

MOLEKÜLER DEMETLE KRİSTAL BÜYÜTME TEKNİĞİ (MBE)

PROF. DR. SÜLEYMAN ÖZÇELİK

sozcelik@gazi.edu.tr



TARİHÇE

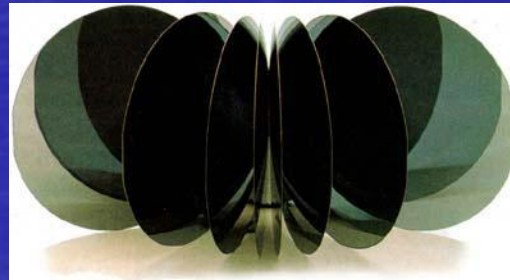
Moleküler Demet Epitaksi (MBE) metodu ilk defa, heteroyapılı lazerlerin çalışıldığı Bell Laboratuvarlarındaki bir grup tarafından fark edildi.

- **1958:** Günther stokiyometrik III-V filmlerinin vakum büyütmesi ile büyütülebileceğini göstermek için bir vakum sistemi kullandı.
- **1960-1970:** Heteroyapı fiziği, malzemesi ve aygıtları ile ilgili olan bu ilk çalışmalar, gelecek 40 yıl içindeki heteroyapı çalışmaları için bir model oldu.
- **1968:** Davey ve Pankey geliştirilmiş vakum koşulları ve GaAs alttaş üzerine epitaksiyel tabakaların büyütülebileceğini gösterdiler.
- **Yaklaşık aynı zamanlarda** Arthur ve Cho, soğuk duvar vakum sisteminde, ultra yüksek vakumda ısıtılmış GaAs yüzeylerine çarpan Ga ve As₂ moleküllerinin reaksiyon kinetiğini inceledi.
- **1970:** yılında Cho ve arkadaşları, ilk defa MBE tekniği ile heteroyapı büyütülebileceğini ileri sürerek GaAs üzerinde Al_xGa_{1-x}As büyütmüşlerdir.
- **1969-1975:** yılları arasında Cho ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmalar; ilk AlGaAs/GaAs periyodik yapılarını ve tabaka morfolojisi, katkılama, fotoluminesans ve elektriksel özellikler ve mikrodalga cihazlar ve heteroyapılı lazerlerle ilgili araştırmaları kapsamaktadır.
- **1978:** elementsel olmayan kaynakların kullanımı yine bu laboratuvarlarda geliştirilerek, Gaz Kaynaklı Moleküler Demet Epitaksi (GSMBE) metodu geliştirildi.
- Bu çalışmalar son **30 yıldır** oldukça gelişmiştir.

KRİSTAL BÜYÜTME TEKNİKLERİ

BULK

- Czochralski
- Bridgman
-
-



ALTTAŞ
(Substrate)

İNCE FİLM

EPİTAXY
MBE
MOCVD
CVD

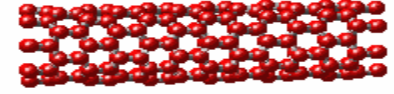
EPİTAKSİ NEDİR?

- İnce dilim alttaşlar üzerinde tek kristal yarıiletken tabakaların büyütülmesi içeren sürece "EPITAXY" denir. Epitaxy Yunan kökenli bir kelime olup İngilizce karşılığı olarak: "epi"= on, "taxy"=arrangement anlamına gelmektedir.
- Belirli bir alttaş üzerine atomların dizilişini ayarlayarak tek kristal hale getirebiliriz. Epitaxy tabaka ve alttaş materyali aynı materyal ise büyütülen bu numune "Homoepitaxy" denir. Örneğin; Si alttaş üzerine Si (Si/Si), GaAs üzerine GaAs büyütme (GaAs/GaAs) gibi. Eğer alttaş üzerine büyütülen tabaka ile kimyasal olarak farklı ise " Heteroepitaxy" denir. Buna da örnek olarak; GaAs üzerine büyütülmüş $Al_xGa_{1-x}As$ /GaAs verilebilir.
- Alttaş üretimi ve özelliklerinin belirlenmesi başlangıç adımı olarak değerlendirilebilir.

NEDEN EPİTAXY?

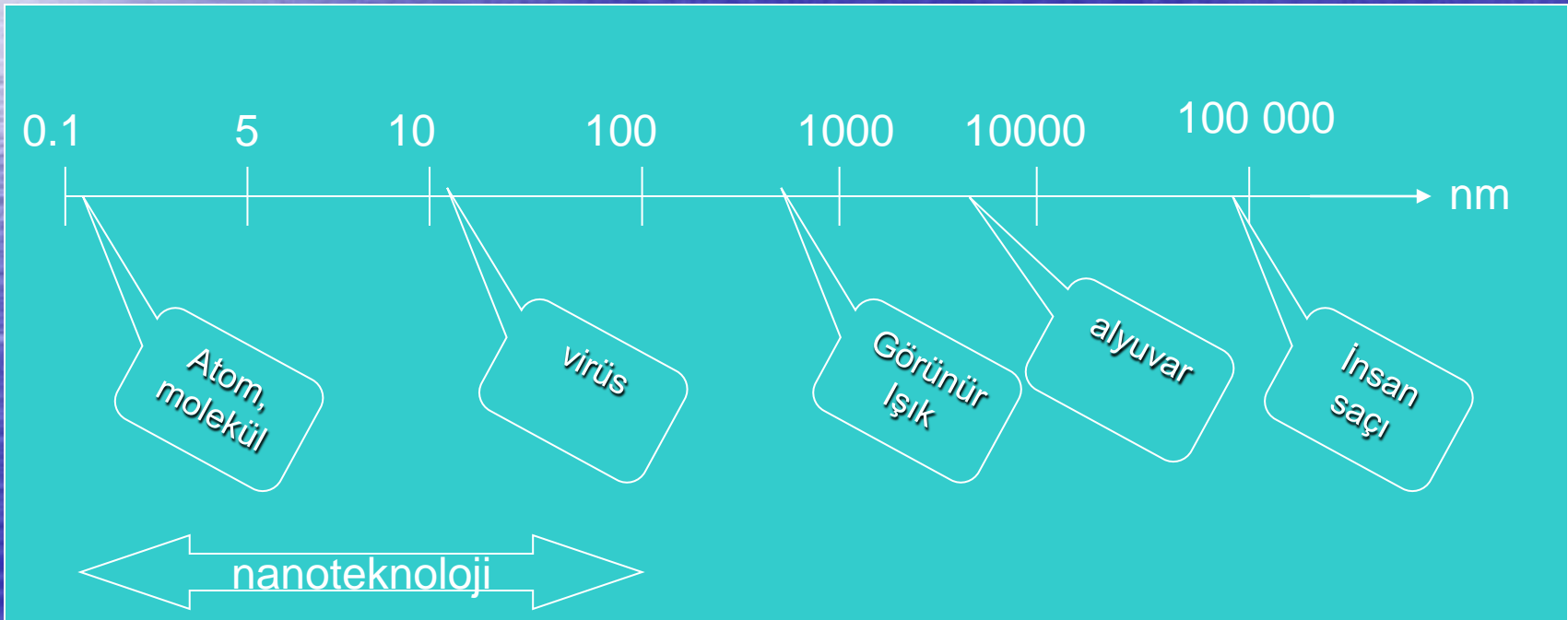
- Nano kalınlıkta ince filmlerin elde edilebilmesi,
- Ara-yüzey durumlarının iyileştirilmesi,
- Homojen çoklu ince tabakaların üst-üste büyütülebilmesi,
- Homojen katkı dağılımı elde edilmesi

İnce Nedir?



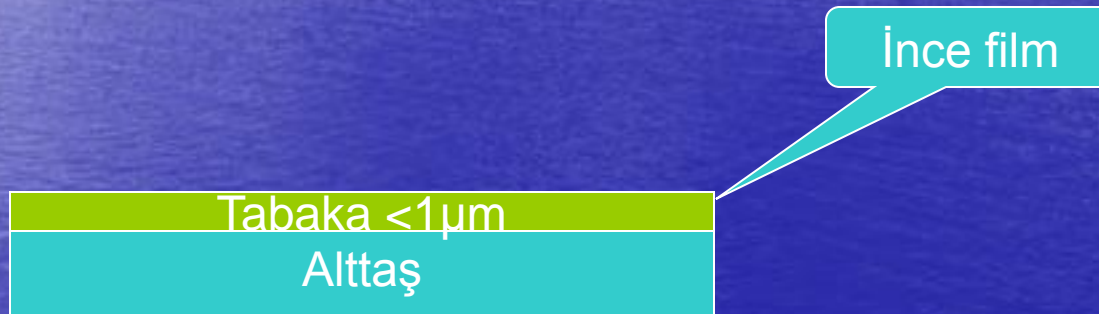
ince = bir mikrondan daha küçük ($1\mu\text{m} = 10^{-9}\text{m} = 10\ 000\text{ Angstrom} = 1000\text{ nm}$)

1nm = $10^{-9}\text{m} = 10^{-3}\mu\text{m}$; insan saçından 100 000 kez daha küçük



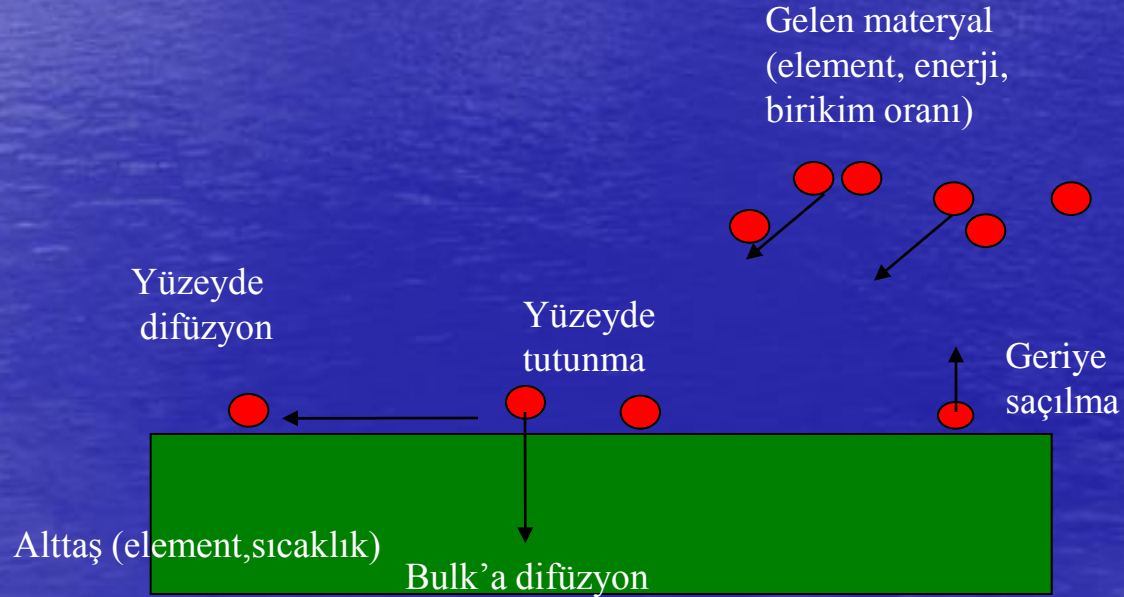
İnce Film?

film = alttaş üzerinde oluşturulan materyal tabakası

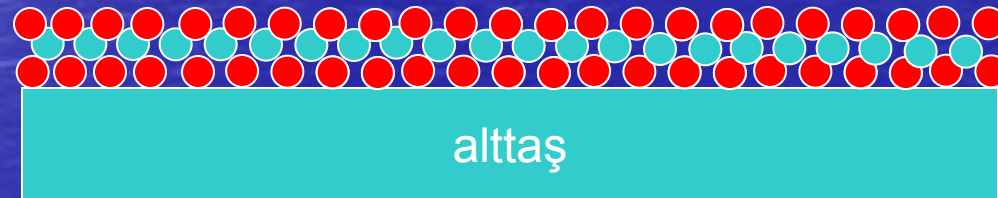


İnce film nasıl elde edilir?

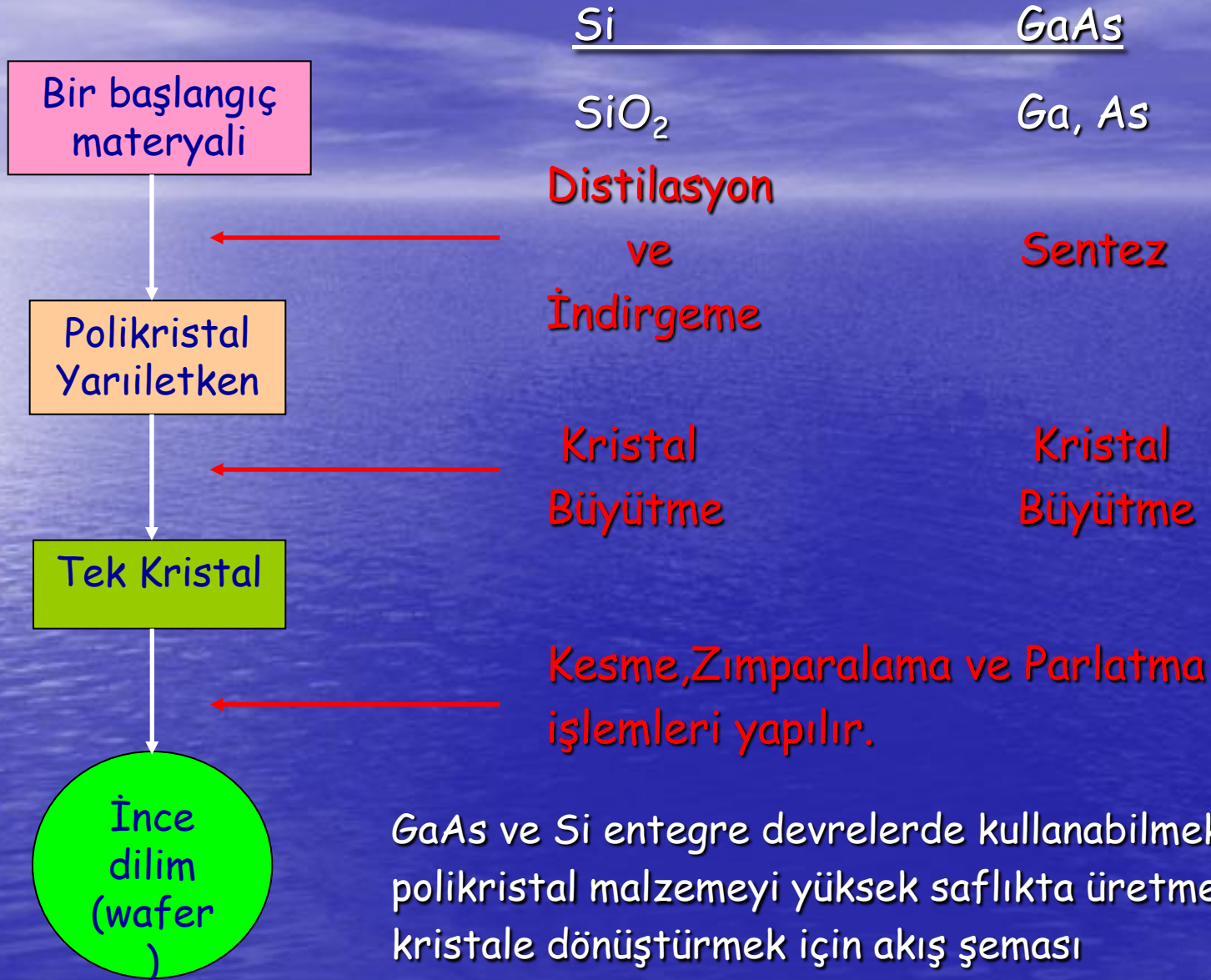
- kaynaktan (ısı, yüksek voltaj,...) parçacıkların yayılması
- parçacıkların alttaşa taşınması (serbest, yönlendirilmiş)
- Alttaş üzerinde parçacıkların yoğunlaştırılması



İnce Film



Epitaxy Öncesi gerekenler



İnce Dilim → Epi-tabaka → Cihaz

(1)

Tek kristal Si,
GaAs, InP vb.
külçeleri
büyütmek

(2)

Külçelerden
zımparalanmış-
parlatılmış
ince dilimlere
kadar uzanan
çeşitli işlemler

(3)

İnce dilimlerin
elektrik
ve mekanik
özelliklerini
belirlemek.

(4)

Çeşitli tekniklerle
epitaksiyel
büyütme:
Homo ve hetero
yapıların
büyütülmesi

(5)

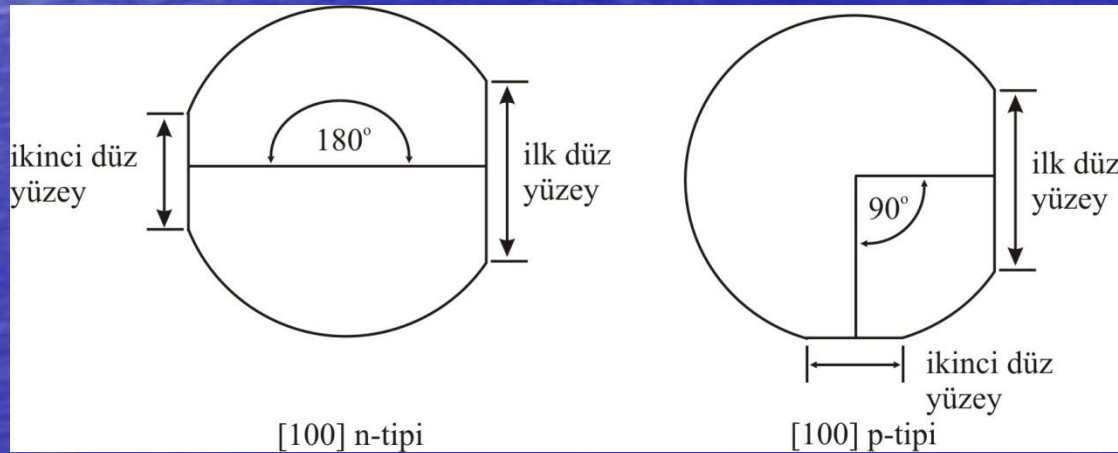
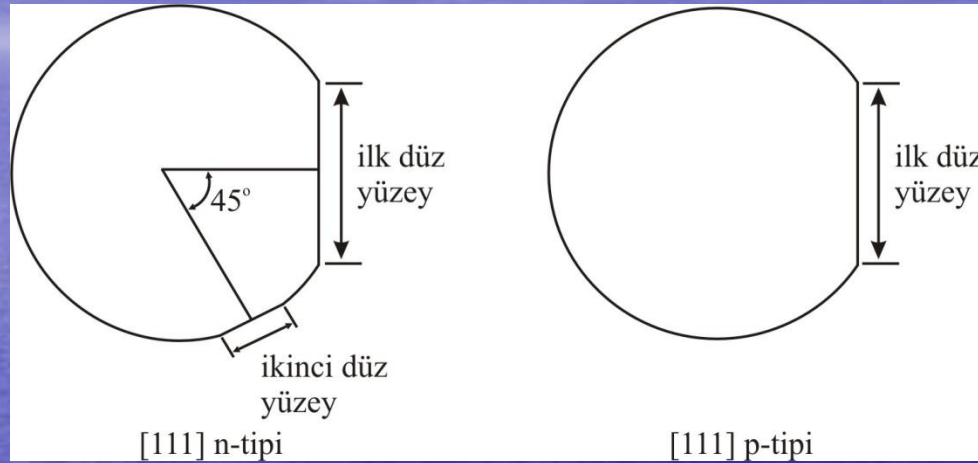
Epi-yapıların
elektrik, optik ve
yapısal
özelliklerinin
analizleri

(6)

Cihaz uygulamaları:

- Litografi
- Metalizasyon
- Performans analizleri
- Bütünleşik sistemler

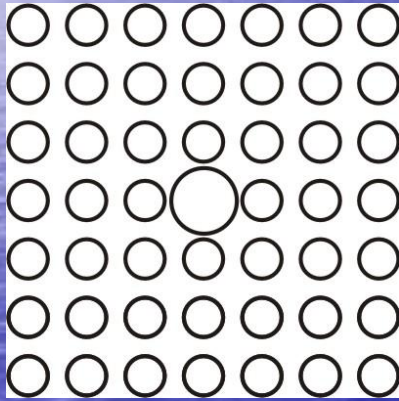
İnce Dilim



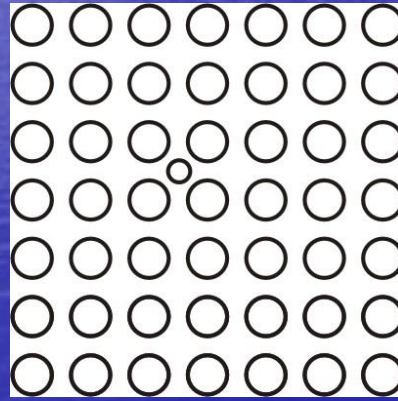
Kristal Karakterizasyonu ve Kristal Kusurları

Gerçek bir kristal (Si ince dilim) ideal bir kristalden biraz farklıdır. Yüzey atomları tamamen bağlı olmayabilir. Hatta kristaller çeşitli kusurlara sahip olabilirler. Bu kusurlar yarıiletkenin elektrik, mekanik ve optik özelliklerine etki eder. Kusurlar dört grupta toplanır.

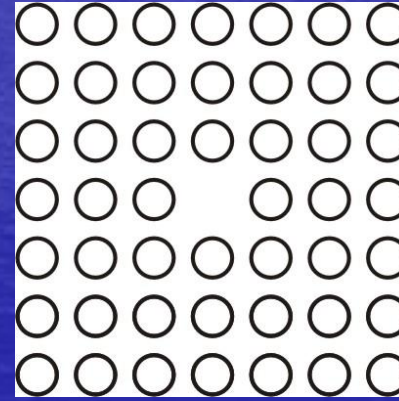
1. Nokta Kusurları



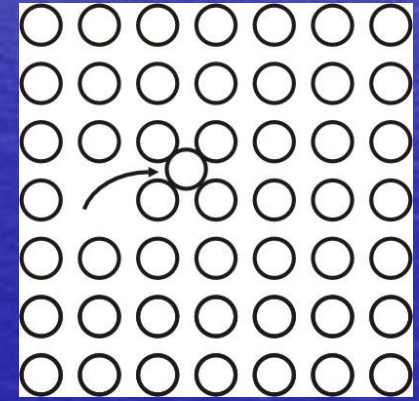
Büyük Atom



Küçük Atom



Atom Yok



Aynı büyüklükte
atom

2. Çizgi kusurları
3. Alan kusurları
4. Hacim kusurları

III-V GRUBU YARIİLETKENLER

Bileşimli yarıiletkenlerin çoğu periyodik tablonun II-VI, III-V ve IV-VI grubunda yer alan materyaller kullanılarak yapay tekniklerle elde edilebilmektedir.

III-grubu elementlerden Alüminyum (Al), Galyum (Ga) ve İndiyum (In) ile V-grubu elementlerden Fosfor (P), Arsenik (As) ve Antimon (Sb) elementlerinin alaşımı (bileşimi) ile elde edilen GaAs, InP, InGaAs, AlGaAs gibi yarıiletken malzemeler elde edilebilmektedir. Ayrıca GaN, AlGaN gibi grup-III-nitrür bileşimleri son yıllarda teknolojik uygulamaları ile önemini artıran yarıiletken malzemelerdir.

Yapay yarıiletkenlerin elde edilebildiği, periyodik tablonun II-VI grubunda yer alan bazı elementler

II	III	IV	V	VI	VII
Be	B	C	N	O	F
Mg	Al	Si	P	S	-
Zn	Ga	Ge	As	Se	-
Cd	In	Sn	Sb	Te	-
Hg	Tl	Pb	Bi	-	

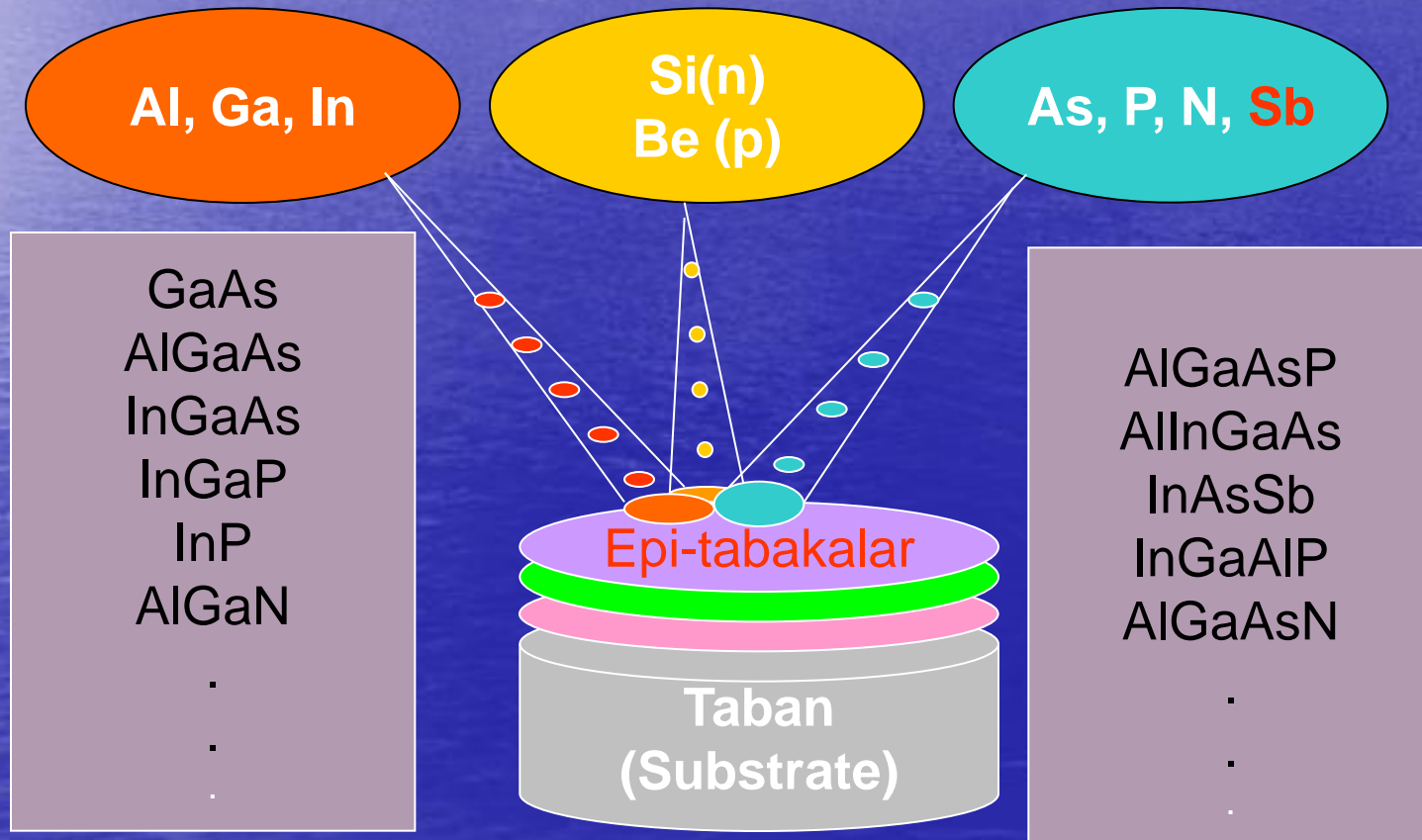
MBE en az 5N saflıkta olan kaynak malzemelerine ihtiya duyar. Yarıiletken bileşikler-alaşımlar, ham madde elde etme ve kristalleri saflaştırma işleminin maliyetinden dolayı silisyumdan daha pahalıdır. Yarıiletken bileşiklerin maliyetinin yüksek olmasına ve saflaştırma süreçlerine ihtiya duymasına rağmen, teknolojik öneminden dolayı talep görmektedir.

III-V GRUBU BİLEŞİMLER

GRUP III

KATKI

GRUP V

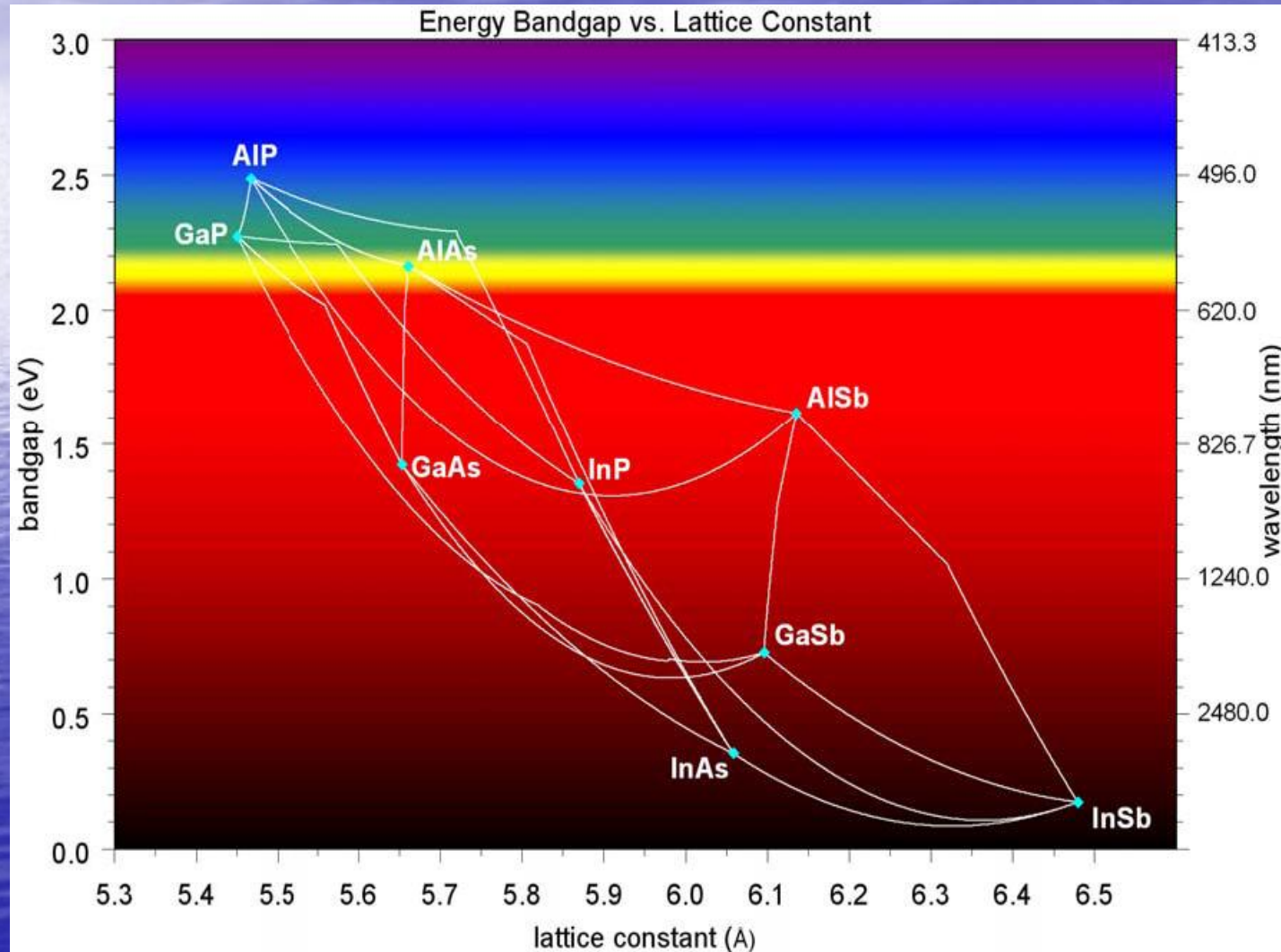


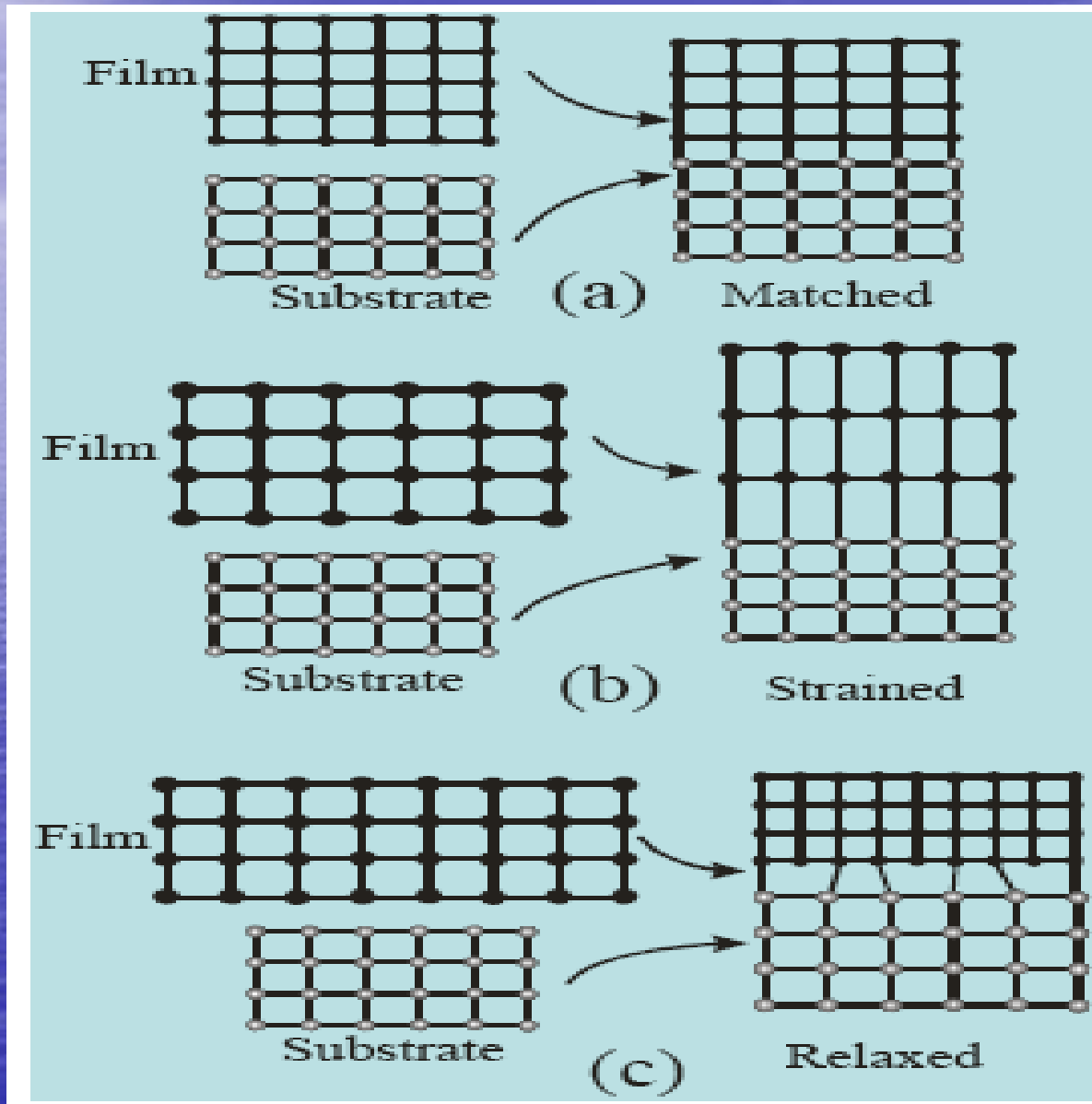
1. Silikonla geliştirilen opto elektronik cihazlar çoğunlukla pn eklemleri kullanılmaktadır. GaAs ve InP gibi yarı iletken bileşikler kolaylıkla iki tür yarıiletken arasında farklı eklemler oluşturabilir.

2. Yarıiletken bileşikler silikon veya germanyumda olmayan eşsiz fiziksel özellikler sağlar: Lazer ışınları emisyonunun ve yüksek mobiliteli elektronların meydana getirilmesi gibi.

Yarıiletken bileşiklerin eşsiz fiziksel özelliklerinden; diyotlar (lazerler vb.), elektromanyetik spektrumun çok geniş bölgesini içeren frekanslar üretebilen- algılayabilen cihazlar ve yüksek hızlı transistörler geliştirmekte faydalarınız.

Elementlerin bileşiminden uygun yapılarda yarıiletken kristal oluşturmada temel parametrelerden biri örgü uyumluluğudur. Örgü sabitleri birbirine yakın olan element ya da alaşımlar bir arada yeni yapı oluşmasına imkan sağlar. Örgü uyumsuz yapıların büyütülmesi gerilmeli durumlara yol açmaktadır.





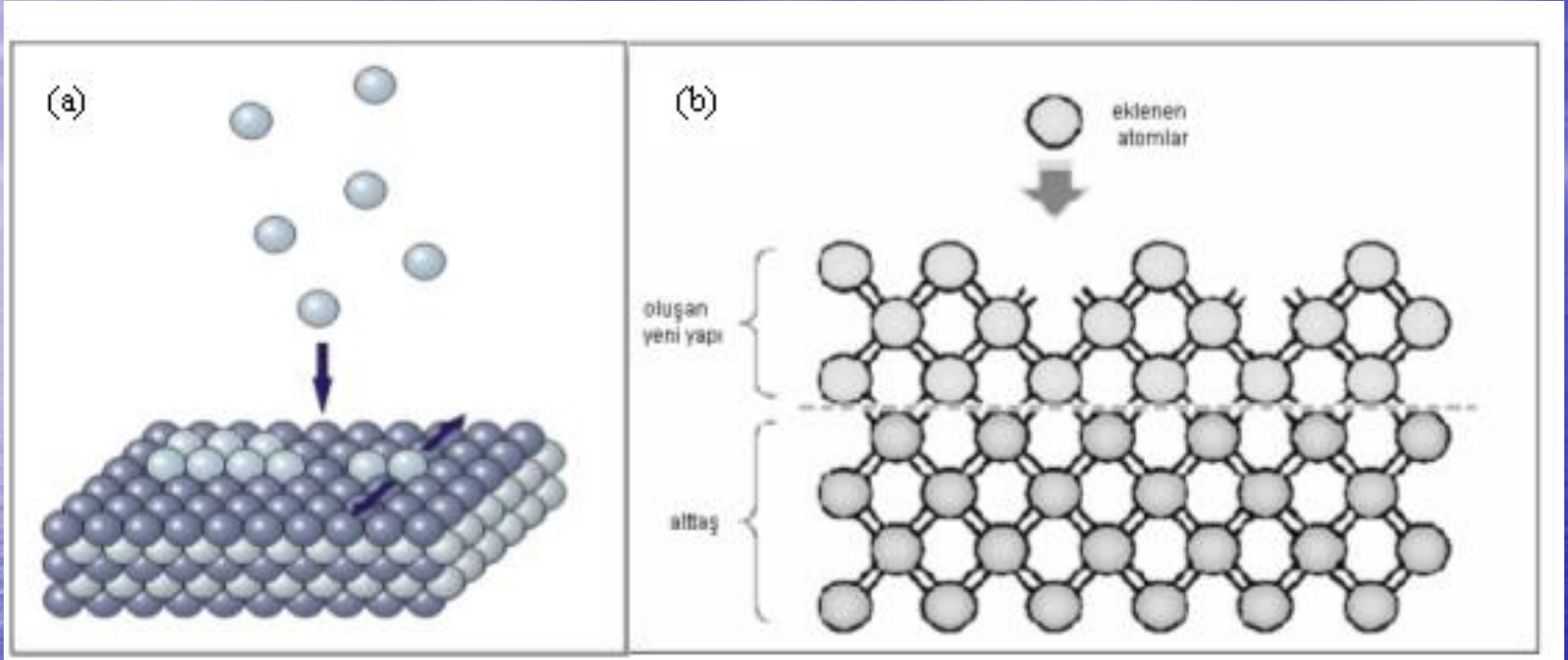
EPİTAXIAL BÜYÜTME TEKNİKLERİ

Bilindiği gibi bir çok "hacimli tek kristal" büyütmeye büyütmeye yöntemleri vardır. Bu yöntemler içerisinde Czochralski ve Bridgman-Stockbarger yöntemi temel yöntemlerdir.

Bu yöntemlerle elde edilen Si ve ya GaAs gibi yarıiletken malzemeler elektronik sanayisinde kullanılabilecek kalitede üretilebilmektedir.

Gelişen teknoloji ve geliştirilen kristal büyütmeye yöntemleri ile üstün performanslı cihazların üretilebildiği nm mertebesindeki kalınlıklarda tabakalı yapılar, kuantum nokta ve telleri büyütülmesine imkan sağlamıştır.

Epitaksi teknikleri, atomların ve/veya moleküllerin bir alttaş kristali üzerine birikimi sürecini içerir.



Epitaksiyel büyümede,

- a) moleküler demetlerin alttaşa yönelimi
- b) altta üzerinde biriken atomların yeni yapı oluşturmalarının şematik gösterimi

Yaygın olarak kullanılan teknikler;

1. CVD (Chemical-Vapor Deposition)

2. VPE (Vapor Phase Epitaxy)

3. MBE (Molecular Beam Epitaxy)

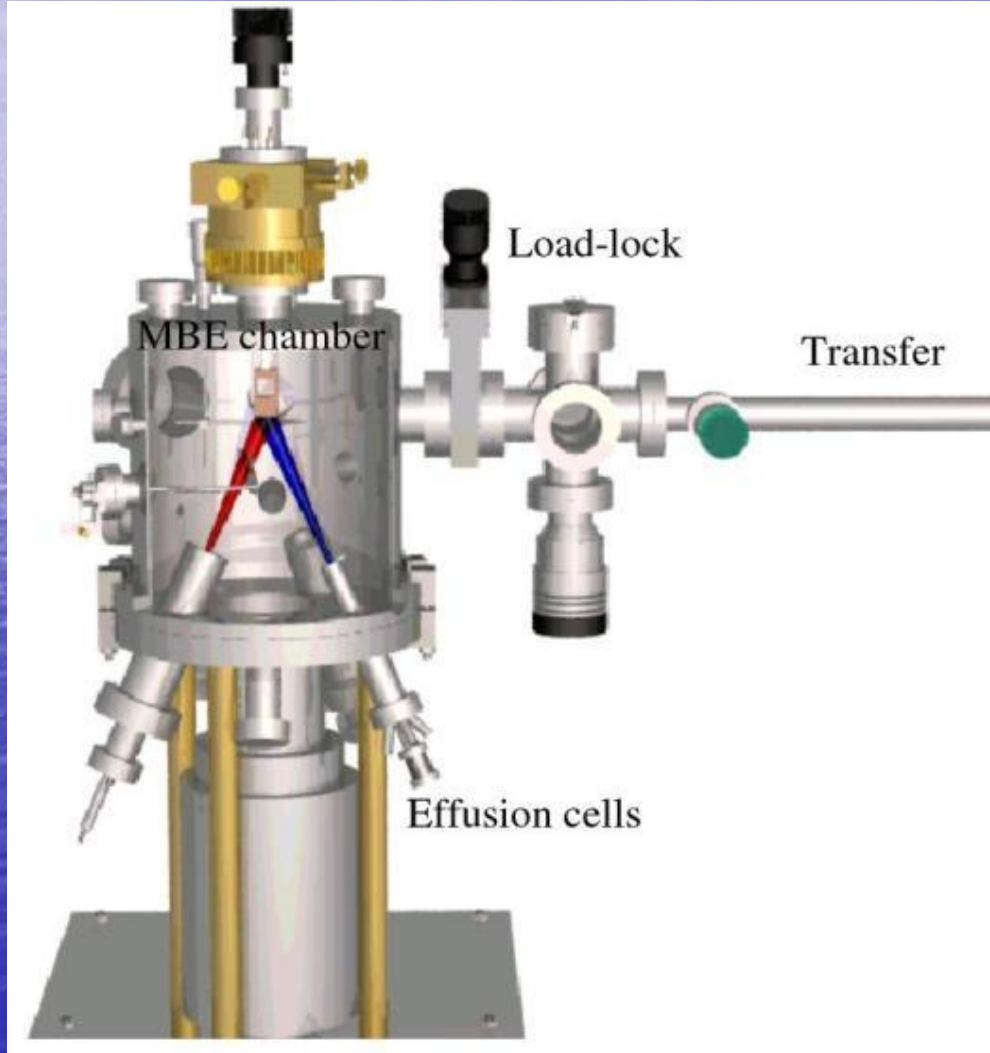
4. MOCVD (Metal Organik Chemical Vapor Depositions)

Bu tekniklerde çekirdek yerine taban-numune(alttaş)-substrate (wafer) kullanılır. Epitaxial büyütmede kaynak bazen erime sıcaklığının biraz üzerinde veya biraz altında ısıtılarak oluşan molekül demetinin alttaş üzerinde birikmesi ile oluşur.

Epitaxial Techniques Comparison

	LPE	MOCVD	MBE
Pressure	760torr	25-760torr	10^{-10} torr
Reactant transport	Liquid phase	Vapor phase	Atomic & molecular beams
Temperature control	Source & substrate	Substrate	Source & substrate
Heterostructure formation	Sliding speed	Gas flow control	Shutter control
In-situ diagnostic	no	no	RHEED, reflectivity Mass spectroscopy
Growth rate (um/min)	0.1 ~10	0.005~1.5	0~0.05
Minimal thickness (Å)	500	20	5
Uniformity	Good (small wafer)	good	good
Surface quality	bad	good	good
Interface sharpness	bad	good	good
Doping Range (cm^{-10})	$10^{14} \sim 10^{19}$	$10^{14} \sim 10^{19}$	$10^{14} \sim 10^{19}$
Process yield	low	high	Very low

MOLEKÜLER DEMETLE KRİSTAL BÜYÜTME (MOLECULAR BEAM EPITAXY , MBE)



1960'lı yılların
sonuna doğru Bell
Laboratuvarında
J. R. Arthur ve
A. Y. Cho
tarafından
geliştirilen ilk MBE
sistemi

Moleküler Beam Epitaxy metodu çok yüksek vakumda (UHV) (10^{-8} , 10^{-11} Torr) bir kristal yüzey ile atom veya moleküllerin termal demetlerinin reaksiyon sürecini içerir.

MBE ile kimyasal kompozisyon ve katkı profillerinin her ikisinde çok hassas bir şekilde kontrol edilebilir. Tek kristal çok tabakalı (atomik tabaka) yapılar MBE kullanılarak elde edilir.

MBE metodu ile yarıiletken çoklu yapıları ince filmleri (nm mertebesinde) çok hassas bir şekilde elde edebilmektedir.

Genelde MBE büyütme oranı son derece küçüktür. Örneğin GaAs için $1\mu\text{m}/\text{h}$ 'dir.

UHV birikiminden dolayı MBE büyütmesi termodinamik dengeden bağımsız sayılabilir. Bu yönü ile diğer tekniklerden farklılığını ortaya koyar.

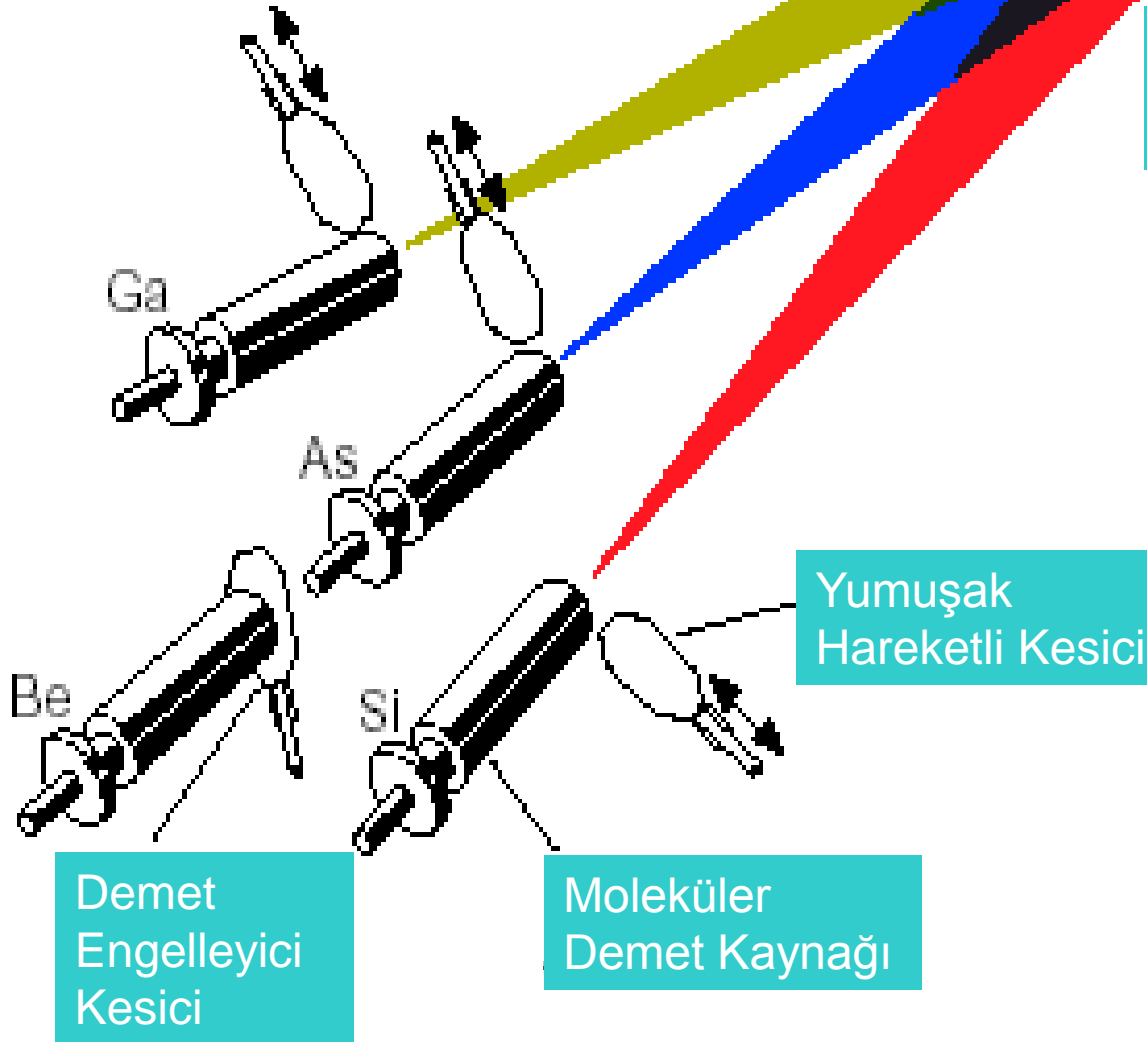
RHEED (Reflection High-Enerji Electron Diffraction), AES (Auger Elektron Spectroscopy), Elipsometry v.b iç ölçüm tekniklerine sahiptir.

UHV Odası

Başlangıç Basıncı 5×10^{-11} Torr

Taban-
Numune
Dönmesi

Taban-Numune
Isıtıcısı



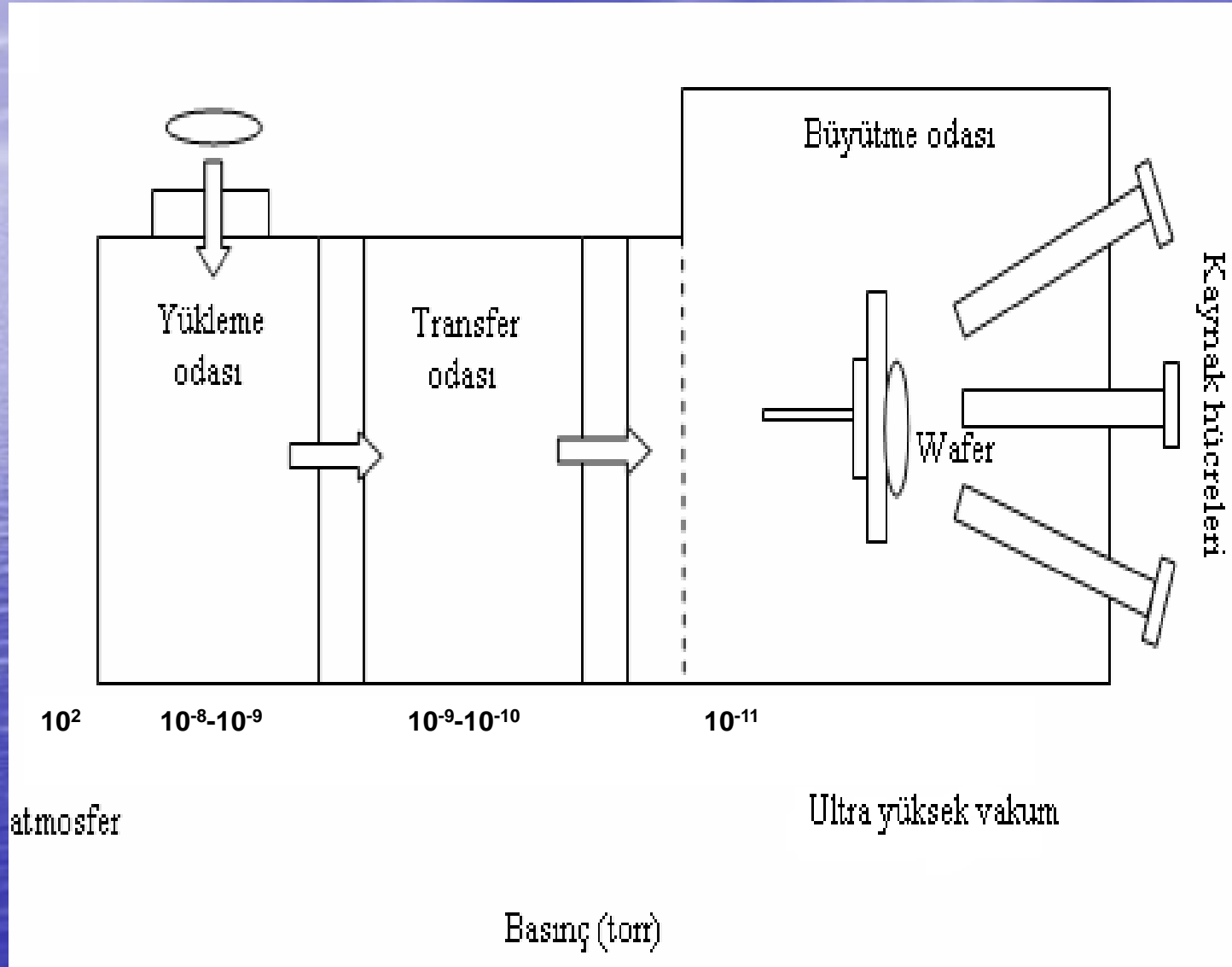
**Moleküler
Demet
Epitaksi'nin
Temeli**

Ultra yüksek vakumda kristal büyütme tekniği olarak da tarif edilebilen MBE sistemi yükleme/giriş, tampon/hazırlık ve büyütme olmak üzere üç ana vakum odasından oluşur. En önemli oda numunenin büyütüldüğü büyütme odasıdır. Tampon/hazırlık odası büyüme odasına girmeden önce numunenin hazırlanması ve saklanması için kullanılan odadır ve 10^{-10} mbar mertebesinde vakumlanabilmektedir.

Yükleme/giriş odası ise 10^{-8} mbar'lık vakum büyüklüğü ile diğer odaların vakum bütünlüğü korunurken numunenin vakum odasına getirilmesinde ve vakum odasından çıkarılmasında kullanılır. Aynı anda birden fazla numuneyi barındırabilecek bir kasete sahiptir.

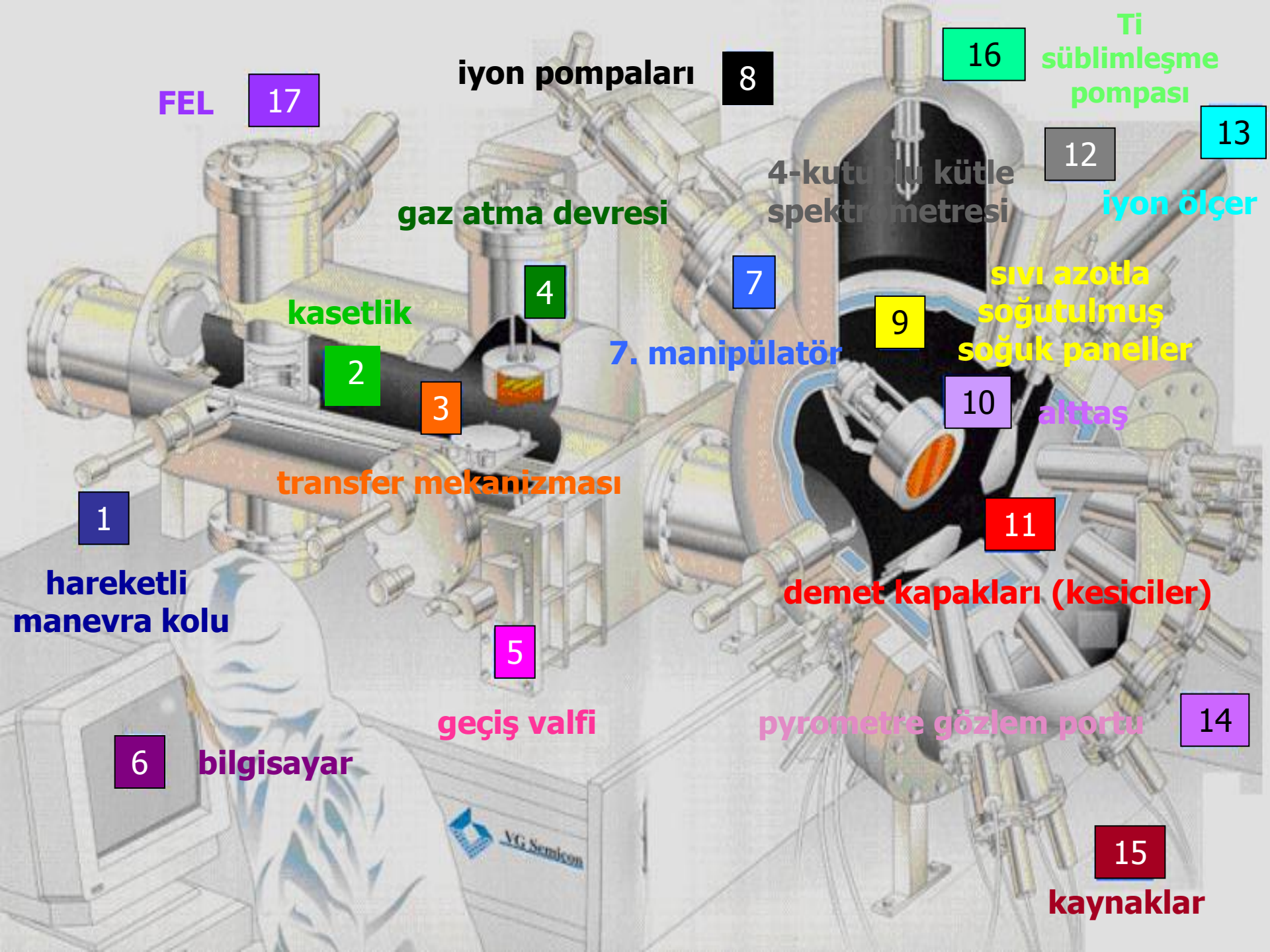
Tampon/Hazırlık/Transfer Odası: Numunenin hazırlanması ve saklanması için kullanılır. Numunenin su, yağ ve benzeri buharlaşabilen kirliliklerden ısıtılarak (450°C) ilk sistem içi temizliğin yapıldığı birimdir.

Büyütme Odası: Genel MBE sisteminin büyütme odasının ve bazı alt sistemleri Şekilde görülmektedir. Büyütme odası: numunenin büyütüldüğü yerdir. Taban numune, manyetik olarak bağlantılı bir transfer çubuğu ile büyütme odasındaki numune tutucuya/ısıtıcıya taşınır. Üretilen malzeme akısı elde edilecek ve birbirinden bağımsız olacak şekilde ısıtılır. Büyütme sırasında bu hücrelerden bilgisayarla kontrol edilen bir aralıktan belirli zamanlarda elementler vakum ortamındaki taban üzerine gönderilerek büyütme yapılır.



Ülkemizde ilk olarak gazi Üniversitesi Fizik Bölümünde kurulan katı-kaynaklı Moleküler Demet Epitaksi Sistemi





FEL

17

iyon pompaları

8

16

Ti
süblimleşme
pompası

12

13

gaz atma devresi

4-kutulu kütle
spektrometresi

iyon ölçer

kasetlik

4

7. manipulator

7

9

sıvı azotla
soğutulmuş
soğuk paneller

10

alttaş

transfer mekanizması

3

1

hareketli
manevra kolu

demet kapakları (kesiciler)

11

5

geçiş valfi

pyrometre gözlem portu

14

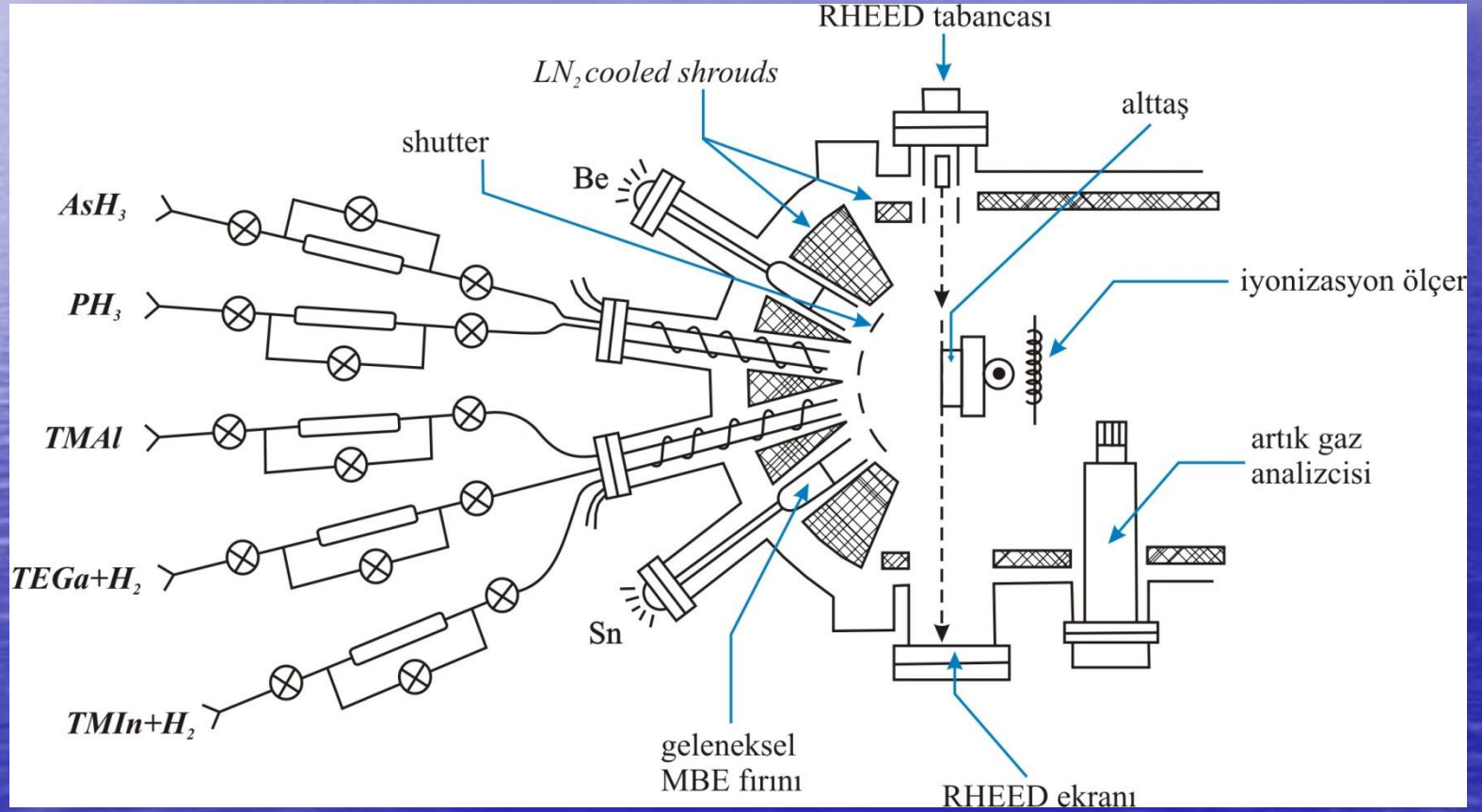
6

bilgisayar

15

kaynaklar

Gaz kaynaklı MBE



Yüzeyde düzgün bir tabak oluşturmak için düşük basınçta-yüksek vakum ortamında taban numune ısıtılıyor.

MBE'de çok düşük sıcaklıkta (450-600°C) kristal büyütülür. Bu sıcaklık alttaş sıcaklığıdır.

MBE Sistemi İçin Vakum Pompaları

Yükleme Odası	Hazırlık Odası	Birikim Odası
Turbo moleküler pompa	İyon pompa	Cryo pompa İyon pompa TSP pompa Turbo pompa

Kullanım Alanlarına Göre Vakum Büyüklükleri

Düşük Vakum ($760-10^{-3}$ Torr) :

İnce Dilim külçeleri
Yükleme birimleri
Sputtering
RIE (Reaktif ion etching)
Düşük basınç kimyasal buhar deposition (LPCVD)

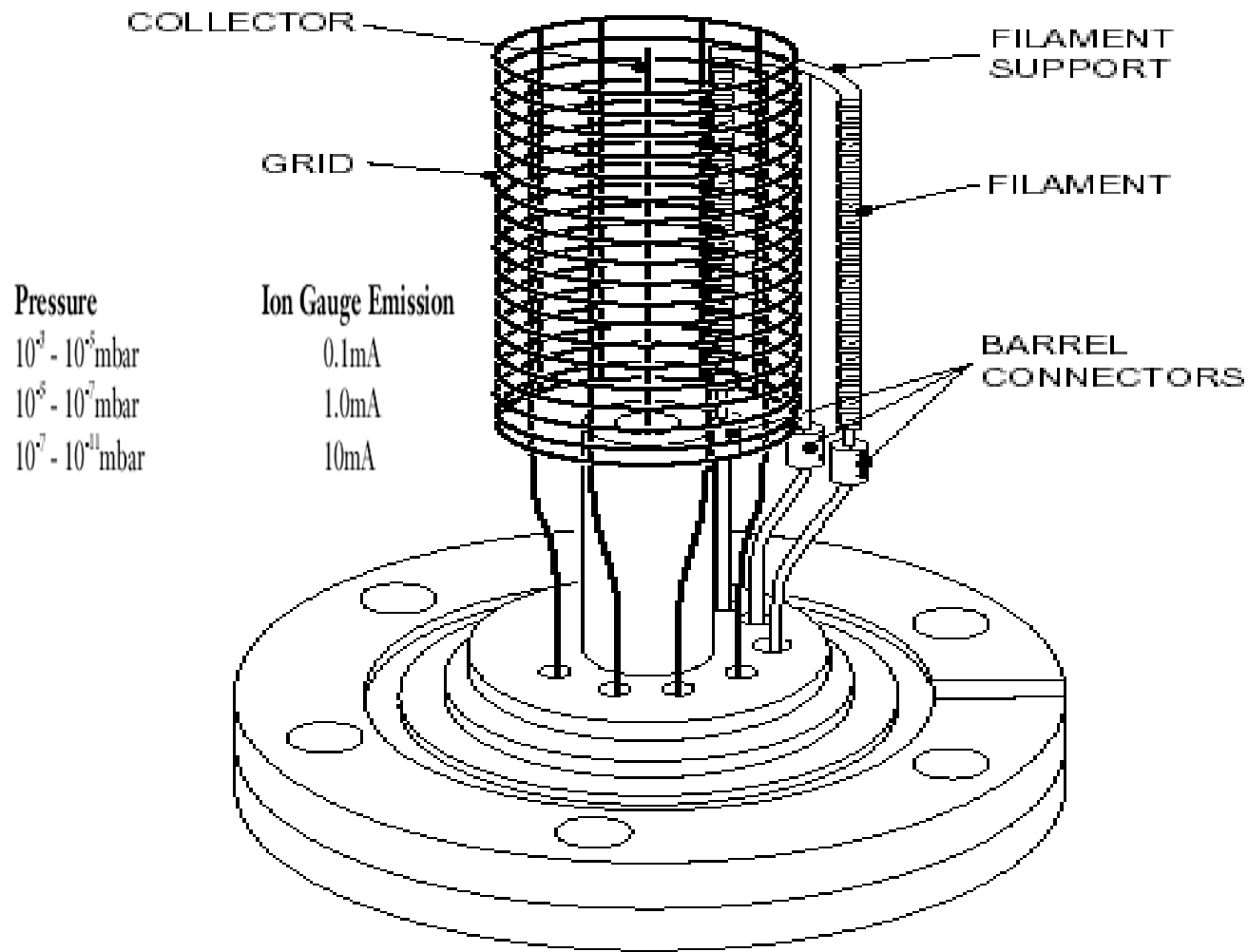
Yüksek Vakum ($10^{-3} -10^{-8}$ Torr) :

Buharlaştırma, iyon ekme

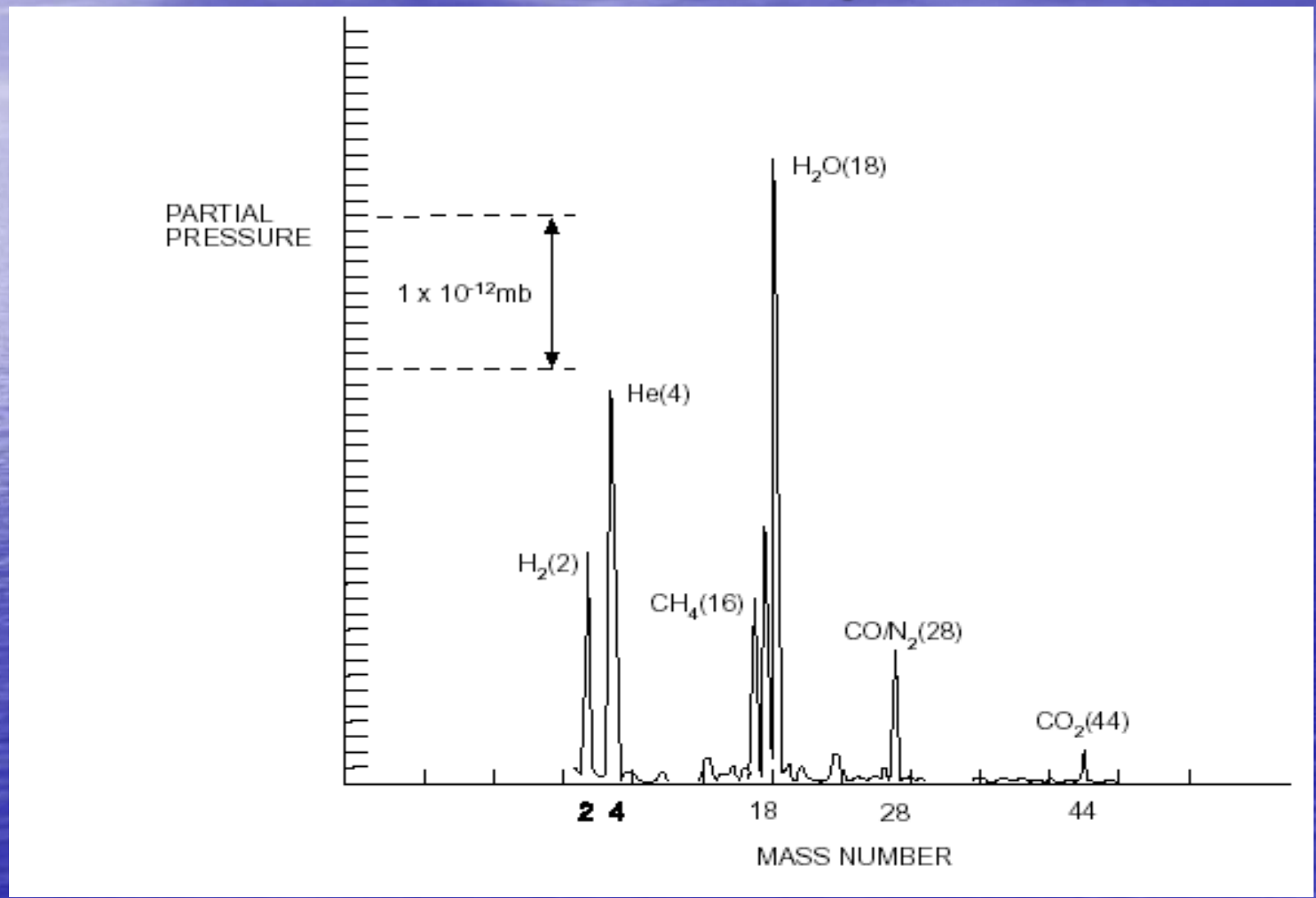
Ultra-Yüksek Vakum ($10^{-8}-10^{-12}$ Torr) :

Yüzey analizi
Moleküler demet epitaksi (MBE)
 $760 \text{ mmHg}=760 \text{ Torr}$ şeklindedir.

Vakum Ölçer-İyon Ayarı



Kalıntı Gaz Analiz Spektrumu



İnce Film Büyütmede Yüksek Vakum Şartları

Pa (10^{-7} mb) ise bu vakuma UHV (ultra-yüksek vakum) denir. MBE'nin temel karakteristiği kütle transferidir. UHV ortamında kütle transferi için iki önemli parametre vardır.

Vakum ortamına giren gaz moleküllerinin ortalama serbest yolu. Gaz moleküllerinin konsantrasyonu (birim hacimdeki molekül sayısı= n) Ortalama serbet yol, moleküller arası ardışık çarpışmalar için ortalama mesafedir. L ile gösterilir. Gazların kinetik teorisi ile yukarıda bahsedilen iki parametre belirlenir. Gazların kinetik teorisinin kabul ettiği dört tane şart vardır:

- ❖ Gaz molekülleri özdeş nokta yüklerden oluşur.
- ❖ Moleküller arasında bir etkileşme kuvveti mevcut değildir.
- ❖ Moleküllerin hız dağılımı Maxwell dağılımına uyar.
- ❖ Gaz izotropiktir (hareket yönü belli bir doğrultuya yönlendirilmiştir.)

GAZLARIN KİNETİK TEORİSİ

$$PV = RT = N_{av}kT \text{ (İdeal Gaz Kanunu)} \quad (1)$$

P , basınç; V , gazın 1 molünün hacmi; R , gaz sabiti 1.98 cal/mol.K veya 82 atm.cm³/mol.K ; T , kelvin cinsinden mutlak sıcaklık; N_{av} , avagadro sayısı 6.02×10²³ molekül/mol; k , Boltzman sabiti 1.38×10⁻²³ J/K veya 1.37×10⁻²² atm.cm²/K.

Gerçek gazlar ideale yakın olarak kabul edilebileceğinden ideal gaz kanunu çoğu vakum prensipleri için geçerlidir. Yukarıdaki denklemden birim hacimdeki molekül sayısı (n) yi hesaplayabiliriz.

$$n = \frac{N_{av}}{V} = \frac{P}{kT}$$

$$n = 7.25 \times 10^{16} \frac{P \text{ (pascal)}}{T} \text{ molekül / cm}^3$$

$\rho_d \Rightarrow$ gaz yoğunluğu

Moleküler ağırlık cinsinden gaz yoğunluğu konsantrasyona bağlı olarak,

$$\rho_d = \text{molekül ağırlığı} \times \left(\frac{P}{kT} \right) \quad (2)$$

şeklinde verilir. Gazların hızı sıcaklığa bağlıdır. Hız dağılımı **Maxwell-Boltzman** dağılımına uyacağından, bu dağılım yasasının verilen bir v hızındaki durum ifadesi

$$\frac{1}{n} \frac{dn}{dv} = f_v = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2kT} \right)^{3/2} \cdot v^2 \cdot e^{\left(-\frac{mv^2}{2kT} \right)} \quad (3)$$

Burada m , bir molekülün kütlesidir. Eğer hacim içinde n tane molekül varsa, dn tane molekülün hızları v ile $v+dv$, ($v \Rightarrow v+dv$) arasında bir hıza sahip olacaktır. Böylece ortalama hız,

$$v_{av} = \frac{\int_0^{\infty} v f_v dv}{\int_0^{\infty} f_v dv}$$

(3) Denkleminde yerine yazılırsa,

$$v_{av} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2kT}{m}}$$

Ardışık çarpışmalar arası geçen süre biliniyorsa ortalama serbest yol hesaplanır. Vakum tekniği için önemli bir parametre de moleküllerin varma (ulaşma) oranıdır. Bu, birim zamanda birim alan üzerine ne kadar varır demektir. Bu parametreyi hesaplayabilmek için x doğrultusundaki moleküllerin hızı yerine ilk önce dağılım fonksiyonunu dikkate alırız.

(3) denklemden,

$$\frac{1}{n} \frac{dn}{dv} = f_{v_x} = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} \cdot v_x^2 \cdot e^{\left(-\frac{mv_x^2}{2kT} \right)}$$

⇒ Tek boyutta olduğu için gerekli üs $\frac{1}{2}$ olarak alınmıştır.

⇒ Moleküllerin varma oranı, ϕ ,

$$\phi = \int_0^{\infty} v_x dn_x \quad \Rightarrow \quad \phi = n \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}}$$

Gaz basıncı (P) ve moleküllerin varma oranı (ϕ) arasındaki ilişki (2) denklemini kullanılarak elde edilebilir:

$$\phi = P \frac{1}{\sqrt{2\pi mk}}$$

$$\phi = 2.64 \times 10^{20} \left(\frac{P \text{ (pascal)}}{\sqrt{MT}} \right) \text{atom} / \text{cm}^2 \text{s}$$

Burada m : bir molekülün kg cinsinden kütlesi, M : moleküler ağırlıktır.

Örnek: $T=300\text{K}$, $P=10^4$ Pa ise oksijen için varma oranının $\phi=2.7 \times 10^{14}$ molekül/ cm^2s olduğunu gösteriniz.

Çözüm: $\text{O}_2 \Rightarrow M=32$

$$\phi = 2.64 \times 10^{20} \frac{P}{\sqrt{MT}}$$

$$\phi = 2.64 \times 10^{20} \frac{10^{-4}}{\sqrt{32 \cdot 300}} = \frac{2.64 \times 10^{16}}{97.98} = 2.7 \times 10^{14} \text{molekül} / \text{cm}^2 \text{s}$$

Örnek: $T=300\text{K}$ 'de O_2 nin çapı $r=3.64 \text{ \AA}$ ve birim alandaki moleküllerin sayısı $N_s=7.54 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ dir. $1, 10^{-4}, 10^{-8} \text{ Pa}$ 'lık basınçlarda O_2 nin bir monotabaka oluşturmaları için geçen süreyi bulunuz.

Çözüm: Gelen bütün moleküllerin %100'ünün yapıştığını kabul ediyoruz.
(yapışma olasılığı = sticking probability)

$$\phi = 2.64 \times 10^{20} \frac{P}{\sqrt{MT}} \Rightarrow t = \frac{N_s}{\phi} = \frac{N_s \sqrt{MT}}{2.64 \times 10^{20} P}$$

$$P=1 \text{ Pa için, } t = \frac{7.54 \times 10^{14} \sqrt{32 \cdot 300}}{2.64 \times 10^{20} \cdot 1} = 2.8 \times 10^{-2} \text{ s} \Rightarrow t = 28 \text{ ms}$$

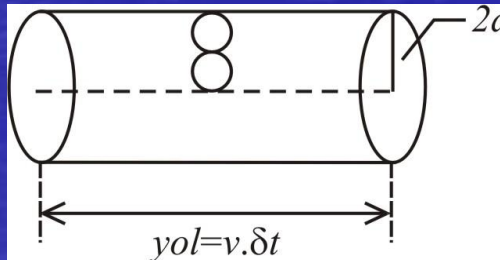
$$P=10^{-4} \text{ Pa için, } t = \frac{7.54 \times 10^{14} \sqrt{32 \cdot 300}}{2.64 \times 10^{20} \cdot 10^{-4}} \Rightarrow t = 2.8 \text{ s}$$

$$P=10^{-8} \text{ Pa için, } t = \frac{7.54 \times 10^{14} \sqrt{32 \cdot 300}}{2.64 \times 10^{20} \cdot 10^{-8}} \Rightarrow t = 2.8 \times 10^4 \text{ s veya } t = 7.7 \text{ saat}$$

N_s , 1 cm^2 ye 3.64 Å^2 çapındaki moleküllerden ne kadar yerleştiğini gösterir. Epitaxial tabakaların konitaminasyon tabakaların (daha temiz daha kaliteli) olabilmesi için MBE sisteminde vakumun UHV ($\sim 10^{-8}$ pascal) şartlarında tutulması zorunludur.

Moleküller hareketleri süresince diğer moleküllerle çarpışacaklardır. Ortalama serbest yol çarpışan tüm moleküller üzerinden toplanmalıdır. Bu hesaplama basit çarpışma teorisinden türetilebilir: Yarıçapı d ve hızı v olan bir molekül, δt zamanında $v \cdot \delta t$ lik bir mesafe içerisinde diğeri ile çarpışır. Çarpışan moleküllerle çarpışmayan moleküller arasındaki uzaklık $2d$ kadardır. Moleküllerin $2d$ yarıçaplı silindir içinde çarpışma yapmaksızın hareket ettikleri düşünülürse, silindir hacmi,

$$\delta V = \frac{\pi}{4} (2d)^2 \cdot v \cdot \delta t$$



n (molekül/cm³) tane molekül varsa hacim içerisindeki molekül sayısı $1/n$ cm³ olur. Böylece hacim $1/n$ ye gidecektir:

$$\tau = \delta t \quad \frac{1}{n} = \pi d^2 v \tau$$

$$\text{Ortalama serbest yol} = L = v \tau = \frac{1}{\pi n d^2} = \frac{kT}{\pi P d^2}$$

$$L = \frac{kT}{\sqrt{2} \pi P d^2} \Rightarrow L = 3.11 \times 10^{-24} \frac{T}{P d^2}$$

$$d = 3.64 \text{ \AA} \quad L = \frac{0.66}{P \text{ (pascal)}} \text{ cm (oda sıcaklığı)}$$

$$P = 10^{-8} \text{ Pa} \quad L = 660 \text{ km}$$

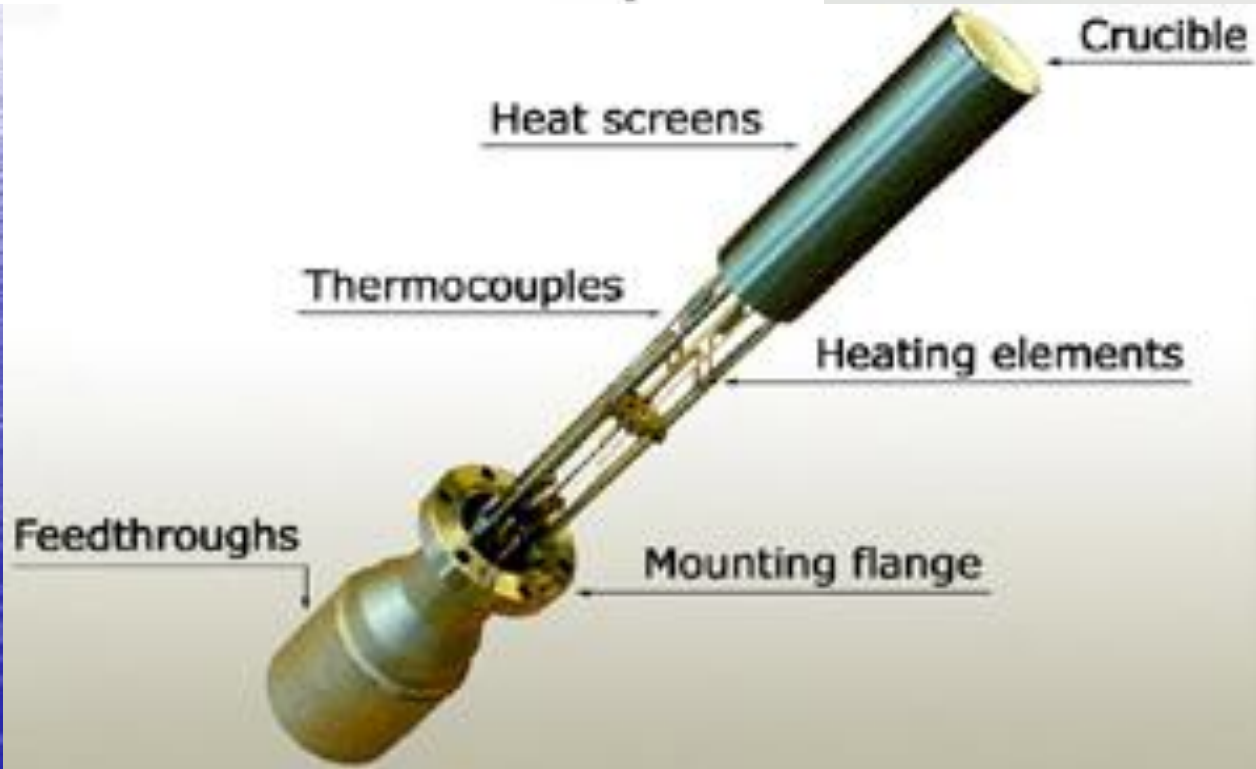
\Rightarrow Buradaki bütün nicelikler SI birim sistemindedir.

Kalıntı Gaz Birikimi

- $t(b) \Rightarrow$ Vakum reaktörü içindeki kalıntı gazlardan alttaş yüzeyine birikim yoluyla oluşan bir monotabaka için gerekli süre,
- $t(v) \Rightarrow$ moleküler demetlerden bir monotabaka büyütülmesi için gerekli süre olmak üzere

$$t_1(b) = 10^{-5} t_1(v)$$

- Kalıntı gazların yüzeyi kaplaması için geçen süre 10^5 s ise moleküler demet için bu süre 1 s dir: Kalıntı gazlardan tabaka büyüme imkanı yoktur.
- Moleküler demet yokluğunda: kaynak kesicilerin kapanma sürelerinin kısa olması kalıntı gazların etkisini azaltacaktır.



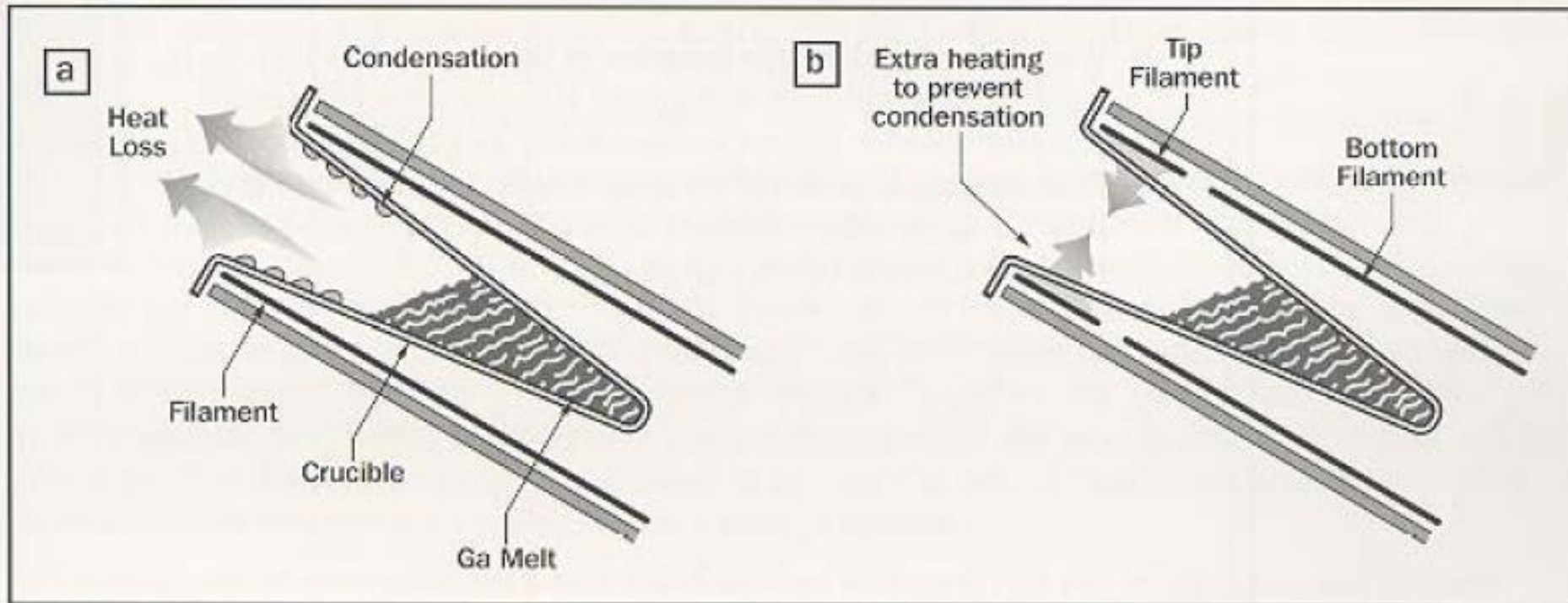


Figure Two: Principle of operation, Dual Filament Cell. In the conventional cell (a), a single filament uniformly heats the entire length of the crucible. The crucible orifice area is cooled by radiated heat loss, causing the evaporant to condense and form droplets. In the Dual Filament Cell (b), the crucible orifice area is independently heated by the second filament, to create a "hot-lip", thereby eliminating condensation and reducing oval defect densities.

Atomik veya Moleküler Demet Kaynakları: İdeal Kaynak Hücresi

- Bu hücreler temel olarak içerisindeki saf elementlerin yüksek sıcaklıklara kadar ısıtılmasıyla moleküler/atomik demet üreteçleridir.
- Esasında moleküler demet oluşumu, reaksiyon dinamikleri ve termodinamiklerini içine alan buharlaşma teorisiyle son derece yakından ilişkilidir. Temel ölçek (ilk belirlenmesi gereken) vakum içindeki buharlaşma oranının incelenmesidir. Vakum sistemi içerisinde hidrostatik basınç (P) olduğu kabul edilir ve P_{eq} sistemdeki denge basıncı olarak alınır. Her zaman hidrostatik basınç "0" olmayabilir. A_e yüzey alanı dolayısıyla bu yüzeyden dt süresinde buharlaşan molekül sayısı dN_e

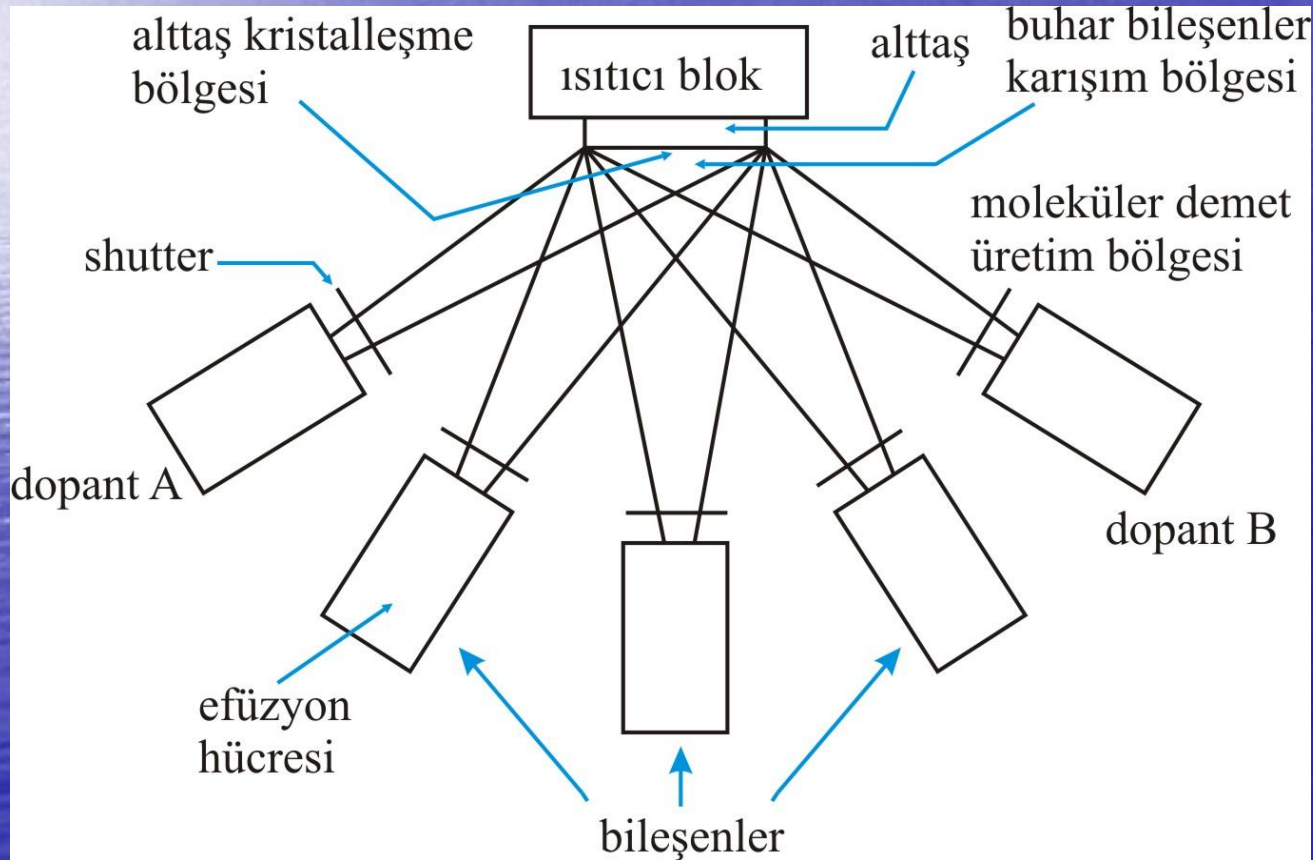
$$\frac{d N_e}{A_e dt} = (P_{eq} - P) \sqrt{\frac{N_A}{2\pi M k_B T}} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

- M : Buharlaşan türün molekül ağırlığı
- a_v : buharlaşma katsayısı
- Buharlaşma oranı,

$$\frac{dN_e}{A_e dt} = a_v (P_{eq} - P) \sqrt{\frac{N_A}{2\pi M k_B T}}$$

(Hertz-Knudsen Denklemi)

MBE Vakum Odasındaki Temel Fiziksel Olaylar



1. Bölge:
Moleküler demetin oluşturulma bölgesi

2. Bölge:
Farklı kaynaklardan demet buharlarının karıştığı bölge

3. Bölge:
Kristalin yüzeyi bölgesi. Burada kristalleşme süreci yer alır.

Termal Kabul Edilme

- Yarıiletken bileşimlerin MBE'de gerekli olan akı (efüzyon hücresinden çıkan madde miktarı) 10^{18} ile 10^{20} atom/m²s arasındadır.
- Alttaş üzerine varan atomlar onların sıcaklıkları ile orantılı veya sıcaklıklarına uygun bir enerji dağılımına sahip olacaklardır. MBE sisteminde bu sıcaklık T_i sıcaklığıdır. Buna hücre sıcaklığı denir. T_s ise alttaş sıcaklığı olarak adlandırılır. Genellikle $T_s < T_i$ dir.
- Atomlar alttaş yüzeyine vardıktan sonra anında buharlaşabilir ve enerjisi dolayısıyla sıcaklığı T_e olur. (başlangıçtaki sıcaklık T_i iken) yüzeye varan atomlar alttaş'ın yüzey atomları arasında termodinamik dengeye ulaşınca kadar enerji değişimi meydana gelecektir.
- Termal kabul edilme katsayısı,

$$a = \frac{T_i - T_e}{T_i - T_s}$$

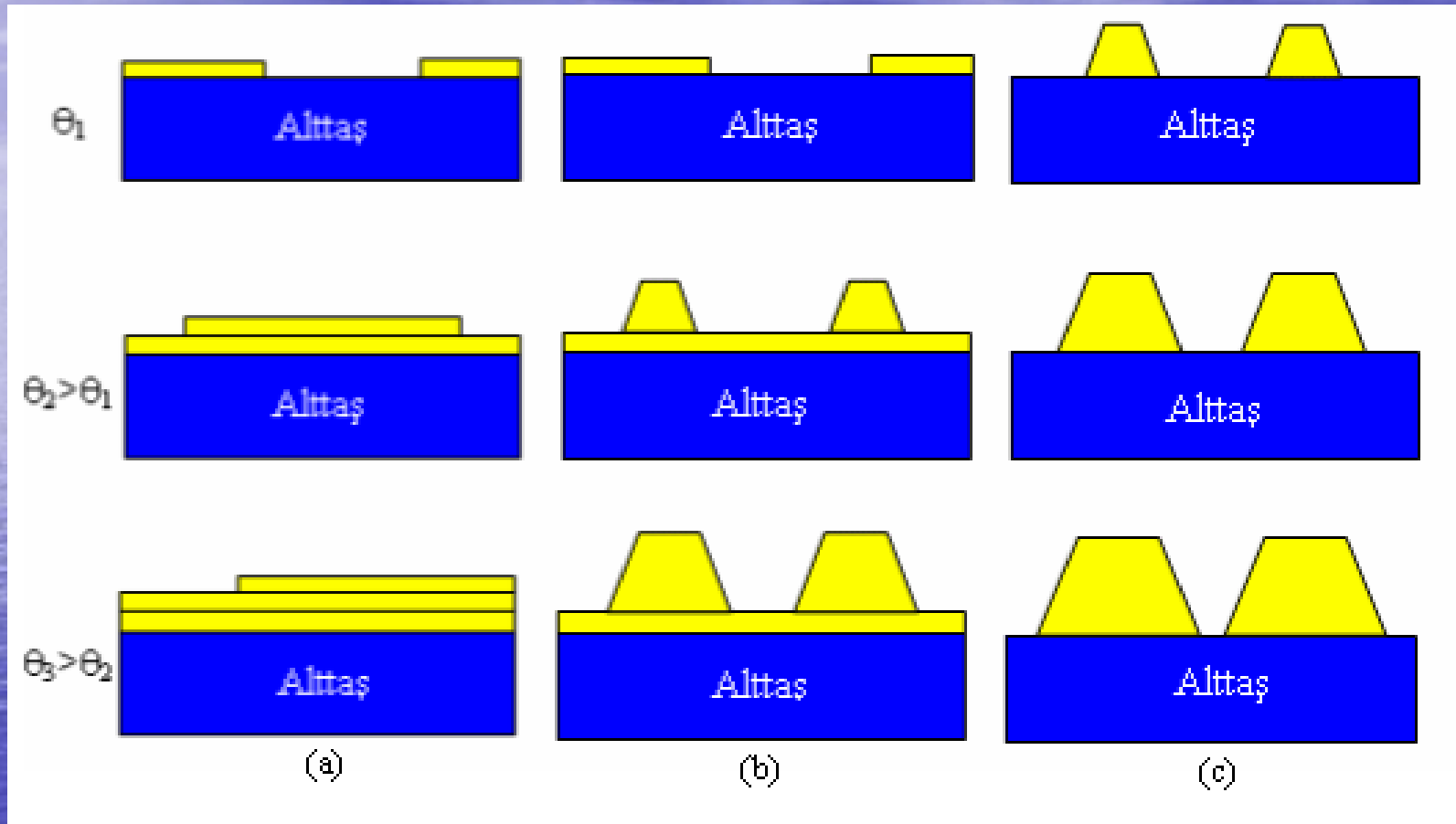
ile tanımlanır.

- $T_e = T_s \Rightarrow a=1$ olur olur. Bu gelen atomun kolaylıkla yerleşeceği anlamına gelir. MBE'de $T_s < T_i$ dir. Dolayısıyla $T_e < T_i$ olur. Fakat $T_e < T_s$ olamaz.

MBE' de Büyüme Modları

- Bir madde diğer bir madde üstüne epitaksiyel büyütülürken, üç olası durum vardır. Birincisi, Frank–Van der Merve; alttaş kristaline iki boyutlu katmanın başarılı bir şekilde basitçe eklenmesi işlemidir.
- İkincisi, Volmer Weber; ara yüzey alanını düşürerek yüzey alanının artırmayla serbest enerjisini düşürebilen, eklenen maddenin camın üzerine düşen su damlalarına benzer şekilde bir adanın oluşması şeklinde oluşturulabilir.
- Üçüncü durum ise Stranski–Krastanov büyütme modu denir. Bu durumda eklenen maddenin örgü boşluğu alttaşın uyuşmazlığıyla yükselebilir.

Kristal Büyüme Modları



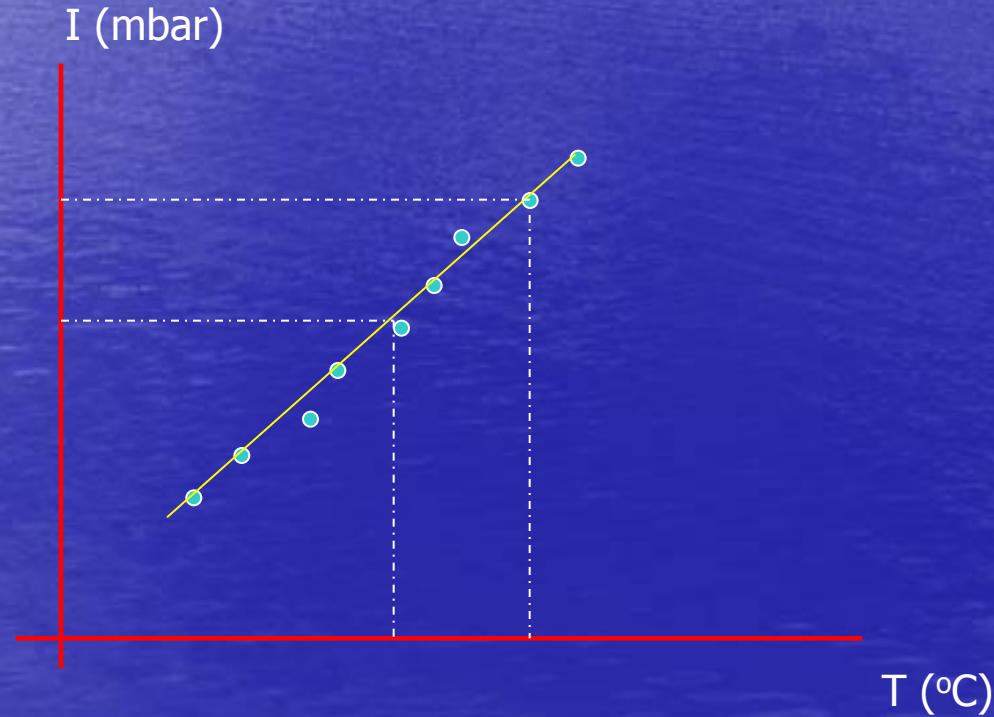
(a)
Frank-van-der-Merwe
büyütme modu

(b)
Stranski-Krastanov
büyütme modu












(c)
Volmer-Weber
büyütme modu

Akı Kalibrasyonu

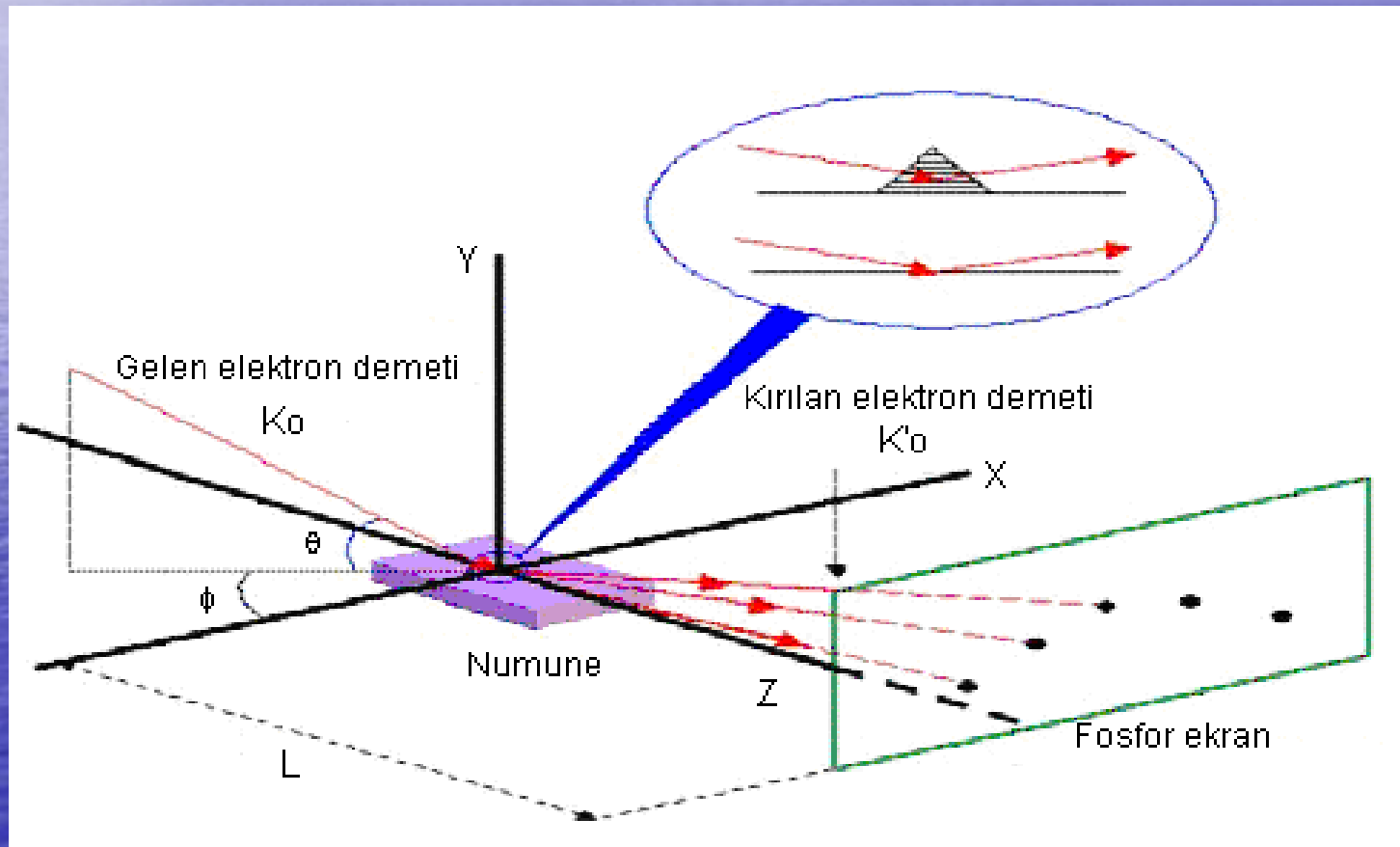
- Herhangi bir hücrenin (kaynak malzemenin) belirli bir sıcaklıktaki demet akısının belirlenmesi: Hücre sıcaklığına göre demet akısı iyon ölçer vasıtasıyla belirlenerek, sıcaklığa karşı grafiği çizilerek; istenilen herhangi bir akı değerinin sıcaklık değerine göre belirlenmesi sağlanır.



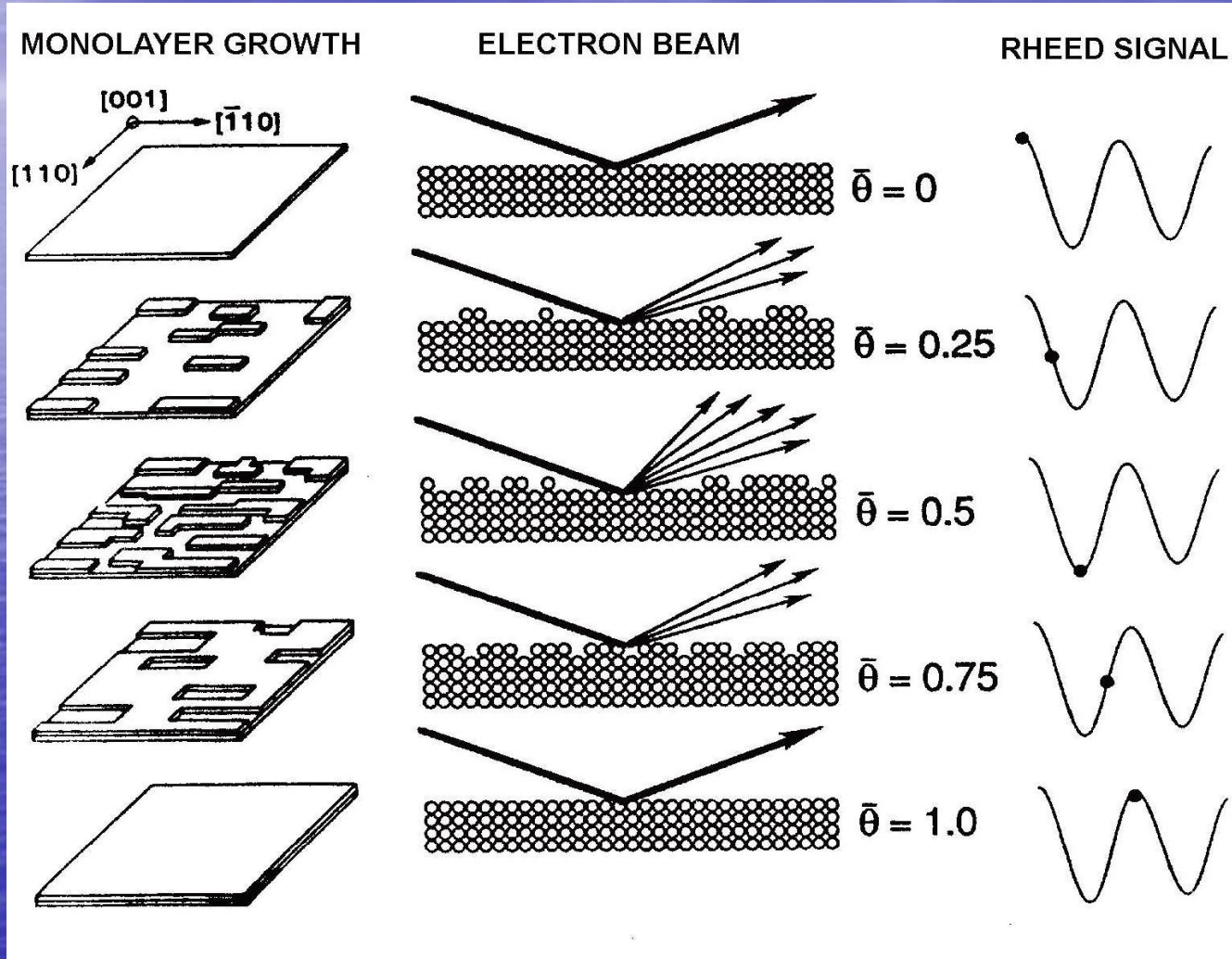
Sıcaklık Kontrol Paneli

VG Semicon Temperature Monitor							
Substrate Rotation: OFF		MIG Position: OUT		Flux: 24.200 nA			
Name	State	Measured	Temperature (°C)		Ramp	Power (%)	
			Setpoint	R.Point		Actual	Max
Substrate		500.0	500.0			24.6	50.0
Silicon		599.8	599.9			8.0	80.0
Indium		600.0	600.0			7.5	50.0
As_Sublim.		9999.0↑	0.0			0.0	50.0
Gallium1		600.1	599.9			12.9	50.0
Gallium2		600.0	599.8			10.5	50.0
Gallium3		599.9	599.8			11.8	50.0
As_Cracker		9999.0↑	0.0			0.0	50.0
Aluminum1		600.1	599.9			9.1	50.0
Aluminum2		600.1	599.9			7.8	50.0
Beryllium		600.0	599.9			6.0	50.0
Outgas		449.9	450.0			52.0	75.0

RHEED



RHEED SALINIMLARI

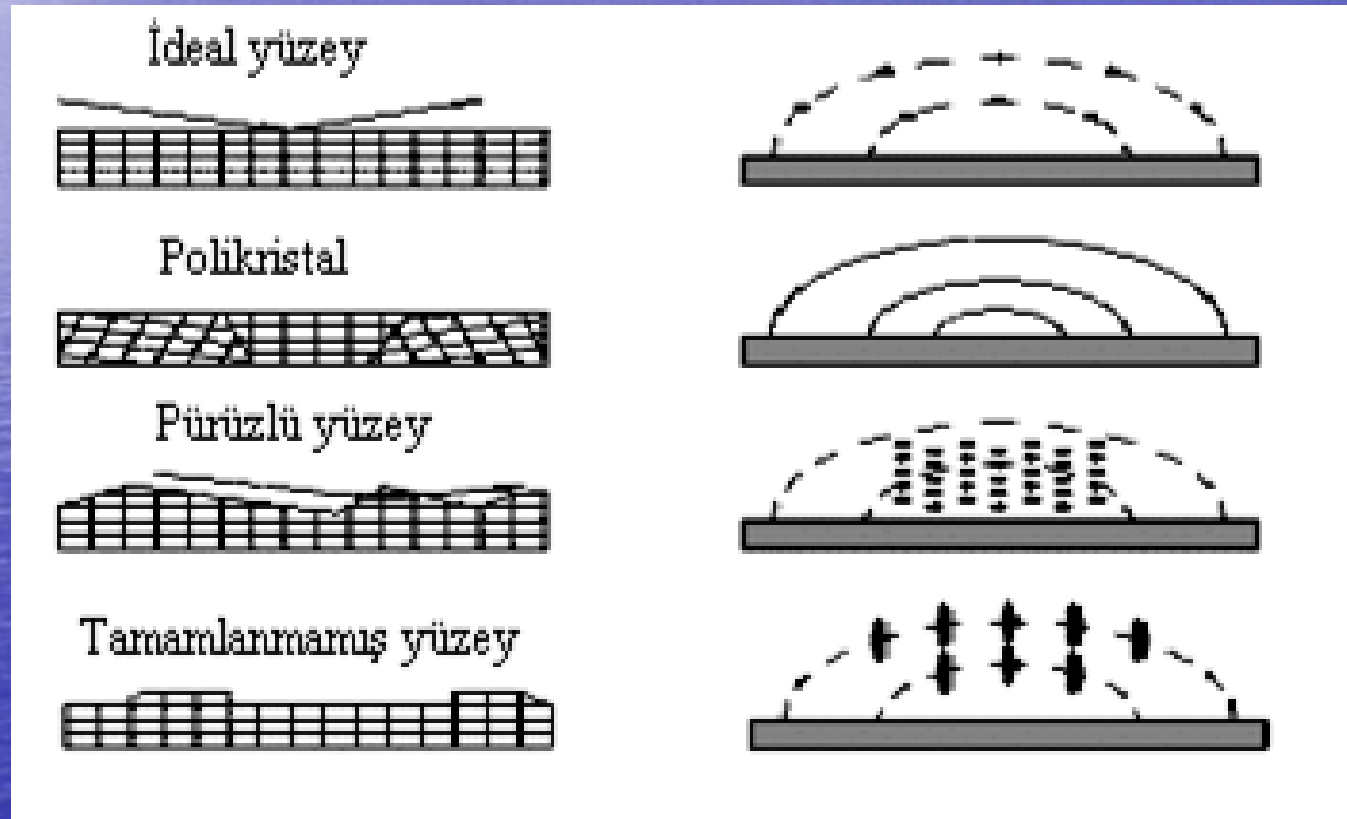


RHEED

RHEED şiddet salınımları MBE' deki büyütme oranlarının hassas, hızlı ve direkt ölçümünde kullanılabilir. Büyütme pürüzsüz bir GaAs yüzey üzerine başlatıldığı zaman, özellikle düzgün yansımalarda RHEED desenin şiddeti salınım yapmaya başlar. Salınım frekansı monotabaka büyüme oranına karşılık gelir. Burada bir monotabaka, As ve Ga atomlarının tam bir tabakasının kalınlığıdır.

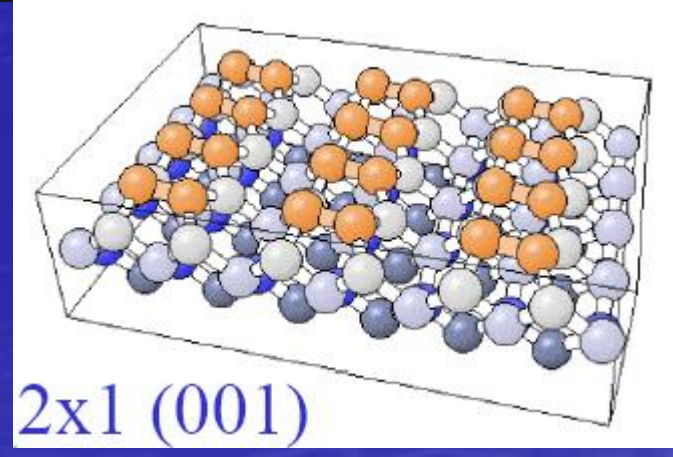
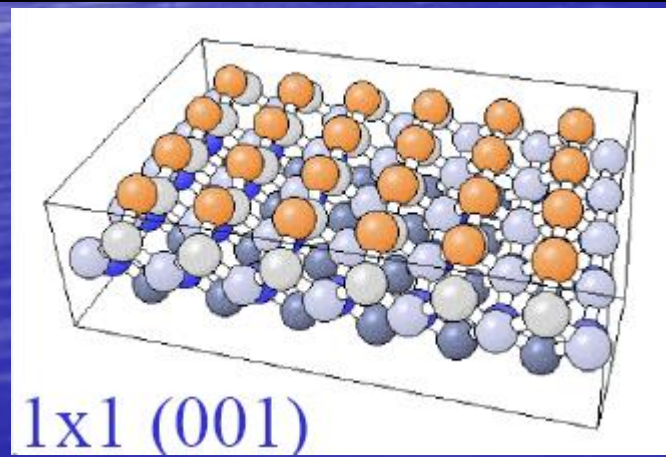
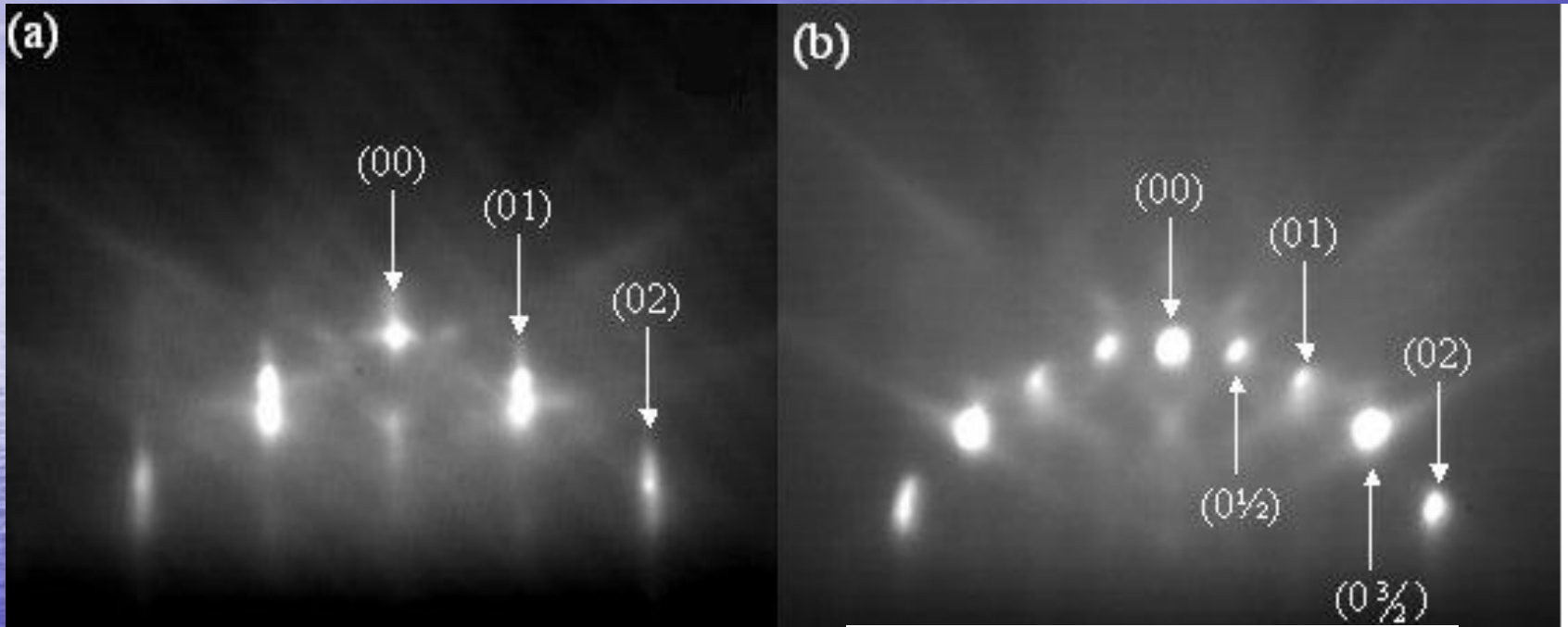
Bu salınımlar tabaka tabaka büyüme modunu açıklayabilir. Pürüzsüz ve düzgün noktası aydınlık (parlak) olan tanecikli bir tabaka büyütülmeye başladığında yüzey üzerinde adacıklar oluşur ve düzgün nokta kaybolur. Tabaka büyütmesi bittiği zaman, adalar düz bir tabakanın içine doğru birleşir ve düzgün nokta şiddeti artar. Düzgün nokta şiddetinin salınımı, saçılmayı değiştiren tabakanın pürüzlülük değişimini gösterir.

Yüzey Morfolojisi-RHEED



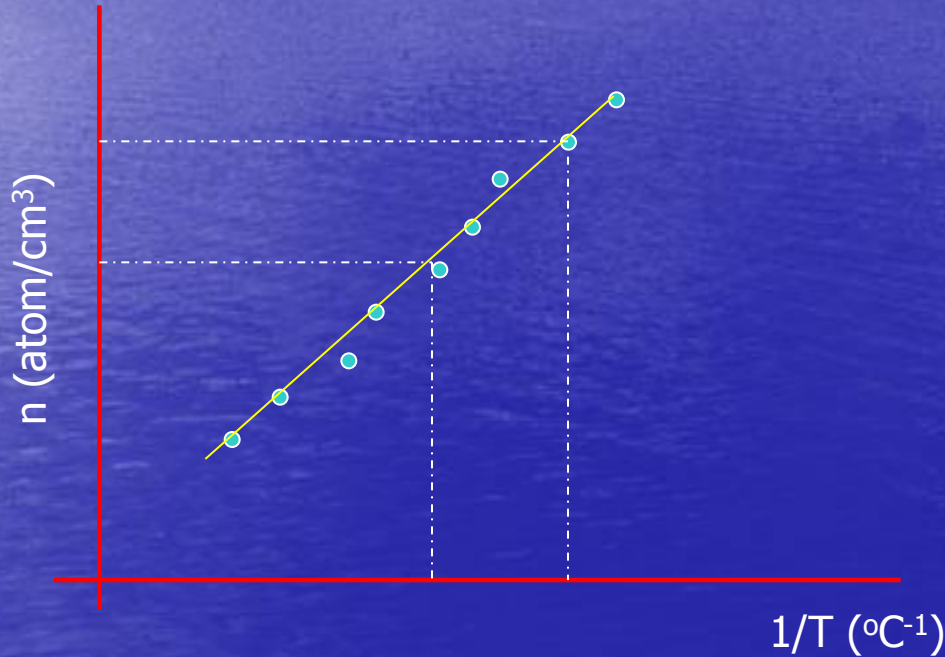
RHEED Desenleri

Epitaksiyel büyüme sırasındaki RHEED deseni (a) Si(100)-1x1, (b) Si(100)-2x1



Katkı Kalibrasyonu

- Malzemeye yapılan katkının (n veya p) yoğunluğunun belirlenmesi:
- Herbir katkı için en az üç adet numune SI-taban üzerine büyütülür .
- Her biri için taşıyıcı yoğunluğu belirlenir ve hücre sıcaklığına göre çizilir.



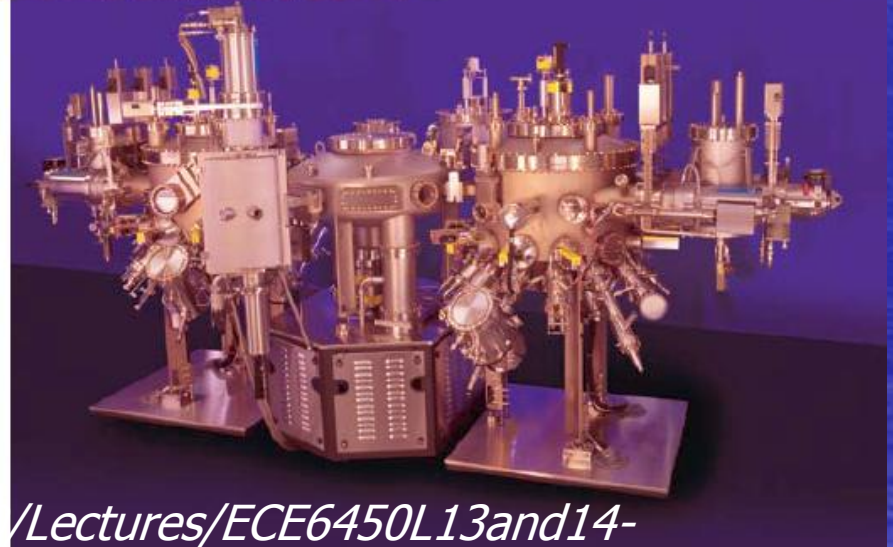
- Herhangi bir büyütme için hücre sıcaklığı belirlenerek gereken katkı yoğunluğu sağlanmış olur.

Alařım Oranının Belirlenmesi

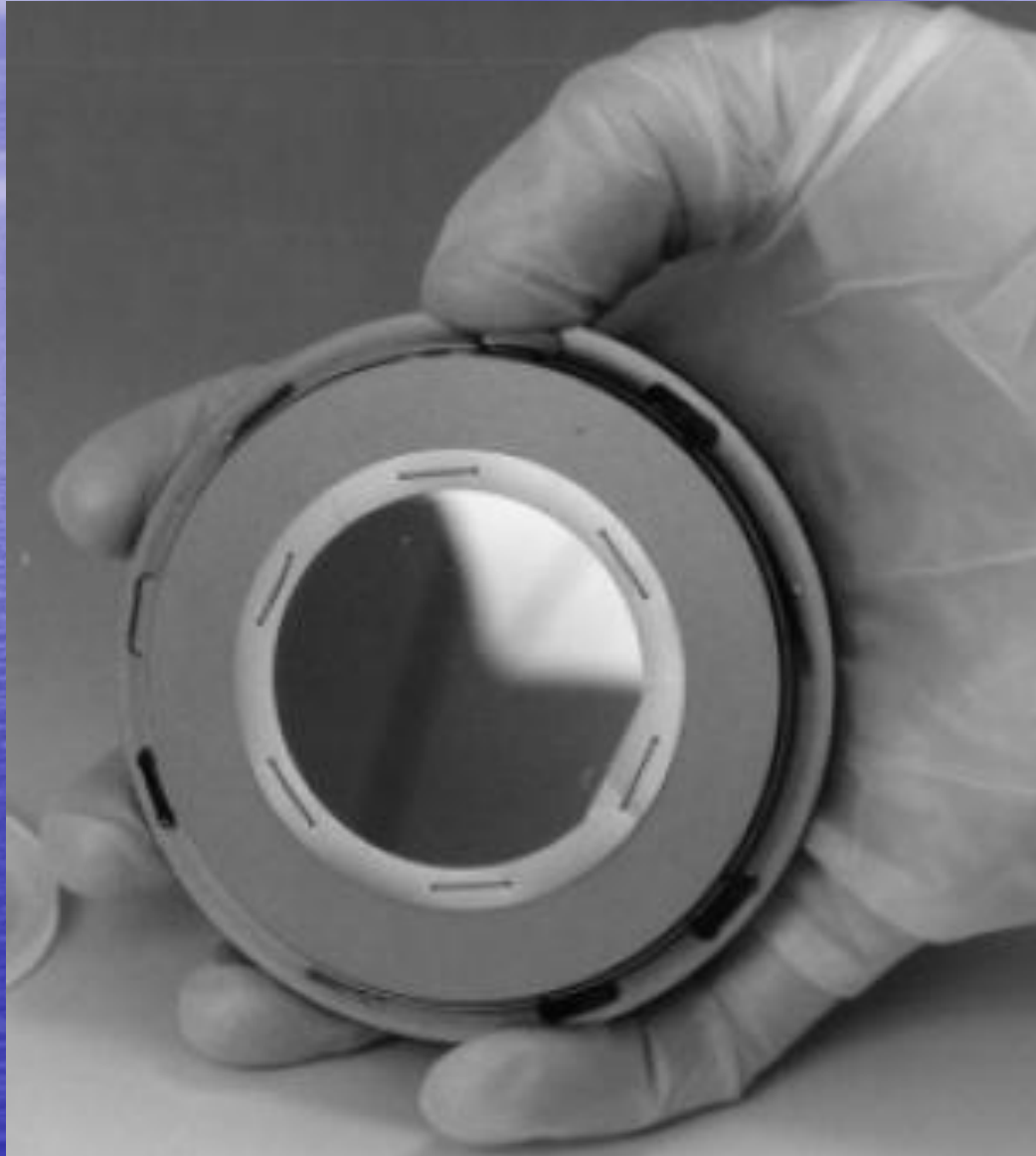
- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alařımındaki x yüzde deęerinin belirlenmesi malzemenin elektrik ve optik özellikleri açısından önemlidir:
- GaAs için büyüme oranı $2.78\text{\AA}/\text{s}$ olarak RHEED kullanılarak belirlenir.
- İlk olarak herhangi bir $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ numune $I(\text{Al}_1)$ akısı için büyütülerek XRD analizinden $x=x_1$ deęeri ve tabaka kalınlığı bulunur. Kalınlık deęerinden bu malzeme için büyüme oranı (GR_1) hesaplanabilir.
- Hedeflenen alařım oranı için büyüme oranı (GR_2) belirlenir:

$$x = \frac{\text{GR}(\text{AlAs})}{\text{GR}(\text{AlAs}) + \text{GR}(\text{GaAs})}$$

- Yeni x deęeri için akı:
$$I(\text{Al}_2) = \frac{I(\text{Al}_1) * \text{GR}_2}{\text{GR}_1}$$



Images from
<http://users.ece.gatech.edu/~alan/ECE645/Lectures/ECE6450L13and14-CVD%20and%20Epitaxy.pdf>



AlGaAs Çoklu Kuantum Kuyusunun Büyütme Şartları

Alttaş:

- Epi-hazır SI-GaAs(100),
- İlk gaz temizliği 400 °C'de 2 saat,
- Oksit temizliği 590 °C

Büyüme Şartları:

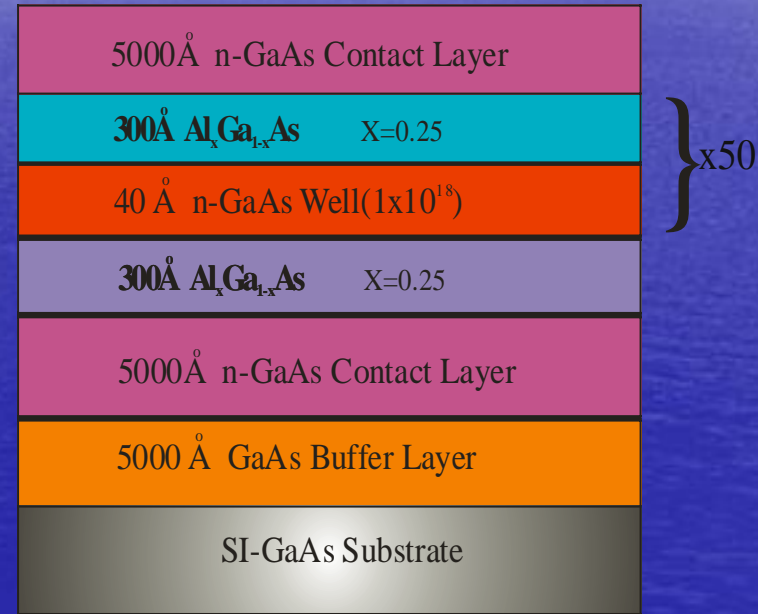
- Alttaş sıcaklığı:
tampon tabaka için 580 °C,
epitabakalar için 560 °C
- Arsenik: As₂ (Kırma hücresi) T=950 °C



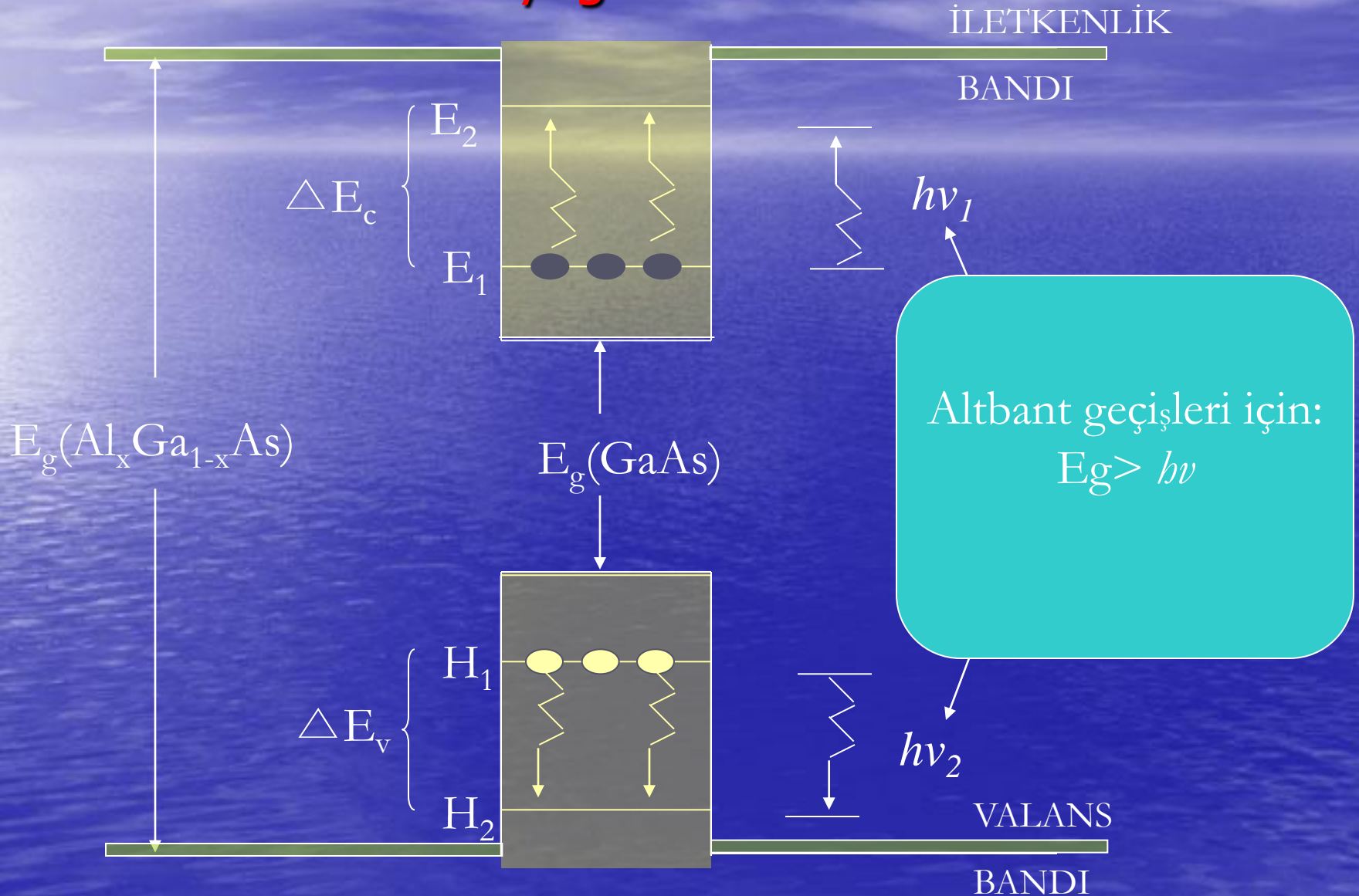
Büyütme Şartları

Büyüme Oranları (GR)

- Tampon ve kontak tabakalar için 2.78 Å/s ,
- GaAs QW için 1.09 Å/s ,
- AlGaAs engel için 0.46 Å/s ,
- V/III akı oranı: tampon ve kontak tabakalar için 4, diğer tabakalar için 7.
- Katkı: Si; kuyu ve kontak tabakalar için $n \sim 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$



AlGaAs Kuantum Kuyusunun Şematik Bant Diyagramı

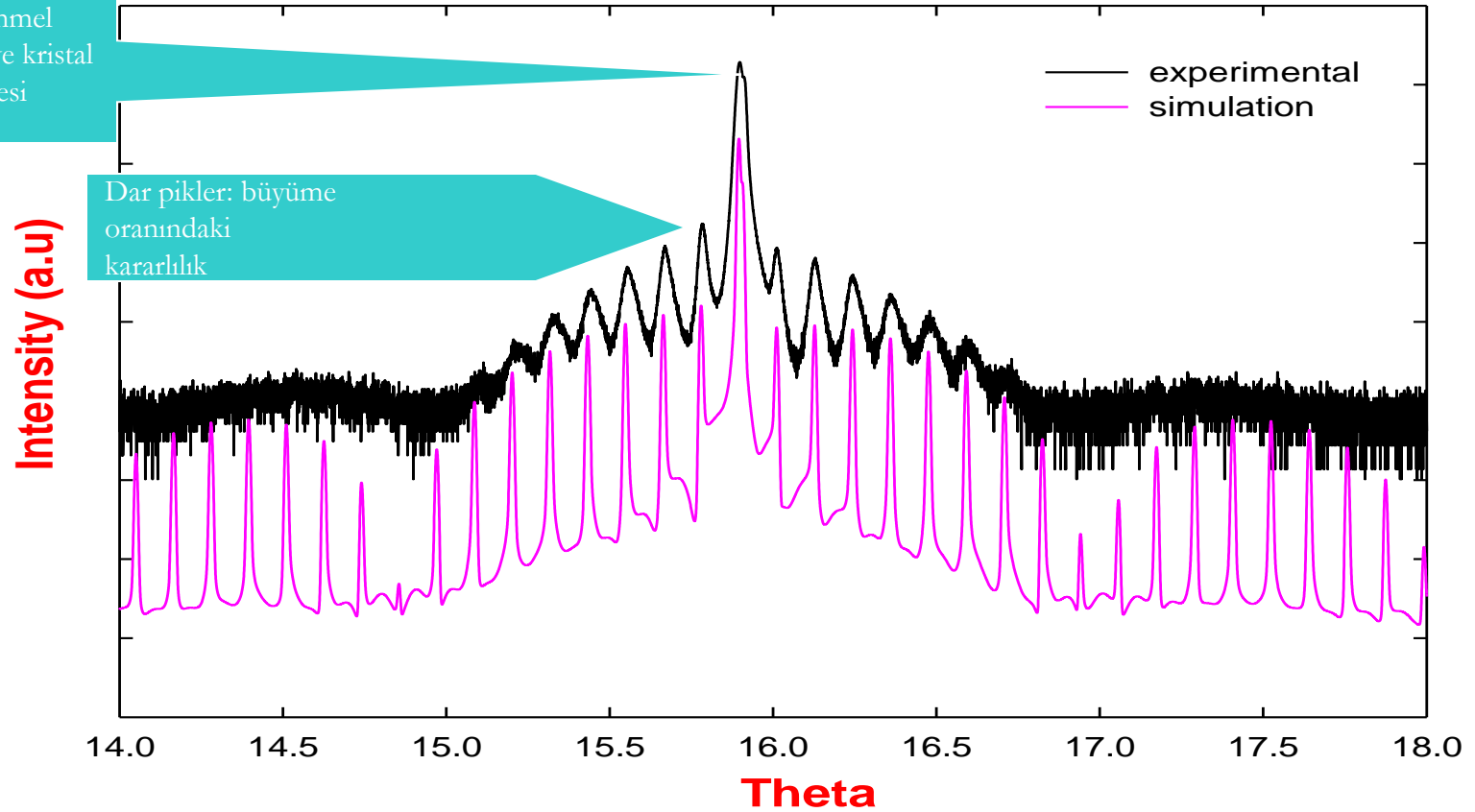


HRXRD Analizleri

- Cihaz: Bruker D8-Discovery
- Kaynak: Cu (K_α)
- Ge monokromatör (dört yansıma kanallı 220 yönelimli Ge kristal)
- Simulasyon: LEPTOS 1.7

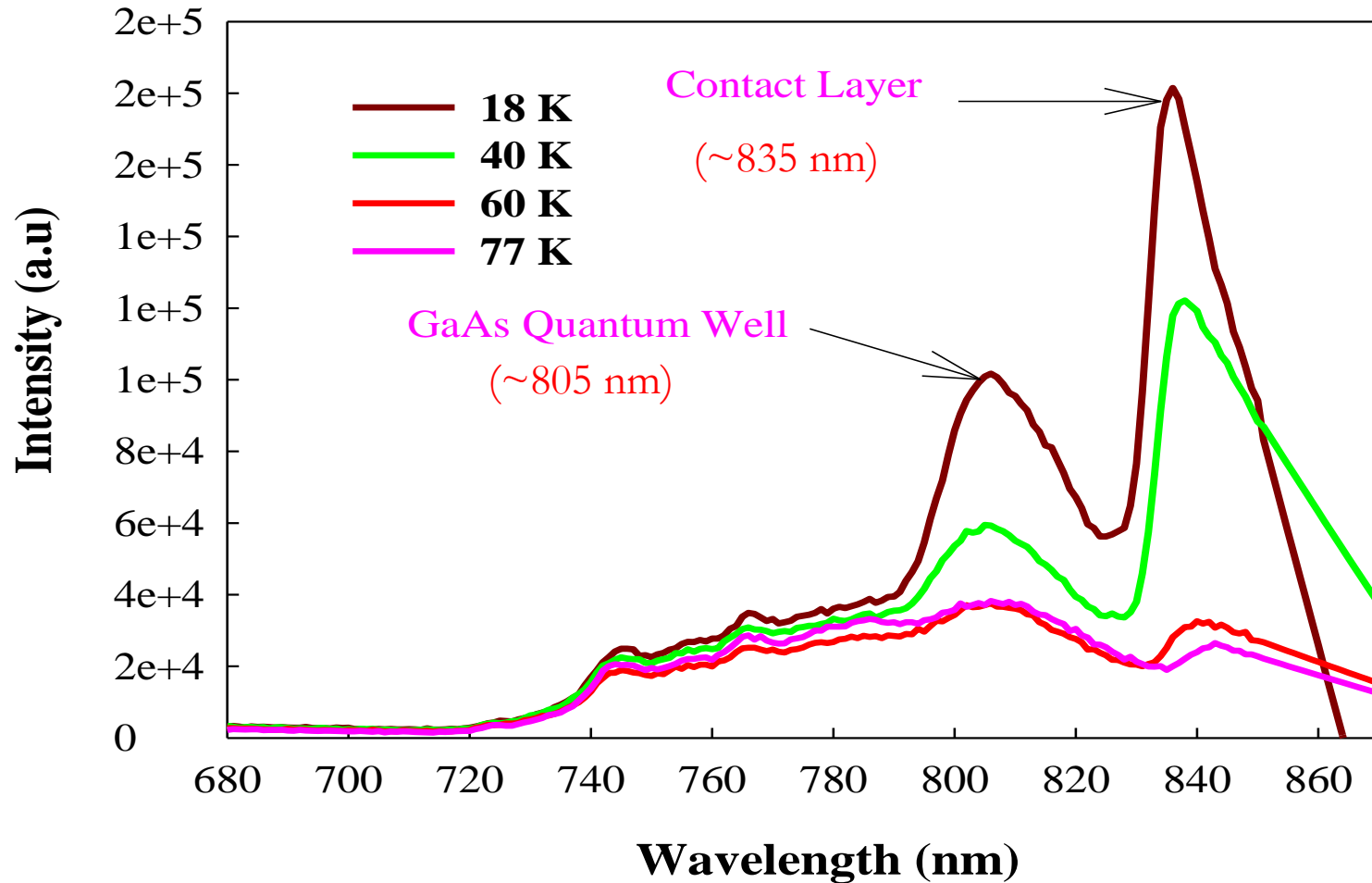
Çıktılar: kompozisyon oranı, tabaka kalınlıkları, kristal kalitesi

HRXRD Ölçümleri

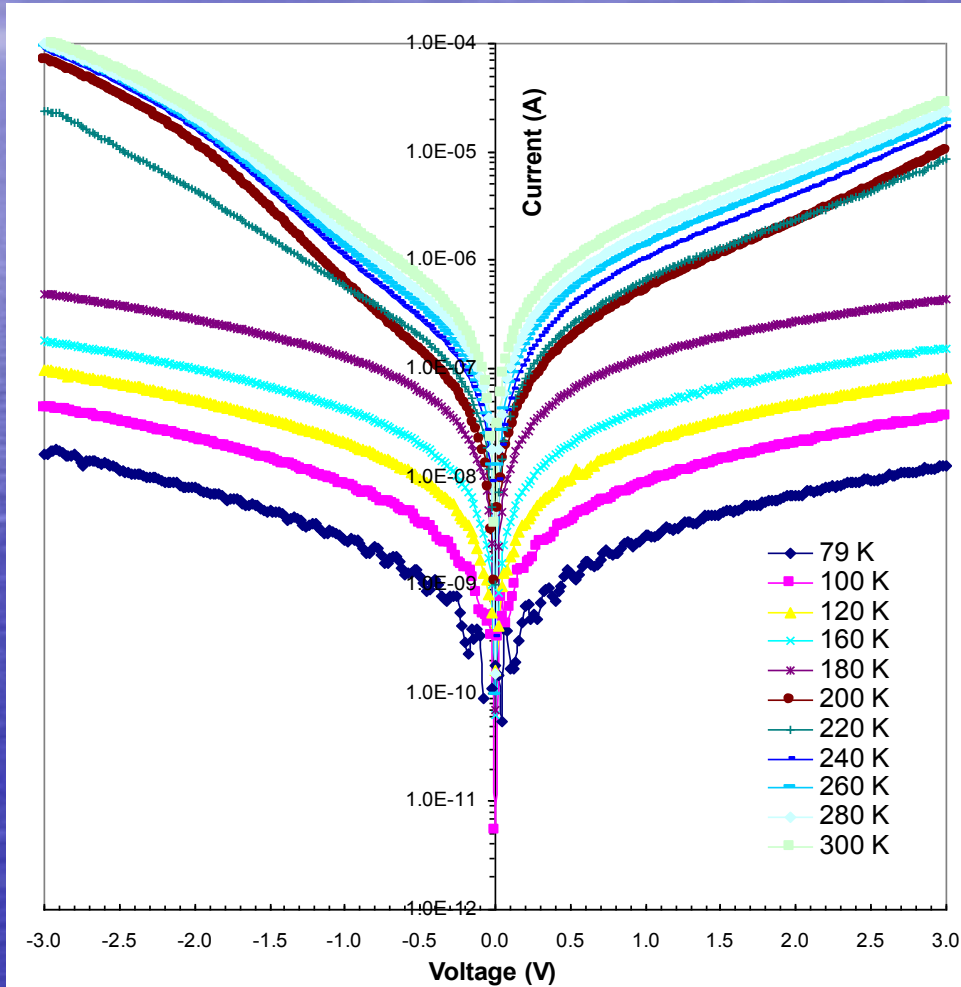


PL Ölçümleri

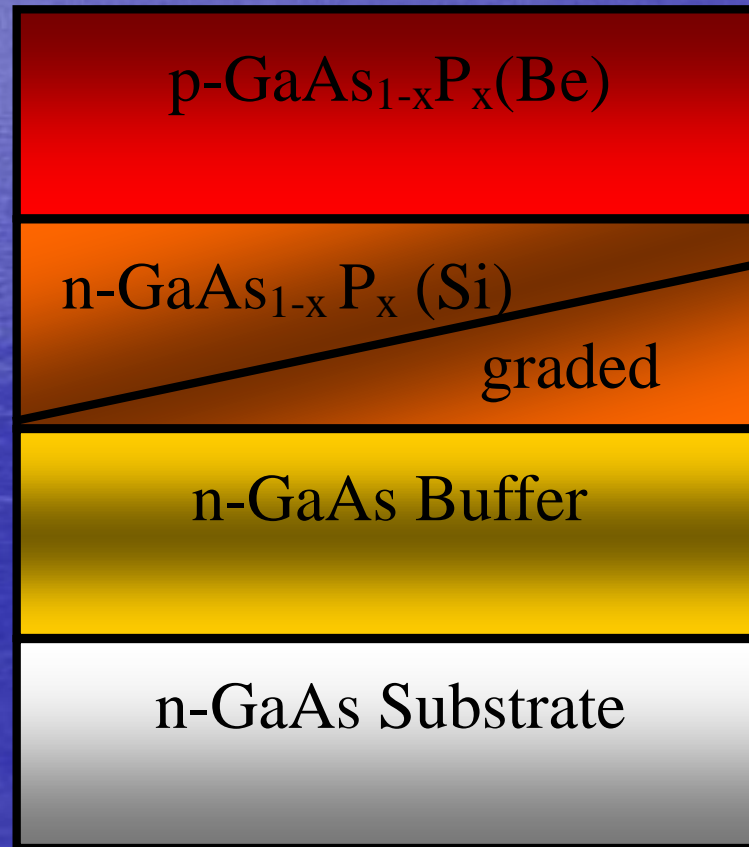
GS025



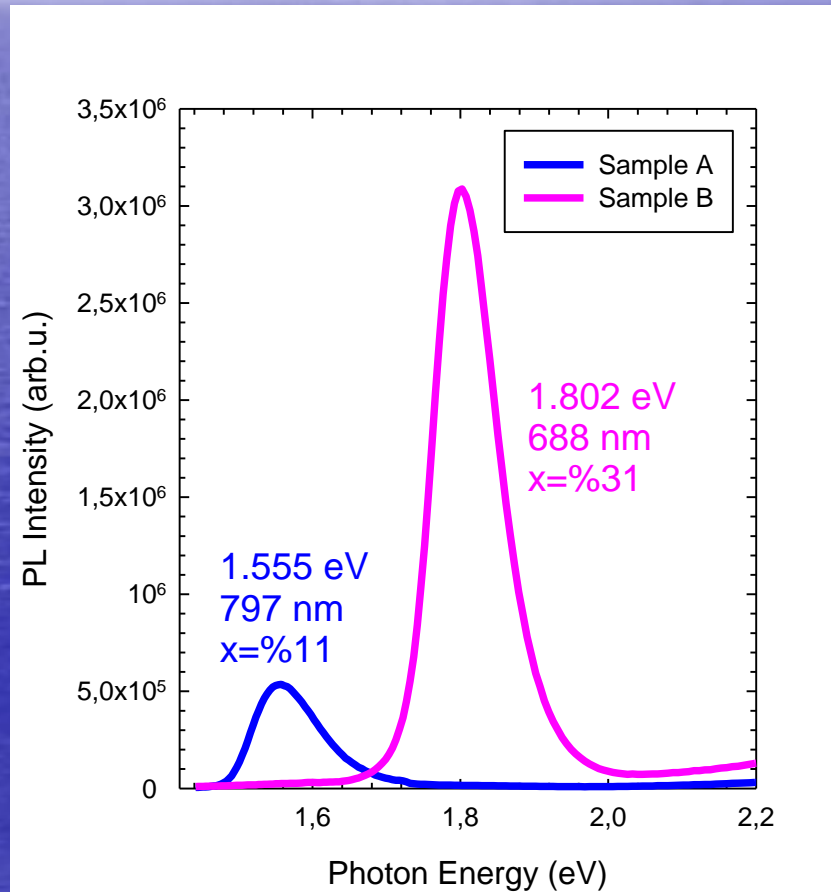
Karanlık Akım Ölçümleri



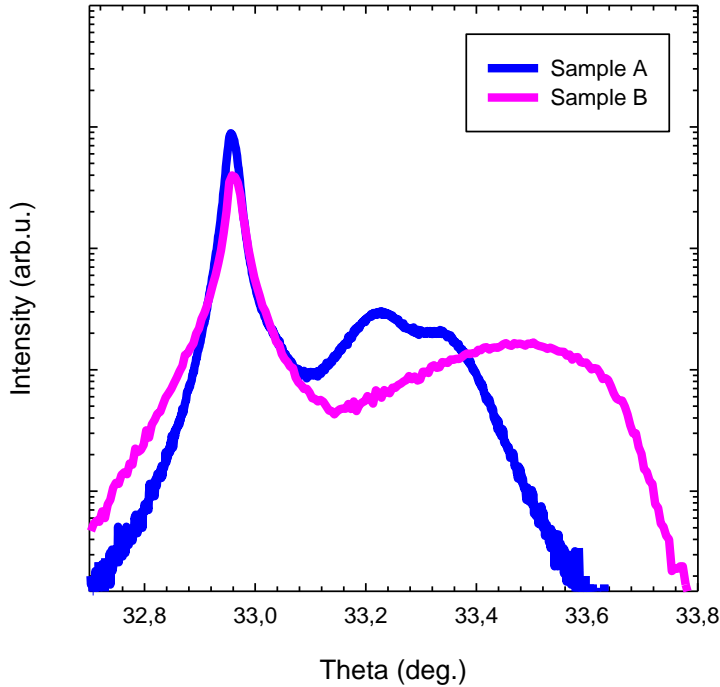
GaAsP/GaAs kristallerin büyüme yapısı şematik olarak gösterimi (GS050-55)



$\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x/\text{GaAs}$ PL ÖLÇÜMLERİ



GaAs_{1-x}P_x/GaAs HRXRD Ölçümleri



P konsantrasyonu (x)

A numunesi

0.1025

B numunesi

0.2768

