



Yarıiletken Yüzeylerde Öbek Oluşumu ve İstatistiği

Mehmet ESEN

Çukurova Üniversitesi Adana Meslek Yüksekokulu, Beyazevler, Adana,

Received: 15.03.2017; Accepted: 23.03.2017

Özet: Çalışmada yarıiletken yüzeyler Monte Carlo yöntemi ile büyütülmüş, belirli bir kaplama oranına eriştikten sonra yüzeye gelen parçacık akısı durdurularak yüzeyin denge şekline ulaşması beklenmiştir. Daha sonra yüzey üzerinde oluşan bir atom yüksekliğindeki öbeklerin istatistiksel dağılımı incelenmiştir. Çalışma farklı sıcaklıklar, farklı akı değerleri ve farklı kaplama oranları için tekrarlanmış, bunların öbek istatistiği üzerindeki etkisi araştırılmıştır. Ayrıca öbek oluşumu ve bunların istatistiği ile problemin enerji parametreleri arasındaki bağlantıları araştırılmıştır. Çalışmada 60, 80, 100, 130K sıcaklık değerleri kullanılmıştır. Simülasyon yüzeyi olarak 200x200 atomdan oluşan kare bir örgü seçilmiştir. Yüzey kaplama oranı %5, %10 ve %15 değerlerine ulaşıldığında büyütme durdurulmuş ve dengeye ulaşması beklenmiştir. Yüzeyde oluşan öbeklerin istatistikleri incelendiğinde yüzey sıcaklığı, akı ve kaplama oranının öbeklerin istatistiklerini etkiledikleri görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Monte Carlo, Akı, Büyütme, Öbek, İstatistik

Cluster Formation on Semiconductor surface and Statistics

Abstract: In the present study semiconductor surfaces are grown by Monte Carlo technique where particle flux coming to the surface is stopped after the particle coverage of the surface has reached a predetermined value and thereafter the simulation is continued until the surface reached its equilibrium shape. Then the statistical distribution of monolayer clusters is examined. The study is carried out for different growth temperatures, different particle flux values to the surface and different coverage values and their effect on the statistics of clusters is investigated. Furthermore the relation between the energy parameters of the problem and cluster formation and their statistics are studied. In this study 60, 80, 100 and 130 K temperature values are used. The simulation area is chosen as a 200x200 square grid. When the coverage reached a value of 5%, 10 and 15%, the growth is stopped and the surface is allowed to equilibrate. When the statistical distribution of clusters is investigated, it is observed that the distribution is affected by temperature, particle flux to the surface and the coverage of the surface.

Keywords: Monte Carlo, Flux, Growth, Cluster, Statistics

1. GİRİŞ

Yüzeylerin oluşumu hakkında deneysel ve teorik çalışmalar, yaygın şekilde yapılmıştır ve etmektedir [1-13]. Yarıiletken yüzeylerin yüzey yapısını incelemek, yarıiletken yüzeylerin cihaz yapımındaki teknolojinin gelişiminde öncü bir rol oynar. Deneysel çalışmalarda büyütme, ve ölçme deneysel süreçler olup büyütme sürecinin seyrini gözlemek için büyütme süreci durdurulup ölçme yapmak gerektiğinden, büyütme sürecinin sürekliliği devamlılık arz etmez ve nihai yüzey şekillerinde farklılaşmalar oluşabilir. Bu noktada teorik incelemelerin önemi artmaktadır. Teorik yüzey büyütme sırasında tüm parametreler kontrolümüz altında olmakta ve teorik çalışmada analizin, tersi istenmediği sürece büyüme yapısının değişimine etkisi olmaz. Kristal yarıiletken yüzey büyütme tercihleri amaca göre değişebilmektedir, ani ve yüksek akı ile büyütme, düşük akı ile katmanlar tamamlanarak büyütme, basamaklar halinde büyütme gibi yöntemler kullanılmaktadır. Yarıiletken yüzey büyütme

* Corresponding author. Email address: mehesen@cu.edu.tr

tekniklerinden biri de sınırlı bir akı gönderilerek yüzeyin kısmi olarak kaplanması ve oluşabilecek basamaklar, adacıklar, tek/ikili/üçlü atom öbekleri gibi yapıların, akı kesilerek, belirli bir süre aktivasyonlarını aynı kinetik ve termal şartlar sağlanarak belirli bir zaman sürdürmektir. Büyütme ve dinlendirme süreçleri sırasında yüzeyin nasıl değişeceği ve büyümenin nasıl süreceğini o ana kadar oluşmuş yüzey yapısı, termal parametreler, yüzey enerji parametreleri, akı miktarı gibi parametreler etkiler. Yüzeyin sınırlı kaplanması sırasında parçacıkların yüzey üzerinde serbest difüzyonu, basamak/öbek kenarı boyunca difüzyonu, basamak kenarına birleşme/ayırılma süreçleri, basamak/öbek üzerinden alt terasa geçme gibi süreçler yüzey dinamiğini belirleyen süreçlerdir ve yüzeyin nihai şeklinin oluşmasında etkilidir. Bahsedilen süreçler içerisinde Schwoebel bariyer etkisi; yani üst terastan alt terasa enerji bariyerini geçerek inme için geçerli olan bariyer enerjisi sıfır (0) kabul edilmiştir, böylelikle teras üzerinde yeni teras oluşumu engellenmiştir. Bu nedenle bu çalışmada sadece bir atom yüksekliğinde öbeklerin oluşumu ve onların istatistiği araştırılmıştır. Deneysel çalışmalarda gözlenen yüzeye akı gelmesi ve yüzeyden atom buharlaşması olaylarından, yüzeyden atom buharlaşması (desorbition) olayı simülasyona katılmamıştır. Yüzey öbeklerinin oluşumu, öbeklerin difüzyonu konuları iki boyutlu sistemler için incelenmiş olup oluşan öbeklerin ölçülerek heterojen bir dağılıma sahip oldukları gözlenmiştir. Benzeri çalışmalar 2 ve 3 boyutlu sistemler için yapılmıştır [8-9].

2. TEORİK ALTYAPI

Simülasyon sırasında Kinetik Monte Carlo (KMC) algoritması kullanılmıştır. Yüzeyde bulunan atomların hareket edebilme olasılıkları yönlere bağlı olarak hesaplanmış ve oluşabilme olasılığına bağlı olarak, rasgele bir sayı yardımı ile olayın oluşması sağlanmıştır. Zamanın ötelenmesi de rasgele bir sayı seçilerek ve parçacıkların toplam geçiş oranları kullanılarak yapılmaktadır[10]. Simülasyonlar sırasında büyüyen yüzeyde bulunan atomların basamağa bağlanma veya basamaktan ayrılma olasılıkları, üst terastan aşağı inme olasılıkları Schwoebel bariyer etkisi, yüzey üzerinde serbest difüzyon, basamak kenarı boyunca difüzyon olayları KMC algoritmasına dahil edilen yüzey olaylarıdır[11,12]. Yüzeyde bulunan bir atom kare örgü üzerinde boş olan komşu bir konuma geçeceği sırada

$$E = E_d + nE_b \quad (1)$$

kadarlık bir enerji bariyerini aşmak zorunda kalmaktadır. Burada E_d yüzeydeki serbest, bağı bulunmayan bir atomun yüzeydeki difüzyon bariyer enerjisidir. E_b ise iki birbirine bağlı atomların bağı enerjisidir, n ise bir atomun bağı yaptığı komşu atom sayısını göstermektedir. $n = 1,2,3,4$ değerlerini alabilir. $n = 4$ olduğu durumda atomun hareket etme olasılığı sıfır (0) kabul edilmiştir. Basamak/öbek boyunca hareket için aşılması gerekli enerji E_{ds} dir. Bu enerji bariyerleri (E_{ds} hariç) Şekil 1'de sembolik olarak gösterilmiştir. Bir atomun komşu boş bir noktaya geçme olasılığı,

$$w(T) = v \exp(-E/k_B T) \quad (2)$$

ile verilir. Burada v bir atomun/parçacığın yüzeye dik olarak yaptığı salınımların frekansı, k_B Boltzmann sabiti, T ortamın mutlak sıcaklığıdır. Atomun titreşim frekansı ν , $10^{12-13} s^{-1}$ civarındadır ve simülasyon için $10^{13} s^{-1}$ değeri kullanılmıştır, kullanılan metot hakkında detay için [13] çalışmasına bakılabilir. Simülasyon sırasında enerji parametreleri meV cinsinden olmak üzere $E_b = 125, E_d = 150, E_k = 0$ ve $E_{ds} = 100$ olarak seçilmiştir. Burada önemli olan enerji bariyer değerlerinin mutlak değerinden ziyade onların birbirlerine göre değeridir. Simülasyon $T = 60 - 130$ K sıcaklık değerleri için yüzeye gönderilen farklı parçacık akı değerleri için yapılmıştır.

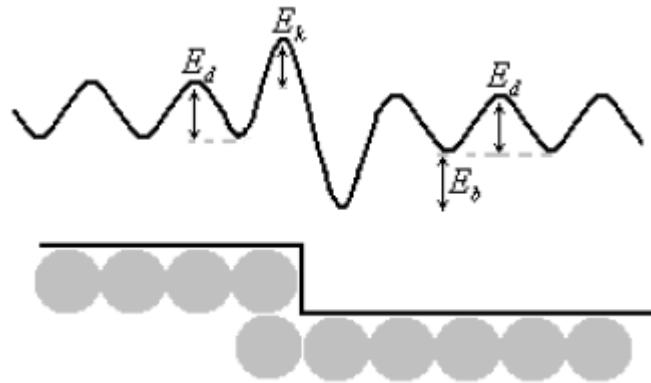
Yarıiletken Yüzeylerde Öbek Oluşumu ve İstatistiği

Yüzeyde oluşan tüm olayların oluşabilme olasılıkları sıcaklığa bağlı olarak artmaktadır çünkü Denklem (2)'de görülebileceği gibi sıcaklık yüzey aktifliğini arttırmaktadır ve özellikle tek atomların yüzey üzerinde difüzyonunu arttırmaktadır. Simülasyon sırasında uzunlukları a cinsinden 200×200 boyutunda bir simülasyon yüzeyi kullanılmıştır. Yüzey %5 (yani 2000 atom), %10 (4000 atom) ve %15 (6000 atom) oranlarında kaplanmıştır.

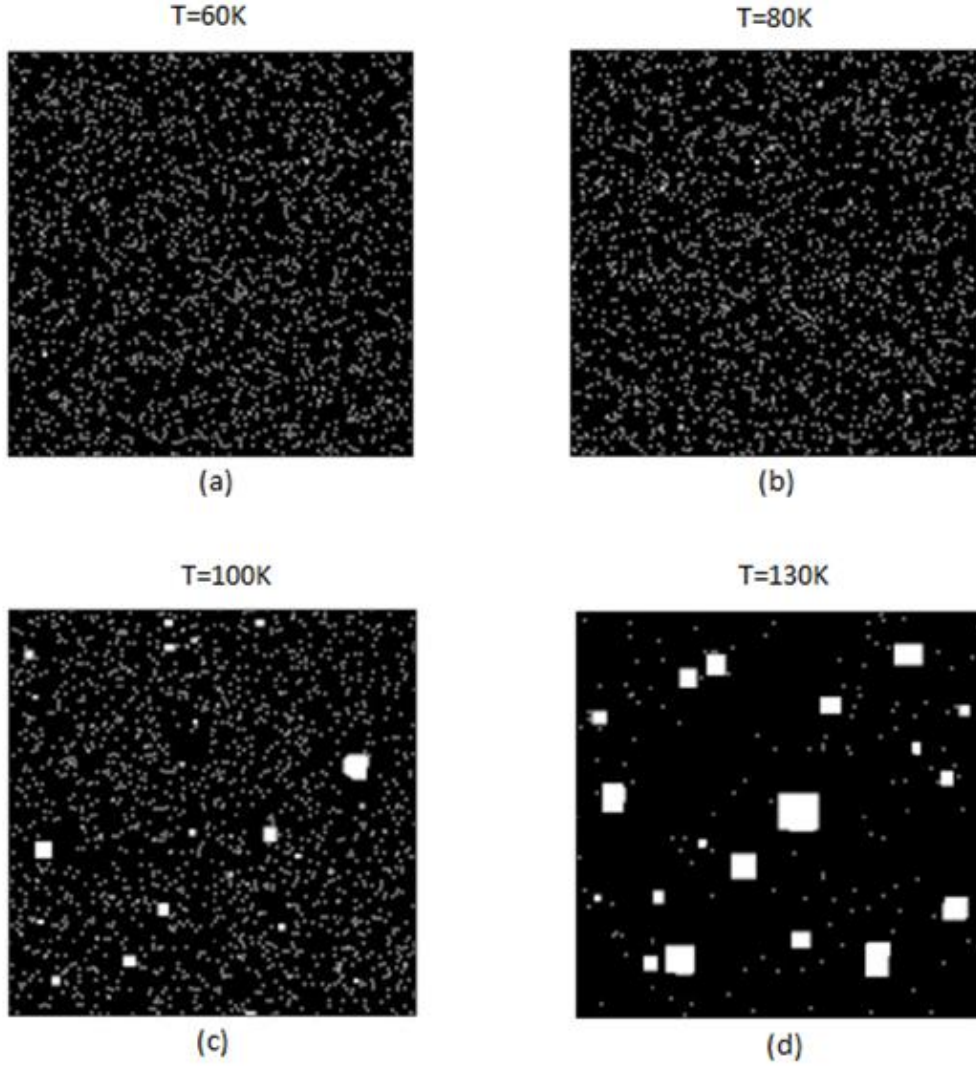
Yüzeyin kaplanması Monte Carlo (MC) yöntemi ile yüzey üzerinde rastgele seçilen boş bir noktaya bir parçacık yerleştirilmesi şeklinde yapılmıştır. Yüzeye gönderilen parçacık akısı başka türlü belirtilmediyse yüzey saniyede $0.18 \mu\text{m}$ mertebesinde büyüyecek şekilde seçilmiştir. Akının görelisi olarak yüksek seçilmesinin sebebi M C simülasyonlarının hızlandırmak içindir. Kaplama oranlarının sınırlı tutulması deneysel çalışmalarda sık uygulanan bir yöntemdir ve yüzeydeki atomlara olası en düzgün şekilleri oluşturmasına zaman ve olanak tanımaktadır. Bu kaplama oranları ve sıcaklık değiştirilerek yüzeyde oluşan adacık (öbek) istatistikleri incelenmiştir. Yüzeyde oluşan adacıkların şekillerinin, akı miktarı ve sıcaklık parametrelerinden daha fazla etkilendiği görülmüştür. Düşük akı miktarı ve düşük sıcaklıklarda oluşan adacıklar kareye yakın paketlenmiş şekillerde bulunmuştur. Fakat çok düşük sıcaklıklarda ise akı miktarı düşük dahi olsa oluşan adacıklar saçaklanarak oluşmuş ve kapalı paketlenmiş formu oluşmamaktadır. Çok yüksek sıcaklıklarla ilgili sonuçlar burada gösterilmemiştir fakat bu durumda adacık oluşmama veya oluşmuş adacıklar dağılarak yüzeyde tekli atom halinde rastgele difüzyona uğramaktadır.

3. BULGULAR ve TARTIŞMA

Yapılan çalışmada 200×200 kare bir ızgara üzerine gönderilen belirli bir parçacık akısı altında yüzeye gönderilen parçacıkların dağılımı ve oluşan yapıların şekilleri incelenmiştir. Yüzey üzerinde bulunan bir parçacık kare örgü nedeniyle sadece dört yönde ilerleme olasılığına sahiptir. Parçacıkların bir konumdan başka komşu bir konuma geçme olasılıkları yüzeydeki bütün parçacıklar için Denklem (2) kullanılarak hesaplanmıştır. Parçacıkların hareketi Kinetik Monte Carlo yöntemi [10, 13] kullanılarak yapılmıştır. Çalışma yüzeyin belirli kaplama oranları için gerçekleştirilmiştir, kaplama oranları sırası ile %5, %10 ve %15 olarak seçilmiştir. Bunlara karşılık gelen yüzey morfolojileri sırası ile Şekil 2, 4 ve 6'da ve bu yüzeylere karşılık gelen yüzey üzerindeki öbeklerin istatistiği ise sırası ile Şekil 3, 5 ve 7'de gösterilmiştir. Verilen bir sıcaklıkta yüzeye gelen parçacık akısı rastgele sayılar seçilerek kontrol edilmiş ve istenen oranda kaplama sayısına erişilince yüzeye gelen parçacık akısı durdurulmuştur. Bundan sonra yüzeyin dinamiği Monte Carlo yöntemi ile incelenmeye devam edilmiş yüzey dengeye ulaşana kadar simülasyon sürdürülmüştür. Simülasyon sırasında yüzeyde oluşan öbeklerin istatistiği takip edilmiş önemli bir değişikliğin artık oluşmadığı ana kadar simülasyona devam edilmiştir. Üç ve daha fazla parçacığın oluşturduğu gruplar öbek olarak kabul edilmiş, diğerleri istatistiğe dahil edilmemiştir.

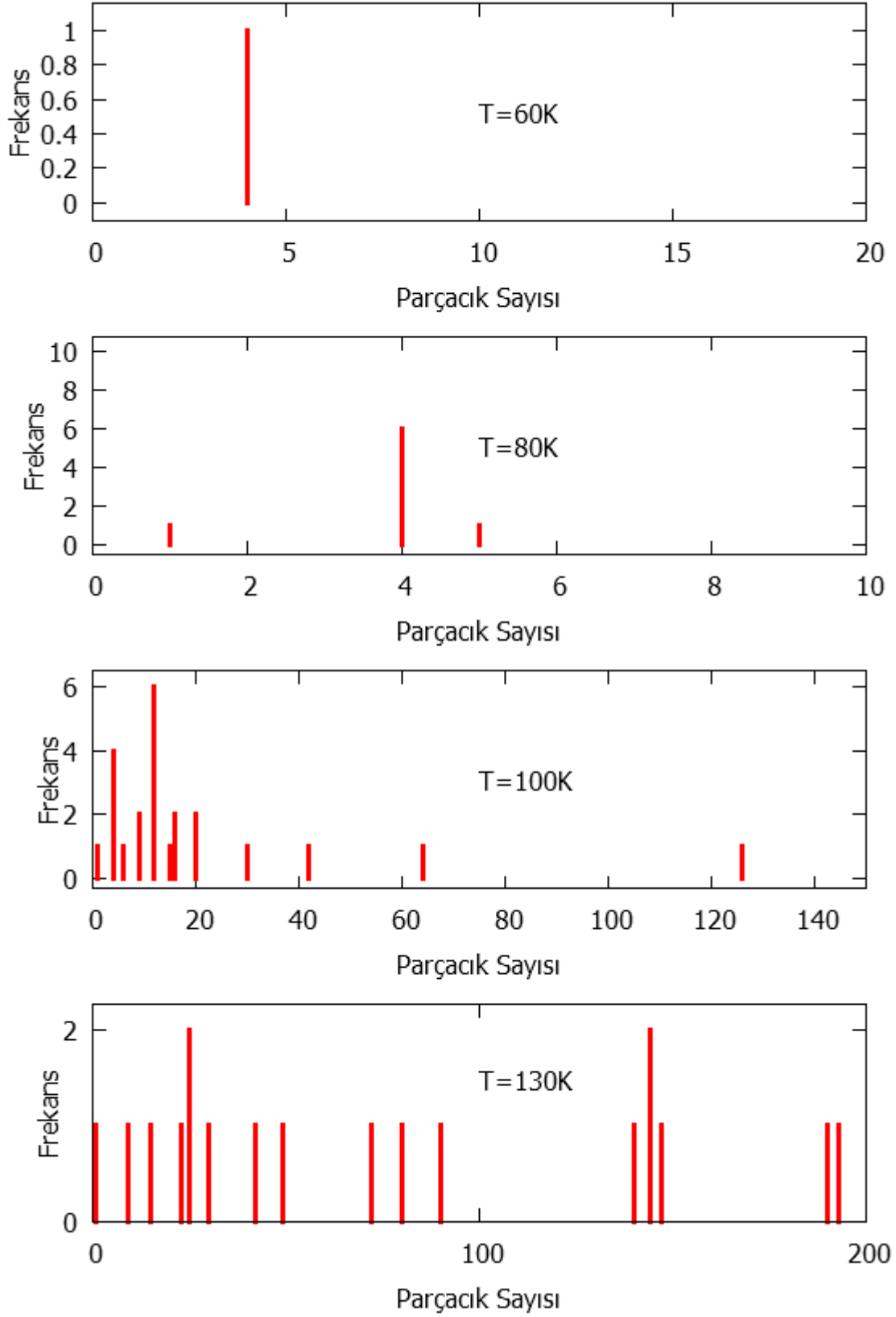


Şekil 1. Bir yüzey üzerinde atomların hareketleri sırasında aşmak zorunda oldukları potansiyel enerji engelleri. E_a yüzey üzerinde serbestçe hareket eden bir parçacığın aşması gereken enerji engeli, E_b bir öbek kenarında bağ yapmış bir atomun, en yakın komşu atomuyla yaptığı bağ enerjisidir. E_k bir parçacığın bir basamak veya öbek kenarından aşağı inerken aşması gereken ilave enerji engelidir ve Schwoebel bariyeri olarak bilinir bu çalışmada 0 kabul edilmiştir çünkü sadece tek katmandan oluşan yapılar incelenmiştir.

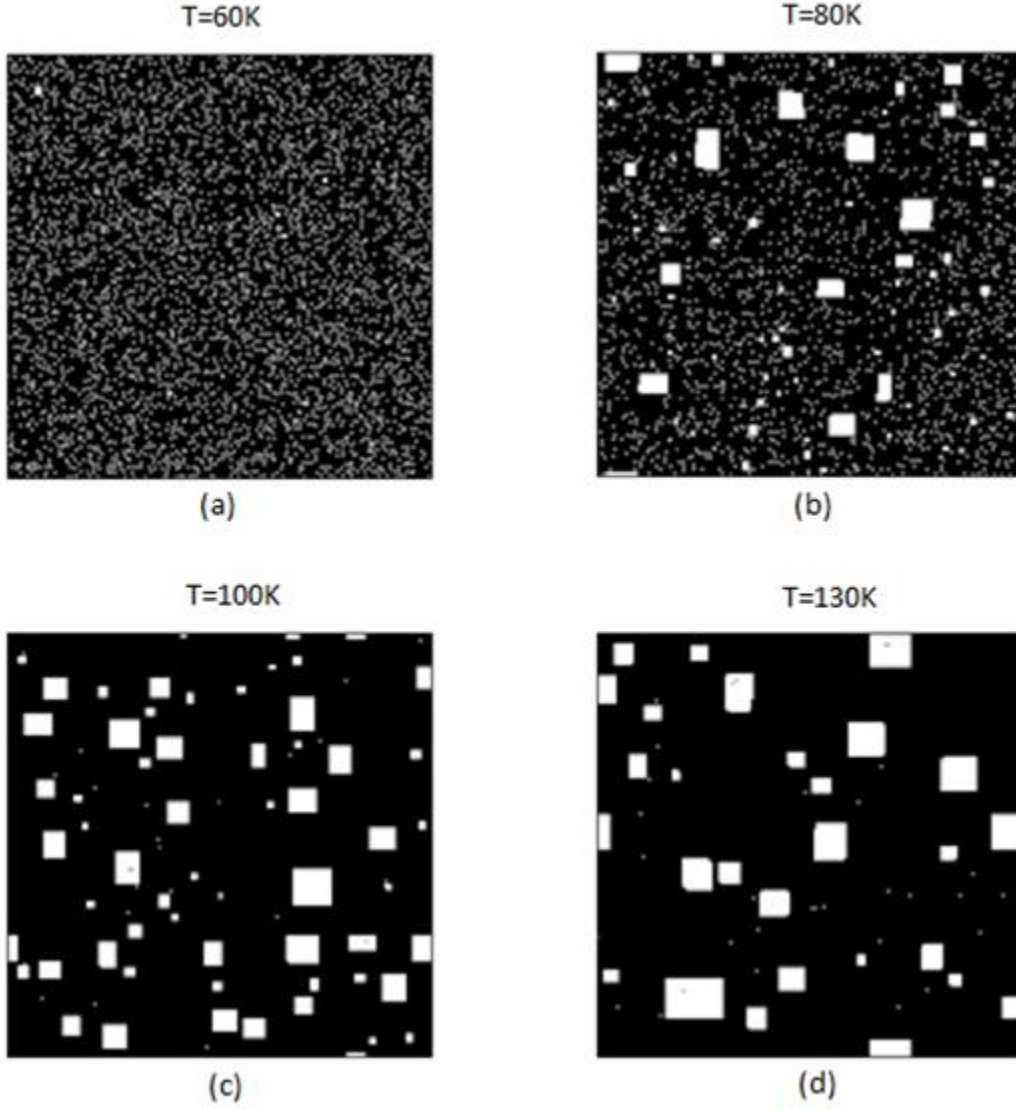


Şekil 2. %5(2000atom) doluluk oranı ve $4.0e-8$ yüzey akısı ile büyütülmüş farklı sıcaklıklardaki yüzeylerin dengeye ulaştıktan sonraki görünüşleri.

Yarıiletken Yüzeylerde Öbek Oluşumu ve İstatistiği



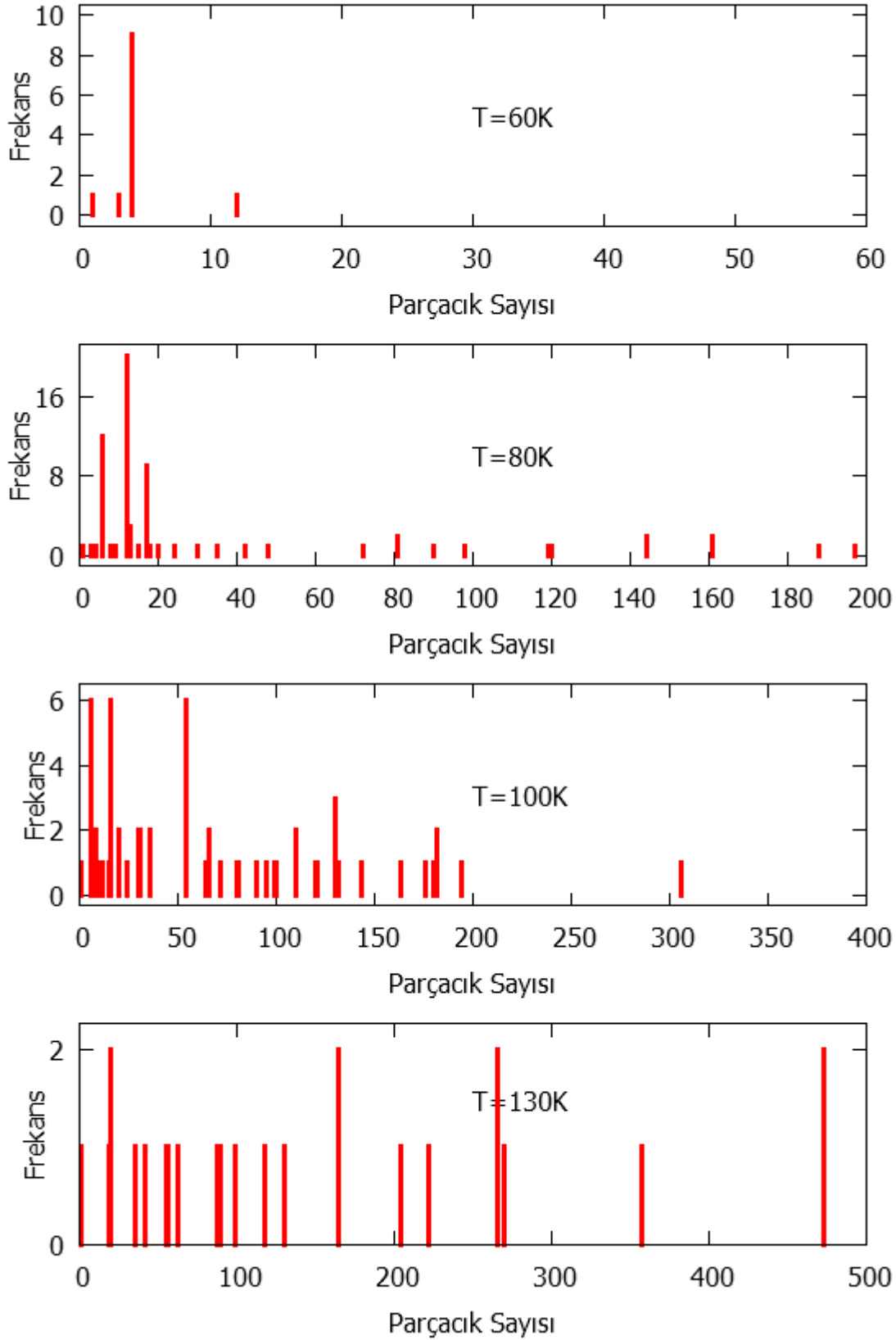
Şekil 3. %5 doluluk oranı ve farklı sıcaklıklar için dengeye ulaşılmış yüzeylerdeki öbek sayılarının istatistikleri.



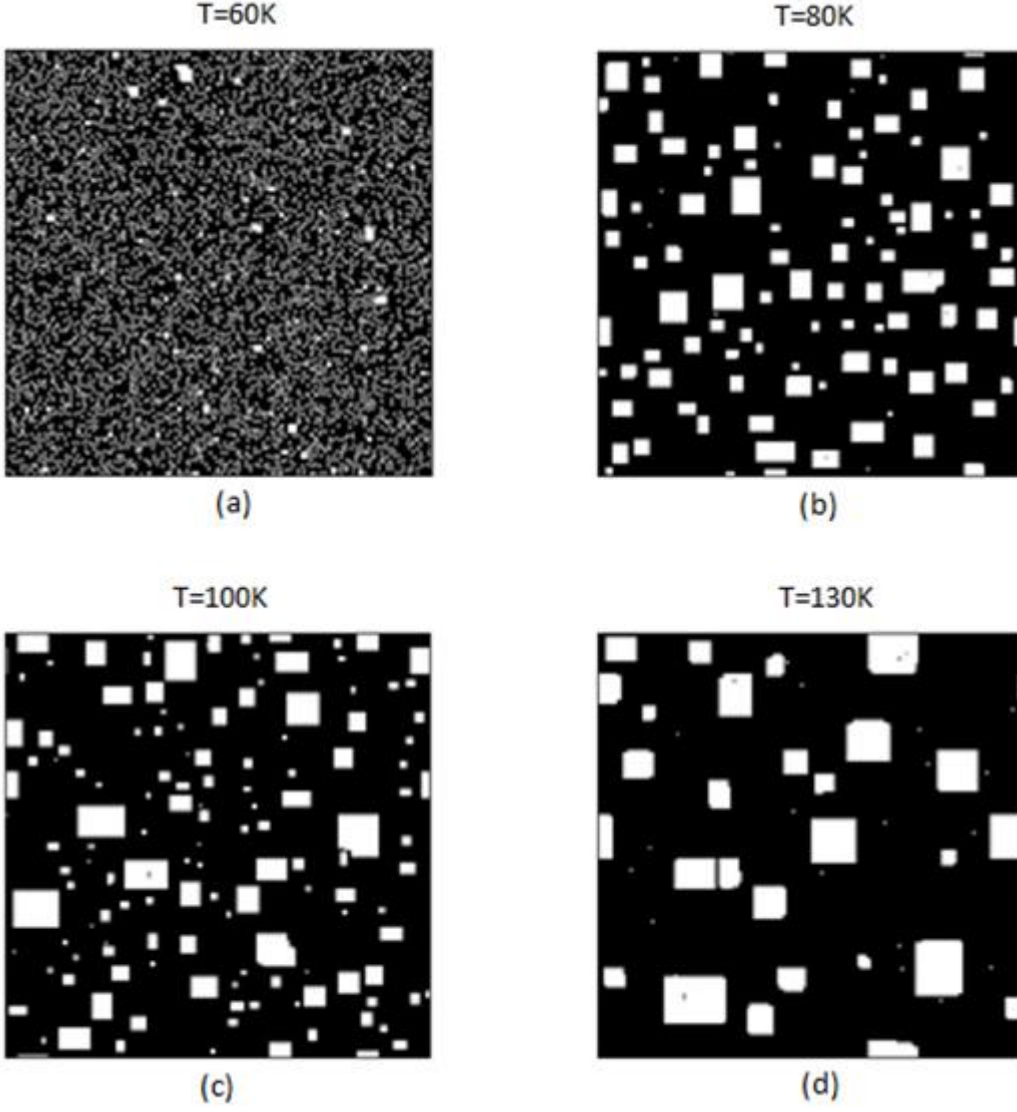
Şekil 4. %10(4000atom) doluluk oranı ve $4.0e-8$ yüzey akısı ile büyütülmüş farklı sıcaklıklardaki yüzeylerin dengeye ulaştıktan sonraki görünüşleri.

Yüzey şekilleri incelendiğinde %5, %10, %15 kaplama oranları için, Şekil 2(a), 4(a) ve 6(a)'da görüldüğü gibi 60K sıcaklığına karşılık gelen yüzeylerde bir öbek oluşumu yok denecek kadar azdır. Bunun sebebi sıcaklığın düşük olması ve bu nedenle yüzeye gelen atomların hareket kabiliyetlerinin çok az olması sebebiyle ilk geldikleri yerlerden yüzey üzerinde hareket edememeleridir. Bu durumun oluşmasının sebebi (2) nolu denklemlerle açıklanabilir. Yüzey üzerinde serbestçe hareket edecek bir parçacığın E_d enerji engelini aşması gerekir (Şekil 1). Sıcaklık düşük olduğunda $\exp(-E_d/k_B T)$ teriminin argümanı büyüdüğünden parçacığın yüzey üzerinde hareket olasılığı da azalmaktadır. Bu durumda yüzeye gelen her parçacık yüzeye konduğu noktadan hemen hemen hiç uzaklaşmamakta ve böylece öbek oluşumu meydana gelmemektedir. Fakat yüzey kaplama oranı arttığında parçacıklar arasındaki mesafe azaldığından Şekil 6(a)'da görüldüğü gibi çok nadir de olsa küçük boyutlu öbeklerin oluşması meydana gelmektedir. Bu durum öbek istatistiğini veren Şekil 3,5 ve 7'nin $T=60K$ sıcaklığına karşılık gelen grafiklerine bakıldığında açıkça görülmektedir. Örneğin Şekil 7'de görülebileceği gibi yüksek kaplama oranlarında çok az da olsa 10-50 atomlu birkaç öbek mevcuttur.

Yarıiletken Yüzeylerde Öbek Oluşumu ve İstatistiği

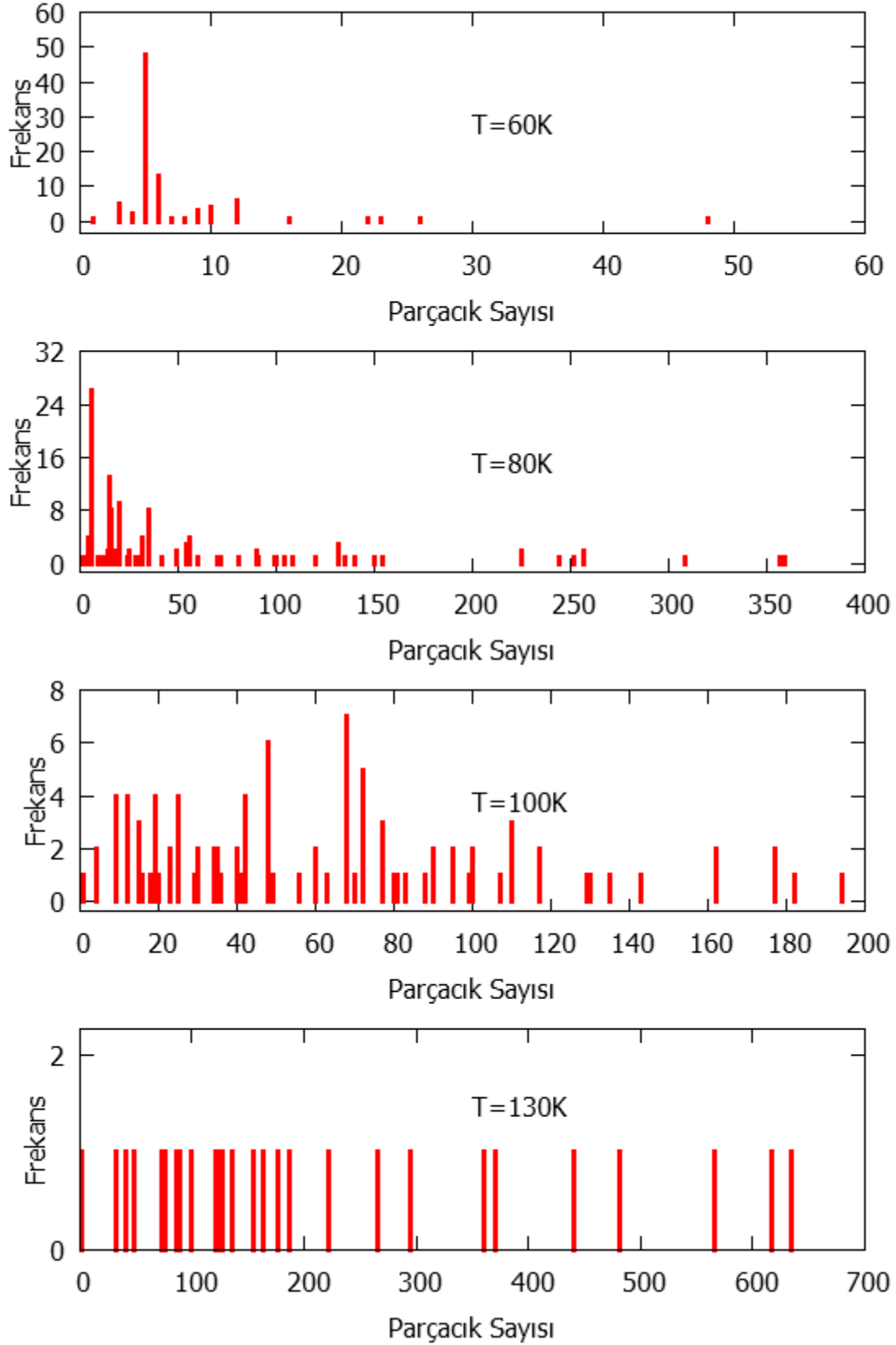


Şekil 5. %10 doluluk oranı ve farklı sıcaklıklar için dengeye ulaşmış yüzeylerdeki öbek sayılarının istatistikleri.



Şekil 6. %15(6000atom) doluluk oranı ve $4.0e-8$ yüzey akısı ile büyütülmüş farklı sıcaklıklardaki yüzeylerin dengeye ulaştıktan sonraki görünüşleri.

Yarıiletken Yüzeylerde Öbek Oluşumu ve İstatistiği



Şekil 7. %15 doluluk oranı ve farklı sıcaklıklar için dengeye ulaşmış yüzeylerdeki öbek sayılarının istatistikleri.

Her kaplama oranı için Şekil 2,4 ve 6'da verilen yüzeyler (a)-(d) sırası ile incelendiğinde, sıcaklık arttıkça yüzey aktifliğinin arttığı ve böylelikle difüzyon olaylarının oluşma olasılığının arttığı gözlemlenebilir. Difüzyon olaylarının artması neticesinde atomların yan yana gelme olasılıkları artmış ve komşu olan atomlar E_b enerjisi ile aralarında bağ yaparak öbeksizleşmeler oluşmuştur. Her akı miktarı için sıcaklığın artması öbeksizleşmeyi arttırmıştır.

Yukarıdaki tartışmadan da anlaşılacağı gibi öbek oluşumu hem sıcaklık hem de yüzeye gelen parçacık akısının kontrolü altındadır. Sıcaklık parçacıkların yüzey üzerindeki hareket kabiliyetlerini arttırdığından parçacıklar yüzey üzerinde daha geniş bir alanda gezinmekte böylece birbirleri ile karşılaşarak bağ yapma olasılıkları artmaktadır. Üç veya daha fazla parçacığın bir araya gelerek öbek oluşturması, öbeğin bulunduğu bölgede serbest gezinen parçacıklar için yüksek enerji ile bağlanabilecekleri bir merkez oluşturmaktadır. Bir öbek kenarına yapışan bir parçacık bir veya daha fazla bağ yaptığından, öbek kenarları parçacıkların bağlanabilecekleri ve kararlı kalabilecekleri merkezlerden oluşmaktadır. Öbek alanı ne kadar büyükse bu merkezlerin sayısı da o kadar fazladır. Aslında öbek kenar uzunluğu öbeğin alanının kökü ile orantılıdır.

Öbeklerin başlangıçta oluşmaya başladığı noktaların nasıl dağıldığı detaylı olarak incelenmemiştir, fakat bir öbek bir kez oluştuğundan sonra etrafındaki serbest atomlar için bir tuzak görevi gördüğünden, bir öbeğin yakın çevresinde başka bir öbeğin oluşma olasılığı oldukça düşüktür. Öbekler arasındaki ortalama mesafe yüzeye gelen parçacık akısına bağlı olacaktır fakat bu durum detaylı incelenmemiştir.

Şekil 2,4 ve 6'da gösterilen yüzeyler incelendiğinde öbeklerin şekillerinin hemen hemen kare şeklinde olduğu görülecektir. Bunun bir sebebi seçilen örgünün kare olmasıdır. Bir diğer sebebi ise sıcaklığın yeterince yüksek olmamasıdır. Öbek kenarındaki bir parçacık üç bağ yaptığından bağlarını koparma olasılığı oldukça düşüktür. Öbek kenarında hareket eden tek atomlar ise öbek köşesindeki boşlukları doldurarak öbekleri daha kararlı hale getirmektedirler. Bu nedenle sıcaklığın çok yüksek olmadığı durumlarda en kararlı öbek şekli kare veya dikdörtgen şeklindedir. Öbekler aslında sürekli bir parçacık alış verişini içerisindedir. Bir öbekten parçacık kopması en büyük olasılıkla köşelerden olabilir, çünkü diğerlerine nazaran en az sayıda bağ yapan parçacıklar bunlardır. Bu çalışmada gösterilmemiştir fakat sıcaklık arttırılırsa öbekler köşelerden parçacık salmaya başlayacak ve öbek köşeleri yuvarlanacaktır. Ayrıca başka bir çalışmada detaylı incelendiğinden burada göz önüne alınmamıştır fakat öbeklerin her biri yüzey üzerinde bir bütün halinde gezinmektedir. Bu konunun detayları için [14] çalışmasına bakılabilir.

Yüzey üzerinde oluşan öbekleri oluşturan parçacık sayıları ve öbek sayıları açısından yüzey morfolojisinin istatistiklerinin detayları Şekil 3,5 ve 7'de görülebilir. Genel kural olarak düşük sıcaklıklarda çok sayıda ama küçük boyutlu öbekler mevcuttur. Sıcaklık arttıkça küçük öbeklerin birleşmesi sonucu daha büyük öbekler meydana gelmekte böylece az sayıda fakat büyük boyutlu öbekler meydana gelmektedir. Öbeklerin sayısı ve boyutu ayrıca yüzeyin kaplanma oranına da bağlıdır. Örneğin düşük sıcaklıklardaki dağılıma örnek olarak $T = 80 \text{ K}$ için kaplanma oranı düşük ise öbek sayısı ve öbekleri oluşturan parçacık sayısı da düşüktür. Aynı sıcaklık için kaplama oranı arttığında hem öbek sayısı hem de öbekleri oluşturan parçacık sayısı artmaktadır (Şekil 3, 5 ve 7).

4. SONUÇ

200x200 boyutunda seçilen düz bir yüzey üzerine parçacık akısı gönderildiğinde yüzeyde oluşan adacıkların (öbeklerin) oluşması ve bunların dağılımı sıcaklığın ve yüzey kaplama oranının bir fonksiyonu olarak Kinetik Monte Carlo yöntemi ile incelenmiştir. Öbek oluşum düşük sıcaklık ve düşük kaplama oranı değerlerinde çok azdır. Bunun sebebi hem düşük sıcaklık nedeniyle parçacıkların hareket kabiliyetlerinin az olması hem de parçacıklar arasındaki ortalama mesafenin büyük olması nedeniyle

Yarıiletken Yüzeylerde Öbek Oluşumu ve İstatistiği

parçacıkların bir araya gelerek adacık oluşturmasının zor olmasıdır. Sıcaklık arttığında adacık oluşma oranı ve yeterince parçacık varsa (kaplama oranı yüksekse) adacıkları oluşturan parçacık sayısı da artmaktadır. Yüzey şekilleri ve öbek istatistikleri farklı sıcaklık ve yüzey kaplanma oranları için sunulmuştur. Sıcaklık çok yüksek olduğunda öbekler dağılmaktadır fakat bu çalışmada bu konu detaylı incelenmemiştir.

KAYNAKLAR

- [1]. Geguzin Ya.E., Ovcharenko N.N. ,Soviet Physics Crystallography1961, 6, 75.
- [2]. Ratsh C. , Zangwill A., Applied Physics Letters, 1991, 58, 403.
- [3]. Ozdemir M.,Zangwill A., Journal of Vacuum Science and Technology, 1992, A10, 684.
- [4]. Mirin R.P., Tan I.H., Weman T., Leonard M., Yasuda T., Bowers J.E., Hu E.L., Journal of Vacuum Science and Technology, 1992, A10, 697.
- [5]. Haider N., Wilby M.R., Vvedensky D.D., Applied Physics Letters, 1993, 62, 3108.
- [6]. Ohtsuka M., Suzuki A., Journal of Applied Physics, 1993, 73, 7358.
- [7]. Scheiner D., Hanein Y., Heiblum M., Semiconductor Science and Technology, 1997, 12, 1046.
- [8]. Noh J D, Lee H K , Park H. Physical Review, 2011, E 84, 010101.
- [9]. Lv J P, Yang X ,Deng Y., Physical Review, 2012, E 86, 022105.
- [10]. Fichthorn K.A., Weinberg W.H., Journal of Chemical Physics, 1991, 95, 1090.
- [11]. Ehrlich G., Hudda F.G., Journal of Chemical Physics, 1966,44, 1039.
- [12]. Schwoebel R.L., Shipsey E.J., Journal of Applied Physics ,1966, 37, 3682.
- [13]. Esen M., Tuzemen A.T., Ozdemir M., European Physical Journal B ,2012, 85, 117.
- [14]. Esen M., Tuzemen A.T., Ozdemir M., Chinese Physics B, 2016, 25, 1 ,013601.