sora tárul fel. Ha minden rácsponthoz egy atomcsoportot rendelünk, úgy az atomcsoport  $j$ -edik atomjának a helyvektora a következőképpen alakul:

$$\mathbf{r}_{123j} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c} + \mathbf{R}_j, \quad (3.2)$$

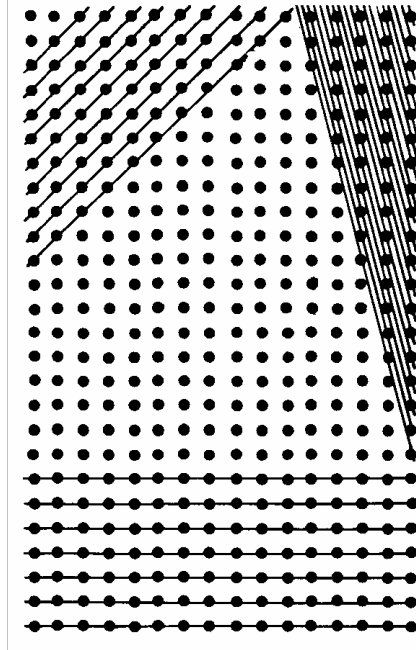
ahol  $\mathbf{R}_j$  a  $(n_1, n_2, n_3)$  ponthoz viszonyított helyvektor. A pontoknak vagy atomoknak az a csoportja, melyet minden rácsponttal így összefüggésbe hozunk az úgynevezett bázis. Így a kristályszerkezet két mennyiség összege: mégpedig a rácspontoknak és a bázisnak, mely azon atomok geometriai elrendezése, melyek minden egyes rácsponthoz hozzárendeltek. Egyszerűbb kristálystruktúrák bázisát néhány atom alkotja, de különösképpen a biológiai anyagokban több száz atom is alkothatja azt. A bázis bevezetésével minden egyes rácspont új szimmetriaelemeket hoz magával – mint például a bázis forgatása és tükrözése tengelyekre és síkokra vonatkozóan a megfelelő rácspont viszonylatában, mely műveletekkel vagy műveletek kombinációjával az elrendezés ismét önmagába állítható vissza. Összesen mintegy 230 különféle szimmetriaminta található 3 dimenziójú struktúrák-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

hoz az említett műveletekkel. Azon kristálytani struktúráknak a száma, melyek az azt alkotó különféle atomok távolságát és a bázis összetételét is figyelembe veszik – természetesen végtelen. Azonban pusztán a szimmetria szempontjából minden struktúra a 230 tércsoport egyikéhez tartozik.

### 3.3. Kristálytani síkok és Miller-indexek

A Bravais-rácsok pontok 3-dimenziós tömbjeibe rendezettek térben, de 2 dimenziós tömbökből állónak is tekinthető, ahogy azt a 3.6. ábra is illusztrálja. Az ábrából látható, hogy minél nagyobb a síkok közötti távolság, annál nagyobb a rácspontok sűrűsége az adott síkban – mely közvetlenül következik a Bravais-rács pontjainak pontos hasonlóságából és az egyedi jellemző rácsponti (rácsponthoz tartozó) térfogatból. A kristályok anizotrópok, ami azt jelenti, hogy a fizikai tulajdonságok (pl. vezetőképesség, töltéshordozók mozgékonyasága, stb.) függenek a kristálytani irányoktól. Ezért szükséges a különféle lehetséges kristálytani irányok jelölése, melyre a Miller-indexek használatosak. Mivel a Bravais-rácsban minden pont egymással egyenértékű, ezért a származtatás tetszőleges.

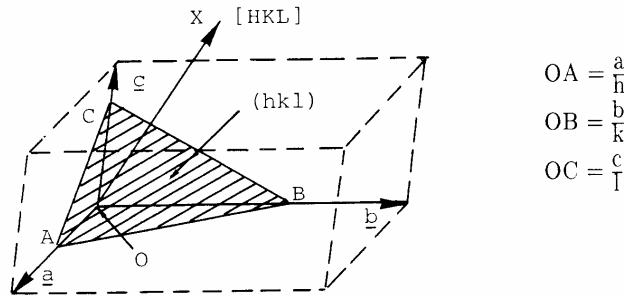


3.6. ábra: A kristályrács úgy is leírható, mint 2 dimenziós atomi síkokból felépülő térrész. Végtelen számú módon választhatunk ki síkokat egy térrész kialakításához, ebből most 3 példát illusztrál az ábra.

A Miller-indexekkel a kristálytani síkok az elemi cellán belül írhatóak le a következő módon, melyet a 3.7. ábra is szemléltet:

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

- A kiválasztott síkhoz határozzuk meg az  $x, y$  és  $z$  koordinátatengelyeken a metszéspontokat.
- Fejezzük ki a metszéspontokat az elemi cella bázisvektoraival mint  $x/a, y/b, z/c$ , melyek nem feltétlenül egész számok, de hányadosuk racionális.
- Képezzük az előbbi törtek reciprokait:  $a/x, b/y, c/z$ .
- Határozzuk meg a reciprokok legkisebb közös többszörösét úgy, hogy vonatkozó  $hkl$  egész számokká alakíthassuk őket.
- 



3.7. ábra. Miller-indexek és a vonatkozó  $(hkl)$  sík.

Az adott  $hkl$  egész számokból álló számhármast  $(hkl)$ -ként jelöli egy síkcsalád azon síkját, mely az elemi cellán belül az origóhoz a legközelebb van. Mivel a választott origó egy rácspont, ezért ennek a rácspontnak is a  $(hkl)$  síkcsalád egyik síkjában kell lennie. Ezért a távolság a választott origótól a  $d_{hkl}$  síkközi távolság. A  $hkl$  indexű síkok közül a  $(hkl)$  sík fekszik legközelebb a választott origóhoz, a tengelyeket pedig az  $a/h, b/k, c/l$  pontokban metszi. Így az elemi cella minden síkja leírhatóvá válik. A tengelyeket a negatív tartományban metsző síkokat hasonló módon kell kezelni, csak a vonatkozó Miller-indexek is negatívvá válnak. A Miller-indexek jelölésrendszerében egy meghatározott sík vagy párhuzamos síkok együttese  $(hkl)$ -ként kerül jelölésre, míg szimmetriájukban megegyező síkok mint  $\{hkl\}$  síkok kerülnek jelölésre, mely ebben az utóbbi esetben a különféle negatív indexekkel rendelkező síkokat is tartalmazza. Kristálytani irány mint  $[uvw]$  kerül jelölésre, míg egymással szimmetriájukban megegyező irányokat  $\langle uvw \rangle$  jelöl. Kizárólag köbös rácsok esetén az irányok a rácssíkok normálvektorával is meghatározhatók, így  $[hkl]$  jelöli a  $(hkl)$  síkra merőleges irányt. Szimmetria középponttal rendelkező rendszerekben az azonos Miller-indexeket tartalmazó síkok ekvivalensek. Köbös rácsok esetén az  $(123), (312), (321), (132), (231)$ , és  $(312)$  indexű síkok síkközi távolságai egymással egyenlők, mely igazán fontos szerepet nyer a röntgen diffrakci-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

ós kristálytani vizsgálatoknál. A fentebb említett módon minden ilyen index negatív is lehet a köbös rácsokban, így az ekvivalens síkok száma 48 lehet.

A kristálytani struktúrák lehetnek rendkívül bonyolultak, de egészen egyszerűek is előfordulnak. Szerencsére a fémek, félvezetők és egyéb ötvözeteik egyszerű kristálytani struktúrával rendelkeznek. Bizonyos fémek kétféle kristályszerkezetben is kristályosodnak, ahogyan az alábbi összefoglalásból is látszanak. Külön jelölésre került a koordinációs szám (legközelebbi szomszédok száma), valamint a kitöltési tényező (atomok, mint egymással érintkező gömbök által elfoglalt térrész hányada a Bravais-rácson belül).

**BCC** (body centered cubic) tércentrált köbös:

- koordinációs szám: 8
- kitöltési tényező: 0,680

<b>Li</b>	<b>Na</b>	<b>K</b>	<b>Rb</b>	<b>Cs</b>
<b>Ba</b>				
<b>V</b>	<b>Cr</b>	<b>Fe</b> (< 910°C, > 1390°C)		
<b>Nb</b>	<b>Mo</b>			
<b>Ta</b>	<b>W</b>			
<b>Eu</b>				

**FCC** (face centered cubic) lapcentrált köbös:

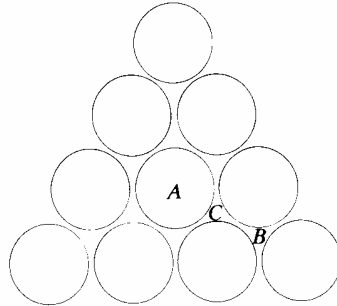
- koordinációs szám: 12
- kitöltési tényező: 0,74

<b>Ca</b>	<b>Sr</b>	<b>Al</b>	<b>Pb</b>
<b>Co</b>	<b>Ni</b>	<b>Cu</b>	<b>Fe</b> (910°C - 1390°C)
<b>Rh</b>	<b>Pd</b>	<b>Ag</b>	
<b>Ir</b>	<b>Pt</b>	<b>Au</b>	
<b>Ce</b>	<b>Yb</b>		
<b>Th</b>			

További elterjedt struktúra a fémek között a hexagonális közel illesztett HCP (hexagonal close packed). Tekintsük a 3.8. ábrát, melyen a rácsot alkotó atomok gömbként illusztráltak és a lehető legnagyobb kitöltési tényezővel kerültek egymás mellé egy síkban rendezésre. Látható, hogy az *A*-val jelölt síkra további gömbökből (atomokból) álló síkok illeszthetők – de az illesztés kép közeli, jól illeszkedő referencialhelyre történhet. Ezeket *B* illetve *C* jelöli. Amennyiben az illesztési sorrend ...*ABCABCABC*..., akkor a jól ismert FCC köbös struktúrát kapjuk. Ebben az esetben viszont, ha az illesztési sorrend ...*ABABABAB*..., akkor a kialakult struktúra a HCP lesz. A HCP struktúrához tartozó Miller–Bravais-indexeket a 3.8. ábra illusztrálja. Fontos megjegyezni, hogy a felvett 4 bá-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

zisvektorú koordinátarendszer szemléletességi és kényelmi okokból lett felvéve, és az  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{c}$  bázisvektorok esetén  $\mathbf{a}_3 = -(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ , és hasonlóan a vonatkozó *hkl* Miller-indexekre  $i = -(h + k)$ . Így a 3 indexet nem szükséges használni, mivel a rendszer az előbb említett okokból kifolyólag túlhatározott. Ennek megfelelően a Miller-indexek a  $(hk \cdot l)$  jelöléssel használhatók.



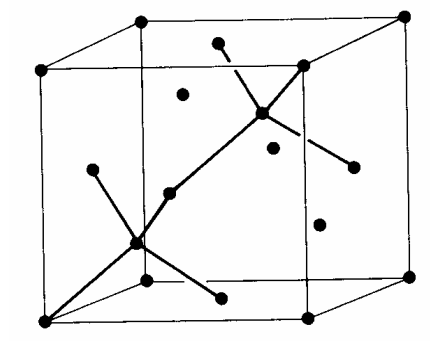
3.8. ábra: A 3-féle különböző lehetséges illeszthető  $A, B$  és  $C$  atomi síkok.

**HCP** (hexagonal close packed) hexagonális közel illesztett:

- koordinációs szám: 12
- kitöltési tényező: 0,74

Li (< 78K)		Na (< 40K)				
Be	Mg					
Sc	Ti	Co (< 400K)	Zn			
Y	Zr	Ru	Cd			
Hf	Re	Os	Ti			
Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Lu

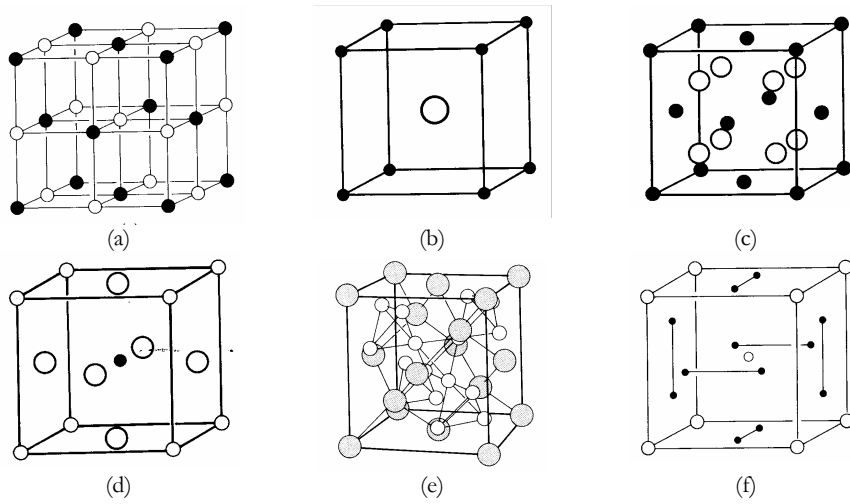
A félvezető-technológiák számára fontos anyagok, mint például a szilícium (Si) és a germánium (Ge) gyémántstruktúrában kristályosodnak, mely FCC rács, mely bázisa  $000, \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ . Így az FCC rács mind a négy atomjához még egy-egy külön további atomot kell hozzáadnunk, mely eredményeképpen 8 atom lesz a köbös cellában, ahogy ez a 3.9. ábrán is látható.



*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

3.9. ábra: Szilícium és germánium 8 atomot tartalmazó köbös gyémántrácsa.

Végezetül a 3.10. ábra illusztrál néhány gyakoribb típusú kristályrácsot.



3.10. ábra: Néhány szokványosabb kristályrács: (a) NaCl; (b) CsCl; (c) CaF<sub>2</sub>; (d) BaTiO<sub>3</sub>; (e) Cu<sub>2</sub>Mg; (f) β-wolfram (Nb<sub>3</sub>Sn).

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

## 4. Kristálytani hibák

Ahogy a természetben és az ipari technológiákban előforduló kristályok szerkezete várhatóan eltér a tökéletestől, már a fémmegmunkálási technológiák fejlődése során a szakítóvizsgálatok során is bebizonyosodott, hogy a kristályrácsok „lágyabbak” az ideális kristályrácstól elvárható értékeknél, mivel vonalhibákat, úgynevezett diszlokációkat tartalmaznak. A vonatkozó elméletet Taylor, valamint tőle függetlenül Orowan és Polányi vezették be 1934-ben. Az elmélet általános összefoglalását Burgers végezte el 1938-ra, de az elmélet nyilvánvaló gyakorlati, kristálynövesztéses bizonyítására egészen 1948-ig várni kellett. A kristálytani hibák vizsgálatának legmeghatározóbb eszköze a transzmissziós elektronmikroszkóp (TEM).

A szilícium, mint a rohamosan fejlődő félvezetőipar legfőbb alapanyaga, a Földön kiterjedten megtalálható, és az egyik legkutatottabb anyag még napjainkban, a vegyület-félvezetők megjelenése után is. A Bardeen, Brattain és Shockley nevéhez fűződő bipoláris tranzisztor feltalálása után a germánium került a középpontba, de ezen félvezető felületi aktivitása és kis tiltott sáv szélességéből adódó nagy szivárgó árama miatt hamar át kellett adnia helyét a szilíciumnak. Napjainkban már az aktuális kihívást a tökéletes kristályrácsok megvalósítása jelenti, melyben felesleges szennyezők nem változtatják meg a tervezett elektromos és optikai tulajdonságokat, illetve kristályhibák nem gátolják és csökkentik a már egyre csökkenő számú (egyre kisebb energiaigényű) szükséges töltéshordozók mennyiségének transzportfolyamatait. A gátló kristálytani tökéletlenségeket nagyfelbontású vizsgálati módszerekkel fel kell tárni és a technológiai folyamatokban – elsősorban a mikroelektronikában és nanotechnológiában – lehetőség szerint minimalizálni, vagy adott esetben lehetőség szerint megszüntetni is kell. Félvezető alapú nagysebességű elektronikai eszközök és monokromatikus fényt kibocsátó optikai eszközök technológiája esetén néhány ppb-szintű (parts per billion – azaz csak pár atom a milliárdból) szennyezők vagy hibák jelenléte észlelhetően romló működési paraméterekhez vezethet – már nem is beszélve például az egyelektronos tranzisztorokról, ahol egyetlen elektron kristályhibák általi esetleges " elvesztése " a várt működés teljes megszűnéséhez vezet.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



## 4.1. Kristályhibák típusai

A kristályhibáknak 4 nagy típusa van, melyek a kristályhiba kiterjedésével, azaz dimenziójából fakad:

- Ponthibák
- Vonalhibák vagy diszlokációk
- Területi vagy sík hibák
- Térfogati hibák

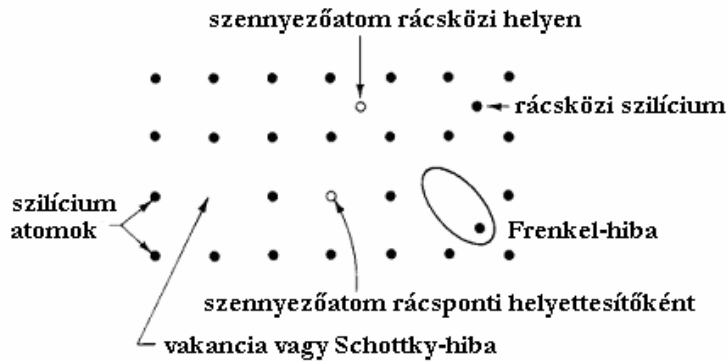
### 4.1.1. Ponthibák (0-dimenziós hibák)

A ponthibáknak számos formája lehet, ahogy ezt a 4.1. ábra is szemlélteti az elektronika egyik legfőbb alapanyagának, a szilíciumnak példáján. Minden szilíciumtól különböző atom ponthibának tekintendő függetlenül attól, hogy rácspontban vagy rácsközi pozícióban van. Az ilyen atom lehet szándékosan bejuttatott adalék vagy éppen szennyező is. A rác hiányzó atomjai üres rácshelyet – azaz vakanciát vagy úgynevezett Schottky-hibát hoznak létre, ami szintén ponthiba. Egy olyan rácsközi szilícium atom, mely egy vakanciához kötődik – Frenkel-hibaként kerül meghatározásra. Fontos összefüggésként érdemes megjegyezni, hogy a vakanciáknak és a rácsközi atomoknak van egyensúlyi koncentrációi, melyek a hőmérséklettől függenek. Termodinamikai szempontból a hőmérsékletfüggő koncentráció a következő összefüggés révén határozható meg:

$$N_d = A \exp(-E_a/kT), \quad (4.1)$$

ahol  $N_d$  a ponthibák koncentrációja,  $A$  egy állandó,  $E_a$  az aktiválási energia (2,6 eV vakanciákra és 4,5 eV rácsközi atomokra),  $T$  az abszolút hőmérséklet, és végül  $k$  a Boltzmann-állandó. A ponthibák elsősorban a diffúzió és oxidáció kinetikai folyamatainál játszanak fontos szerepet. Elektronikai szempontból az aktív atomok rendszerint helyettesítő – nem pedig rácsközi – helyet foglalnak el a kristályrácsban. Ilyen rácsközi helyen új energiaszinteket is hoznak létre a félvezető tiltott sávjában. Az alacsony szintek hatékony donorként illetve akzeptorként működhetnek, míg a tiltott sáv belsejében lévő energiaszintek töltéshordozók generálásában és rekombinációjukban játszanak szerepet. Vannak bizonyos szennyezők, melyek csak kizárólag rácspontokban, azaz helyettesítőként foglalnak helyet a kristályrácsban, de vannak olyanok is, melyek csak rácsközi helyen találhatóak. Azonban olyan szennyezők is vannak melyek mindkét előbb említett pozíciót rendre elfoglalják.

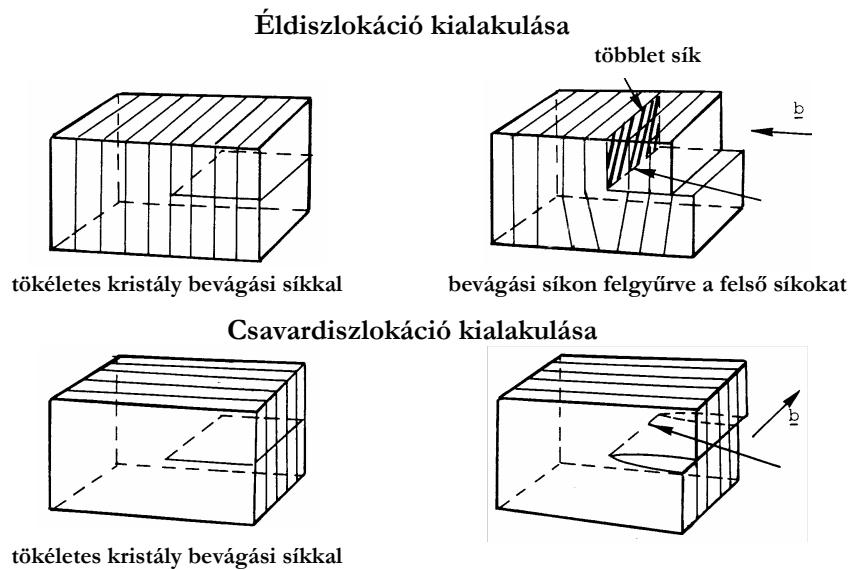
*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



4.1. ábra: Ponthibák típusai és előfordulásuk egy egyszerű kristályban.

#### 4.1.2. Vonalhibák vagy diszlokációk (1-dimenziós hibák)

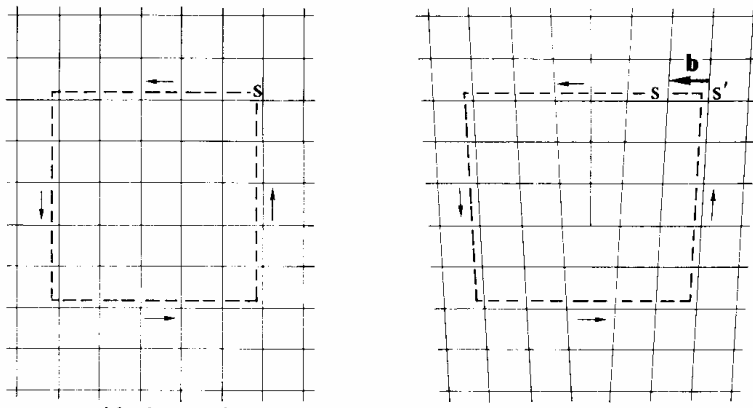
A kristályhibák második nagy csoportjába a diszlokációk, azaz a vonalhibák tartoznak. Két fajtájuk van – a csavar- és az éldiszlokáció, melyek a diszlokációk tiszta formáit jelenítik meg. Azonban fontos megjegyezni, hogy az átmenet egyikből a másikba folyamatos is lehet. A két diszlokáció típus kialakulásának főbb szemléltető lépéseit a 4.2. ábra illusztrálja.



4.2. ábra. Él- és csavardiszlokációk (felül illetve alul illusztrálva)  $\mathbf{b}$  Burgers-vektoruk meghatározásával.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

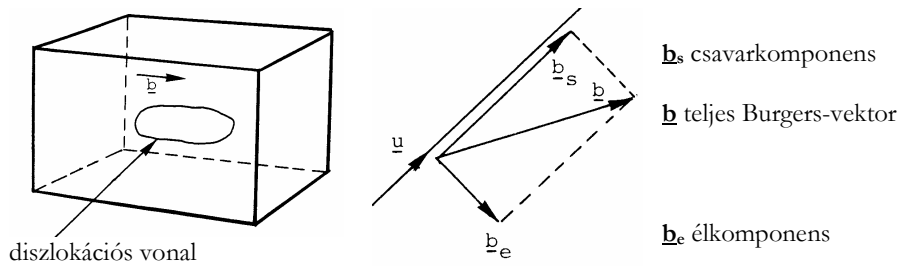
A diszlokáció mértéke a  $\mathbf{b}$  Burgers-vektorral kerül meghatározásra, mely megadja a kristálytani elcsúszás irányát és mértékét. A Burgers-vektor meghatározása a következőkben ismertetett módon lehetséges a 4.3. ábrán szemléltetett módon. Feltesszük, van egy hibáktól mentes ideális kristály és egy kristályhibával, diszlokációval rendelkező kristály. Az ábrán vázolt függőleges síkban egy tetszőleges, rácspontok által megadott pályán választunk rácspontról rácspontra „ugrásokkal”. Amennyiben a kiindulási pontba jutunk vissza úgy, hogy mind függőleges, mind pedig vízszintes irányokban haladva pozitív és negatív irányokban külön-külön egyező számú rácspontot érintettünk (pl. vízszintesen balra 5-öt, majd függőlegesen lefelé 5-öt, majd vízszintesen jobbra 5-öt, majd végül felfelé 5-öt) – akkor ideális kristályban haladtunk a kiválasztott pályán. Amennyiben viszont a zárt hurok nem jön létre, csak egy további,  $\mathbf{b}$  Burgers-vektorral jellemezhető lépéssel – úgy az a bejárt térrész diszlokációt tartalmaz. A feltárt diszlokáció a pályát bezáró, vektorként értelmezhető lépéssel – azaz a  $\mathbf{b}$  Burgers-vektorral zárható be, ahogy ez a 4.3. ábra bal oldalán is látható a megfelelő jelöléssel. Az előbbieket figyelembe véve az ábra alapján megállapítható, hogy éldiszlokáció esetén a Burgers-vektor merőleges a diszlokáció vonalára, míg csavardiszlokáció esetén a Burgers-vektor párhuzamos a diszlokáció vonalával.



4.3. ábra. A  $\mathbf{b}$  Burgers-vektor meghatározása ideális (bal oldali ábra) és kristályhibával rendelkező (jobb oldali ábra) kristály esetén.

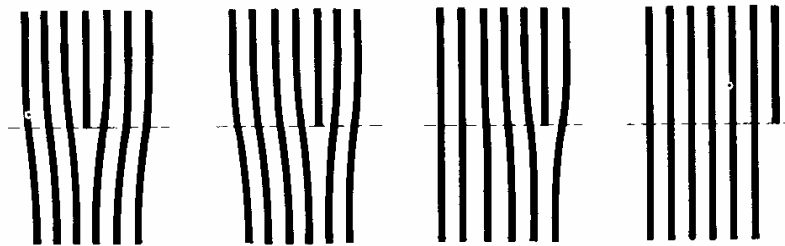
Általánosabban kifejezve, a diszlokáció egy terület határát jelöli, mely felett az anyag elcsúszott  $\mathbf{b}$  vektorral az alatta lévő anyaghoz képest. Természetesen vegyes diszlokációkról is beszélhetünk, ahol a Burgers-vektor és a diszlokáció vonala között  $0^\circ$  és  $90^\circ$  közötti szög alakult ki, ahogy ez a 4.4. ábrán látható.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



4.4. ábra: Kristályon belül kialakult diszlokációs vonal. A vegyes diszlokáció esetén a Burgers-vektor felbontható él- és csavarkomponensekre.

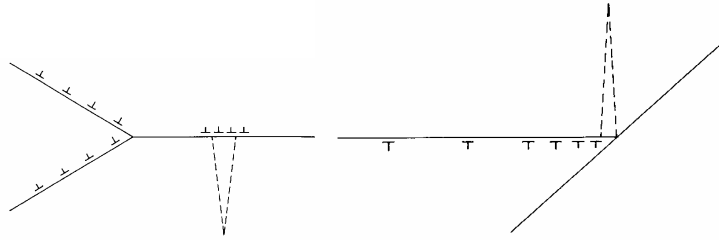
A diszlokációkat tartalmazó kristályokban a diszlokációk egyenes vonalúak lehetnek, melyek a kristályok felületén végződnek, vagy zárt hurkokat alkothatnak, illetve 3 dimenziós hálózatokat alkothatnak – melyekben a diszlokációs vonalak vagy a felületen végződnek, vagy zárt hurkokat alkotnak, vagy pedig egymásban is végződhetnek, mellyel mintegy kioltják egymást. Zárt hurkok esetén a diszlokáció típusa különféle a hurok különböző részein, de a  $\underline{b}$  Burgers-vektorok összege 0. A diszlokációk vándorolni is tudnak a kristályon belül, ahogy ezt a 4.5. ábra is szemlélteti. Tisztán lázható az ábrán a diszlokáció, mely mintegy elválasztja a hibásan illesztett (elcsúszott) és hibamentes (csúszásmentes) régiókat. Az ábrázolt éldiszlokáció a szaggatott vonallal jelzett csúszósíknál végződik. Így a felső régió lokálisan egy fél síkkal többet tartalmaz, mint az alsó régió. Külső hatások révén pedig a diszlokáció vándorolni is tud, ahogy ennek mechanizmusa a 4.5. ábrán látható.



4.5. ábra. Éldiszlokáció mozgása a szaggatott vonallal jelzett csúszósíkon.

Azonos csúszósíkkal rendelkező diszlokációk mozgását szemcsehatárok gátolhatják – melyeknél a diszlokációk feltorlódhatnak, sűrűségük jelentősen megnövekedhet. Az egymással kölcsönhatásba kerülő diszlokációk mikro-repedések és mikro-lyukak kialakulásához is vezethetnek. A diszlokációk feltorlódását a 4.6. ábra illusztrálja.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



4.6. ábra. Azonos csúszósíkkal rendelkező diszlokációk feltorlódása, illetve mikrorepedések kialakulása a torlódási helyeknél.

#### 4.1.3. Síkhibák (2-dimenziós hibák)

Síkhibák határfelületeknél jöhetnek létre. Ilyen eset lehet, ahol például a kristályorientáció változik meg egy határfelületnél, mintha az egyik oldal tükörképe lenne a másíknak – az ikerfelületének. A szilícium estén az (111) sík ilyen ikersík. Síkhiba található a szemcsehatároknál is, ahol átmenet jön létre kristályos anyagok között, melyek között nincs orientációs összefüggés. A szemcsehatárok rendezetlenebbek mint az ikerfelületek. Például szilíciumban szemcsehatár választhat el egykristályos és polikristályos régiókat. A síkhibák nagy területeket fedhetnek le, de mindkét oldalukon tökéletes kristály határolhatja ezeket a részeket, azonban az ilyen növesztett félvezetőkristályok integrált áramkörök kialakítására rendszerint alkalmatlanok.

#### 4.1.4. Térfogati hibák (3-dimenziós hibák)

Kristályos anyagon belül felhalmozódott szennyező- és adalékanyagok térfogati hibákat hoznak létre precipitátumok formájában. Egy kristályrácsba juttatott bármely szennyező anyagnak oldhatósága van. A legtöbb szennyezőnek úgynevezett retrográd oldhatósága van, azaz oldhatósága csökkenő hőmérséklettel csökken. Így ha egy  $T_1$  hőmérsékleten maximálisan oldható koncentrációban szennyezőket bocsátunk egy kristályos anyagba, majd a kristályt egy alacsonyabb  $T_2$  hőmérsékletre hűtjük, mellyel egy túltelített állapotot hozunk létre. A túltelítettség fokát a  $T_1$  hőmérsékleten elért koncentráció és a  $T_2$  hőmérsékleten létrejött oldhatóságának aránya adja. A kristály így egy egyensúlyi állapotba kerül, mely során a többlet szennyező atomok precipitátumok formájában egy második fázisként kiválnak. Ez a második fázis különböző lesz mind összetételében, mind pedig kristályszerkezetében. Fémszennyezők kiválásakor létrejövő reakciók szilíciumban szilikátok létrejöttét okozzák a szilícium kristályrácsán belül. A kiválás kinetikája függ a túltelítettség fokától, az időtől, valamint a precipitátumok kialakulásának helyétől. A mikro- és nanoelektronikai technológiák során precipitátumok kialakulása természe-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

tesen kerülendő, hiszen ezek a térrészek segítik a diszlokációk kialakulását. A diszlokációk a precipitátum és a kristályrács térfogati illesztési hibáiból kialakuló belső feszültség felszabadulásán keresztül jönnek létre. Ez a belső feszültség szabadul fel diszlokáció létrehozása révén. A szilícium alapú félvezetőeszközök technológiai során bór, oxigén és fémszennyezők kiválasztását lehet adott esetben megfigyelni.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

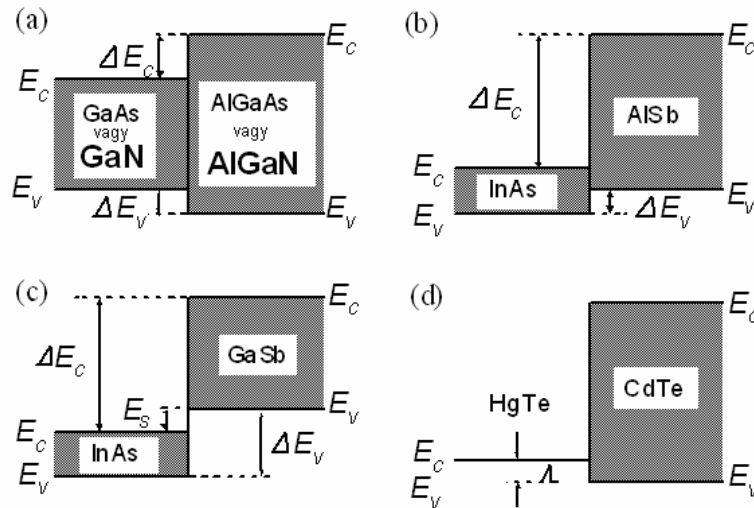
## 5. III-V vegyület-félvezetők

### 5.1. Heterostruktúrák

Két különféle, egymásra rétegnövesztett félvezető heteroátmenetet hoz létre. Az olyan kristályos félvezetőket, melyek egy vagy több heteroátmenetet tartalmaznak – heterostruktúráknak nevezzük. A heteroátmeneteknek alapvetően 4 típusa létezik, melyeket a 5.1 ábra szemléltet. Az I-es típus jellemzi a GaAs-AlAs, GaN-AlN, GaSb-AlSb, GaAs-GaP anyagrendszerek átmeneteit, ahol  $\Delta E_g = \Delta E_c + \Delta E_v$ , azaz a vezetési és vegyértéksávok különbségeinek összege jellemzi az átmenetet. A II-es típus jellemzi az InAs-GaSb,  $(\text{InAs})_{1-x}(\text{GaAs})_x - (\text{GaSb})_{1-y}(\text{GaAs})_y$  anyagrendszerek átmeneteit, ahol a töltéshordozó elektronok illetve lyukak térben elkülönülő rétegekbe választódnak szét. Különösen a II-es illesztetlen típusú heterostruktúráknál a vegyértéksáv a GaSb részben az InAs rész vezetési sávjának alja fölött helyezkedik el  $E_s$  értékkel, különbözve a II-es lépcsős típusú heterostruktúráktól. Különleges félvezető-kombinációnak tekinthető a HgTe-CdTe, mely III-as típusú heterostruktúrát formál, ahol a HgTe mint 0 tiltott sáv szélességű félvezető szerepel. Ez utóbbi típusú heterostruktúra III-V vegyület-félvezetőkkel nem valósítható meg.

A vezetési és vegyértéksávok heteroátmeneteknél történő folytonosságainak megváltozásai határozzák meg a kvantumvölgy és szuperrács struktúrák alapvető tulajdonságait. Heterostruktúrák kialakításánál olyan félvezetőpárokat kell kiválasztani, melyek rácsállandói közel azonosak, mivel így csökkenthető a kristályhibák sűrűsége és a kialakuló mechanikai feszültség. Azonban eltérő rácsállandójú heteroátmenetek is előállíthatóak az illesztésből adódó kristályhibák nélkül, amennyiben egy kritikus rétegvastagságnál kisebb réteget hozunk csak létre. Ebben az esetben az illesztetlenség mechanikai rácsfeszültségben oszlik szét. Így állíthatók elő a szuperrácsok, melyek eltérő rácsállandójú félvezetőkből állnak, de a kialakuló egységes, elosztott belső mechanikai feszültség révén kristályhibáktól mentesek. Ez ad lehetőséget különféle tiltottsáv szélességű félvezetők előállítására optikai eszközökhöz. Szuperrács struktúrák amorf félvezetők felhasználásával is létrehozhatók, változtatva növesztve amorf szilíciumot, germániumot, szilícium-nitridet és szilícium karbidot.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



5.1. ábra: Félvezető heteroátmenetek: (a) I-es típus, (b) II-es lépcsős típus, (c) II-es illesztetlen típus, (d) III-as típus.

## 5.2. III-V vegyület-félvezetők

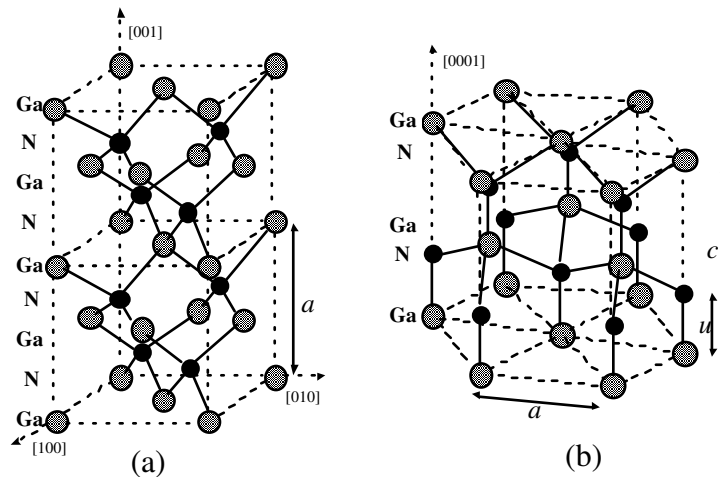
### 5.2.1. III-V biner vegyület-félvezetők

A III-V félvezetők hasonló kristályszerkezetűek mint a gyémánt-rácsú elemi félvezetők (Si, Ge), de létrehozásokhoz a III-as (B, Al, Ga, In) és az V-ös (N, P, As, Sb) csoportok elemeit használjuk. A III-V vegyület-félvezetők (vagy félvezető ötvözetek) általában cinkblende kristályráccsal rendelkeznek, melyet két egymásba hatoló lapcentrált köbös (FCC) rács alkot. A wurtzitrács szintén gyakori, melyet két egymásba hatoló hexagonális közel illesztett (HCP) rács alkot, ahogy az a 5.2. ábrán is látható. A III-nitrid félvezetők (pl. GaN, AlN, InN és a hasonló ötvözetek) a termodinamikailag stabilabb wurtzitrácsban kristályosodnak. Azonban nem egyensúlyi állapotok között cinkblende struktúra is létrehozható köbös kristályrácsú hordozó kristályokon (pl. Si és GaAs). A két kristályszerkezet hasonló, de a wurtzitrács anyagokat formál, míg a cinkblende nagyobb szimmetriát mutat. Mindkét kristályszerkezetben a III-as csoportú atomokat 4 nitrogénatom határol, és minden egyes nitrogénatomot 4 darab III-as csoportú atom határol. A fő különbség azonban az atomi síkok illesztési sorrendje, míg a legközelebbi szomszédok pozíciói majdnem azonosak. Csak a második legközelebbi szomszédok viszonylagos pozíciói különböznek. Minden atomi kötéstávolság azonos a cinkblende struktúrában, de a wurtzitrács esetén két kissé eltérő atomi kötéstávolság van.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



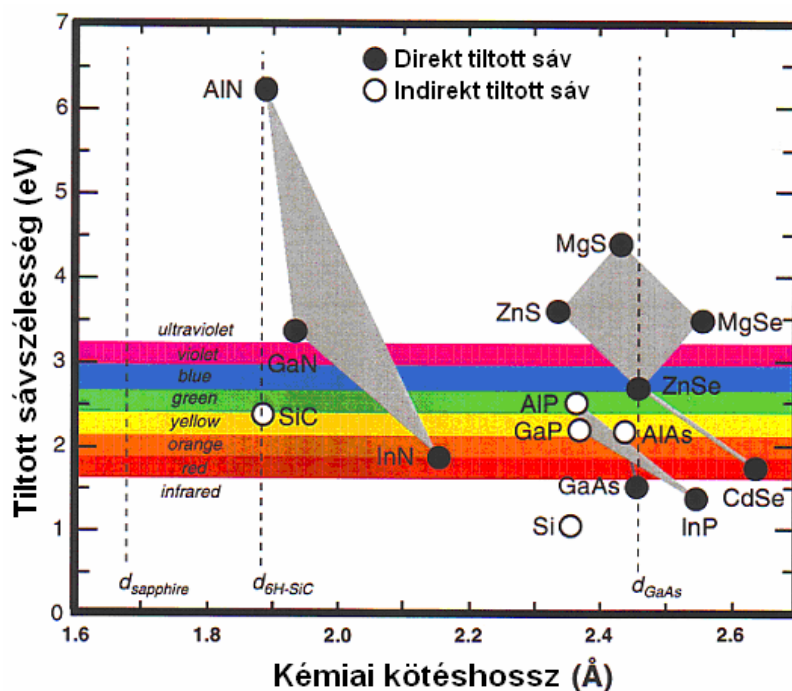
Cinkblende rácsnál az egyensúlyi kristálygeometria könnyen meghatározható, ahol  $a$  a rácsállandó két atommal az egységgrácspan, egyik a  $(0,0,0)$ , míg a másik a  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})a$  pozícióban, ahol az egységvektorok  $\mathbf{a} = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})a$ ,  $\mathbf{b} = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})a$ , és  $\mathbf{c} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)a$ . A wurtzitrács esetén 4 atom van a hexagonális egységgrácspan. Az  $\mathbf{a} = (\frac{1}{2}, \sqrt{\frac{3}{4}}, 0)a$ ,  $\mathbf{b} = (\frac{1}{2}, -\sqrt{\frac{3}{4}}, 0)a$ , és  $\mathbf{c} = (0, 0, c/a)a$  egységvektorokkal a rácsot alkotó egyik típusú atomok a  $(0,0,0)$  és  $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$  pozíciókban foglalnak helyet, míg a másik típusú atomok a  $(0,0,u)$  és  $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, u + \frac{1}{2})$  pozícióknál találhatók, ahol  $u$  egy belső paraméter. Ideális wurtzitrácsra  $c/a = \sqrt{\frac{8}{3}}$  és  $u = \frac{3}{8}$ .



5.2. ábra: Cinkblende (a) és wurtzite (b) kristályrácsok.

Néhány vegyület-félvezető látható a 5.3. ábrán, illusztrálva a különféle anyagcsoportokkal lefedhető tiltott sáv szélességeket a kémiai kötéshosszak függvényében. A különféle kristályrácsú (cinkblende illetve wurtzite) félvezetők összehasonlítása a kémiai kötéshosszakon keresztül válhat közvetlenné. Természetesen vannak olyan vegyület-félvezetők is, melyek mindkét kristályráccsal előállíthatók. A biner félvezetők gyakran használatosak hordozókként a félvezető-technológiákban. A növesztett réteg kristályszerkezete így a hordozóéénak fog megfelelni.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



5.3. ábra: Vegyület-félvezetők tiltott sáv szélessége és kémiai kötési hossz függvényében. A látható fény tartománya a félvezetők tiltott sávjának szélességéhez viszonyítva látható. A szokásos félvezető-technológiai hordozókhoz tartozó tiltott sáv szélességek szaggatott vonallal jelöltek. A különféle kristályrácsú (cinkblende illetve wurtzit) félvezetők összehasonlítása a kémiai kötési hosszakon keresztül válik közvetlenné.

### 5.2.2. III-V terner vegyület-félvezetők

Ha a III-as vagy az V-ös csoportból több elemet választunk, és ezeket véletlenszerűen osztjuk szét a III-as és V-ös rácsponti helyekre, III-III-V vagy III-V-V terner vegyület-félvezetőket kapunk. A leggyakrabban használt jelölés  $\text{III}_x\text{III}_{1-x}\text{V}$  illetve  $\text{IIIIV}_y\text{V}_{1-y}$ . Több mint 20-féle lehetséges terner rendszer állítható elő.

A terner vegyület-félvezetők  $E_g(x)$  tiltott sáv szélessége az  $x$  összetétel függvénye a következők szerint:

$$E_g(x) = E_g(0) + bx + cx^2, \quad (5.1)$$

ahol  $E_g(0)$  a kisebb tiltott sáv szélességű biner komponens tiltott sáv szélessége és  $c$  a görbületi paraméter. Thompson és Wooley (1967) nevéhez fűződik a négyzetes változás igazolása. A görbületi paraméter elméleti számításokkal meghatározható, mely akkor válik különleges fontossá, amikor tapasztalati adatok nem állnak rendelkezésre egy adott vegyületről.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

Egy terner vegyület-félvezető  $a$  rácsállandója a Vegard-szabály szerint határozható meg. Így a terner vegyület-félvezetők egy átlagos rácsállandója határozható meg az alábbi módon:

$$a_{\text{alloy}} = xa_A + (1 - x)a_B, \quad (5.2)$$

ahol  $a_A$  és  $a_B$  az A és B biner komponensek rácsállandói. A Vegard-szabály jól illeszkedik a legtöbb III-V terner vegyület-félvezető rácsállandójának változásához.

A különféle III-V terner vegyület-félvezetők kialakítását a különféle fényhullámhosszakhoz kötődő optikai alkalmazások tették szükségesé. Az alapelv az volt, hogy a félvezetők tiltott sávzélességét igazítsák hozzá egy meghatározott hullámhosszhoz, mellyel adott hullámhosszú fotonok kibocsátása illetve detektálása vált lehetővé az így kialakított eszközökkel. Így a felhasznált biner vegyület-félvezetők közötti tartományok is lefedhetővé váltak terner vegyület-félvezetőkkel. Végeredménybe a különféle terner rendszerekkel az egész látható tartomány lefedhetővé vált napjainkra.

### 5.2.3. III-V kvaterner vegyület-félvezetők

A kvaterner vegyület-félvezetők alkalmazását elsősorban a rácsillesztett heteroátmenetek kialakítása motiválta, melyekkel különféle tiltott sávzélességű félvezető-struktúrák megvalósítása vált lehetővé. Példaként említhető a mechanikai feszültség csökkentése GaAs-en rétegnövesztett  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  rétegekben, ahol kevés P hozzáadásával átmeneti, feszültségcsökkentő kvaterner  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}_y\text{As}_{1-y}$  réteg jött létre. Feltételezve a biner AC komponens  $a_{AC}$  rácsállandójából adódó lineáris függést az összetételen keresztül, valamint ugyanilyen összetételen keresztül megvalósuló lineáris összefüggést a többi hasonló biner rácsállandón keresztül is, az  $\text{A}_x\text{B}_{1-x}\text{C}_y\text{D}_{1-y}$  kvaterner vegyület rácsállandója a következőképpen fejezhető ki:

$$a_0 = xy a_{AC} + x(1 - y)a_{AD} + (1 - x)y a_{BC} + (1 - x)(1 - y)a_{BD}, \quad (5.3)$$

A tiltott sávzélesség energiájának meghatározása azonban a korábban látottaknál valamivel bonyolultabb. Ha a  $c$  görbületi paraméter elhanyagolható, akkor a tiltott sávzélesség energiája a vonatkozó binereken keresztül, egyszerű lineáris változást feltételezve közelíthető:

$$E_g = xy E_{AC} + x(1 - y)E_{AD} + (1 - x)y E_{BC} + (1 - x)(1 - y)E_{BD}. \quad (5.4)$$

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

## 5.3. Elektronikai tulajdonságok

### 5.3.1. Elektronok három dimenzióban

Az elektronok vákuumbeli mozgása síkhullámokkal írható le kvantummechanikai megközelítést alkalmazva. Így az elektronok hullámfüggvénye a következő alakban adható meg:

$$\psi_{(k,r)}^{3D} = \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (5.5)$$

ahol  $V$  a makroszkopikus térrész térfogata és  $k$  a hullámvektor ( $2\pi/\lambda$ ). Kristályos félvezetőkben az elektronok (és lyukak) kvázi-szabadoknak tekinthetők a gyenge periodikus rácspotenciálból adódóan. Az elektronok energiaeloszlása tömbkristályban a sáv szélének közelében az alábbiak szerint adható meg:

$$E^{3D} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (5.6)$$

ahol  $m^*$  az effektív tömeg, melyben a periodikus kristálypotenciál is figyelembe lett véve. Egy háromdimenziós (3D) elektronrendszer energiaeloszlási függvénye parabolikus állapotsűrűségi függvényhez vezet:

$$D^{3D} = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}, \quad (5.7)$$

ahogy ez a 5.4. ábrán is látható.

### 5.3.2. Mozgásukban korlátozott elektronok

Elektronok mozgásának egy vagy több dimenzióban történő korlátozása nemcsak a hullámfüggvényt módosítja, de hatással van az eloszlásra és az állapotok sűrűségére is. Ennek a hossz szerinti kvantálásnak a méretét ideális esetet és szóródásmentességet feltételezve a de Broglie hullámhossz határozza meg:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m^*E}}. \quad (5.8)$$

Egydimenziós korlátozás négyszögletes végtelen magas potenciálgátat feltételezve ( $x$  irányban) méretbeli kvantáláshoz vezet ebben az irányban, ahol az immár kétdimenziós (2D) elektronok energiája az alábbiak szerint adható meg:

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

$$E^{2D} = E_{n_z} + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}. \quad (5.9)$$

A  $z$  irányban történő korlátozás a korlátozási energiát adja meg a következők szerint:

$$E_{n_z} = \frac{\hbar^2 n_z^2 \pi^2}{2m^* L_z^2}, \quad (5.10)$$

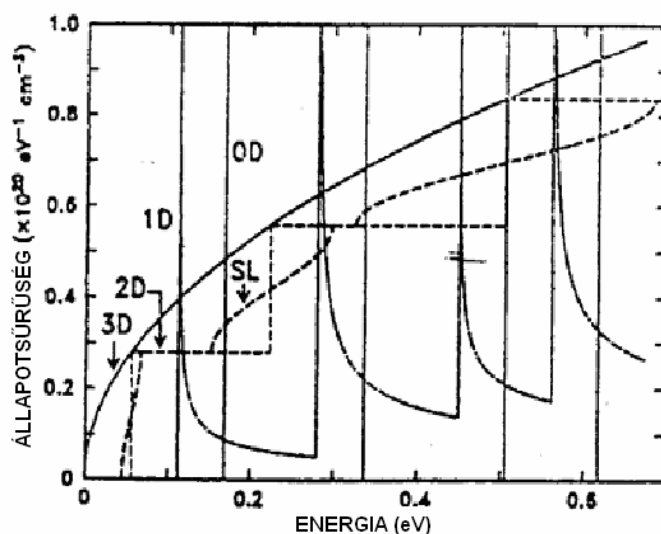
ahol  $L_z$  a potenciálvölgy szélessége (kvantumvölgy-réteg vastagsága) és  $n$  a kvantumszám ( $n = 1, 2, \dots$ ). Az elektron hullámfüggvényt síkhullámok adják az  $x$  és  $y$  irányokban, és páros vagy páratlan harmonikus függvényekkel leírt a korlátozott  $z$  irányban:

$$\psi_{n_z}^{2D} = \left(\frac{2}{L}\right) \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \left(\frac{2}{L_z}\right)^{\frac{1}{2}} \sin(k_{n_z} z). \quad (5.11)$$

Az állapotsűrűség függvény a korábbi  $E^{1/2}$  függésről lépcsős függvényre változik:

$$D_{(E)}^{2D} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_{n_z} \theta(E - E_{n_z}), \quad (5.12)$$

ahol  $\theta(E)$  a Heaviside-függvény ( $\theta = 0$  ha  $E - E_{n_z} < 0$ ,  $\theta = 1$  ha  $E - E_{n_z} > 0$ ), ahogy az a 5.4. ábrán is ábrázolt.



*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

5.4. ábra: Állapotsűrűségek ábrázolása háromdimenziós (3D) és kétdimenziós (2D) elektronrendszerek esetén. Összehasonlításként, állapotsűrűség szuperrácsban (SL), egydimenziós (1D) és nulladimenziós (0D) elektronrendszerekben.

### 5.3.3. Kétdimenziós elektrongáz

Heterostrukturák kialakítása esetén a sávok meggörbülnek, amikor két félvezető egymással érintkezésbe kerül. A Fermi-szintek kiegyenlítődnek egyensúlyi állapotban, míg a tömbanyag tulajdonságai helyreállnak az átmenettől távol. Az átmenet létrejöttkor elektronok diffúziós áramlása indul meg az egyik félvezetéből a másikra, pozitív donor ionokat hagyva hátra. A vezetési sáv folytonosságának megtörése egy betüremkedést (zsebet) hoz létre a kisebb tiltott sáv szélességű félvezetőben, ahogy az a 5.5. ábrán is látható. Az ebben a betüremkedésben lévő elektronok mozgását egy háromszögyszerű potenciálvölgy korlátozza, melynek vastagsága ~10-20 nm vagy kisebb, függően az adalékolási különbségtől. Mivel potenciálvölgy méretei kisebbek vagy összemérhetőek a de Broglie hullámhosszal, térbeli kvantumhatások jönnek létre. Ezeket a szinteket alsávoknak nevezzük, mivel a határfelülettel párhuzamosan az elektronenergiák nem kvantáltak és az elektronok megtartják a sáv tulajdonságait, egy kétdimenziós elektrongázt (2DEG) alkotva. A szabad elektronok energiáit ebben a kétdimenziós rendszerben a 5.10. egyenlet adja meg. Azonban egyszerűbb az alsávok energiáit úgy közelíteni, hogy az előbbi potenciálvölgyet (zsebet) háromszögletű potenciálvölgynek tekintjük végtelen kiterjedéssel. A 2-dimenziós potenciál modellezése az AlGaIn/GaN határfelületnél jelzi, hogy a  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  tartományba eső elektronkoncentráció révén nemcsak a 2DEG első alsávja kerül betöltésre. A kialakuló energiaszinteket végtelen háromszögű potenciállal lehet közelíteni a következőképpen:

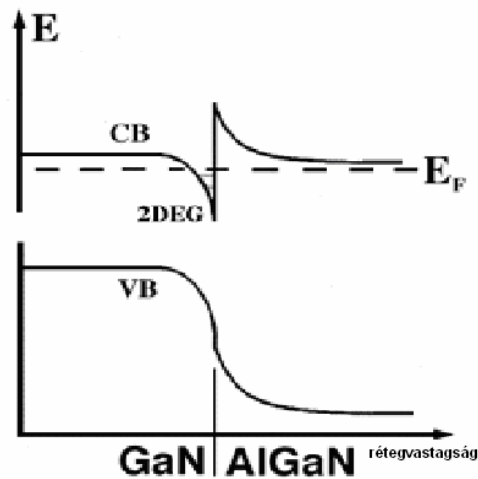
$$E_i = \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{1/3} \left( \frac{3}{2} \pi q F \right)^{2/3} \left( i + \frac{3}{4} \right)^{2/3}, \quad (5.13)$$

ahol  $F$  az elektromos térerősség, mely megfelel az energiasáv lejtésének, míg  $i$  jelöli a sávindexet.

Mivel a szabad elektronok a megfelelő térbeli kvantált szintek csapdáiba esik, ezzel az elektronkoncentráció ott nagymértékben megnövekszik és a határfelület kisebb tiltott sáv szélességű félvezetőjéhez lokalizálódik. Amennyiben a szélesebb tiltott sáv szélességű félvezető erősen adalékol, míg a keskenyebb tiltott sáv szélességű félvezető adalékolásmentes vagy közel annak tekinthető, nagy elektronátvitel érhető el. Az elektronok a szélesebb tiltott sáv szélességű félvezető ionizált donorjaitól származnak, és térben elkülönülnek a megfelelő ionjaiktól. Ennek

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

a különválásnak az a jelentősége, hogy a szabad elektronok koncentrációja nagymértékben megnövelhető egy anyagon belül anélkül, hogy a töltéshordozók mozgékonyaságát a nagymértékben megnövekvő koncentrációjú hátrahagyott donorionok lecsökkentenék az ionizált szennyezők révén létrejövő elektronszóródást. Ehelyett a szabad elektronok elkülönítődnek a hátrahagyott ionizált donoratomoktól egy olyan térrészbe, melyben az ionizált szennyezők koncentrációja alacsony. Így rendkívüli mértékben megnövekedett elektronmozgékonyaságok érhetőek el. Heterostruktúrák modulációs adalékolása egy széles körben alkalmazott technológia arra, hogy 2DEG tulajdonságokat mutató félvezetőeszközöket állítsunk elő. Ilyen eszközök a fém-oxid térvezérlésű tranzisztorok (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor – MOSFET), a nagy elektronmozgékonyaságú tranzisztorok (High-Electron-Mobility Transistor – HEMT) és a piezo-indukált AlGaIn/GaN heterostruktúra térvezérlésű tranzisztorok (Heterostructure Field-Effect Transistor – HFET), melyek a legutóbbi idők III-nitrid alapú félvezető-fejlesztéseinek alapulnak.



5.5. ábra: Modulációadalékolt AlGaIn/GaN heteroátmenet sávszerkezete egyensúly esetén, jelölve az illesztett Fermi-szinteket és az így létrejött sávgörbületeket. A vezetési sáv folytonosságának megtörése egy betüremkedést (zsebet) hoz létre határfelületnél, kétdimenziós elektrongázt (2DEG) létrehozva a kisebb tiltott sáv szélességű félvezetőben. A különböző, rétegnövesztéssel előállított rétegek is feltüntetésre kerültek. A kialakuló elektronkoncentráció az első és második alsávokat tölti meg.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

## 6. Epitaxiális rétegnövesztés

### 6.1. Rövid történeti áttekintés

Az „epitaxia” jelentése egykristályos réteg rendkívüli módon kontrollált, atomi szintű leválasztása egy egykristályos hordozón oly módon, hogy a hordozó kristályszerkezete folytatódik a leválasztott rétegben. Különleges érdeklődés övezi a III-V vegyület-félvezetők epitaxiális rétegnövesztését InP, GaAs és GaSb félvezetőkön alapulva, de napjainkban a GaN is az elektronikai és optikai eszközfejlesztések érdeklődésének középpontjába került. Ezzel az új technológiával új vegyület-félvezetők széles skálája állítható elő a legkülönfélébb optikai és elektronikai tulajdonságokkal rendelkező eszközök formájában.

1974-ben optikai abszorpció megfigyelése vált lehetővé epitaxiálisan növesztett 50 - 200 Å széles GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (0,19 < x < 0,7) kvantumvölgy struktúrában. Az első, folytonos üzemmódban működő dupla heterosztuktúrájú, szobahőmérsékleten működő lézer előállítására 1975-ben vált lehetővé epitaxiális rétegnövesztés révén. Töltéshordozók első sikeres térbeli elkülönítése a modulációs adalékolási technika kidolgozása révén 1978-ban vált lehetővé. A GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As alapú modulációadalékolt szuperrácsok az előzetes elméleti számításokat messze meghaladó elektronmozgékonyságokat értek el. A GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterosztuktúrákban létrehozott kétdimenziós elektrongázok (2DEG) 1.000.000 cm<sup>2</sup>/Vs-ot meghaladó elektronmozgékonytságot mutattak, mellyel új, nagysebességű MODFET struktúrák kialakítása vált lehetővé. A modulációadalékolt HEMT tranzisztorok 1989-ben már tömeggyártásba kerültek és az LSI és VLSI áramkörök alapelemeivé váltak. 1980-ban a kvantált Hall-effektust 2-dimenzionális, epitaxiálisan növesztett struktúrában sikerült megfigyelni nagy mágneses tér és alacsony hőmérséklet alkalmazásával.

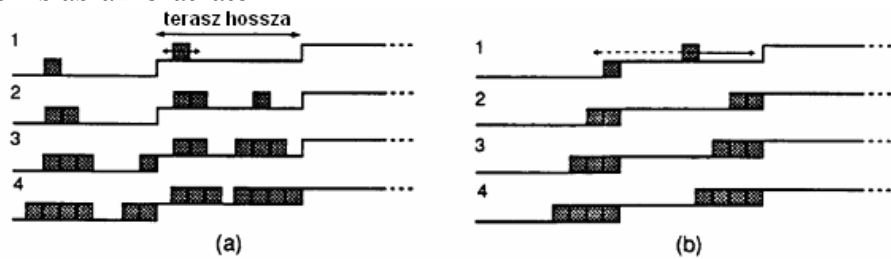
### 6.2. Homoepitaxia és rácsillesztett heteroepitaxia

A rácsillesztett rétegek epitaxiális rétegnövesztése rétegről rétegre történik, mely a Frank–van der Merwe növesztési mechanizmus szerint megy végbe. A GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As struktúráknak közel azonos rácsparaméterekkel rendelkeznek (az eltérés 0,6%-on belüli), mellyel kellően sík és kristályhibamentes rétegről rétegre történő növekedés érhető el. Számos más III-V alapú rendszer is kielégíti az előbbi szigorú feltételeket, mint például az In<sub>0,5</sub>Ga<sub>0,5</sub>As – InP, In<sub>0,5</sub>Ga<sub>0,5</sub>P – GaAs, In<sub>0,5</sub>Al<sub>0,5</sub>As – InP vagy a GaAs<sub>0,5</sub>Sb<sub>0,5</sub> – InP rendszerek.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



A rétegről rétegre történő növekedés két korlátozó esettel jellemezhető. Ez első ilyen típusú korlátozás, amikor az atomok felületi migrációs hossza sokkal rövidebb, mint a hordozó felületének alakzatai, melyek például az úgynevezett teraszok, amiket atomi szintű „lépcsők” választanak el egymástól. Ezeken a teraszokon a növekedés kétdimenziós szigetek kialakulásán keresztül történik, ahogy ez a 6.1.a. ábrán is illusztrált. A második típusú korlátozás akkor lép érvényre, amikor az atomok felületi migrációs hossza sokkal nagyobb, mint a teraszok méretei. Ebben az esetben a teraszokon migráló (vándorló) atomok a teraszok széleibe (lépcsőfokok) épülnek be. Az így fokozatosan kiterjedő lépcsőfokok egy olyan sebességgel fognak terjedni, mely a lépcsők sűrűségétől és a növesztési sebességtől függ, mellyel a lépcsőfokok mintegy végigfolynak a felületen, ahogy az a 6.1.b ábrán is látható.



6.1. ábra: Rétegről rétegre történő rétegnövesztés (Frank–van der Merwe) két korlátozó esete: (a) kétdimenziós szigetnövekedés, (b) lépcsőfokok terjedése (végigfolyása a felületen).

Vannak különleges esetek, amikor a rétegnövekedés eltér a rétegről rétegre történő folyamattól. Ez akkor jöhet létre, amikor különböző felületi energiákkal rendelkező anyagokat szeretnénk kombinálni. Egy általános szabály előre megadhatja a kialakuló növekedési módot a  $\gamma$  felületi energiákon keresztül, ahol  $\gamma_{sv}$  a hordozó–határfelület,  $\gamma_v$  a réteg–vákuum,  $\gamma_s$  pedig a hordozó–réteg felületi energiája. A rétegről rétegre növekedés akkor következhet be, ha a réteg csökkenti, vagy konstans értéken tartja a rétegek közötti energiát, azaz  $\gamma_v + \gamma_s \leq \gamma_{sv}$ . Háromdimenziós (3D) szigetek pedig akkor alakulnak ki, ha a réteg minimalizálja réteg–vákuum és réteg–hordozó határfelületeket, azaz  $\gamma_v + \gamma_s > \gamma_{sv}$ . Számos 3D szigetkialakításos példa megfigyelése vált lehetővé az elmúlt évek során.

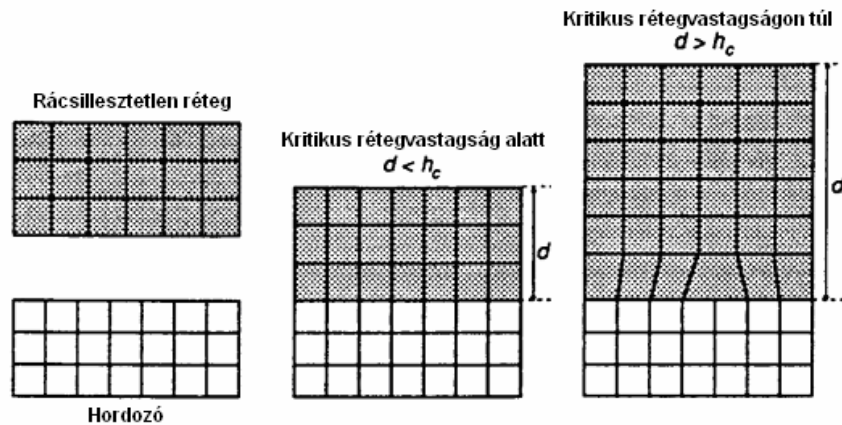
### 6.3. Rácsillesztetlen heteroepitaxia

Lehetséges rácsillesztetlen rétegeket vékony, rácshibamentes vastagságban előállítani, de a létrejött feszített rétegek sáv szerkezete lényeges

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

eltéréseket mutat a tömbanyagokéhoz képest. Az  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ – $\text{GaAs}$ ,  $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ – $\text{InP}$  és  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ – $\text{Si}$  rendszerek az utóbbi évek kutatásának és fejlesztésének is a középpontjába kerültek.

A csúcsmínőségű epitaxiális rétegeknek megfelelő maximálisan mechanikai feszültséget és rétegvastagságot az illesztési kristályhibák létrejötte és a növesztett réteg felületének atomi szintű érdessé válása korlátozza. A mechanikai feszültség illesztési kristályhibák létrejöttén keresztüli felszabadulása széleskörben tanulmányozott. A kritikus vastagság ( $h_c$ ) az a vastagság, mely felett diszlokációk jönnek létre a növesztett struktúrában. A rétegleválasztás vonatkozó lépései a 6.2. ábrán láthatóak, mely végén illesztési hiba jön létre, mellyel a belső mechanikai feszültség felszabadul. Az ilyen jellegű kristályhibák transzmissziós mikroszkóppal (TEM) figyelhetők meg a hordozó–réteg határfelületeken. Általánosan megállapítható, hogy  $h_c$  csökken a különféle anyagkombinációkra a növekvő illesztetlenséggel ( $f$ ), azaz a rácsállandók különbségével.



6.2. ábra: Rácsillesztetlen anyagok rétegleválasztásának kezdeti fázisai.

Háromféle alapelv létezik a  $h_c$ -nek  $f$ -től való függésének meghatározására. Matthews és Blakeslee a mechanikai feszültséggel rendelkező réteg energiáját egy olyan réteg energiájához hasonlította, mely illesztési diszlokáció kialakulásán keresztül feszültségmentessé vált. Ahogy megadták, egy kritikus vastagság létezett azon a határon is túl, ahol a feszültségmentessé vált struktúra energetikailag kedvező volt az alábbiak szerint:

$$h_c = \frac{b}{2\pi f} \frac{(1 - \nu \cos^2 \alpha)}{(1 + \nu) \cos \lambda} \left( \ln \frac{h_c}{b} + 1 \right) \quad (6.1)$$

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

ahol  $b$  a Burgers-vektor,  $\nu$  a Poisson-szám,  $\lambda$  adja meg a szöveget a csúszási irány és a réteg síkja között, és  $\alpha$  a szög a diszlokációs vonal és Burgers-vektora között. Dodson és Tsao olyan modellt dolgozott ki, amelyik magába foglalta a diszlokációk mozgásának kinetikáját a  $h_c$  kritikus rétegvastagság meghatározásába. Ez az utóbbi modell ad magyarázatot arra, a megfigyelésre, hogy koherens belső feszültséggel rendelkező rétegek érhetőek el a kritikus rétegvastagságnál nagyobb rétegvastagság esetén is, mint amit az egyensúlyi modellek jeleznek. A modell tanulsága abban nyilvánul meg, hogy a diszlokációk kinetikája korlátozza a relaxációt – azaz a rétegek belső feszültségének diszlokációk kialakulásán keresztül történő felszabadulását. A 0,02-0,03 feletti  $f$  értékek egy átmeneti tartományt jellemeznek a rétegről rétegre növekedésből a háromdimenziós (3D) szigetnövekedésbe bizonyos kritikus rétegvastagságoknál. Ez a mechanizmus az úgynevezett Stranski–Krastanov növekedési mód.

## 6.4. Nagy strukturális rácsillesztetlenség



a: Stranski–Krastanov növekedési mód

b: Volmer–Weber növekedési mód

6.3. ábra: Rétegnövekedési módok nagy strukturális rácsillesztetlenség esetén.

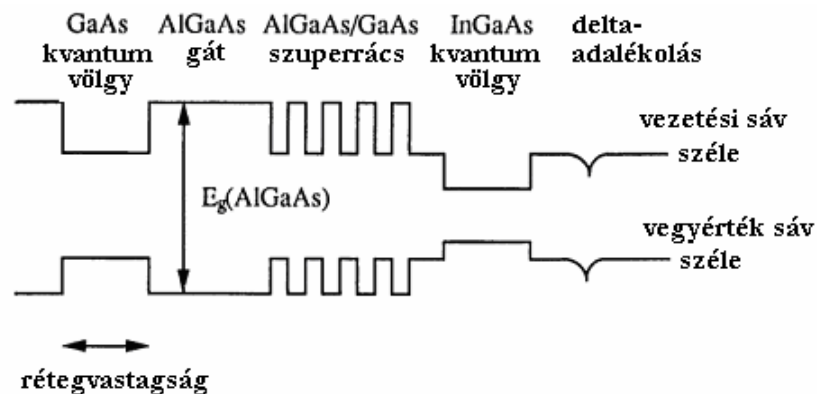
Néhány technológiai fontossággal bíró heteroepitaxiális rendszer különösen nagy rácsillesztetlenséggel rendelkezik. Egy tipikus példa erre GaAs növesztése Si-on, ahol a rétegnövekedést nagy kristályhiba-sűrűség jellemzi, csavardiszlokációkkal, kisszögű szemcsehatárokkal, illesztési hibákkal, iker és ellenfázisú térrészekkel. Az ilyen rétegek Stranski–Krastanov mechanizmussal növekednek, ahogy az a 6.3.a. ábrán is látható. A kialakuló réteg rosszul fedi a hordozót, és felülete is érdekessé válik. Bizonyos esetekben a háromdimenziós szigetek kialakulás megelőzhető idegen atomoknak kisenergiájú ionbesugárással történő felületre juttatásával, mellyel a 3D-szigetek feltörhetők a növesztés közben. Hatékony módszer az úgynevezett rácsközi áthidaló rétegek („spacer” vagy „Übergitter Schicht”) alkalmazása is, melyek növesztésével a két különböző rácsállandójú réteg között kialakuló belső feszültség az átmeneti rétegben oszlatható.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

tó szét. Folyamatos háromdimenziós szigetek kialakulása jöhet létre bizonyos különleges esetekben mindennemű vékony köztes réteg kialakulása nélkül, mely az úgynevezett Volmer–Weber növekedési mód a 6.3.b. ábrán illusztrálva.

## 6.5. Tiltott sávok és sáv szerkezetek technológiái

Az utóbbi évek hatalmassá fejlődött anyagválasztéka a széles skálájú tiltott sáv szélességekkel lehetővé tette, hogy szintetizálhassunk különféle félvezető heterostrukturákat. Ahogy azt a 5.1. ábra is illusztrálja, egyszerűen választhatunk ki rácstiltszott anyagokat különféle tiltott sáv szélességekkel, hogy létrehozhassunk heteroátmeneteket, kvantumvölgyeket vagy szuperrácsokat. De van egy még nyilvánvalóbb módszer is, hogy egy többszöleges sáv szerkezetet tervezzünk. Egyszerűen csak a vegyület-félvezetők ötvöző anyagainak az arányát kell megváltoztatni a korábban már ismertett szabályok szerint, ahogy az a 6.4. ábrán is látható. Fontos megjegyezni, hogy az összetétel anyagon belüli térbeli megváltoztatásával egy belső elektromos térnek megfelelő gradiens jön létre a növesztett félvezetőben. Mivel a vezetési és vegyértéksávoknak különböző a térbeli megváltozása, ezért az elektronok és lyukak által érzékelt tér nem ugyanolyan.



6.4. ábra: Technológiailag tervezett és kialakított tiltott sévszélességekkel létrehozott kvantumvölgyek, potenciálgátak, szuperrácsok, delta-adalékolás és különféle vezetési és vegyértéksáv görbületek.

Sok biner, terner és kvaterner vegyület-félvezető anyag és heteroátmenet kerül megtervezésre és kialakításra napjainkban. Ezek az új anyag strukturák olyan elektronikai és optikai tulajdonságokat mutatnak, melyek az eredeti természetes alapanyagokban nem fellelhetők. A fejlett

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

anyagtechnológiai tervezés (material engineering) és folyamattechnológiák olyan újszerű eszközök megvalósításához vezettek, mint a MODFET, a multi-kvantumvölgy (Multi-Quantum-Well – MQW) lézer és a kvantum-zsinór (Quantum Wire – QWI) lézer.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

## 7. Fém-organikus gőzfázisú epitaxia

### 7.1. Bevezetés

III-V vegyület-félvezetők első fém-organikus és hidrid forrásanyagokból történő epitaxiális növesztése InP formájában valósult meg trimetil-indium (TMIn) és foszfin (PH<sub>3</sub>) felhasználásával zárt csőrendszeren belül. A fém-organikus kémiai gőzfázisú rétegleválasztás (Metal-Organic Chemical Vapour Deposition – MOCVD) elnevezés Manasevit nevéhez fűződik, aki 1969-ben kidolgozta a különféle vegyület-félvezetők gőzfázisú rétegleválasztását.

A fém-organikus gőzfázisú epitaxia (Metal-Organic Vapour Phase Epitaxy - MOVPE), mely kifejezés az MOCVD-nek felel meg, rendkívüli gyorsasággal fejlődött, és napjainkra az elektronikai és optikai eszközök előállításának meghatározó technikájává vált. A különféle elnevezések, mint OMVPE (organo-metallic vapour phase epitaxy), MOCVD (metal-organic chemical vapour deposition), vagy OMCVD (organo-metallic chemical vapour deposition) – ugyanazt a technikát jelölik, ahol a hordozó forró gázvegyületek hatásának van kitéve, mely eredményeképpen a hordozón a hordozó kristályszerkezetének megfelelő szilárd fázisú réteg rakódik le. Az MOVPE napjaink félvezető-kutatásának és fejlesztésének egyik legfontosabb területe. (A megnevezés szempontjából érdekességként megemlíthető, hogy hagyományosan az ipari alkalmazások inkább a CVD kifejezést, a kutatás-fejlesztés pedig inkább a VPE jelölést alkalmazza a technikára.)

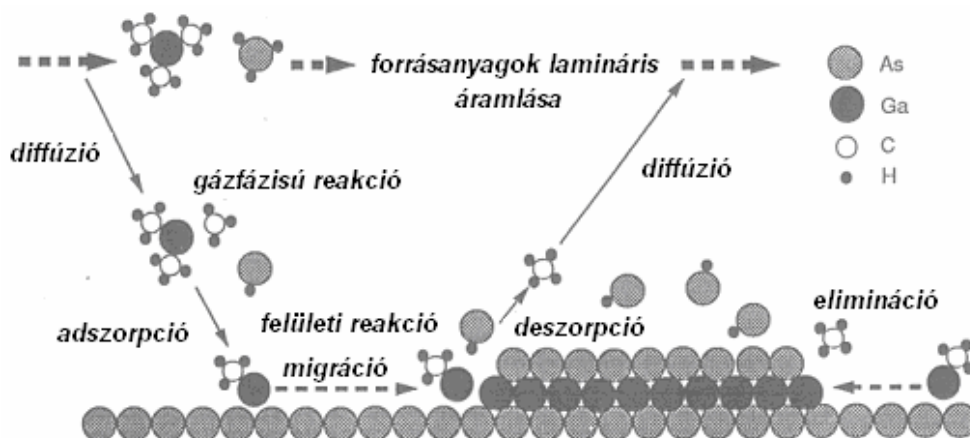
### 7.2. A MOVPE jellemzői

A kémiai gőzfázisú rétegleválasztás során a gőzfázisból kémiai reakciók révén egy vékony réteg kerül a hordozóra leválasztásra. Reaktív molekulák, melyek a leválasztani kívánt anyag molekuláit tartalmazzák, egy hordozógáz segítségével (egy inert, nem reagáló hordozógázba keverve) jutnak a reakciókamrába. A reakciókamra egy paramétereiben jól kontrollált térrész, melyben a hordozólapkák kerülnek elhelyezésre, melyeken a rétegleválasztódás fog végbemenni. A számos kémiai reakció teszi ezt a technikát eltérővé a fizikai rétegleválasztási módszerektől, mint a szublimáció, vagy a vákuumpárologatási technikák. A kémiai reakciókhoz szükséges energia termikus energiaként áll rendelkezésre, de egyéb CVD technikák is kifejlesztésre kerültek, mint a foto-CVD (vagy PCVD), a plazmával segített CVD (plasma enhanced CVD - PECVD). (A Jegyzet a továbbiakban a termikus CVD folyamatokra fog korlátozódni.) A leválasztott vékony réteg növekedése sokrétű felületi reakciókon keresztül valósul

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

meg. Számos lépés általánosan előfordul kémiai gőzfázisú rétegleválásnál, melyeket a 7.1. ábra illusztrál. A legfontosabb lépések a következők:

1. Reagensok áramlási és diffúziós transzportfolyamatai a reaktor (reakciókamra) bemenetétől a reakciótérbe (a reaktorkamrán belül).
2. Kémiai reakciók a gázfázisban, melyek új köztetes reagensokat és melléktermékeket eredményeznek.
3. Reagensok és köztetes reagensok áramlási és diffúziós transzportfolyamatai a hordozó felületére.
4. Reagensok és köztetes reagensok adszorpciója és kemoszorpciója a hordozó felületén.
5. Adszorbeált részecskék diffúziója (migráció) a felületen.
6. Felület által katalizált heterogén felületi reakciók, melyek szilárd kristályos réteg kialakulásához vezetnek.
7. Reakciótermékek deszorpciója a felületről.
8. Gáz halmazállapotú reakciótermékek diffúziós transzportfolyamatai a hordozó felületéről.
9. Reakciótermékek áramlási és/vagy diffúziós transzportfolyamatai a reakciótérből a reaktorban.



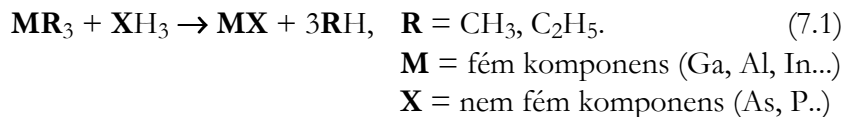
7.1. ábra: MOVPE (vagy MOCVD) folyamatának alapvető lépései. A számokkal jelzett folyamatok az előző oldalon kerülnek ismertetésre.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

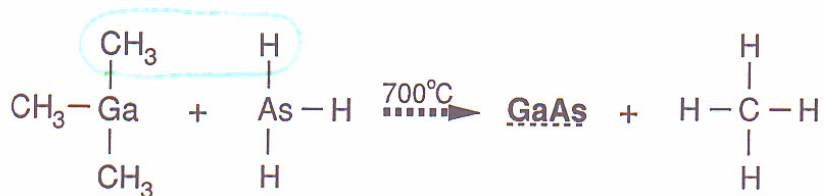
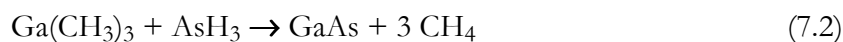
Minden CVD (vagy VPE) folyamatban egy kezdőállapotból (kezdeti reagens gázok) egy másik állapotba (szilárd fázisú végállapot és gázfázisú reakciótermékek) jutunk. A gyakorlatban ezt egy technológiailag megfelelő időtartamon belül kell elérni úgy, hogy az átalakult anyag mennyisége a meghatározó a folyamatban. Ezt az átalakult anyagmennyiséget kémiai kinetika és anyagszállítás határozza meg. A reaktorban lévő gázkeverék általánosan nincs termodinamikai egyensúlyban.

### 7.3. A MOVPE fontosabb folyamatai

Vegyület-félvezetők MOVPE rétegnövesztése egy úgynevezett hidegfallú kémiai rétegleválasztási folyamat. A folyamat alapját egy III-as csoportú fématomot tartalmazó fém-organikus vegyületnek (pl.  $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ , azaz trimetil-gallium, TMGa, vagy  $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ , azaz trietil-gallium, TEGa) egy az V-ös csoport atomját tartalmazó hidriddel (pl.  $\text{AsH}_3$ , azaz arzin,  $\text{PH}_3$ , azaz foszfin) történő reakciója jelenti. Tehát a III-V vegyület-félvezetők előállításánál a következő általánosan is leírható reakció megy végbe:



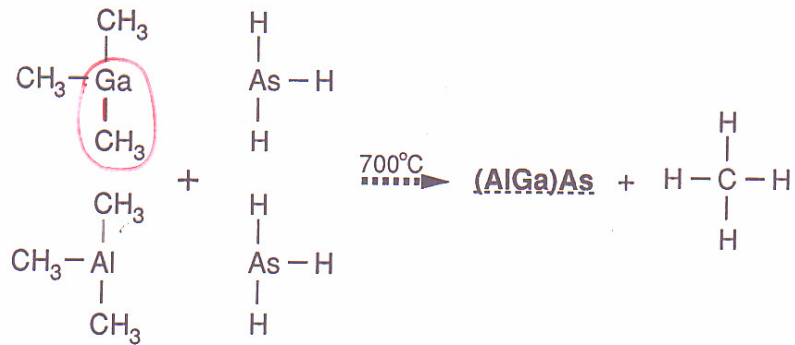
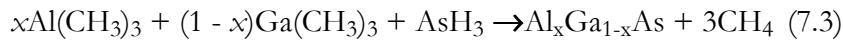
Most egy példán keresztül ismerkedjünk meg az egyik leggyakoribb reakcióval, mely GaAs és  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  rétegnövesztése során megy végbe:



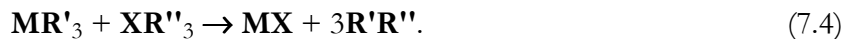
vagy

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



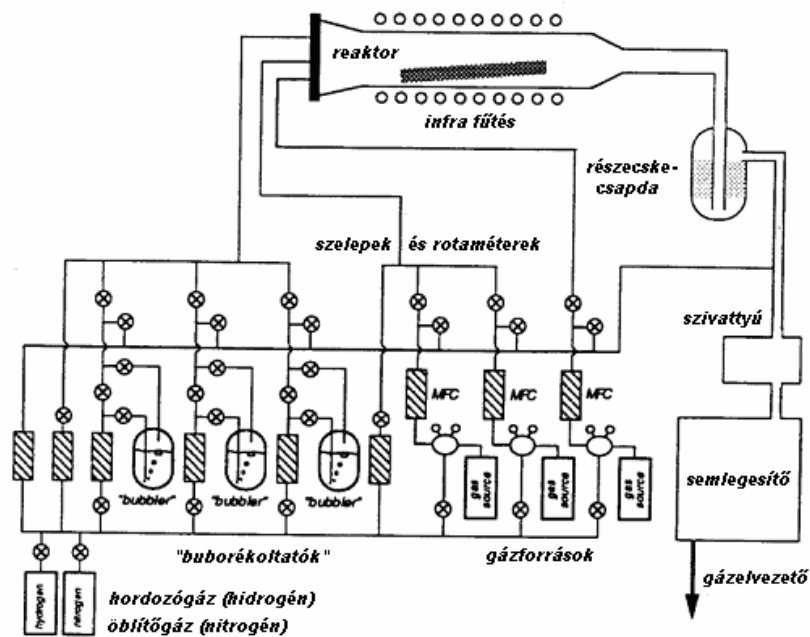


A *fém-organikus komponensek* szobahőmérséklet környékén általában nagy parciális gáznyomással rendelkező folyadékok. Minden fontos paraméter, mint az olvadáspont, forráspont és gáznyomások ismertek a leggyakrabban használt komponensekre. A fém-organikus komponensek szállíthatók *összeadódó komponensek (addukt komplexek)* formájában is mint fém-alkil és organikus V-ös csoportú komponens, mint például  $\text{As}(\text{CH}_3)_3$  (trimetil-arzin, TMAs) és  $\text{N}(\text{CH}_3)_3$  (trimetil-amin), az alábbi általános egyenlettel leírható reakciót eredményezve a kristályos III-V vegyület-félvezető kialakulására:



Az *V-ös csoportú hidridek* általában erősen mérgező gázok. A rétegnövesztési környezet fém-organikus forrásanyagok és hidridek hordozógázban (rendszerint  $\text{H}_2$  vagy  $\text{N}_2$ ) gondosan elegyített keverékéből áll. Mivel rendkívül sokféle gáz található a gázadagoló rendszerben, ezért rendkívül bonyolult a pontosan meghatározott összetételű gázkeverék, gázáram, gáznyomás és hőmérséklet szabályozása. Egy MOVPE berendezés gázrendszere látható a 7.2. ábrán:

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



7.2. ábra: MOVPE rendszer és felül gázrendszerének vázlata.

A gázrendszer tartalmazza hőmérsékletellenőrzött hófürdőkből álló fém-organikus forrásokat, melyek a fém-organikus forrásokat egy meghatározott hőmérsékleten tartja, mellyel parciális nyomásuk állandó értéket vehet fel. A "buborékolató" (bubbler) és a csatlakozó gázvezetékek a 7.3. ábrán láthatók. Mivel a fém-organikus forrásanyagok általában folyékonnyak, a hordozógáz ezen a folyadékon kerül átbuborékolatásra. A hordozógáz fém-organikus forráson keresztül történő átáramoltatása egy elektronikus rotaméter (MFC) segítségével történik. Mind a fém-organikus komponens parciális nyomása ( $P_{mo}$ ), mind pedig a forrás teljes nyomása ( $P_i$ ) mérésre kerül. A forrást elhagyó forrásanyag gázárama ( $F_{mo}$ ) a bejövő

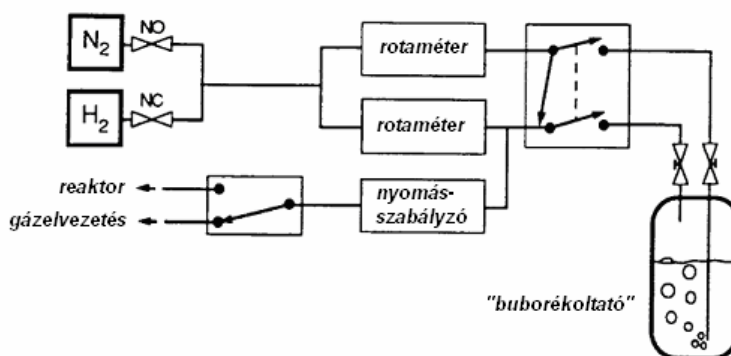
*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

hordozógáz áramán ( $F_{eg}$ ) és a forrás össznyomásán keresztül határozható meg az alábbi egyenlet szerint:

$$F_{mo} / F_{eg} = \beta / (1 - \beta) \quad \text{ahol } \beta = P_{mo} / P_t . \quad (7.5)$$

Az össznyomásnak a forráson nagyobbak kell lennie mint  $P_{mo}$ , hogy megelőzze a forrás esetleges forrását. A hordozógáz áramának viszont megfelelően alacsonynak kell lenni ahhoz, hogy a buborékoltató kimenete egyensúlyba kerüljön a forrásanyaggal. A gázrendszerben vagy a reaktor közelében a reaktív folyamatgázok további hígításra, keverésre kerülnek, majd ezután juthatnak be a reaktorba.

Általában rozsdamentes, hegesztéssel csatlakoztatott gázvezetékeket alkalmaznak kizárólag vákuumtechnikai fém-fém tömítésekkel. Az éles összetételi átmeneteket és adalékolásokat tartalmazó félvezető-struktúrák növesztése kapcsolóelemek és gázvezetések alkalmazását igényli. A hordozógáz a folyamat során végig keresztülhalad a fém-organikus forráson, és a kikerülő (bypass) vagy elvezető (vent) irányok között kapcsolva érheti el adott esetben a reaktort, ahogy az a 7.3. ábrán is látható.



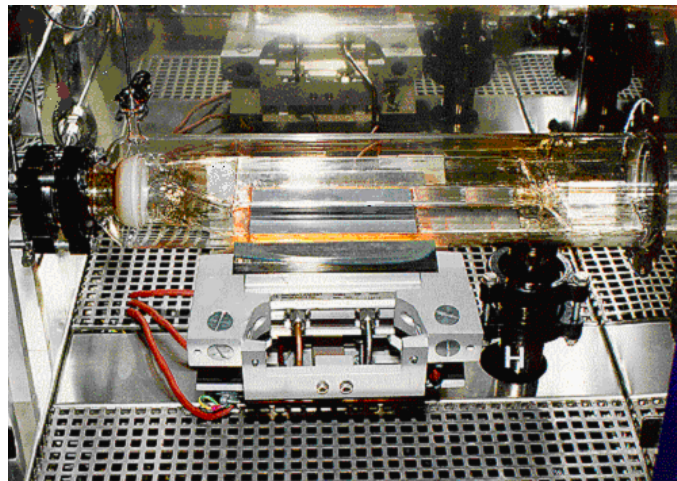
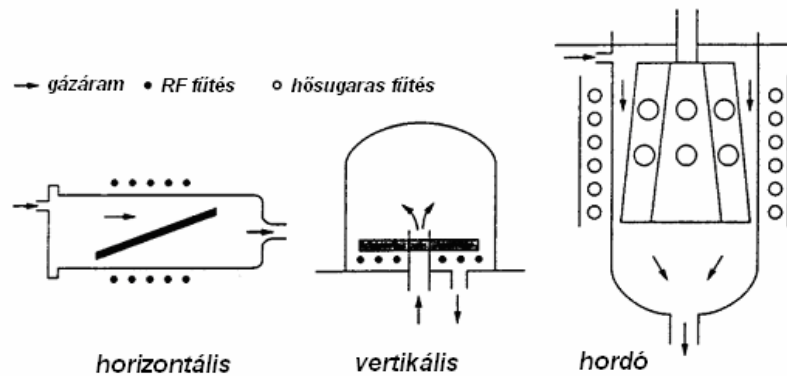
7.3. ábra: Fém-organikus forrás kialakítása.

Az ilyen forrásrendszerek azt követelik meg, hogy a nyomás a forrás egészen állandó legyen a rétegnövesztési folyamat egészen, leszorítva a nyomásingadozásokat a gázvezetés és az aktív gázvonalak között 1 Torr alá. A megfelelő gázkeverék előállítása után a gázok a reaktorba kerülnek bevezetésre.

Néhány szokványos VPE reaktortípus látható a 7.4. ábrán. Alapvetően 3 fő típus létezik: vertikális (függőleges), horizontális (vízszintes) vagy hordó reaktorok. A fő különbség a vertikális és a másik két típusú reaktor között a gázáram és a hordozó egymáshoz viszonyított helyzete. Míg a reaktorba beérkező gázáram a vertikális reaktorban merőleges a hordozó

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

felületére, addig a két utóbbi reaktor esetén tangenciális a gázáram a hordozóra. A vertikális reaktort általában kísérleti berendezésként alkalmazzák, mivel a hordozókapacitása mindössze egy hordozó. A horizontális reaktornak sokhordozós kapacitása van, valamint kialakításának viszonylagos egyszerűsége kísérletezést és kisszériás gyártást is lehetővé tesz. A hordó elrendezésű reaktorok kialakítása teszi lehetővé a nagyipari gyártást a kereskedelemben is kapható félvezető alapú eszközökhöz és készülékekhez. Az ilyen reaktorok rendszerint 5 - 20 (legalább 2" átmérőjű) hordozószelet befogadására is képesek. Valamennyi előbb említett rendszerben a gázok olyan hordozókon haladnak keresztül, melyek induktív csatolású rádiófrekvenciás fűtéssel ellátott grafit vagy szilícium-karbid (SiC) hordozótartóval (szelettartóval) rendelkeznek.

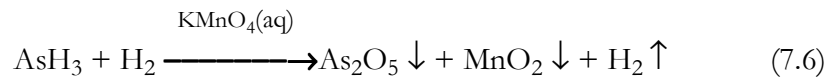


7.4. ábra: Különbéle MOVPE reaktortípusok és alul egy horizontális reaktor fényképe.

A reaktorok alacsonynyomású működését rendszerint mechanikus szivattyúk biztosítják. A rendszer kivezetése még tartalmazhat mérgező

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

anyagokat, melyek nem kerültek felhasználásra a növesztési folyamatok során. Ezeket az anyagokat mindenképpen kezelni kell valamilyen formában, hogy eltávolíthassuk őket a környezetbe jutó anyagok közül. Ez különösen vonatkozik a rendkívül mérgező arzinra ( $\text{AsH}_3$ ) és foszfinra ( $\text{PH}_3$ ). Aktív szén alapú gázsemlegesítők vagy pirolízis-kemencék alkalmazása gyakori ilyen célokra. Környezetvédelmi szempontból különösen fontos egy példa bemutatása különös tekintettel a fokhagymához hasonló szagú arzin mérgező tulajdonságaira, mely korábban harci gázként történő alkalmazását is lehetővé tette az első világháború során:



A mérgező gázok detektálása különös fontossággal bír a MOVPE reaktorok működtetésénél. Napjainkban szinte minden III-V rétegnövesztő rendszer használ mérgező vagy gyúlékony anyagokat, melyek gyors és pontos detektálása elengedhetetlen a biztonságos ipari működés szempontjából. Elsősorban  $\text{AsH}_3$  és  $\text{PH}_3$  detektorok alkalmazása fontos, de a hidrogéndetektorok is alapvető fontossággal rendelkeznek, mivel segítségükkel lehet a legkönnyebben felfedni a rendszerek esetleges tömítetlenségét.

A műszaki részletek rövid tanulmányozása után érdemes néhány pillantást vetni a kémiai gőzfázisú rétegleválasztás – és ezen belül is az MOVPE – rétegnövekedési mechanizmusaira és magára a rétegnövekedés folyamatára.

#### 7.4. Rétegnövekedés mechanizmusa és folyamata

Ahogy az már korábban említésre került, a kristályos réteg növesztése során a folyamatok alapvetően két részre oszthatók: *termodinamikai* és *kinetikai*. A termodinamika határozza meg a hajtóerőt az egész folyamat számára, míg a kinetika határozza meg a különféle folyamatok lezajlásának mértékét. *Hidrodinamika* és *anyagok transzportfolyamatai* vezérlik az anyagoknak a növekedési szilárd/gáz határfelülethez történő szállítását. A gázfázisú kémia reakciók és a rétegnövekedésnél létrejövő reakciók kulcsfontossággal bírnak. Például fontos paraméter a hordozó hőmérséklete vagy a forrásanyagok áramának mértéke, melyek nagymértékben befolyásolják a növekedési sebességet.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

### 7.4.1. A rétegnövekedés termodinamikája

A *termodinamika* kulcsfontosságú a kristálynövesztésben és a folyamattechnológiában. A MOVPE folyamatban szilárd-gáz kölcsönhatások és egyensúly vezérlik rétegnövesztési folyamat körülményeit és az anyagstabilitást. A biner MX kialakulásának reakcióhője megfelel egy szilárd fém és a gázfázisú anion részecskék reakciójának az alábbiak szerint:



Általánosságban a létrejött vegyület termodinamikai stabilitása csökken az alkotó fém vagy anion részek atomszámának növekedésével. A növekvő atomi méret természetesen a biner vegyület rácsállandójának növekedésében is tükröződik.

A III-V vegyületek jellemzője a nagy nyomás, mivel a P, As, Sb önmagában is viszonylag nagy nyomással rendelkeznek szobahőmérsékleten. A termikus egyensúly a gáz és szilárd fázisok között megkívánja, hogy a vegyületnek mind a fém, mind pedig az anion komponense jelen legyen a gázfázisban. Például GaAs esetén nagy hőmérsékleteken egy megfelelő gázkörnyezet biztosítása szükséges, mely ezeket a komponenseket tartalmazza annak érdekében, hogy nehegy a GaAs termikus lebomlása jöheszen létre. A fém és anion komponensek megfelelő parciális nyomástartományait az alábbiak szerint határozhatjuk meg a GaAs példáján keresztül:



A Ga és  $As_2$  parciális nyomásainak GaAs-del egyensúlyban történő figyelembe vétele nem elég, azon túl még figyelembe kell venni az egyensúlyt a folyékony és gázfázisú Ga között is:



A Ga és  $As_2$  parciális nyomásai GaAs-en így aztán a következőképpen határozhatók meg:

$$P_{Ga}P_{As_2}^{1/2}/a_{GaAs} = \exp[-(\Delta G_f - \Delta G_v) / RT], \quad (7.10)$$

ahol  $a_{GaAs}$  a GaAs aktivitása 1-nek véve,  $\Delta G_f$  és  $\Delta G_v$  a Gibbs szabad energiák a 7.8. és 7.9. egyenletekkel leírt folyamatok során. Ga és As parciális nyomásoknak van egy egész tartománya, melyben egyensúly van GaAs-del anélkül, hogy egyéb fázisok jönnének létre mint Ga(f) és As(sz). Az V-ös csoportú elemek a gázfázisban monomer, dimer és tetramer formában (pl. As,  $As_2$  és  $As_4$ ) formában találhatók meg. A gázfázisú hőmérséklet határozza meg ezeknek az alkotórészeknek a viszonylagos koncentrációját. Alacsonyabb hőmérsékleteken a tetramer forma dominál, míg

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

magasabb hőmérsékleteken a dimer forma általános. A szilárd-gáz fázisok egyensúlyának teljes termodinamikai leírása fogja meghatározni a relatív parciális nyomásait az ilyen alkotórészeknek.

Két különleges része figyelhető meg ennek a fázisstabilitási tartománynak. A Ga-gazdag tartományban az elemi Ga gőznyomása a GaAs-en nagyon közel van  $P_{Ga}$ -hoz egy minimális As nyomással ( $As + As_2 + As_4$ ). Az előbbinek megfelelően az As-gazdag tartományban a teljes As parciális nyomás közel van a magas As nyomáshoz egyensúlyban az elemi As-nal az adott hőmérsékleten, minimális  $P_{Ga}$  mellett. A kristálynövesztési környezetnek a kristály alkotóelemeinek parciális nyomását kell biztosítania ezeken a tartományokon belül. Többlet vagy túltelítés azonban szükséges a gázfázisban a növekedéshez:

$$P_{Ga}^0 P_{As_2}^0 > P_{Ga} P_{As_2} \quad (7.11)$$

ahol a felső jellel ellátott nyomások jelölik a pillanatnyi nyomást a rétegnövesztési környezetben.

#### 7.4.2. Felületi tulajdonságok

A MOVPE rétegnövesztésre befolyással vannak mind a gázfázisú reakciók, mind pedig a növesztett felületen létrejövő reakciók. A megfelelő felületi részek természete és száma vezérli a növekedési sebességet, kémiai összetételt és a szennyezőatomok beépülését.

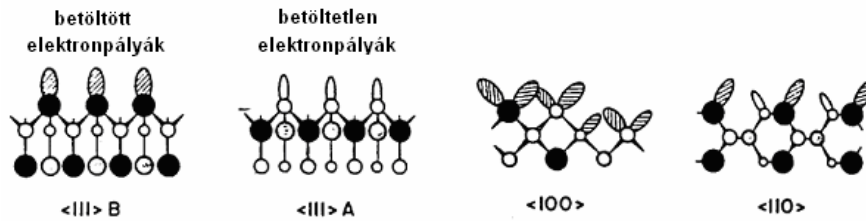
A legtöbb vegyület-félvezetőre jellemző cinkblende rácsszerkezet esetén sokféle felületi struktúra jöhet létre. Az adott felület legszemléletesebb képét úgy kaphatjuk, hogy a kristályt egy meghatározott kristálytani felület mentén elvágjuk. Ilyen szemléletes felületi példák láthatók a 7.5. ábrán az (111)A, (111)B, (110) és (100) felületekre vonatkozóan. Minden egyes ilyen illusztrált esetben a felületi atomok mint adszorpció és felületi katalizált reakcióközpontok válnak aktívvá.

A különféle kristálytani felületstruktúrák vizsgálata reflexiós nagy-energiájú elektrondiffrakcióval (Reflection High-Energy Electron Diffraction – RHEED) lehetséges molekulasugaras epitaxia (Molecular Beam Epitaxial – MBE) rétegnövesztés során – ultra-nagy vákuum alkalmazásával az MBE reaktoron belül. (Hasonló vizsgálat természetesen nem lehetséges kémiai gőzfázisú rétegleválasztás során.)

Az epitaxiálisan növesztett rétegek atomi simasággal rendelkeznek. Egy durvább felületi morfológia megjelenése GaAs MOVPE növesztése esetén hidrokarbon radikálisok bizonyos felületi részekhez történő kötődésével magyarázható, mely a kétdimenziós lépcsőszerű rétegnövekedést gátolhatja.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

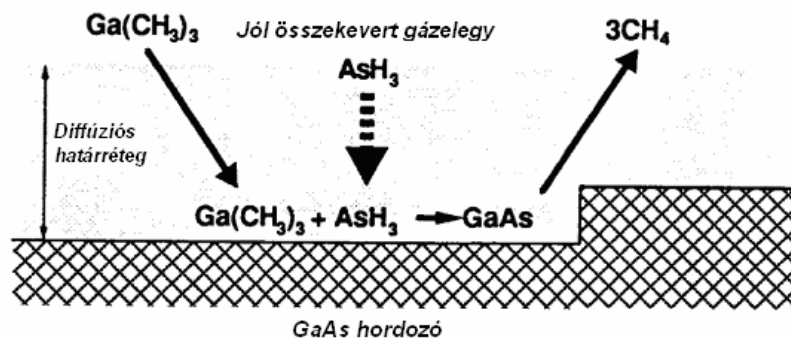




7.5. ábra: Különbéféle atomi rétegek keresztmetszete.

### 7.4.3. Kinetika – Gázfázisú és felületi reakciók

A rétegnövekedési folyamat egy egyszerűsített illusztrációja látható a 7.6. ábrán, mely egyben a 7.1. ábra és a 7.2. egyenlet egyszerűsítése is a GaAs példáján keresztül. A rétegnövekedési környezet rendszerint egy V-ös csoportú túlsúllyal rendelkezik a fém-alkilokkal szemben. Számos lépésnek kell megtörténnie, hogy a 7.1. ábrán illusztrált rétegnövekedés létrejöhessen. A leírt folyamat leglassabb lépése lesz a rétegnövekedést korlátozó lépés. A hordozó hőmérséklete a fém-alkil komponensek pirolízis hőmérsékleténél magasabb értéken van tartva, így biztosítva a komponensek (forrásanyagok) gyors hőbomlását a rétegnövesztési felületnél. A rétegnövekedési sebességet így a III-as csoportú reagenseknek a rétegnövesztési felületre irányuló transzportfolyamatai határozzák meg. Míg a rétegnövekedési sebességet a reagensek felülethez történő transzportja határozza meg, addig a felületi és gázfázisú reakciók befolyásolják a kialakult réteg anyagtulajdonságait. A legegyszerűbb, a 7.2. egyenlet által leírt reakció valójában 60-féle gázfázisú és 19 felületi reagenst foglal magába legalább 232 gázfázisú és 115 felületi reakción keresztül.



7.6. ábra: A növesztett réteg felületének közelében lejátszódó folyamatok.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



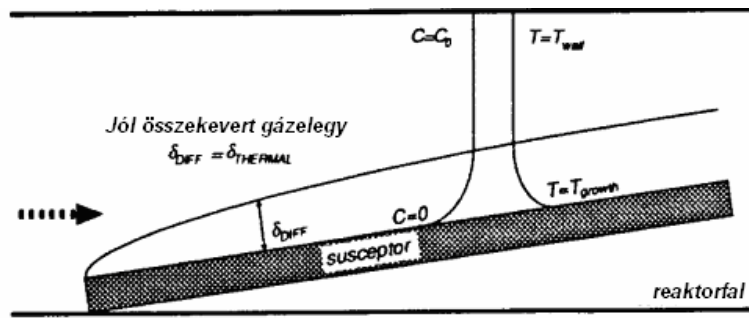
## 7.5. Transzportfolyamatok

A MOVPE reaktoron belüli folyamatok környezete meglehetősen összetett. A rétegnövekedés egymással kölcsönhatásban lévő összetett gázáramlási, kémiai és termikus rendszerek révén jön létre. Nagyon sok erőfeszítés történt annak érdekében, hogy valamely olyan egyszerűsített modellt lehessen létrehozni a MOVPE rendszerekre, mely még az előbb említett kölcsönhatásokat tartalmazza. A következőkben csak rövid alapelvek ismertetése történik a MOVPE reaktor összetett gázáramlási, kémiai és termikus rendszerjellemzőire vonatkozóan.

### 7.5.1. Tömeg- és hőszállítás

*Tömeg- és hőszállítás* a reaktorban többféle mechanizmussal is létrejöhethet: diffúzió, kényszerített- és hővezetés. Turbulencia és hővezetés hiányában *diffúziós folyamatok* dominálnak a transzportfolyamatokban a rétegnövesztési régióban. A gázfázisú tömeg- és hődiffúziós együtthatók hasonlóak és ugyanazon módon fejezhetők ki. A korábbiaknak megfelelően, a rétegnövekedési sebességet a fém-alkil komponensek növekedési felületéhez történő áramlása határozza meg. Megfelelő egyenletes eloszlású növekedéshez ennek az áramnak állandónak kell lennie az egész növesztési felületen. A tömegszállítás egy úgynevezett *diffúziós határréteg* kialakulásával írható le, melyen a reagensek koncentrációja a kezdeti koncentrációról egy növekedési felületi csökkentett koncentrációra változik. Ez a diffúziós határréteg ( $\delta_{DIFF}$ ) a gázáram irányában a hely függvénye, ahogy az a 7.7. ábrán is látható. A leválasztási régió belépő élénél a reagensek felhasználása a rétegnövesztési felületnél elkezd kiüríteni a gázfázist. A rétegnövekedési felület feletti gázrégió, mely fölött a kiürítés létrejön, úgy növekszik, ahogy a gáz a fűtött hordozó felett áramlik. Annak érdekében, hogy a rétegnövekedés mindenütt azonos legyen még egy nagy hordozó esetén a horizontális reaktorokban, a reaktor keresztmetszete a gázáram irányában csökkentésre kerül – például a hordozótartó megdöntésével, ahogy ez a 7.7. ábrán is látható. A megdöntött hordozótartó megnöveli a gázáram sebességét, mellyel megváltozik a diffúziós határréteg és a gázfázisú kiürítés.

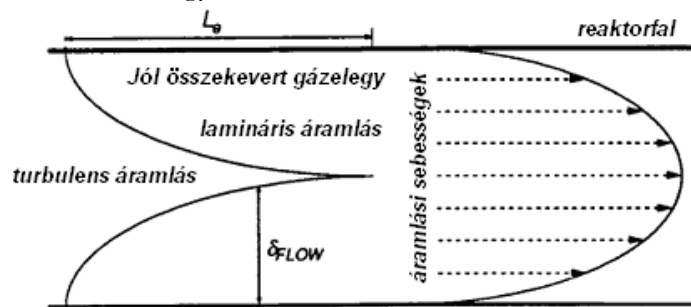
*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



7.7. ábra: A rétegnövesztés esetén kialakuló gázfázisú kiürítés és a diffúziós határréteg.

### 7.5.2. Gázáramlás

A reaktoron belüli *gázáramlásnak* döntő jelentősége van a kialakuló réteg tulajdonságainak homogenitására és rétegnövesztési hatékonyságára. A legtöbb reaktor úgy kerül kialakulásra, hogy elkerülje, vagy minimalizálja a turbulens gázáramlást a rétegleválasztási felület közelében. Turbulens gázáramlás azonban a reaktorbemenetnél (ahol a reagensek a reaktorba bevezetésre kerülnek) összekeveri és homogenizálja a gázáramlást. Ha viszont turbulens gázáramlás alakul ki a rétegleválasztási felületnél, az a növesztési környezet helyi változásaihoz vezethet a hordozó felülete mentén. A gázsebesség helyi változásai és növekedési zónából származó gázáramok újra lefelé mozgó áramlásba jutása egyenetlen anyagtulajdonságok, növekedési sebesség és anyagösszetétel-ingadozás kialakulásához vezet a hordozó felületén, és megnövekszik a hirtelen összetételi és adalékolási határfelületek kialakulása is. A legtöbb reaktor úgy kerül megvalósításra, hogy minimalizálja a turbulencia megjelenését lamináris áramlási profil kialakításával a reaktorcsőben. A kívánt lamináris áramlási profil alakul ki a reaktor falainál lamináris gázáramlási határréteg létrejöttén keresztül, ahogy ez a 7.8. ábrán is látható. Az  $L_e$  belépési hosszban kialakuló lamináris áramlási profil kialakulása után az áramlási sebesség vonalai mind egyirányúak a reaktorral, ahogy a vonatkozó ábrán is látható.

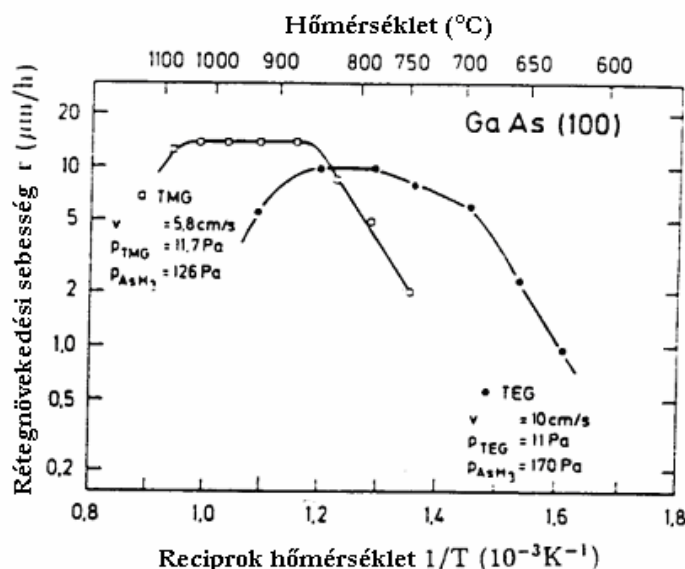


*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

### 7.5.3. Rétegnövekedési sebesség

A már szokványosnak tekintett példánkban, GaAs egykristályos réteg növekedésénél  $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$  és  $\text{AsH}_3$  forrásanyagok felhasználásával ipari szempontból is nagy növesztési hatékonyság érhető el. Ezzel szemben InP hasonló növesztése esetén polimerek kialakulása is létrejön  $\text{In}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$  és  $\text{PH}_3$  alkalmazása esetén, mellyel a növesztési hatékonyság csökken. Ez utóbbi folyamat még számos rétegnövesztési körülmény mellett a reaktor geometriára is nagyon érzékeny.

Azonban a rétegnövesztési hőmérséklet ( $T_{gr}$ ) hatásai eddig még nem kerültek megemlítésre. Ahogy az a 7.9. ábrán két különféle Ga forrásanyagra is látható, három jól elkülöníthető hőmérsékleti tartomány határozható meg a GaAs növekedésére vonatkozóan. Nagyon nagy és nagyon kis hőmérsékleteken a rétegnövekedési sebesség hőmérsékletfüggése jellemző.



7.9. ábra: GaAs rétegnövesztési sebessége a növesztési hőmérséklet függvényében trimetil-gallium (TMG) illetve trietil-gallium (TEG) alkalmazásával mindkét esetben arzén felhasználásával ( $\text{AsH}_3$ ).

- *Alacsony hőmérsékleti tartomány* rendszerint nem alkalmazott MOVPE rétegnövesztési folyamatok során. Ebben a tartományban a korlátozó tényező a reagensek alacsony mértékű termikus bomlása a rétegnövesztési felületen. Alacsony  $T_{gr}$  rétegnövesztési hőmérséklet esetén a

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

rétegnövesztési sebesség arányos a gázfázis fém-alkil koncentrációjával.

- *Magas hőmérsékleti tartományban* szintén erős a hőmérsékletfüggés. A hőmérsékletet megnövelve azonban a rétegnövesztési sebesség csökken több okból is kifolyólag, mint a gázfázis kiürülése a hordozó felett, Ga deszorpciója a növesztett rétegből vagy a nem elhanyagolható Ga gáznyomás a GaAs felett.
- *Hőmérsékleti középtartomány* alkalmazott a MOVPE rétegnövesztési folyamatokra. Itt a rétegnövekedési sebességnek csak nagyon gyenge a függése a növesztési hőmérséklettől. A rétegnövesztési sebesség független az  $\text{AsH}_3/\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$  aránytól  $V/III \gg 1$  esetén (fontos tényező ipari gyártási folyamatoknál és laboratóriumi munka során), de arányos  $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$  gázfázisú koncentrációjával. A rétegnövesztési sebességet ebben a tartományban a reagenseknek a rétegnövesztési felülethez történő szállítása (transzportfolyamat) korlátozza.

## 7.6. Szennyezők

Bármely epitaxiálisan növesztett réteg tisztaságát és felhasználhatóságát nagymértékben meghatározza a kialakult réteg háttérszennyezettségének típusa, koncentrációja és annak eloszlása. A félvezetők rétegnövesztése a technológiák nagyon magas szintű kézbentartását igényli az *adalékok* szempontjából. A rétegekbe beépült *háttérszennyezők* a növesztési környezetből is származhatnak, de közvetlenül magukból a forrásanyagokból is beépülhetnek.

### 7.6.1. Adalékok

A IIa és IIb csoportok elemei mint Mg, Be, Zn vagy Cd a IIIa csoport oldalát foglalják el a kristályban. A IVa csoport elemei mint C, Si, Ge és Sn egy sor úgynevezett *amfoter adalékot* hoznak létre, melyek vagy akceptorok, vagy pedig donorok attól függően, hogy mely rácspontba kerülnek a kristályban. Magas szennyezőkoncentrációk esetén az amfoter adalékok mind a donor, mind pedig az akceptor oldalon kiválnak, mellyel a töltéshordozók koncentrációja telítődik.

Az adalékanyagok legfontosabb tulajdonsága az elemi parciális gőznyomásuk, szilárdfázisú oldhatóságuk és diffúziós együtthatójuk az adott félvezetőkristályban, valamint MOVPE szempontból megfelelő gőzfázisú forrásanyag elérhetősége. Heterostruktúrák kialakításához jól kontrollálható és éles adalékprofilok kialakítása szükséges a szokványos rétegnövesztési hőmérsékleten. Amennyiben az adalékok gőznyomása magas – „autoadalékolás” jön létre. Autoadalékolás alakul ki, amikor adalékatomok

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

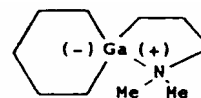
párolognak el a már növesztett rétegből a gázfázisba, majd innen később ismét kiválnak a növesztett rétegbe.

### 7.6.2. Szennyezők

Sok fentebb említett sekély adalék *szennyezőként* is megjelenhet a forrásanyagokban. A Si, Ge vagy Zn gyakran előfordulhat fém-organikus forrásanyagokban. A MOVPE szempontjából legfontosabb szennyező a szén. A szén amfoter adalék, mely III-V félvezetőkben sekély akceptor-ként van jelen. A szén beépülésének forrásai lehetnek többek között felületi reakciókból származó hidrokarbon vegyületek, mint  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$  és  $C_2H_6$ , tartalmazva egy kettős szénkötést  $-C=C-$ , azonban ezek a vegyületek viszonylag kevés szén beépüléséhez vezetnek. A szén beépülésének fő forrása a TMGa, méghozzá a felületi reakciók termékeiként létrejövő szén radikálisok rétegbe történő beépülése révén. A szén epitaxiális rétegbe történő beépülésének valószínűsége TMGa áramával arányos. Az arzinból származó többlet hidrogén radikálisok közömbösíthetik a szén radikálisokat, mellyel csökkenthető a szén beépülése. Amennyiben a fontos arány  $TMGa/AsH_3 > 1$ , az epitaxiális rétegek *p*-típusúak, és amennyiben ez az arány  $TMGa/AsH_3 \ll 1$ , akkor az epitaxiális réteg *n*-típusú lesz. A szén beépülése a Ga-oldalra történik, így többlet arzinra van szükség a gyors felületlefedéshez és a szén beépülésének elkerüléséhez. Így összefoglalóan megállapítható, hogy az arzin fontos szerepet játszik a szén beépülésében epitaxiálisan növesztett GaAs rétegbe MOVPE alkalmazása esetén.

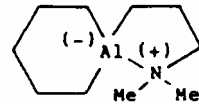
A MOVPE alternatív forrásanyagainak fejlesztése napjaink is egyik fontos feladata, mellyel lehetőség nyílik a szén beépülésének visszaszorítására, illetve kevésbé mérgező és gyúlékony anyagok környezetbarát alkalmazására. Az ilyen lehetséges új forrásanyagok molekulái azonban nagyon összetettek, de már mutatják a szükséges új forrásanyagok szennyezésmentes tulajdonságait. Fontos megemlíteni, hogy alacsonyabb szénbeépülési szint esetén kevesebb mérgező arzinra van szükség. Néhány, az utóbbi években kifejlesztett új forrásanyag látható az alábbiakban, mintegy illusztrálva ezen anyagok összetettségét, melyek a technológiai szempontok sokrétűsége alakított ki ilyenné:

APGH: 1-3-Dimetil-aminopropil-1-galla-ciklohexán

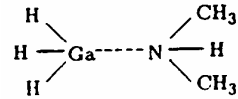


*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

APAH: 1-3-Dimetil-aminopropil-1-ala-ciklohexán



DMAGa: Dimetilamin-gallán



Egyéb szennyezők, melyek extrinszik módon (azaz kívülről) kerülnek a rétegnövesztési folyamatba, az oxigén és nitrogén. Az oxigén mélyen fekvő szennyezőszintet hoz létre sok III-V vegyület-félvezetőben, és hatással van mind az optikai, mind pedig az elektronikai tulajdonságokra. Az oxigén beépülése különösen az Al-tartalmú rétegeknél fontos, mint például az  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

A nitrogén optikailag aktív központokat hoz létre számos terner vegyület-félvezető rendszerben. A nitrogénbeépülés forrása természetesen nem a rendkívül stabil  $\text{N}_2$  molekula, hanem az ammónia ( $\text{NH}_3$ ) vagy esetleg szerves nitrogén vegyületek, melyek a fém-alkil forrásokban találhatóak.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

## 8. Molekulasugaras epitaxia

A molekulasugaras epitaxia (Molecular Beam Epitaxy – MBE) a legkifinomultabb, csúcstechnológiájú formája a vákuumpárolgatásnak. A technika Günther egyik korai, 1958-as munkájából származtatható. A tanulmány egy háromhőmérsékletes rétegleválasztási technikát írt le, mellyel vegyületek rétegeinek növesztése vált lehetővé egy fűtött hordozón, amire az egyes összetevők különféle hőmérsékletű forrásokból kerültek felpárolgatásra. A molekulasugaras epitaxia kifejezés számos jellegzetességet kifejez. Semleges, termikus energiával rendelkező molekuláris vagy atomi sugarakból jön létre a növesztett anyag. Ezek a molekulák vagy atomok egy ultra-nagy vákuumos (Ultra-High Vacuum – UHV) környezetben haladva ütköznek a fűtött egykristályos hordozóba. Az elpárolgatott molekulák és atomok nagy átlagos szabad úthosszal rendelkeznek, és az UHV környezet rendkívül tiszta rétegnövesztési körülményeket biztosít. A rétegnövesztés folyamatában – azaz *in situ* monitorozható – különféle karakterizáló technikákkal. Az MBE technika messze túlhaladt már a III-V vegyület-félvezetők előállításán. Gázforrású MBE is kifejlesztésre került, lehetővé téve szilárd és gáz halmazállapotú források alkalmazásának lehetőségét egy rendszeren belül.

Az MBE elsődleges előnye az atomi szinten – atomról atomra – felépülő heterostruktúrák növesztésének képessége, mellyel a lecsökkent méretek új fizikai és eszköztulajdonságokat eredményeznek. A tipikus rétegnövesztési sebesség egy atomi (vagy mint II-V félvezetők esetén egy kétatomos, azaz Ga-As réteg) másodpercenként, mely lehetőséget ad a közel azonnal rétegnövesztési leállításra az egyes források előtt elhelyezett elektronikusan mozgatható árnyékoló lemezekkel (shutter). Az atomi rétegenkénti rétegnövesztést több tényező is támogatja. Először, a tipikus rétegnövesztési hőmérsékletek elegendő felületi diffúziót biztosítanak az atomi rétegről rétegre történő növekedéshez és ezzel szinte tökéletes határfelületek valósíthatók meg. A tipikusan használt hőmérsékleteken a félvezetőtömbben a rétegek között létrejövő belső diffúzió (interdiffúzió) még minimális, így az autoadalékolás még nem jelentős az MBE által növesztett struktúrákban. Az MBE rendkívül rugalmas technika, mivel lehetővé tesz pulzus-növesztési eljárásokat is a határfelületek simaságának növelésére. Ilyen eljárások a növesztés-megszakítás (Growth Interruption – GI), fáziscsatolt epitaxia (Phase Locked Epitaxy – PLE), atomi réteg epitaxia (Atomic Layer Epitaxy – ALE) és a migráció növelt epitaxia (Migration Enhanced Epitaxy – MEE). Másik fontos tényező az MBE egyedülálló képessége nagytisztaságú félvezetőanyagok előállítására legfej-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

lettebb elektronikai és optikai tulajdonságok kialakítására csúcstechnológiájú kutatások és különleges ipari követelmények kielégítésére.

## 8.1. Rendszerjellemzők

Egy tipikus szilárdforrású MBE rendszer rajza látható a 8.1. ábrán. Az MBR rendszerek általában három jól elkülönülő UHV kamrarészből állnak: *előkészítő kamra*, transzfer és tárolási feladatokat ellátó *átmeneti kamra*, és *rétegnövesztési kamra*. Egy speciális mintakezelő és töltő-záró mechanizmus használatos a minták (azaz hordozólapkák) kamrák közötti átvitelére. Mivel a hordozók és tartószerkezeteik mozgatása egy lezárt UHV rendszeren belül kell hogy történjen, a hordozólapkák kis szállító fémkocsijait nagy külső mágnesek segítségével lehet mozgatni. A fém kereten lévő hordozólapkákat szintén nagy külső mágnesekkel mozgatott speciális belső kezelőrudak segítségével lehet a kocsikra rögzíteni vagy onnan levenni. A hasonló, de hosszabb transferrudakkal lehet a hordozólapkákat a rétegnövesztéshez a növesztési kamrába áttolni és a megfelelő pozícióba behelyezni és rögzíteni. A hordozó tisztító gázkipárologatásos (outgassing) kezelése az előkészítő kamrában történik, majd a hordozólapkák az átmeneti kamrában kerülnek tárolásra, vagy a rétegnövesztési kamrába kerülnek. A kamrákat rendszerint többféle szivattyúval is pumpálják, ionos szivattyúval, krioszivattyúval, Ti szublimációs szivattyúval, cseppfolyós nitrogén csapdás diffúziós szivattyúkkal vagy turbomolekuláris szivattyúkkal. A végső vákuum legalább  $10^{-10}$  Torr kell, hogy legyen a megfelelő szabad úthossz és a szükséges nagytisztaságú egykristályos rétegek előállíthatóságának érdekében.

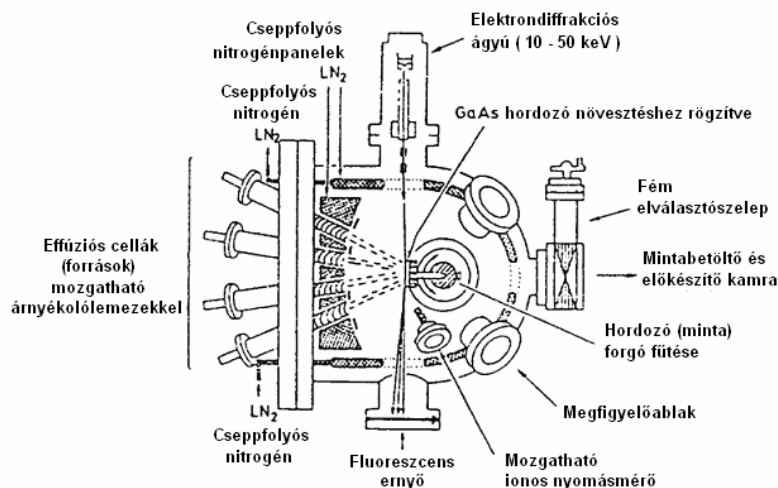
A források és a hordozó tartórendszere magába foglalja a rendkívül pontosan ( $\leq 0.1^\circ\text{C}$  forrásoknál és  $\pm 1^\circ\text{C}$  hordozón) szabályozható fűtőelemeket. Továbbá, megfelelő hőátvitelt és forgatást is biztosítani kell a növesztési pozícióba helyezett hordozóhoz, mellyel a réteg növesztési és összetételi homogenitása biztosítható. A hordozólapka molibdén tömbre kerül rögzítésre titán huzalok segítségével, vagy esetleg indium is alkalmazható mint speciális alacsony olvadáspontú rögzítő „ragasztóanyag”, mely jó hővezetése segíti a hordozólapka jó hőmérsékleti szabályozását növesztés közben.

Az epitaxiális rétegnövesztés során a III-as csoportú elemek tapadási együtthatója egységnyinek tekinthető a hordozó teljes hőmérséklettartományára és mindig monomerként kerül elpárologtatásra a megfelelő folyékony halmazállapotú elemből. Az V-ös csoport elemei tetramerekként ( $\text{P}_4$ ,  $\text{As}_4$ ,  $\text{Sb}_4$ ) szállítódnak szublimációval, vagy dimerré ( $\text{P}_2$ ,  $\text{As}_2$ ,  $\text{Sb}_2$ ) lebom-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



lást követve a megfelelő bontó zónát (cracker zone) elhagyva. A III-V vegyület-félvezetők összetétele MBE rétegnövesztés során „önszabályozó” mindaddig, amíg többlet V-ös csoportú molekulák jutnak a hordozó felületére. A többlet V-ös csoportú atomok nem tapadnak a fűtött hordozófelülethez, így a rétegnövekedési sebességet a III-as csoportú elem atomjainak hordozófelületre történő érkezése határozza meg.



8.1. ábra: Szilárd forrású MBE berendezés.

A hőmérsékleteket a párologtató cellákon (források) és a hordozó tartószerkezetén termopárok alkalmazásával lehet megfelelő pontossággal mérni. A hordozó felületének hőmérsékletét optikai pirometriai módszerrel is szokták mérni. Az egyik legfontosabb jellemző, mely az MBE technikát megkülönbözteti más rétegnövesztési módszerektől a rétegnövesztési folyamat közbeni – *in situ* – atomi szintig történő felület-megfigyelés (monitorozás) lehetősége. A legszélesebb körben használt módszer a *reflexiós nagy-energiájú elektrondiffrakció* (Reflection High-Energy Electron Diffraction – RHEED). A módszer alkalmazása során egy elektronnalábort fókuszálunk a minta felületére nagyon kis szög alatt, majd a felületről visszaverődő elektronokat egy foszforral bevont ernyőre irányítjuk. Mivel a RHEED rendszer nem lép kölcsönhatásba a párologó molekuláris vagy atomi áramlással, így a növesztés egész folyamatát lehet folyamatosan megfigyelni, vagy a felületi atomi elrendeződés mintázatát tanulmányozni.

*Tömegspektroszkópia* alkalmazásával maradványgázokat vagy molekuláris áramlásokat lehet detektálni. Az összetettebb *in situ* alkalmazások lehetnek felületi összetétel-vizsgálatok vagy felületi reakciók karakterizálá-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

sa, adalék–felület kölcsönhatások vagy felületi szegregáció megfigyelése rétegnövesztés folyamata közben. Még a deszorpciós aránya is meghatározható a hordozóból és a növesztett rétegből a rétegnövesztés során.

## 8.2. Szennyezők

Az MBE technikával növesztett III-V vegyület-félvezetők tisztaságát az UHV rendszerből és a forrásanyagokból származó háttérszennyezők korlátozzák. A visszamaradó szennyezők koncentrációja a  $10^{13} \text{ cm}^{-3}$  alsó tartományába esik napjaink alkalmazott MBE technológiai során. Az MBE folyamatokkal akár tömbadalékolás, akár pedig egyetlen atomnyi rétegű adalékolás is előállítható úgynevezett  $\delta$ -adalékolás kialakításához, mely a kétdimenziós elektronsűrűséget erősen meg tudja növelni modulációadalékolt struktúrákban. Napjainkban egy atomi adalékrétegnek akár a törtrésze is előállítható a fejlett MBE technikákkal – mintegy csak néhány adalékatomot a felületre szórva majd a betemetve.

MBE folyamatok szokványos adalékai a Be mint  $p$ -típusú (akceptor) adalék és Si mint  $n$ -típusú (donor) adalék. A II-es csoportú Be szinte tökéletes sekély akceptorként viselkedik a III-V vegyület-félvezetők rétegeiben. Azonban  $3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ -t meghaladó koncentrációk felett a GaAs felületének morfológiája és elektronikai paraméterei leromlanak, és a Be diffúziója megnövekszik  $550^\circ\text{C}$  feletti rétegnövesztési hőmérsékleteken. A IV-es csoportú Si elsősorban a III-as csoportú rácshelyekbe épül be MBE rétegnövesztés során As-stabilizált körülmények között,  $n$ -típusú adalékolást eredményezve. Az  $n$ -típusú adalékolás felső korlátja  $\sim 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  a szabad elektronkoncentrációra GaAs-ben. Ezt valószínűleg az autokompenzáció határozza meg (azaz a Si V-ös csoportú rácshelyekbe is beépül vagy rácshelyközi atomként), vagy úgynevezett  $[\text{Si}-\text{X}]$  komplexek létrejötté, ahol X Ga-vakanciát (azaz üres Ga-rácshelyet) jelöl, mely felelős az erősen adalékolt rétegek kompenzálódásáért.

## 8.3. MBE vs. MOVPE

Mind az MBE, mind pedig az MOVPE rendelkezik sajátos előnyökkel, melyekkel ez a két rendkívül kidolgozott technika egymást kiegészítővé vált a csúcstechnológiájú optikai és elektronikai eszközök előállításában. Az MBE előnyei közé tartozik az atomilag kontrollált rétegnövesztés és atomi rétegű adalékolás ( $\delta$ -adalékolás). Az MOVPE kiváló eredményeket mutatott a foszfidok növesztésében, a GaN alapú félvezetők előállításában és a gáznövesztésű epitaxiális ipari rétegnövesztésben.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

Az MBE technika szempontjából az UHV két fő előnnyel szolgál. Először, a rétegnövesztés rendkívül tiszta körülmények között történik, így a növesztési körülmények rendkívül jól tanulmányozhatók és megérthetőek részleteikben. Másodszor, a rétegnövesztés folyamatában – *in situ* – megfigyelhető (monitorozható) RHEED, tömegspektrométer, pásztázó alagútmikroszkóp (Scanning Tunneling Microscopy – STM), Auger-elektron-spektroszkópia (Auger Electron Spectroscopy – AES, Röntgen fotoelektron-spektroszkópia (X-ray Photoelectron Spectroscopy – XPS), kisenergiájú elektrondiffrakció (Low-Energy Electron Diffraction – LEED) és másodlagos ion tömegspektroszkópia (Secondary-Ion Mass Spectroscopy – SIMS) felhasználásával. Azonban az MBE fő hátrányát a rendkívül érzékeny UHV rendszer okozza. Más folyamatokkal előzőleg kialakított, majd újra rétegnövesztendő minták elszennyezhetik az UHV reaktort különféle polimer alapú rezisztmaradványokkal, mellyel a vákuum már korábbi értékeit nem érheti el.

Az MOVPE rétegnövesztés esetén a komplex kémia reakciók a gáz-fázisban és a felületen a részletekbe menő folyamatkontrollt sokkal összetettebbé teszik, mint az MBE esetén. A reakciókamra viszonylag kis vákuumának következtében az *in situ* monitorozás és karakterizálás lehetséges szinte kizárólag ellipszometrián alapuló módszerekre korlátozódik. Azonban az MOVPE technika nagyon vonzó annak következményeként, hogy komplex kémiai reakciókkal a háttérben, az általános rétegnövesztési folyamat viszonylagos egyszerűséget mutat más rétegnövesztési módszerekkel szemben. Segítségével csúcsmínőségű, kisméretű struktúrák valósíthatók meg félvezető-fizikai kutatásokhoz és eszközökhöz. Egyik fő előnye a technikának a szelektív területen növesztés lehetősége mindenmű érzékenység nélkül a megelőző technológiai folyamatokból származó maradványokra. Fő hátránya azonban a III-as csoportú alkil forrásanyagok gyúlékonysága, illetve az V-ös csoportú hidrid forrásanyagok erősen mérgezőek. Napjainkban ezek a problémák már kiküszöbölés alatt állnak.

A két technika egymást kiegészítő szerepének mintegy megerősítéseként sok hibrid módszer jelent meg az utóbbi években, mint például a gázforrású MBE (Gas-Source MBE – GSMBE), ahol gázhalmazállapotú hidridek az V-ös csoportú forrásanyagok, a fém-organikus MBE (Metal-Organic MBE – MOMBE), ahol fém-alkilek a III-as csoportú forrásanyagok, valamint a kémiai sugaras epitaxia (Chemical Beam Epitaxy – CBE), ahol pedig gázok formájában állnak rendelkezésre mind a III-as, mind pedig az V-ös csoport elemei.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

## 9. Karakterizálási módszerek

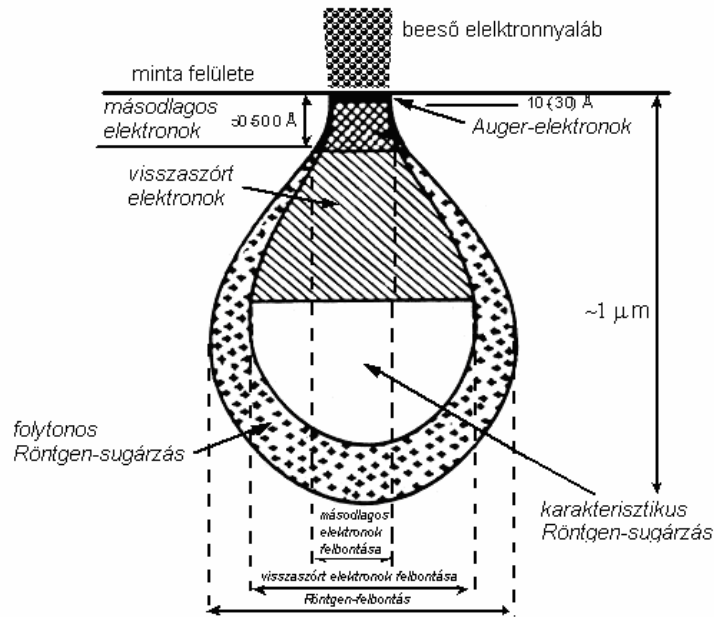
Az epitaxiálisan rétegnövesztett III-V vegyület-félvezető struktúrák fontos paramétere a rácshibák sűrűsége, adalékkoncentráció, emissziós hullámhossz, kémiai összetétel, rétegvastagság, morfológia, töltéshordozók koncentrációja és mozgékonyasága, de az előbbi paraméterek eloszlása is különös fontossággal bír napjainkban. Bizonyos vizsgálati módszerek, mint a kémiai maratás, másodlagos ion tömegspektroszkópia, vezetőképesség és mozgékonyaság feltérképezése roncsoló és sok időbe telik. Roncsolásmentes módszerek az optikai, Röntgen és elektronikai módszerek.

### 9.1. Elektronsugaras analízis

Egy elektronnaláb anyagon belüli kölcsönhatási térfogata rengeteg tulajdonságot tár fel, mint például helyi kémiai összetétel, kristályok és kristályhibák típusai, réteg morfológiája, csak hogy néhányat megemlítsünk a sok közül. Elektronnaláb kölcsönhatását szilárd testtel a 9.1. ábra szemlélteti. A *visszaszórt elektronok* rugalmasan szóródnak, energiáik néhány eV-től a beeső nyaláb elektronjainak energiájáig terjed, ami általában 15 - 30 keV. Ezek az elektronok egy ~500 nm mélységbe kiterjedő térfogathoz származnak, így az általuk hordozott információ az anyagok tömbtulajdonságaira vonatkozik. A *másodlagos elektronok* rugalmatlan ütközések révén jönnek létre, gerjesztett vezetési elektronokat eredményezve. A másodlagos elektronok kibocsátása 5 nm-es mélységhez köthető a gerjesztett elektronok kicsi, 0 - 50 eV mozgási energiájának következtében. Az ilyen elektronok a felületi morfológia karakterizálására alkalmasak. Nagyenergiájú beeső elektronok belső héjak elektronjait is gerjeszthetik, energiavesztést létrehozva. Ez az energiavesztés generálja a *karakterisztikus Röntgen-sugárzást* és az *Auger-elektronokat*, melyeket külső héj elektronjának belső héj megüresedett helyére (vakancia) történő ugrása eredményez. A karakterisztikus Röntgen-sugárzás a folytonos fékezési háttérsugárzással (Bremsstrahlung) együtt jelenik meg. Az Auger-elektronok tipikus szökési mélysége a 3 nm-t nem haladja meg, de így rendkívül hasznos kémiai összetételi információt ad a felületközeleli rétegekről. A karakterisztikus Röntgen-sugárzás ezzel szemben tömbszerű anyagok kémiai összetételének meghatározására használható eredményesen, mivel a karakterisztikus sugárzás a vizsgált anyag ~1-2  $\mu\text{m}$ -es mélységéből származik. A *karakterisztikus katódlumineszcencia* a félvezetőtömbök tulajdonságait tárja fel. Intrinszik katódlumineszcencia jön létre elektron-lyuk rekombináció

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

során vezetési és vegyérték sávhoz közeli állapotok között, így a vonatkozó detektálható fotonenergia körülbelül a tiltott sáv szélességnek felel meg. Extrinszik katódlumineszcencia olyan átmenetekből nyerhető, ahol szennyezőkre jellemző lokalizált energiaátmenetek vannak. Katódlumineszcencia területi eloszlásának feltérképezése fontos információt ad a kémiai összetétel és szennyezők területi eloszlásáról. Az elektron-sugaras analízist nyújtó rendszerek fő alkotórészei (elektronágyú, fókuszáló optika és detektorok) UHV rendszeren belül vannak elhelyezve.



9.1. ábra: Elektronnyaláb–minta kölcsönhatása, illusztrálva a kölcsönhatási térfogatokat a különféle elektrongerjesztési folyamatokra vonatkozóan.

### 9.1.1. Pásztázó elektronmikroszkópia

A pásztázó elektronmikroszkópia (Scanning Electron Microscopy – SEM) egy nagyon hatékony roncsolásmentes karakterizálási módszer mindenféle félvezető-felülethez, 2,5 - 50 keV elektrongyorsító feszültséget használva. A SEM vázlata látható a 9.2. ábrán. A másodlagos és visszaszórt elektronok detektálásán túl (9.1. ábra), sok SEM rendszer kiegészítővel van felszerelve, például Röntgen-sugárzás, abszorbeált elektronok, transzmissziós elektronok, katódlumineszcencia (CL) detektálására. Ha energiadiszperzív Röntgen-analizátor (Energy Dispersive X-ray

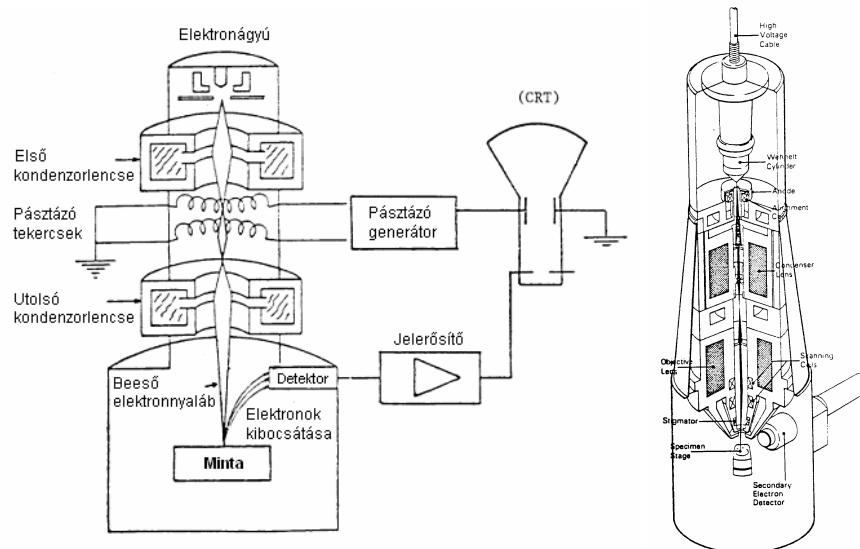
*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

– EDX) is kapcsolódik az elektronmikroszkóphoz, roncsolásmentes mikroanalizátorként is alkalmazhatóvá válik. Mikroanalízis szempontjából különlegesen fontos az elektronnyaláb átmérője, illetve a mintára eső „folt”, vagy úgynevezett szonda mérete. Ez határozza meg az SEM felbontását. Rendszerint a foltméretnek a kívánt felbontás nagyságrendjében kell lennie. Kis foltméretek esetén nagyszögű rugalmas szóródás csökkenti a felbontást. Téremissziós elektronágyúk (Field Emission Gun – FEG) 1 nm-nél jobb felbontást adnak. A mintát elhagyó karakterisztikus elektronokat a detektor gyűjti be és fotoelektron-sokszorozó erősíti. Ez a jel adja a kijelző monitor katódsugárcsővének (Cathode Ray Tube – CRT) fényerejét.

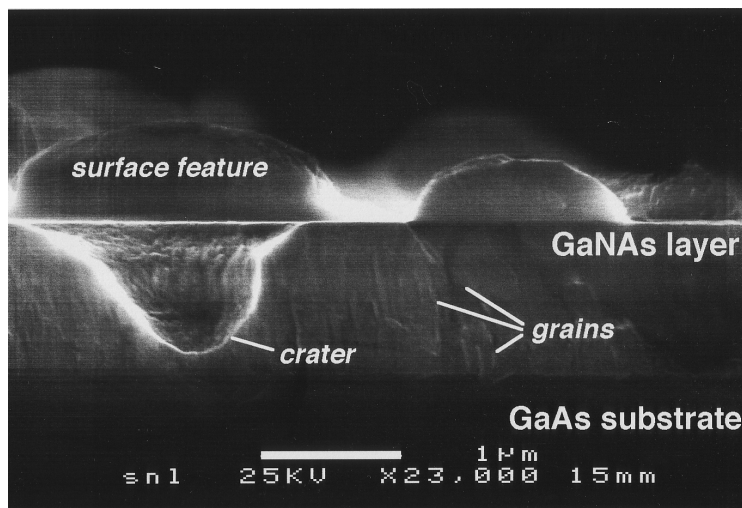
Nagyenergiájú ( $> 50$  eV) *visszaszórt elektronok* a kémiai összetételről (pl. felületi precipitátumok) és a topográfiáról adnak információt, a visszaszórt elektronokat detektáló elektródák megfelelő kombinálásával. A visszaszórt elektronhozam (beeső elektrononkénti visszaszórt elektron) az atomi rendszám monoton növekvő függvényei, úgynevezett atomi kontrasztot eredményezve. A topografikus üzemmódban a visszaszórt elektronok felületi és a félvezető előállítási folyamatai által okozott hibákat tárnak fel.

A kisenergiájú ( $< 50$  eV) másodlagos elektronok létrejöttének kölcsönhatási térfogata jól kisebb, mint a visszaszórt elektronok esetén. Következésképpen a másodlagos elektronok felbontása nagyobb, mint a visszaszórt elektronoké, valamint a kisenergiájú elektronok detektálása is hatékonyabb, jobb jel/zaj viszonyt elérve. A generált másodlagos ionok száma függ a hordozótól, a beeső elektronnyaláb szögétől, és a gyorsító feszültségtől. A vizsgált felület megdöntésével a beérkező elektronok a felülethez közelebbi részekbe hatolnak, több másodlagos elektront gerjesztve. A döntés rendszerint a detektor felé történik, mely tovább növeli a detektálási hatékonyságot. A másodlagos elektronhozam a beeső nyaláb gyorsítófeszültségének függvénye, mely két feszültségnél ad 1 értéket egy beeső elektronra vonatkozóan. Ezek a helyek alkalmasak nem vezető minták vizsgálatára felpárologatott fémréteg (vezetőréteg) nélkül. Vezető öntapadós szénszalagok csökkentik a beeső elektronok által létrejövő elektrosztatikus feltöltődést, mely félvezető rétegek vizsgálatánál jelenthet gondot. Nagyfelbontású másodlagos elektronokkal készített keresztmetzeti kép és mikroanalízis eredménye látható a 9.3. ábrán.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



9.2. ábra: SEM blokkvázlata a főbb alkotórészekkel (balra), illusztrálva az indirekt képalakítást, valamint egy SEM berendezés oszlopának kialakítása (jobbra).



9.3. ábra: Nagyfelbontású SEM mikrográfia MBE-növesztett  $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$  réteg (0.5% As) keresztmetszeti analiziséről, feltárva szemcséket és kristályhibákat, melyek a hordozó/réteg határfelületről erednek. A sok kristályhiba kialakulásának oka a két félvezető (GaAs és GaN) nagyban eltérő kristályrácsa, melyből fakadóan különféle összetételű fázisok is megfigyelhetők.

### 9.1.2. Energiadiszerzív Röntgen-spektrometria

Röntgen-spektroszkópiában a beérkező elektronok egy atom szorosan kötött elektronjait gerjesztik, kiütve elektront például a K-héjról

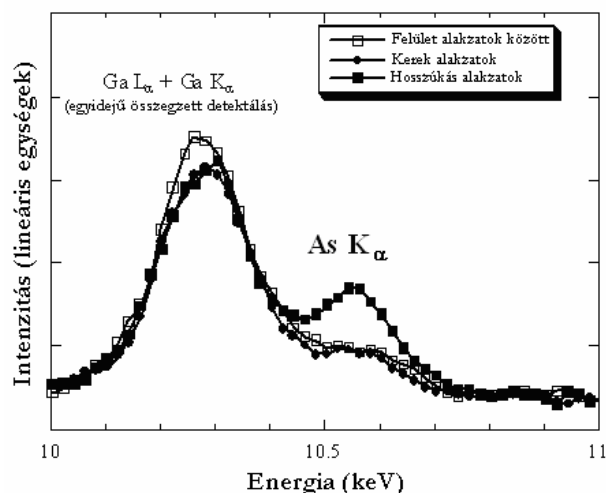
*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

rugalmatlan ütközés révén, mely során az elsődleges elektron a megfelelő energiát elveszti. Amikor a K-vakancia egy külső héj elektronja által betöltésre kerül, a többletenergia karakterisztikus Röntgen-sugárzást és Auger-elektront is létrehozhat, ahogy ez a 9.5. ábrán is látható. A karakterisztikus Röntgen-sugárzás energiái K, L vagy M jelölést kapnak, attól függően, hogy mely elektron kerül kilökésre, míg az alsó index a gerjesztetlen állapotba jutásra utal. Következésképpen  $K_{\alpha}$  és  $K_{\beta}$  olyan folyamatokra utalnak, ahol elektron került kilökésre a K-héjról és helyét egy elektron az L- illetve M-héjról foglalta el. A  $K_{\beta}$ -vonal intenzitása  $\sim 10\%$ -a a  $K_{\alpha}$ -vonal intenzitásának, mely irányelvként tekinthető a különféle spektrális összetevők azonosítása esetén. A beeső elektronok lassulása folytonos Röntgen-háttérrel ad a spektrumhoz.

Elektronsugaras mikroanalízis rendszerint 30 keV elektron gyorsítófeszültséggel történik, az elektronnyalábot 1  $\mu\text{m}$ -ról  $\sim 20$  nm fókuszával a minta felületén, 1 - 100 nA nyalábáramot fenntartva. A Röntgenanalízis felbontása 1  $\mu\text{m}$ -re korlátozódik az elektronnyaláb mintán belüli szóródása következtében, ahogy ez a 9.1. ábrán is illusztrált. Kétféle Röntgen-spektrométer használatos, hullámhossz diszperzív (Wavelength Dispersive – WDX) és energia diszperzív (Energy Dispersive – EDX). WDX rendszerek esetén kristályspektrométer választja szét a különféle hullámhosszú (energiájú) Röntgen-sugarakat, míg az EDX rendszerek Si-Li detektort tartalmaznak. Ebben az utóbbi esetben a Röntgen-sugarak vékony berillium ablakon keresztül érik el a detektort és elektron–lyuk párokat keltenek a beeső Röntgen-sugarak energiáival arányosan. Minden egyes elektron–lyuk pár 3,8 eV energiát igényel, így egy adott  $E_p$  energia  $E_p/3,8$  elektron–lyuk párt kelt. Ez a jel erősítésre kerül egy multi-csatornás analizátorban, ahol minden csatorna egy meghatározott jelmagasságnak felel meg. Így minden csatorna tartalma annak a mértéke, hogy hány foton található egy meghatározott energiaintervallumban. Ha két Röntgen-foton egyszerre érkezik, úgy ezek energiájának összege kerül detektálásra, ahogy ez a 9.5. ábrán is látható. Berillium ablak használata esetén a kisebb energiájú Röntgen-fotonok erős abszorpció miatt  $Z < 11$  elemek analízise nem lehetséges kellő pontossággal, de a nagyobb rendszámú elemek koncentrációi 0,1 - 5% pontossággal meghatározhatók. Mennyiségi (kvantitatív) analízis esetén a folytonos röntgen-háttér eltávolítása szükséges. Tömbszerű minták pontos mennyiségi analízise korrekciót igényel, mivel tiszta mintából származó Röntgen-intenzitások különböznek a többféle elemet tartalmazó mintákból nyerhető intenzitásoktól. A korrekció a rendszám eltérését (Z), Röntgen-abszorpciót (A) és Röntgen-fluoreszcenciát (F) vesz figyelembe – úgynevezett ZAF-korrekcióként.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*





9.4. ábra: A 9.3. ábrán látható GaAs-en növesztett  $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$  ( $x_{\text{átlag}} = 0.995$ , azaz 0.5% As) réteg EDX spektruma, normalizálva a Ga- $\text{K}_\alpha$  intenzitásra. A legnagyobb intenzitású csúcs detektálási egyidejűségéből adódó energiaösszegződésként értelmezhető. Az EDX pontossága kis térfogatú felületi kristályoknál lecsökken, mivel a Röntgen-fotonok kölcsönhatási térfogata túlléphet a vizsgálni kívánt térfogatrészen.

### 9.1.3. Auger-elektron spektroszkópia

Az Auger-elektron spektroszkópia (Auger-Electron Spectroscopy – AES) azon alapul, hogy a beérkező elsődleges elektronok egy atom szorosan kötött elektronjait gerjesztik, rugalmatlan ütközés révén elektront ütnek ki, például a K-héjról, mely során az elsődleges elektron a megfelelő energiát elveszti. Amikor a létrejött K-vakancia egy külső héj elektronja által betöltésre kerül, a többletenergia karakterisztikus Röntgen-sugárzást hoz létre, mely energia Auger-elektront is gerjeszthet, ahogy ez a 9.5. ábrán is látható. A különféle Auger-elektronok a K, L, M, stb. Röntgen-jelöléseket kapják a 9.5. ábra illusztrációja szerint. A  $\text{KL}_3\text{L}_1$  Auger-elektron úgy jött létre, hogy egy elektron került kilökésre a K-héjról, mely üressé vált helyét az  $\text{L}_3$ -héj egy elektronja töltötte be, mely felszabaduló energia Röntgen-fotonja az  $\text{L}_1$ -héjról gerjeszt egy elektront, mely mozgási energiája révén elhagyja a mintát, és detektálásra kerül mint karakterisztikus Auger-elektron. Az előbbieket értelmében a  $\text{KL}_3\text{L}_1$ -electron mozgási energiája a következőképpen fejezhető ki:

$$E_{\text{KL}_3\text{L}_1} = E_{\text{K}} - E_{\text{L}_3} - E_{\text{L}_1}, \quad (9.1)$$

ahol  $E_{\text{K}}$ ,  $E_{\text{L}_3}$  és  $E_{\text{L}_1}$  az Auger-folyamatban résztvevő szintek kötési energiái. Mivel ezek a kötési energiák egyszeres ionizált állapotra vonatkoznak, a 9.1. egyenlet pontatlanná válik kétszeres ionizáció esetére. Továbbá, a kö-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

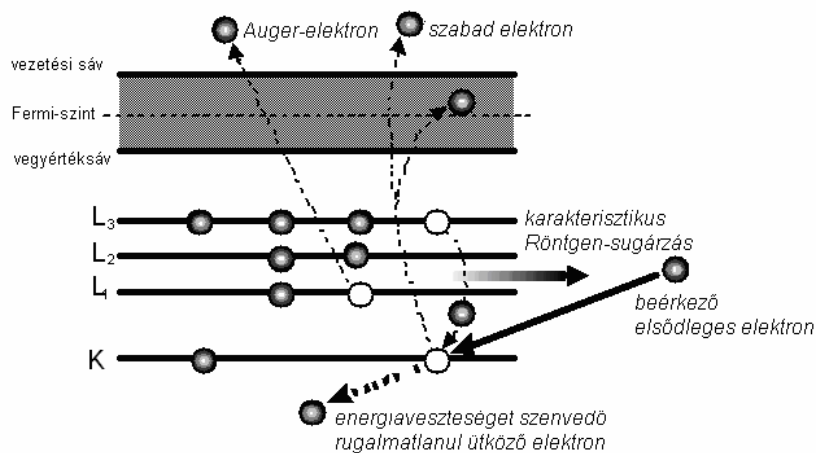
tési energiák a Fermi-szintre vonatkoznak, míg az Auger-elektron mozgási energiája a vákuumszintre. Következésképpen a megfigyelt elektronenergia az analizátor munkafüggvényével ( $\phi$ ) csökken. Hogy ezt a két korrekció beépítésével az Auger-elektron energiája a következőképpen adható meg:

$$E_{KL_2L_1}(Z) = E_K(Z) - E_{L_2}(Z) - E_{L_1}(Z + \Delta) - \phi, \quad (9.2)$$

ahol  $\Delta$  az interpolációs érték a  $Z$  és  $Z+1$  rendszámok között. A  $\Delta$  tapasztalati értékei 0,5 és 0,75 között változnak, részben tapasztalati lehetőséget adva a várható Auger-intenzitások helyeinek kiszámításához. Azonban fizikailag valósághibb megközelítést ad a következő kifejezés:

$$E_{KL_2L_1} = E_K - E_{L_2} - E_{L_1} - F_{L_2L_1} + R_{L_2L_1}(\text{at}) + R_{L_2L_1}(\text{ex}) - \phi, \quad (9.3)$$

ahol  $F_{L_2L_1}$  a kölcsönhatási energia az  $L_2$  és  $L_1$  lyukak között a végső állapotban, míg  $R_{L_2L_1}(\text{at})$  és  $R_{L_2L_1}(\text{ex})$  az atomi illetve extra-atomni nyugalmi energiák.



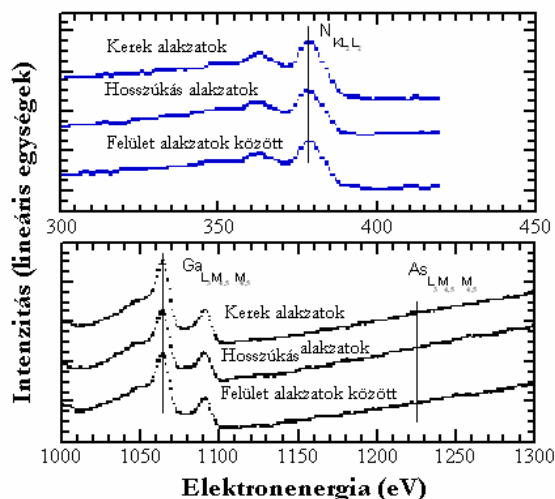
9.5. ábra: Beeső elektron által gerjesztett karakterisztikus Röntgen-sugárzás és Auger-elektron létrejötte.

Auger-elektron spektroszkópia során egy 3 - 5 keV energiájú elektronnyalábot bocsátanak a minta felületére 1 nA - 200  $\mu$ A nyalábárammal, 10 - 50 nm-től 5  $\mu$ m-ig terjedő foltátmérőt létrehozva az analízishez. Az Auger-elektronok energiái viszonylag kicsik, 0 - 2000 eV közé esnek, a felületi rétegek felszínhez legközelebbi régióiból származnak, általában  $\sim 3$  nm-nél kisebb mélységből. Ez az elektronok mintán belüli, rugalmatlan ütközések közötti kis átlagos szabad úthosszából ( $\sim 10$  Å) adó-

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

dik. Ennek következtében az Auger-jel rendkívül érzékeny a felületre adszorbeált különféle atomi rétegekre. Az Auger-elektronhozam (K-héj vakanciánkénti gerjesztett Auger-elektron) növekszik a csökkenő atomi rendszámmal, rendkívül jó lehetőséget biztosítva a könnyű elemek vizsgálatára. Általában cilindres tüköranalizátor (Cylindrical Mirror Analyser – CMA) használatos a detektáláshoz. A detektált elektronok az elektronsokszorozóval ellátott detektorra fókuszálódnak, ahol az  $I(E)$  áram kerül mérésre, vagy kis impulzusok számlálása történik. Mivel az Auger-intenzitáscsúcsok nem igazán nyilvánvalóak a közvetlen  $N(E)$  energiaeloszlási spektrumban, ezért a differenciált  $dN(E)/dE = d^2I(E)/dE^2$ , használt az analitikai gyakorlatban. A pásztázó Auger-mikroszkópia esetén az elektronnalábbal a minta felületét pásztázva a kompozíciós (kémiai összetételi) eloszlás határozható meg. Ionágyú segítségével felületi rétegek porlaszthatók (marathatók) le Auger-analízis során, mellyel különféle elemek mélységi profiljai is felvehetők az adott mintában. Az Auger-jel felbontása is a beeső elsődleges elektronnaláb szóródásától függ, mivel a szórt elektronok is gerjeszhetnek Auger-elektronokat. Kisebb gyorsító feszültségek kevesebb másodlagos elektron által generált Auger-elektront hoznak létre. A minőségi (kvalitatív) analízis a kapott Auger-spektrumnak megfigyelt Auger-intenzitásokhoz listájához történő hasonlítást jelent. Mennyiségi (kvantitatív) analízis nagy pontossággal nehéz feladat. Az összetevők meghatározása viszonylagos érzékenységi együtthatókon keresztül lehetséges. Az ilyen mátrix-együtthatók 0,5 – 2,0 között változnak, de a hiba egészen ~50%-ig megnőhet. A tipikus detektálási határ AES esetén a legkülső atomi réteg 0,1%-a. Példaként AES közvetlen spektrum látható a 9.6. ábrán GaAs-en növesztett  $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$  ( $x_{\text{átlag}} = 0,995$ , azaz 0,5% As) rétegre vonatkozóan pulzusszámlálásos üzemmódban 5 nA beeső nyalábárammal 500 nm alatti foltátmérővel. A megfelelő N, Ga és As koncentrációk kerültek meghatározásra az As/Ga és N/Ga arányokon keresztül, feltárva a különféle összetételű anyagfázisok kialakulását. Az AES kis kölcsönhatási térfogata ideálissá teszi a módszert mikrométeres és annál kisebb felületi és felületközeli struktúrák vizsgálatára.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



9.6. ábra: A 9.3. ábrán látható GaAs-en növesztett GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> (x<sub>átlag</sub> = 0,995, azaz 0,5% As) réteg AES spektruma, karakterizálva a megfelelő N, Ga és As koncentrációkat. Az AES kis kölcsönhatási térfogata ideálissá teszi a módszert mikrométeres és annál kisebb felületi és felületközei struktúrák vizsgálatára.

## 9.2. Röntgen-diffrakció

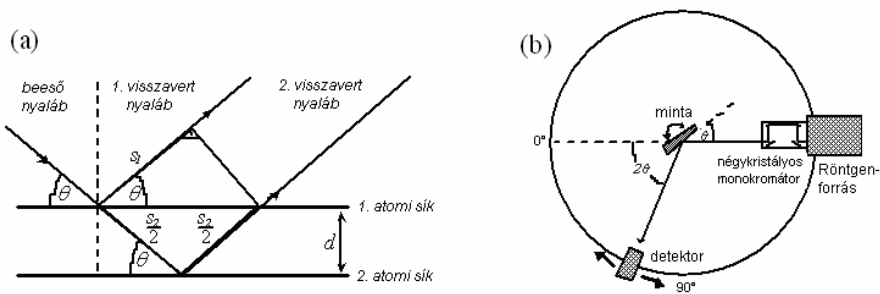
A Röntgen-diffrakció (X-ray Diffraction – XRD) a Bragg-trövény korai kísérletein alapszik, hogy diffrakciós kép alapján az anyagok szerkezetéről információt lehessen kapni. A reflexiók feltétel két atomi síkról visszaverődő hullám interferenciájával teljesül, ahogy az a 9.7. ábrán is látható. A két hullám (sugár) útkülönbsége megadható az alábbi módon:

$$s_1 - s_2 = \frac{2d}{\sin\theta} (1 - \cos^2\theta) = 2d \sin\theta, \quad (9.4)$$

ahol  $d$  az atomi síkok távolsága és  $\theta$  a beérkező Röntgen-nyaláb szöge. Konstruktív interferencia (erősítés) feltétele, hogy az útkülönbség az a hullámhossz egész számú többszöröse legyen Bragg törvénye szerint:

$$2d \sin\theta = n\lambda. \quad (9.5)$$

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



9.7. ábra: Két atomi sík által visszavert Röntgen-sugarak, ahol Bragg törvénye írja le az interferenciát (a). Nagyfelbontású Röntgen-diffraktométer, mely  $2\theta$  szög alatt visszaverődő Röntgen-sugarakat detektál (b).

Röntgen-diffraktometria során a detektor állandó szögsebességgel mozog egy  $2\theta$ , szögtartományban, ahogy az a 9.7.b. ábrán is látható. Ezzel párhuzamosan a minta is forog a diffraktométer tengelye körül a detektor szögsebességének felével. A felvett vonalak helye és közvetlen intenzitásuk kerül az analízis során felhasználásra. A relatív hiba Bragg törvényének deriválásával kapható meg, mely szerint  $\Delta d/d = -\cot\theta \Delta\theta$ . Ez azt jelenti, hogy növekvő  $2\theta$  diffrakciós szögek nagyobb felbontást adnak a rácscsíkok közti távolságok és rácállandók meghatározásához. Mivel a Röntgen-sugarak elektromágneses hullámok, kölcsönhatásba kerülnek az elektronokkal, mely révén azok rezgőmozgást végeznek. Az elektronok a beeső hullámmal megegyező hullámhosszú sugárzást bocsátanak ki. Így az elektronokkal történő kölcsönhatásból származó nyaláb koherens lesz a beeső nyalábbal. A teljes szórt intenzitás a P pontban,  $r$  távolságra egy elektron-tól a Thompson-egyenlet alapján adható meg:

$$I_p = I_0 \frac{e^4}{r^2 m^2 c^4} \frac{(1 + \cos^2 2\theta)}{2}, \quad (9.6)$$

ahol  $e$  és  $m$  az elektron töltése és tömege. Röntgen-sugárzás koherens szórodása atomon csak az atomot alkotó elektronok révén lehetséges. Az atomi szórodási együttható írja le egy atom által létrehozott szórodást egy adott irányban, míg az a létrejött hullám, melyet egy egységgrác valamennyi atomja okozott, az  $(\mathbf{F})$  struktúra faktoral írható le. Így egy Bragg-diffraktált nyaláb intenzitása  $|\mathbf{F}|^2$ -tel arányos, melyet az anyag kristályszerkezete határoz meg.

A Röntgen-diffrakció az egyik legegyszerűbben kivitelezhető roncsolásmentes karakterizálási módszer kristályos anyagok vizsgálatára. A minőségi (kvalitatív) analízis Röntgen-diffrakciós vonalak pozícióinak

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

meghatározásával történhet. Mennyiségi (kvantitatív) is végezhető olyan formában, hogy összefüggést kell alkotni az intenzitás és kristálytérfogat között a megfelelő reflexió integrálásával. Rétegnövesztett félvezető-struktúrák esetén a diffrakcióvonalak megadják a kristályszerkezetet, valamint a terner és kvaterner vegyület-félvezetők rácsállandóját és kémiai összetételét, belső mechanikai feszültségét és rácsillesztetlenségét. Az FWHM (full width at half maximum) érték, azaz a maximális intenzitás felénél mért jelszélesség a réteg minőségéről, összetételi inhomogenitásáról és kristályhibainak sűrűségéről ad információt. A kapott intenzitásjelek szélesebbé válnak a romló kristálytani minőséggel, míg a belső mechanikai feszültség is hozzájárul a szélesedéshez.

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

## 10. Maratási módszerek

Az eszközök előállításában az additív (azaz hozzáadó) rétegnövesztési technológiák mellett a szubtraktív (azaz elvevő) maratási technológiák is fontos szerepet játszanak. Mind a száraz, mind pedig a nedves kémiai maratási technológiák gyakran kerülnek alkalmazásra. A hagyományos szilícium alapú technológiákkal szemben, a III-V vegyület-félvezetők esetén a nedves kémiai maratás rendkívüli fontossággal bír. A következőkben áttekintjük a különféle maratási módszereket és technológiai szerepüket a félvezetőeszközök kialakításában.

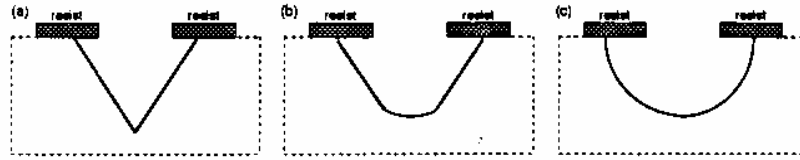
### 10.1. Nedves kémiai maratás

Szilárd fázisok nedves kémiai maratással történő eltávolítása oxidáción alapul. Ezért a maratószer egyik fő komponense az *oxidálószer*, mint például a hidrogén-peroxid ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ), salétromsav ( $\text{HNO}_3$ ), bróm ( $\text{Br}_2$ ), stb. Azonban az előbbi erős oxidálószer sem képesek önmagukban marni a III-V vegyület-félvezetőket, mivel a reakciótermékek nem tudnak disszociálni, így a reakció gyorsan leáll. A feloldhatóvá tételéhez *disszociálószer*ek, savak hozzáadása szükséges, mint például sósav ( $\text{HCl}$ ), kénsav ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ), foszforsav ( $\text{H}_3\text{PO}_4$ ), vagy lúgok, mint a nátrium-hidroxid ( $\text{NaOH}$ ), vagy esetenként ammónia. Így az *disszociálószer*ek révén a reakciótermékek oldható komplexekké alakíthatók, melyek már jól oldhatóvá válnak az *oldószer*ekben, mint például az ecetsav, alkoholok, glicerin, stb. A legtöbb marató rendszer tartalmaz vizet, de gyakran szerves oldószer is helyettesítheti a vizet különböző járulékos hatás kihasználása érdekében. Különleges fontossággal bír a  $\text{H}_2\text{O}_2:\text{H}_3\text{PO}_4:\text{CH}_3\text{OH}$  marató rendszer, ahol a víz metanollal helyettesített. A metanol polírmaró hatású (100) GaAs felületeknél, mellyel nanostruktúrákhoz készíthető atomi szintű maratás.

Maratási folyamatok egyik legfontosabb paramétere a maratási sebesség, mely változtatható a marató rendszer összetételével és a maratás hőmérsékletével. Oldószer (vagy hígítószer) mennyiségének növelésével a maratási sebesség csökken, míg az oxidálószer koncentrációjának növelése növeli a maratási sebességet. Egy marató rendszer fokozott reakciói összetételi inhomogenitás vagy megnövekedett hőmérséklet következtében gyakori okai érdes felületek kialakulásának. A legtöbb maratórendszer esetén a keverés jelentősen megnöveli a maratási sebességet. Egy marató rendszer időbeli kompozíciós változásai megváltoztatják a maratási profilt kinetikailag kontrolláltról köztesre vagy egészen diffúziókontrolláltra,

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

ahogy az a 10.1. ábrán is látható. A kinetikailag kontrollált maratás anizotróp (van kitüntetett maratási irány), míg a diffúziókontrollált maratás izotróp természetű (nincs kitüntetett maratási irány). Általában a hígítószer mennyisége változtatható a maratási profil megváltoztatása nélkül. A nedves kémiai maratás az alkalmazás szempontjából négy fő kategóriára osztható.



10.1. ábra: Maratási profilok: (a) kinetikailag kontrollált, (b) köztes, (c) diffúziókontrollált.

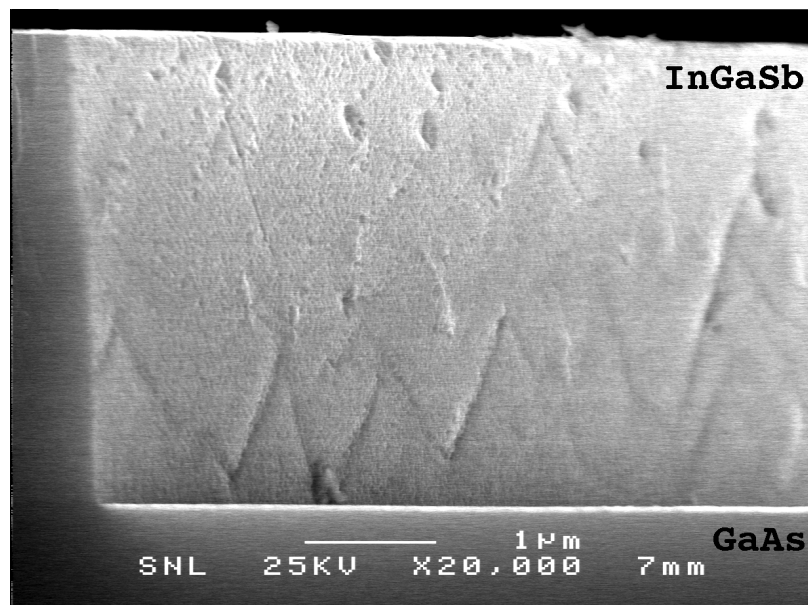
A nedves kémiai maratás alkalmazható felületek *polírozására* és *kristályhibák feltárására*. További tipikus alkalmazás a *szelektív maratás*, például epitaxiális réteg maratása egy másik rétegekre szelektíven. Mivel a különböző rétegek összetétele elég hasonló lehet, ezért a maratási módszereknek nagy kihívásoknak kell megfelelniük.

Az úgynevezett *profilmaratás* a III-V vegyület-félvezető eszközök előállításának fontos technológiája. A „V” alakú, lekerekített vagy szögletes alakzatok maratása gyakori a félvezető-technológiákban, különösen az optikai eszközök előállítása során. Számos technológiai tapasztalat bizonyítja, hogy a III-V vegyület-félvezetők különféle kristálytani síkjai ugyanazon marató rendszer szempontjából eltérő sebességgel maródnak. Általánosságban, a (111)A síkok sokkal lassabban marathatók, mint az (111)B típusúak, ahol A és B megfelelően a III-as és V-ös csoportú komponenseket jelöli. A különféle kristálytani irányokban történő maratási sebességek ismeretével megtervezhető a maratott alakzat formája, különös tekintettel a reziszt körüli és alatti területekre vonatkozóan. Ebben az esetben a kinetikailag kontrollált maratásról beszélünk, mely anizotróp tulajdonságokat mutat kristályos anyag esetén, ahogy ez a 10.1.a. ábrán is látható. Ha minden sík disszociációs rátája nagyon magas, akkor az aktív maratókomponensek transzportfolyamatai határozzák meg a maratási sebességet, ahogy ez a 10.1.c. ábrán is illusztrált. Az ilyen diffúziókontrollált maratás izotróp tulajdonsággal rendelkezik. Köztes maratási profil akkor jöhet létre, ha a profil egyik része kinetikus kontroll alatt állnak, míg a másik része diffúziókontroll alatt áll, ahogy ez a 10.1.b. ábrán is látható. A 10.2. ábrán egy olyan példa látható, mely GaAs hordozón növesztett InGaSb réteg szelektív maratását mutatja egy keresztmetszeti pásztázó elektronmikroszkóppal készített képen. A szelektív maratás mellett profilmaratás eredményei is láthatók tökéletesen függőleges oldalfalakkal. Harmadik hatásként pedig

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



kristályhibák feltárása is látható az oldalfalakon, mely a két félvezetőanyag rácsállandójának viszonylag nagy különbségéből adódik. Ennek következtében maratással feltárt, a képen jól látható diszlokációk indulnak a két anyag határfelületéről.



10.2. ábra: GaAs hordozón növesztett InGaSb réteg szelektív maratása profilmarási és kristályhiba-feltáró hatásokkal.

## 10.2. Száraz maratás

Az 1970-es évekig a maratási folyamatok mind nedves maratások voltak, de napjainkra a helyzet nagymértékben megváltozott. A változás fő oka a száraz maratási technológiák anizotróp tulajdonságaiban rejlik, különös tekintettel arra, hogy ez a tulajdonságuk amorf anyagok maratásakor is jellemző marad, mellyel a felületen kialakított maszk tökéletesen átvihető a félvezetőbe. 2-3  $\mu\text{m}$  alatti alakzatok maratásakor anizotróp módszerekre van szükség a méretek megtartása érdekében. A száraz maratási módszerek általában tisztábban kezelhetők és könnyebben automatizálhatók, míg a nedves maratások kísérleti és egyedi eszközök előállítására előnyösek. A száraz maratási módszerek legszembetűnőbb hátrányai azonban a megmunkált félvezető roncsolódása, a berendezések magas ára és a folyamat bonyolultsága.

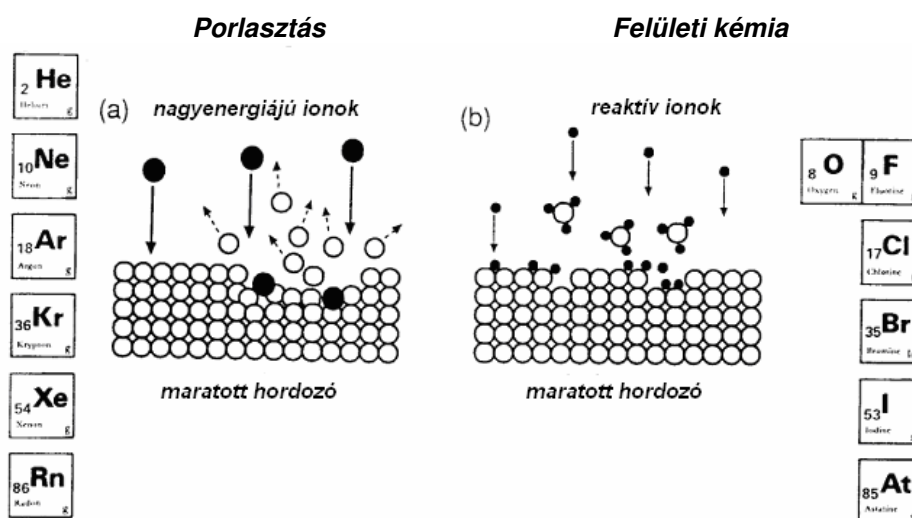
*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

### 10.2.1. Plazma–felület kölcsönhatások

A reaktív plazma mind fizikai, mind pedig kémiai kölcsönhatásokat létrehoz a felülettel. A fizikai kölcsönhatást a plazma sötétere által felgyorsított ionok anyagporlasztásos becsapódása jelenti, míg a kémiai kölcsönhatások reakciókon keresztül, kémiai vegyületek kialakulásával és disszociációjával jönnek létre.

#### *Porlasztás*

A felület porlasztása során a porlasztott anyag a becsapódó nagyenergiájú ionok ( $\text{Ar}^+$  vagy  $\text{Xe}^+$ ) hatására elhagyja a felületet, ahogy az a 10.3.a. ábrán is látható. A kölcsönhatás tisztán fizikai. Fontos porlasztási paraméter a hozam, melyet az egy beeső ion által kilökött atomok száma ad meg egy meghatározott ionenergiához. A porlasztási hozam a beeső ionnyaláb szögétől is függ. Maximális hozam úgy érhető el, ha a felületi merőleges iránytól eltérítjük a beeső nyalábot. Ebben az esetben egyre kevesebb ütközés szükséges egy atom kilökéséhez.



10.3. ábra: Porlasztás (a) és felületi kémia (b).

#### *Felületi kémia*

Sok kémiaileg aktív semleges részecske is van az ionok mellett. Sok esetben ezek a semleges részecskék aktívabb reagensek, mint az eredeti molekuláris gáz, ezért nem lehet a plazmanövelt maratási sebességet pusztán az ionos bombázásnak betudni. Például, klóros és fluor tartalmú plazmák atomos klórt és fluort is tartalmaznak, melyek sokkal reaktívabbak, mint a természetben előforduló molekuláris változatok. A  $\text{Cl}_2$  nem marja a

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

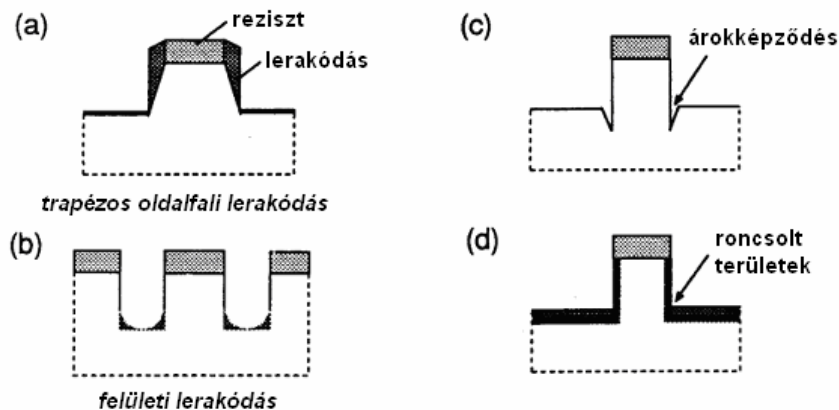
III-V vegyület-félvezetőket spontán módon, de a felület klórral fedetté válik. Ionos bombázás esetén a felület reakciótermékeket deszorbeál, melyek a III-as és V-ös csoportú atomokkal kloridokat hoz létre, melyek elpárolognak a felületről az általánosan nagy parciális nyomásaik következtében, ahogy ez a 10.3.b. ábrán is illusztrált.

### ***Ionsegített és ionindukált maratás***

Amennyiben a plazmából felgyorsított ionok csapódnak a maratott félvezetőbe, akkor ionsegített vagy ionindukált maratás jön létre. Az ionsegített maratás anizotrop maratás némi maszkalámaródást létrehozva, míg az ionindukált maratás tökéletesen anizotrop maratást eredményez tökéletesen függőleges (becsapódási irányú) maratási profillal.

### ***Oldalfal mechanizmusok***

Bizonyos esetekben stabil újra leválasztott rétegek jöhetnek létre a maratott alakzatok oldalfalain, valamint az alsóbb régiók megnövekedett anizotrópiát mutatnak, ahogy ez részleteiben is látható a 10.4.a-b. ábrason. Legalább két mechanizmus vezet az oldalfali lerakódásokhoz. Ha a plazma freonokat tartalmaz, polimer anyagok válhatnak ki a plazmából. A második ok az ionbombázás felületi maratási maradványainak jelenléte. Ez az oldalfali lerakódás a tipikus újra lerakódás, mely gyakran megfigyelhető olyan porlasztásos maratások esetén, amikor a maratási termékek nem párologóak.



10.4. ábra: Különböző oldalfali lerakódások (a-b), árokképződés (c) és maratás által létrehozott roncsolódás (d).

Nagyenergiájú kis szögben érkező visszavert ionok felületközeli megnövekedett ionáramokat hozhatnak létre a reziszt oldalfalainál. Ez a helyileg megnövekedett ionáram a felelős a száraz maratással előállított

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

alakzatok aljánál tapasztalható árokképződésért, ahogy ez a 10.4.c. ábrán látható. Van egy másik hasonló mechanizmus vezető tulajdonságú anyagok maratása során. Itt a felületi topográfia változhat a változó elektromos tér vonalainak megfelelően, megnövekedett ionáramokat létrehozva az alakzatok széleinél árkok kialakulását okozva. Nagy maratási mélységek megnövelik az ionok oldalfalakra történő visszaverődésének lehetőségét és az elektromos tér eltérítő hatásait.

### ***Maratási roncsolódások***

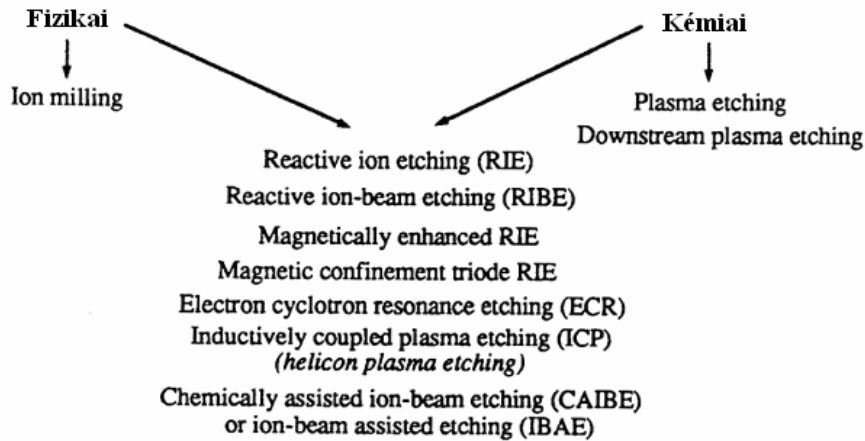
A leglényegesebb száraz maratási hátrány a maratás által létrehozott nemkívánatos roncsolódás, melyet a nagy energiával rendelkező ionok okoznak. Az ilyen nemkívánatos roncsolódások a felületközeli tartományokba esnek, és különösen a nanostruktúrák elektronikai és optikai tulajdonságait rontják le jelentősen. Jól elkülöníthető különbség tehető felületi és oldalfali roncsolódás között, ahogy az a 10.4.d. ábrán is illusztrált. Az előbbi maszkolatlan felület maratása során jön létre, míg az utóbbi eltávolított térrész oldalfalain jön létre. Mindkét roncsolódás eloszlása meghatározható technológiai paraméter. A roncsolódás kiterjedése függ a beeső ion energiájától és a plazma gáznyomásától. Még az egészen kicsi kialakuló hibakonzentrációk ( $\approx 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , vakanciákat és rácsközi atomokat tartalmazva) is jelentős eszközromláshoz vezetnek. Nagy roncsolási mélység jöhet létre csatornahatás révén. A roncsolódások révén létrejött diszlokációk optikai rekombinációs központokként és elektronikai szóródási központokként fejthetik ki nemkívánatos hatásukat a különféle csúcstechnológiájú eszközökben.

### **10.2.2. Száraz maratási módszerek**

A különféle főbb száraz maratási módszerek láthatók a 10.5. ábrán. Történelmi okokból fakadóan a párhuzamos elektródás maratás a plazmamaratás. Ebben az esetben a kémiai mechanizmusok dominálnak, míg az ionos porlasztás elhanyagolhatóbb szerepet játszik, alapvetően izotróp maratást eredményezve. Csak különleges feltételek biztosítanak anizotróp maratást, mint a reaktív ionmarás (Reactive Ion Etching – RIE). Reaktív ionsugaras marás (Reactive Ion-Beam Etching – RIBE) esetén az ionok a reaktor egy elkülönített részében jönnek létre. Az ionok a hordozó felülete felé gyorsulnak 600-1200 eV energiával. Az energia és az energiasűrűség külön-külön vezérelhető. Mikrohullámú kisülés, elektron ciklotron rezonancia (Electron Cyclotron Resonance – ECR) is létrehozhat nagy sűrűségű plazmát az elektronok megnövelt élettartamán keresztül. Nagyfrekvenciás mikrohullámú kisülések sűrű plazmát hozhatnak létre, mellyel izotróp

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

és nagy sebességű maratás érhető el. Magnetron porlasztásnál egy mágnest helyeznek a forrás vagy a maratott hordozó mögé az ionsűrűség megnövelésének érdekében, valamint technológiailag kedvezőbb ioneloszlás létrehozásához. Induktívan csatolt plazma (Inductively Coupled Plasma – ICP) források válhatnak a jövő nanotechnológiájának eszközeivé. Végezetül az egyszerű ionmaratást kell megemlíteni, amikor nagyenergiájú nemesgázok ionjai bombázzák a maratott felületet. Ekkor a folyamat tisztán fizikai porlasztásnak felel meg.



10.5. ábra: Száraz maratási technológiák marási mechanizmus szerinti csoportosítása a szakirodalomban használt megnevezések feltüntetésével.

### 10.2.3. Kémiaileg segített ionsugaras maratás (CAIBE)

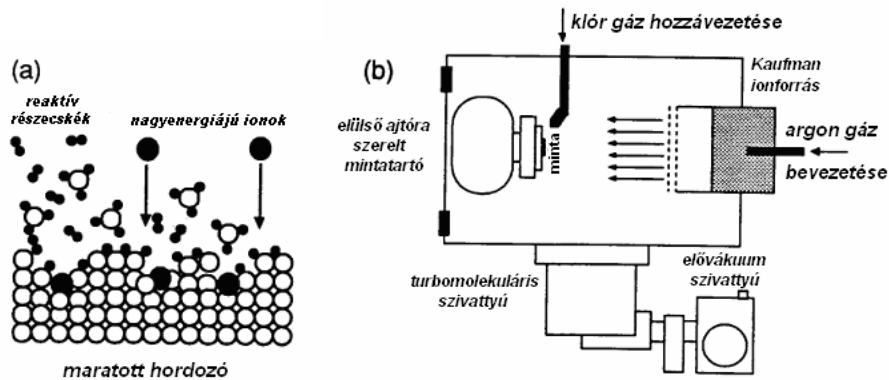
Különös tekintettel a nanotechnológiai alkalmazásokra, a RIBE egy fokozatosan előtérbe kerülő változata a kémiaileg segített ionsugaras maratás (Chemically Assisted Ion-Beam Etching – CAIBE), vagy ahogy még ismert, ionsugárral segített maratás (Ion-Beam Assisted Etching – IBAE). A módszer lényege, hogy reaktív gáz, rendszerint  $\text{Cl}_2$  kerül a hordozóhoz eljuttatásra, míg annak felületét nagyenergiájú  $\text{Ar}^+$ -ionok bombázzák, ahogy ezt a 10.6.a. is illusztrálja.

Egy CAIBE reaktor tipikus kialakítása látható a 10.6.b. ábrán. A szokásos háttérnyomás  $\approx 10^{-6}$  Torr szükséges a maratási folyamathoz. Az  $\text{Ar}^+$ -ionok áramát Kaufman ionforrás hozza létre, melyből a maratott felületre jutnak az ionok. A  $\text{Cl}_2$  gázt csövek juttatják a maratott felület közelébe, és számos lyuk biztosítja a homogén eloszlást. A gázáramot rotaméterek kontrollálják. Általában a kevésbé folyamatérzékeny és gyors

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*

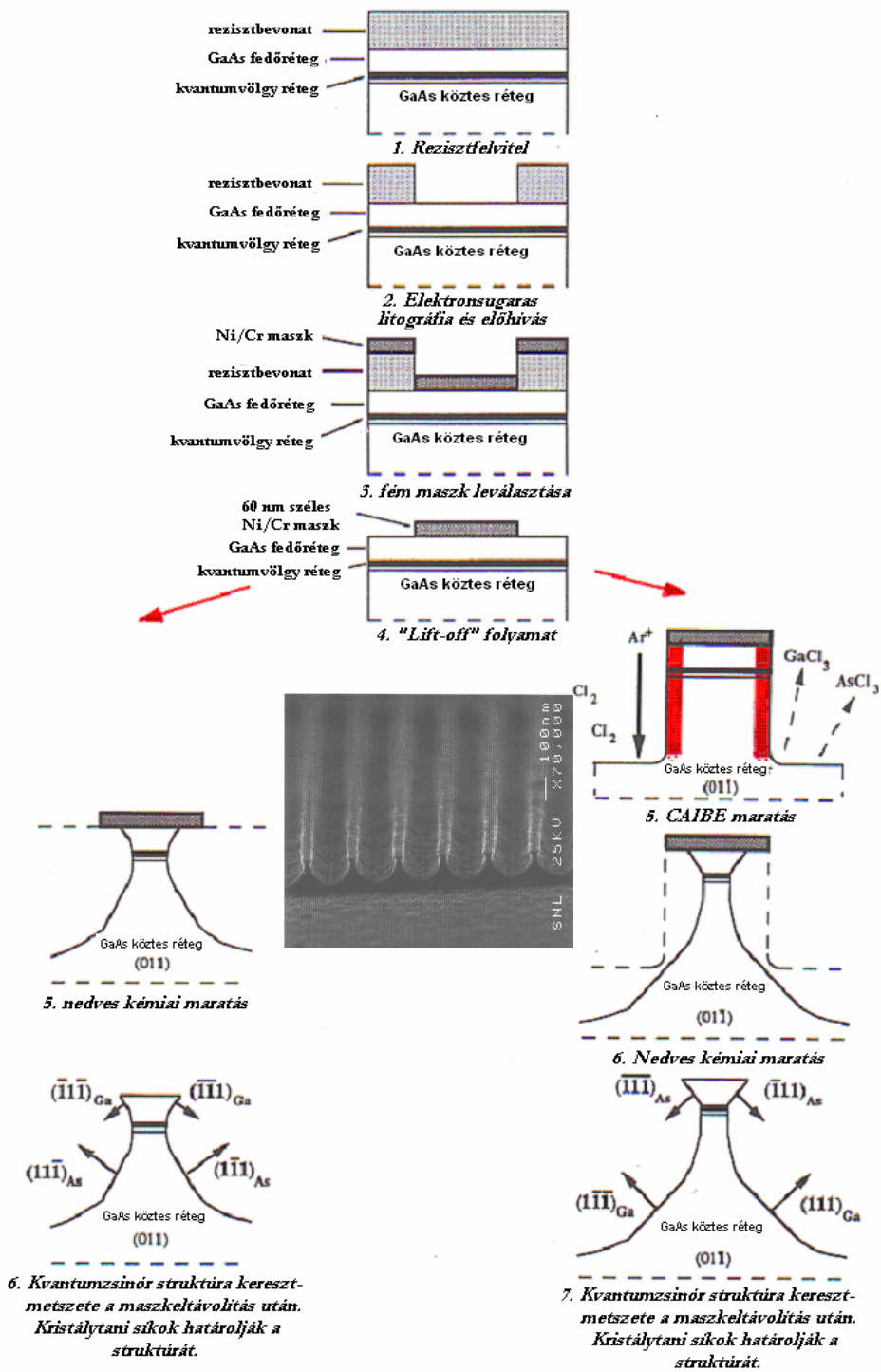
turbomolekuláris szivattyúk használata a szokásos a reaktor szükséges vákuumának létrehozásához.

A maratási folyamat erősen ionos, azaz anizotrop. A III-V vegyület-félvezetők maratása során a porlasztott anyag klórral reagálva a következő reakciótermékeket hozza létre a felületen:  $\text{GaCl}_3$ ,  $\text{AsCl}_3$ ,  $\text{AlCl}_3$ ,  $\text{SbCl}_5$ , stb. Az előbb említett vegyületek alacsony forráspontjukból adódóan könnyen deszorbeálódnak, elpárolognak a felületről. A maratási sebesség arányos a beeső ionok energiájával és áramsűrűségével. A maratási sebességek aránya GaAs és az egyik leggyakrabban használt maszkkanyag, a Ni-Cr között 40:1.



10.6. ábra: A CAIBE maratási módszer alapelve (a) és a maratáshoz használt berendezés vázlata (b).

*A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.*



10.7. ábra: Nanotechnológiai példa kvantumsinór struktúrák kialakítására. Az optikailag aktív réteg a kvantumsinórok legvékonyabb keresztmetszetébe kellett hogy kerüljön.

A vázlat kizárólag a „Mikrofizika” című tárgy 2008/2009-es félévi kurzusához használható az előadások kiegészítéseként.