



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Villamosmérnöki és Informatikai Kar

Szélessávú Hírközlés és Villamosságtan Tanszék

Vékonyréteg napelemeknél használatos nanogömb fotolitográfia numerikus szimulációja

TDK DOLGOZAT

Készítette: Gombor Tamás

Konzulensek: Dr. Szabó Zsolt (HVT)

Dr. Pávó József (HVT)

Budapest, 2011

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
1.1. A zöld energiák fontossága	3
1.2. A napenergia	4
1.3. A napelemek	5
1.3.1. A napelem működése	5
1.3.2. A napelem típusok	8
2. Nanorúd napelem cella	11
2.1. Szilícium nanorúd cella, mint fotovoltaiikus eszköz	11
2.2. A nanorudakat tartalmazó napelem cella készítéséhez szükséges fontosabb technológiai lépések ismertetése	13
2.2.1. Fotolitográfia	13
2.2.2. Nanogömb fotolitográfia	15
3. A szimulációs módszer ismertetése	18
3.1. A peremérték feladat megfogalmazása	18
3.2. A vizsgálati tartomány	20
3.2.1. A vizsgálati tartomány egy réteg gömb esetén	20
3.2.2. A vizsgálati tartomány két réteg gömb esetén	22
3.3. A véges elem módszer	24
4. A szimulációs eredmények	26
4.1. Nanogömb fotolitográfia egy réteg gömb esetén	26
4.1.1. Kvarc hordozón végzett litográfia	26
4.1.2. Ezüst réteggel bevont hordozón végzett litográfia	31
4.1.3. Különböző polarizációjú megvilágítások eredményeinek összehasonlítása	37
4.2. Nanogömb fotolitográfia két réteg gömb esetén	42
5. Kitekintés	46

6. Összefoglaló	47
Irodalomjegyzék	51

1. fejezet

Bevezetés

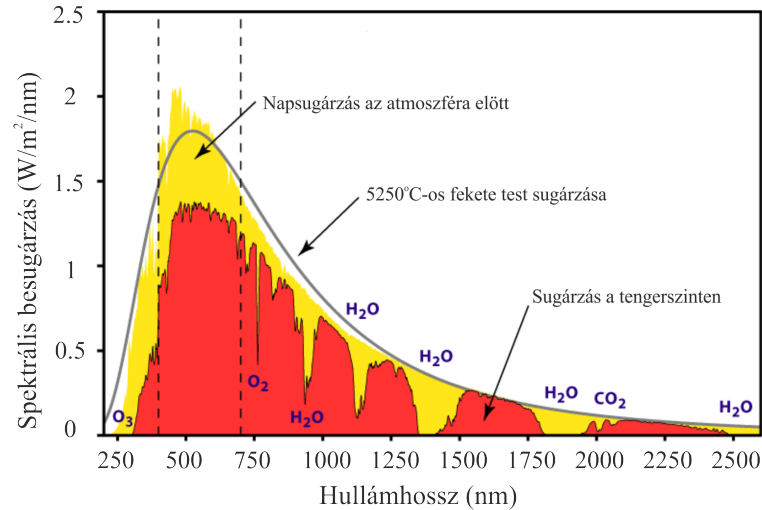
1.1. A zöld energiák fontossága

A XXI. század egyik kiemelt problémája az energiaválság, illetve az energiatermelésből származó környezetszennyezés. A környezetszennyezést csökkentő vagy kiküszöbölő energiaforrásokat zöld energiáknak nevezik.

Jelenleg a világ energiatermelésnek jelentős része a fosszilis tüzelőanyagok felhasználásával keletkezik. Ezek viszont nem megújuló energiaforrások, mivel nagyságrendekkel kevesebb idő alatt felhasználjuk, mint amennyi idő alatt a természetben keletkeznek. Kimerülőben vannak a Föld földgáz, kőolaj és kőszén készletei, és a kitermelésük is egyre nehezebbé és költségesebbé válik, ami az energiaárak növekedéséhez fog vezetni. A fosszilis tüzelőanyagok égetése során számos környezetszennyező anyag jut a légkörbe, többek között a szén-dioxid, ami üvegházhatást okoz, és a kén-dioxid, ami savas esőket eredményez. Ezek alapján kijelenthető, ha az egyre növvő energia igényeket főként fosszilis tüzelőanyagok égetésével elégítik ki, akkor az nagy mértékű környezetkárosítással jár.

Manapság az energiatermelésben nagymértékben felhasznált másik energiaforrás a nukleáris energia, ami a radioaktív anyagok, főként az urán maghasadásakor felszabaduló energiát hasznosítja. A jelenlegi energia fogyasztás mellett több mint 100 évre elegendő a Föld urán készlete. Ennél az energia termelésnél a nehézséget a maghasadásakor keletkező radioaktív hulladék jelenti, amit a környezettől megfelelően elzárva kell tartani, mivel rendkívül káros a környezetre. További nehézséget jelent az atomerőművek öregedése. 2020-ra az Európában telepített erőművek 80%-a túllépi a 30 éves életkort, ezzel eléri a tervezett üzemidejük végét. A megoldás új erőműveket építeni, vagy a már meglévők élettartamának meghosszabítása.

A megújuló energiaforrások egyre nagyobb hangsúlyt kapnak a világ energia



1.1. ábra. A napsugárzás spektruma

termelésének fedezésében. A szél-, víz-, napenergia kimeríthetetlenül rendelkezésre álló energiaforrások, felhasználásuk során nem keletkezik semmilyen környezetre káros melléktermék.

A napenergia nagy előnye, hogy a világűrben is elérhető. Manapság egyre növekszik a Föld körüli pályán használt műholdak száma, ahol a legkézenfekvőbb energiaforrás a napenergia.

1.2. A napenergia

A Nap a földi élet forrása és nagy mennyiségben rendelkezésre álló energia forrásunk. A Nap az energiáját a magfúzióból nyeri, melynek során hidrogén alakul át héliummá. A Nap évmilliárdok óta működik, ennek ellenére még mindig 72%-a hidrogén, így a Nap gyakorlatilag kimeríthetetlen energia forrásunk.

A Nap hőmérsékleti sugárzásának spektrumát az 1.1. ábra mutatja. Az ibolyakéktől ($\lambda = 0.4\mu m$) a bíborvörösöig ($\lambda = 0.8\mu m$) tartó intervallumban van a legnagyobb intenzitású tartomány, ezért ezen belüli érzékelésre fejlődött ki az emberi szem. A legnagyobb intenzitást a $\lambda = 0.5\mu m$ -nél találjuk.

A napsugárzás a világűrben gyakorlatilag veszteség mentesen terjed, spektruma nem módosul amíg el nem éri a földi atmoszférát. A napsugárzás egy része visszaverődik a légköri képződményeken, másik része elnyelődik az atmoszférában való áthaladás közben, így a Föld felszínét a sugárzásnak csak egy része éri el. A sugárzás intenzitása erősen függ a légkör állapotától, a meteorológiai viszonyoktól.

A sugárzásnak nemcsak az összenergiája változik, hanem a spektruma is, a légkörben található poláros (O_3 , H_2O és CO_2) molekulák hatására. Ezek a molekulák a

rezonancia frekvenciájukkal megegyező hullámhosszú fotonokat elnyelik, felveszik az itt szállított energiát. A magas sztratoszférikus (50km) rétegben az UV tartományban érkező sugárzást az ózon (O_3) szűri. Az alsó troposzférikus (10km) rétegben a víz (H_2O) és a széndioxid (CO_2) a legjelentősebb elnyelő anyagok. A vízgőz 1.1, 1.38, 1.87 és $2.7\mu m$ -nél, a CO_2 pedig $2\mu m$ környékén nyeli el a sugárzást. Az 1.1. ábrán megfigyelhetjük ezen molekulák hatását a földet érő sugárzás spektrumában.

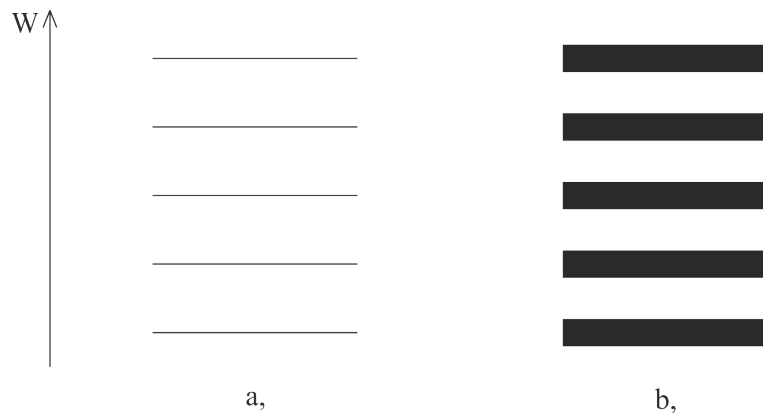
A napsugárzás a Földet mind térben, mind pedig időben egyenetlenül éri. Ahogy a Föld forog a Nap körül változik a Föld felszínére beeső fénysugár beesési szöge. A napelemek hatásfoka a megvilágítás beesési szögétől függ, akkor a legnagyobb a hatásfok, ha a napfény merőlegesen éri a napelem felületét. Mechanikus mozgatással el lehet érni merőleges megvilágítást végig a napsütéses időszakban.

1.3. A napelemek

A jelenlegi technológiákkal elérhető napelemek maximális hatásfoka körülbelül 29%. Az alacsony hatásfok és a magas telepítési és előállítási költségek miatt ezen eszközök energia termelése kevesebb, mint 50GW. Ezért a nagyobb hatásfokú és alacsonyabb költségű napelemek előállítása stratégiai fontosságú.

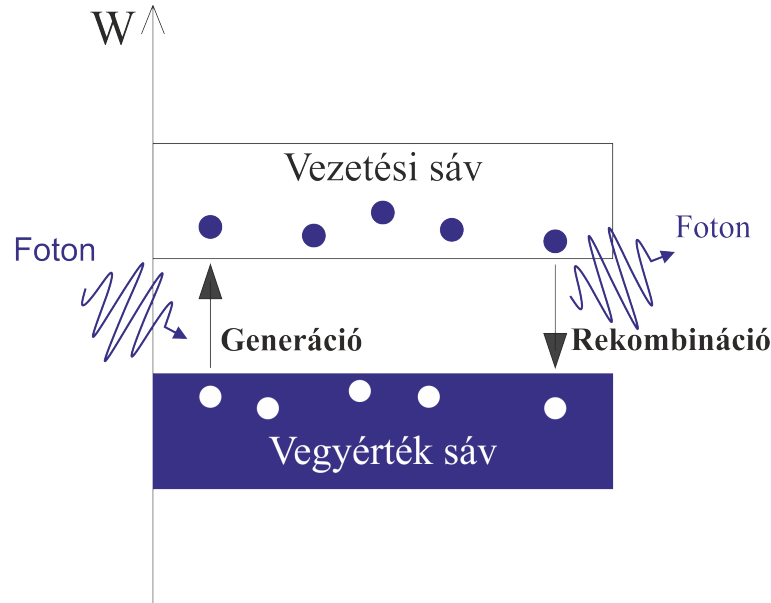
1.3.1. A napelem működése

Különálló atomok elektronhéjain levő elektronok kvantált energiaszinteket foglalnak el. Kristályos szerkezetű szilárd anyagok esetén az atomok diszkrét energiaszintjei szétválnak, és mivel nagyon sok atom alkotja a rácsot ezért folytonos energiasávok jönnek létre (1.2. ábra).



1.2. ábra. A magában álló atom (a) és a kristály (b) elektron energia szintjei

Az elektronok alulról felfele töltik be az energiasávokat. A legfelső teljesen be-



1.3. ábra. Generáció és rekombináció

töltött energiasáv a vegyérték sáv (angolul: valence band), a közvetlenül felette levő sáv a vezetési sáv (angolul: conducting band). Jelöljük a vezetési sáv aljának az energiaszintjét W_c -vel, a vegyértéksáv tetejének az energiaszintjét pedig W_v -vel. A vezetési sáv és a vegyérték sáv közötti energiakülönbséget nevezik tiltott sáv szélességnek (angolul: band gap), és W_g -vel szokás jelölni ($W_g = W_c - W_v$).

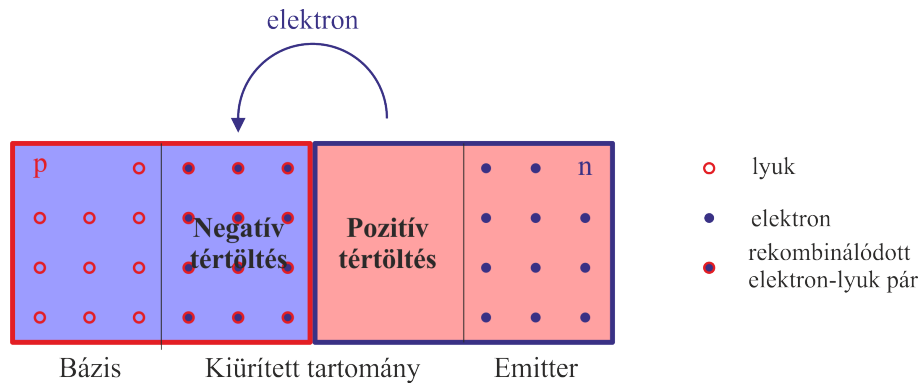
A szilárd anyagokat három csoportba soroljuk aszerint, hogy mekkora a tiltott sáv szélességük. Ha W_g értéke alacsony (kevesebb, mint 2eV) akkor az anyag félvezető, ha nagy (nagyobb, mint 2eV) akkor szigetelő. Ha a vegyérték sáv és a vezetési sáv átfedésben vannak, vagyis $W_c < W_v$ akkor az anyag vezető. A legfontosabb félvezető anyagunk, a szilícium (Si) esetén $W_g = 1.12eV$, a gallium-arszenid (GaAs) esetén $W_g = 1.44eV$.

Egy foton, amelynek energiája nagyobb W_g -nél, képes egy vegyérték sávban levő elektront a vezetési sávba juttatni. Ezt generációnak hívjuk. Ha egy elektron a vezetési sávból visszakerül a vegyérték sávba, akkor egy W_g energiájú foton keletkezik. Ezt rekombinációnak hívjuk (1.3. ábra).

A generáció során a vezetési sávban keletkezik egy elektron, illetve a vegyérték sávban pedig elektron hiány, egy úgynevezett lyuk. Ez az elektron ezután a kristályban szabadon mozoghat. A lyukak is képesek mozogni, úgy ha egy kötött elektron átugrik a lyuk helyére, így a lyuk elmozdult az elektron eredeti helyére. A lyukra lehet úgy tekinteni, mint egy pozitív töltésre, hiszen a helyéről egy elektron, vagyis negatív töltés hiányzik. Tehát egy generációval keletkezik egy szabadon mozgó negatív és egy szabadon mozgó pozitív töltés, az anyag továbbra is semleges maradt.

A rekombináció során ellenkező folyamat játszódik le. Egy vezetési sávban levő elektron egy vegyérték sávban levő lyukkal egyesül.

Adalékolással lehet egy félvezető anyagba lyukakat, vagy szabad elektronokat létrehozni. Például szilícium esetén bór (három vegyérték) hozzáadásával lyukak keletkeznek a rácsban (akceptor adalékolás). Foszfor adalékolás esetén (öt vegyérték) szabad elektronok keletkeznek (donor adalékolás). Az előbbit hívjuk p az utóbbit n típusú félvezetőnek.



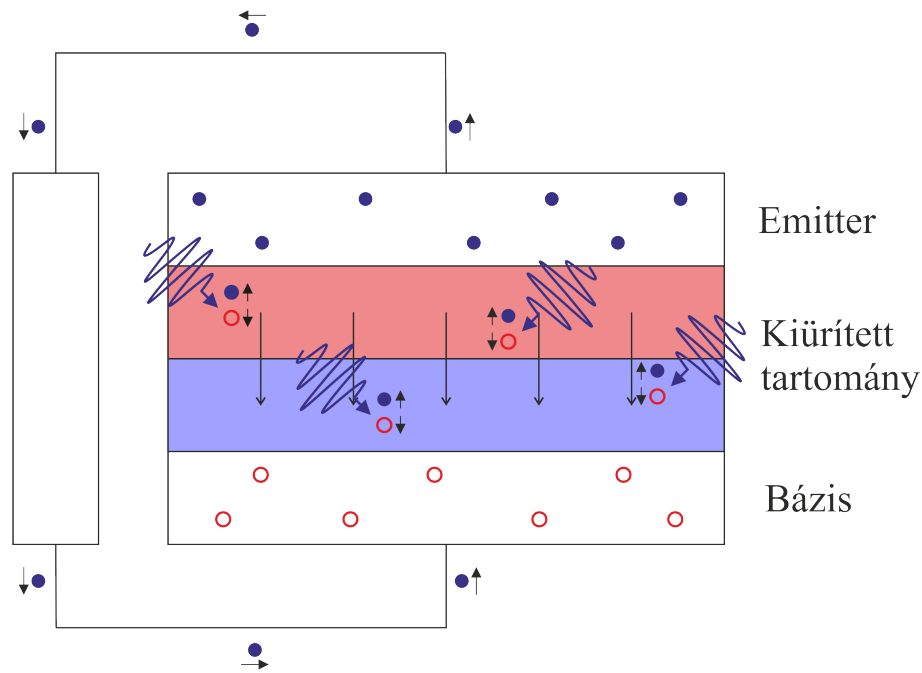
1.4. ábra. A pn-átmenet

Most tekintsünk egy ilyen pn-átmenetet (1.4. ábra). Az n rétegből szabad elektronok diffúziója történik a p rétegbe, ahol azok rekombinálnának a lyukakkal, így az n rétegben elektron hiány (pozitív tértöltés), a p rétegben elektron többlet (negatív tértöltés) jön létre. Ezek a tértöltések elektromos teret hoznak létre. Így a pn-átmenetet három részre oszthatjuk: bázisra (p réteg), emitterre (n réteg) és kiürített tartományra.

Ha ezt a pn-átmenetet megvilágítjuk (1.5. ábra), akkor a W_g -nél nagyobb energiájú fotonok elektron-lyuk párokat generálnak. A kiürített tartományban a tértöltés által létrehozott elektromos tér a fotonok által generált lyukakat a bázis felé, a generált elektronokat az emitter felé mozgatja, így a napfény hatására kialakult töltéshordozók szétválasztódnak. Ha terhelést kapcsolunk a pn-átmenetre, akkor az emitterben felhalmozódott elektronok a terhelésen keresztülhaladva rekombinálnak a bázisban felhalmozódott lyukakkal, így az áramkörben áram fog folyni. Tehát ezzel az elrendezéssel egy napelemet kapunk.

Mint minden átalakítónál, a napelemnél is nagyon fontos a jó hatásfok. A napelem veszteségeket három csoportba soroljuk: rekombinációs eredetű, ohmikus ellenállásból adódó és optikai veszteség.

A rekombináció hasznosulás előtt eliminálja a foton által generált töltéshordozókat, így csökkentve a fotoáramot. Rekombináció egyaránt létrejöhet a bázisban, az



1.5. ábra. A napelem működése

emitterben és a kiürített tartományban. A legjelentősebb a határ felületen létrejövő úgynevezett felületi rekombináció. A kristályhibák, az erős adalékolás mind növelik a rekombináció valószínűségét.

A napelem egyik legnagyobb vesztesége ohmikus eredetű. Ilyen ohmikus veszteségek a bázis és emitter ohmos ellenállása, illetve a fém-félvezető átmenetek ohmikus ellenállása.

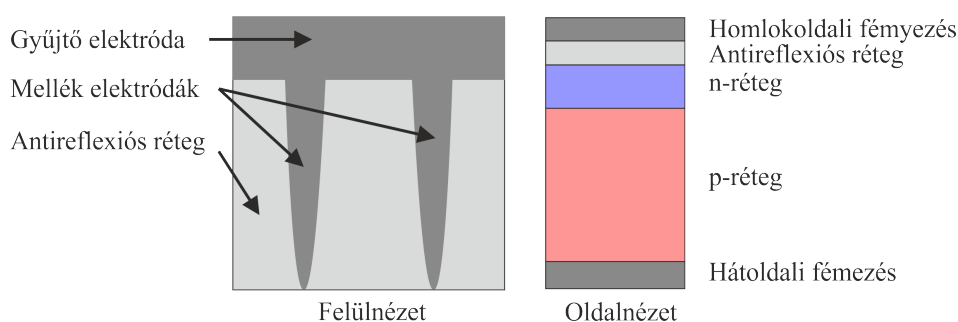
Az optikai veszteségek lehetnek leárnýékolási, reflexiós és transzmissziós eredetűek. A leárnýékolási veszteséget a kivezetés céljából létrehozott fémezés hozza létre. A reflexiós veszteséget a napelem - levegő felületen létrejövő reflexió okozza. Az optikai veszteségek közül utoljára maradt a transzmissziós veszteség, mely az anyagon abszorpció nélkül áthaladó fotont jelenti.

1.3.2. A napelem típusok

Vastagréteg szilícium napelemek

A napelem készítés egyik anyaga a kiforrott és relatív olcsó technológia miatt a szilícium. Az egyik legelterjedtebb és nagy sorozatban gyártott eszköz a pn-átmenetes, egykristályos illetve polikristályos Si-ból készülő struktúra [4]. Az eszköz alapja egy $3\mu\text{m}$ vastag és 10×10 vagy $15 \times 15\text{cm}^2$ felületű p-típusú hordozó. A hordozóban foszfor diffúzióval kb. 900°C -on n^{++} -típusú emitter réteget készítenek (ahol az n^{++} erős donor adalékolást jelent) . A homlokoldali gyűjtőelektódákat és a hátoldali

kontaktust a vastagréteg technológiában szokásos alumínium illetve ezüst tartalmú pasztával hozzák létre. A struktúra az 1.6. ábrán látható. A homlokoldali áramgyűjtő kontaktusok (mellélelektrodák) kb. $100\mu\text{m}$ szélesek, két ilyen vezetőcsík közti távolság pedig 2-3 mm. Az előbbi elektrodákra merőlegesen futó, vastagabb vezető kapcsolja össze a mellélelektrodákat. Ez a vezető teremt kapcsolatot a külvilággal. Ennek a struktúrának a legnagyobb hátránya, hogy a homlokoldali vezetők miatt nagy a leárvényekölési veszteség. Ennek a veszteségnek a csökkentése érdekében csökkenteni kell az elektrodák méreteit. Ennek hatására viszont megnő a napelem ohmikus vesztesége. Így a gyűjtőelektrodák méret kialakításánál optimalizálni kell a minimálisan letakart felületet és a kontaktus soros ellenállása között.



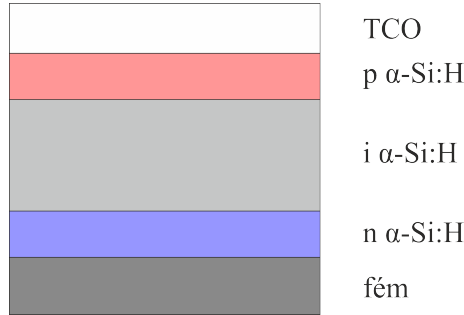
1.6. ábra. Vastagréteg kontaktusú napelem cella

Az előbbi cella egy továbbfejlesztett változata szintén széles körben elterjedt. A reflexiós veszteség csökkentése érdekében a felületre antireflexiós réteget tesznek. Ezzel a technológiával egykristályos (Czochralski) alapanyag esetén 15-17 %, míg polikristályos anyag esetén 13-15 %-os hatásfok érhető el.

Ezeknek a vastagréteg kontaktusú celláknak a technológiája teljesen kiforrott és megbízható, gyártásuk nagy sorozatban történik. A cellákat modulokba integrálják. A drága vágási technológia és a darabolási veszteség miatt a hordozó a modul árának több mint a felét teszi ki. Ezen arány javítására egyre nagyobb méretű és vékonyabb szeleteket alkalmaznak.

Vékonyréteg napelemek

Térjünk át a vékonyréteg napelemekre. Igen elterjedt az amorf szilícium alapú konstrukció [5]. Az amorf Si vékony réteg leválasztása szilán (SiH_4) bontása által különböző CVD (Chemical Vapor Deposition) eljárásokkal (termikus-CVD, foto-CVD és plazma-CVD) történhet. A plazmával segített CVD (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition, PECVD) a legelterjedtebb az amorf Si előállításában. A réteg leválasztás során a technológiai paraméterek változtatásának függvényében hidrogén



1.7. ábra. Amorf szilícium napelem

épül be a leválasztott amorf Si-ba megkötve a szabad kötéseket. Ez az úgynevezett α -Si:H. Az α -Si:H-ból készülő napelem működésének alapja szintén a pn-átmenet. Az adalékolás a PECVD eljárás során p-típusú esetben diborán (B_2H_6), n-típusú esetben foszfin (PH_3) gáznak a reakciótérbe engedésével történik. Az α -Si:H alapú napelemeknél a pin-struktúra a szokásos, ahol a széles ($0.5\text{-}0.7\mu\text{m}$) abszorpciós *i* intrinsic réteget vékony (kb. 50nm) p^+ illetve n^+ -réteg veszi közre. Egy ilyen napelem struktúráját mutat az 1.7. ábra. Az elektromos kontaktus üvegre felvitt átlátszó vezető oxid, többnyire indium-ón-oxid (*ITO*) vagy óndioxid (SnO_2).

A nagyobb hatásfok elérése érdekében vegyület félvezetőket is alkalmaznak a napelem gyártásban. A megfelelő anyag választással és ezek heteroátmeneteivel igen sokféle napelem struktúra alakítható ki. A napelem gyártásban használatos vegyület félvezetők direkt sáv szerkezetűek, ebből következően nagy az abszorpciós képességük. Egy ilyen anyagnál elegendő néhány μm a fény teljes elnyeléséhez, a megfelelő tiltottsáv megválasztása pedig jóval nagyobb hatásfokot eredményezhet, mint a kristályos Si-mal elérhető. Ezek vékonyréteggént leválaszthatók üvegre vagy akár milyen fémfelületre. Előnyük az anyagtakarékosság és a lehetséges nagy modulméret. Hátrányuk a nem olyan kiforrott a technológia, mint a Si esetében, így drágább az ilyen eszközök előállítási költsége. A napelem készítésben alkalmazott fontosabb vegyület félvezető anyagok: $CuInSe_2$, $CdTe$, $CuGaSe_2$ és $GaAs$. Ezekből az anyagokból igen változatos struktúrák (például heteroátmenetes-, tandem-, MIS-szerkezetek stb.) alakíthatók ki.

2. fejezet

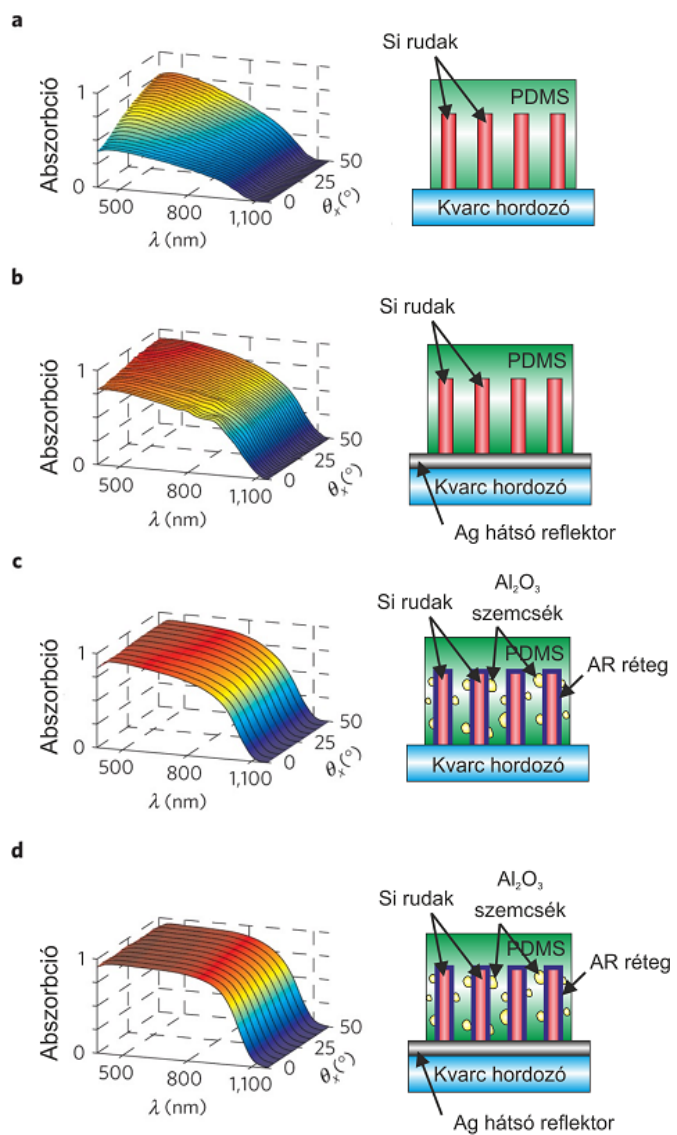
Nanorúd napelem cella

2.1. Szilícium nanorúd cella, mint fotovoltaiikus eszköz

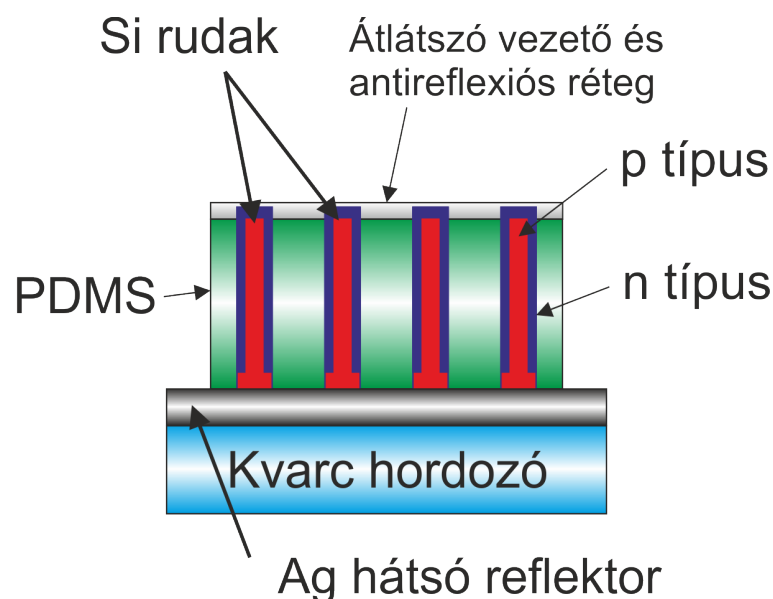
A Si nanorúd tömb (Si nanowire array) ígéretes struktúra a Si felhasználásra napelem eszközökben[6, 7, 8, 9, 10]. A rudak képesek nagy hullámhossz és beesési szög tartományban elnyelni a napfényt, annak ellenére, hogy a hordozón az általuk elfoglalt terület töredéke a hordozó teljes felszínének. A közelmúltban kimutatták, hogy a hordozó felszínének kevesebb, mint 5%-át foglalják el a rudak, akkor is elérhetnek akár 95%-os abszorpciót, illetve elnyelheti a tiltottsáv feletti napsugárzás 85%-át[11, 12]. A Si nanorudakat lehet növesztetni sokféle hordozókra (például üveg) VLS (Vapor-Liquid Solid) növesztési eljárással[13].

A 2.1. ábra egy négyzetesen kialakított rúd struktúra abszorpcióját mutatja. A rudak $67\mu\text{m}$ magasak, és a hordozó felületének 4.2%-át foglalják el. A Si mennyiség megegyezik egy $2,8\mu\text{m}$ vastagságú Si vékonyréteggel. Ha a rudakat egy egyszerű kvarc szeletre növesztjük (2.1. a, ábra), akkor a csúcs abszorpció viszonylag alacsony, és jelentősen csökken más beesési szögekre. Most egészítsük ki a struktúrát egy ezüst (Ag) hátsó reflektorral (2.1. b, ábra). Ez egy kontaktust jelenthet, illetve az optikai úthosszat is megnöveli. A további abszorpció növekedés érdekében, két további változtatást vezettek be (2.1. c, és d, ábra). A polidimetilszilokán (PDMS) felvitele előtt, egy Si_3N_4 antireflexiós réteget (AR) viszünk fel a rudakra (80nm névleges vastagság). Továbbá Al_2O_3 szemcsékkel ($0.9\mu\text{m}$ névleges átmérő) bővítjük a PDMS-t, hogy azok szórják a rudak közt elhaladó fényt. Látható, hogy ezzel a struktúrával magas abszorpciót kaptunk a teljes beesési szög és teljes frekvencia tartományban a tiltott sáv szélesség felett.

A 2.2. ábrán a nanorúd napelem felépítése látható. A nanorúd napelem ese-



2.1. ábra. A Si nanorúd struktúra abszorpciója



2.2. ábra. A nanorúd napelem felépítése

tében a p-n átmenetet úgy lehet létrehozni, hogy p adalékolású szilícium rudakat növesztünk az ezüst rétegre. Ezután donor adalékolással előállítjuk az n réteget a p típusú rudak külső részén. Így létre jön a p-n átmenet. Az ezüst réteg amellet, hogy visszaveri a fényt, így növelve az abszorbcíót a p réteg kontaktusaként is funkcionál. Az n réteg kontaktusát a napelem tetejére felvitt átlátszó vezető réteggel (ITO) lehet megoldani.

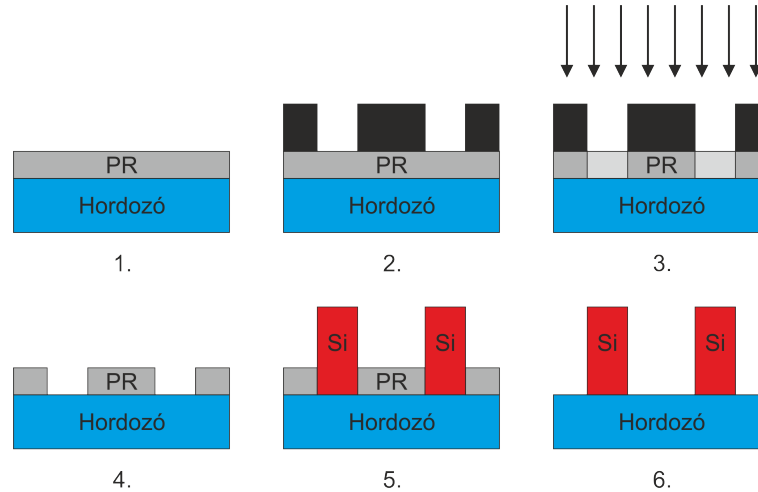
Nanorúd napelemet készíteni nem csak szilícium felhasználásával lehetséges. Vegyület félvezetkekből is készíthető ilyen struktúrájú napelem[14]. Ilyen vegyületfélvezetők lehetnek InN [15] vagy $GaAs$ [16].

2.2. A nanorudakat tartalmazó napelem cella készítéséhez szükséges fontosabb technológiai lépések ismertetése

2.2.1. Fotolitográfia

A *fotolitográfia* (angolul: *photolithography*) egy olyan gyártási eljárás, amelynek segítségével kis méretű mintázatot lehet létrehozni egy hordozó felületén.

Ha a hordozó felületének csak egyes adott részén szeretnénk alkalmazni egy technológiai eljárást (adalékolás, fémzés maratása, anyag növesztés), akkor ezt fotolitográfia segítségével tudjuk megtenni.



2.3. ábra. A fotolitográfia technológiai lépései

A fotolitográfia során egy speciális anyagot használnak, amit *fotorezisztnek* (angolul: *photoresist*) hívnak. Ez egy fényérzékeny szerves anyag. Két fajtája létezik. Van pozitív és negatív fotoreziszt. A pozitív reziszt alap állapotában nem oldható, megvilágítás után oldhatóvá válik. A negatív reziszt pont az ellenkezője, vagyis alap állapotában oldható, megvilágítás után oldhatatlanná válik.

Most nézzük meg, hogy lehet előállítani fotolitográfia felhasználásával a Si nanorúd sztruktúrát egy hordozóra. Ezen a példán keresztül vázlatosan ismertetem a fotolitográfia főbb technológiai lépéseit (2.3. ábra).

1. A hordozó felületének megtisztítása után az első lépés a fotoreziszt felvitele. Ez úgy történik, hogy a rezisztet felcseppentjük a hordozóra, majd spin coat eljárást alkalmazva kialakul az egyenletes reziszt vékonyréteg a hordozó felületén.
2. A fotorezisztel bevont hordozó fölé helyezett fotomaszkon keresztül megvilágítjuk a reziszt egyes részeit. A megvilágítás hatására a fotoreziszt maszk által nem takart részei oldhatóvá válnak.
3. A hordozót az előhívó folyadékba tesszük. Mivel ebben a példában pozitív rezisztet használunk ezért az előhívó egy olyan speciális folyadék ami csak a megvilágított részeket oldja, a nem megvilágítottakat pedig nem. Negatív reziszt esetén pedig olyan lenne, hogy csak a nem megvilágított részeket oldaná.
4. lépés a rudak növesztése. Abban az esetben, ha a hordozóra nem lehet közvetlenül Si nanorudat, akkor a növesztés előtt fel kell vinni olyan vékonyréteget amiről lehetséges. Ilyen anyag például az *ITO*[17].

5. lépés a reziszt eltávolítása. Itt olyan oldószert kell használni, ami a rezisztet feloldja de a hordozóban és az előző lépésben kialakított struktúrában nem tesz kárt.

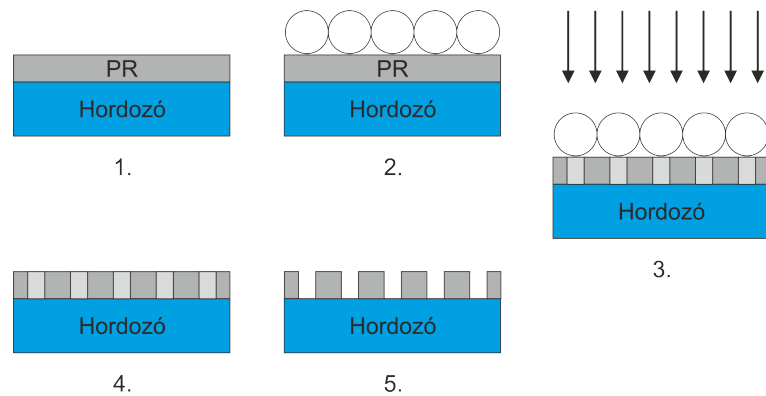
A hagyományos fotolitográfia eljárásban szükség van fotomaszkra (3. lépés). A maszk egy króm vékonyréteg amelyen elektron sugaras litográfiával (Electron Beam Lithography, EBL) aperturákat nyitottak. Az elektron sugaras litográfiával kis-méretű, nagy sűrűségű és pontosságú mintázatokat lehet kialakítani, viszont nagy költségű és lassú eljárás. Így a fotomaszkkészítés drága és hosszadalmas folyamat. A fotolitográfia többi technológiai lépéseiben felhasznált anyagok nem túl költségesek, így a fotolitográfia költségét a maszkkészítés ára határozza meg.

2.2.2. Nanogömb fotolitográfia

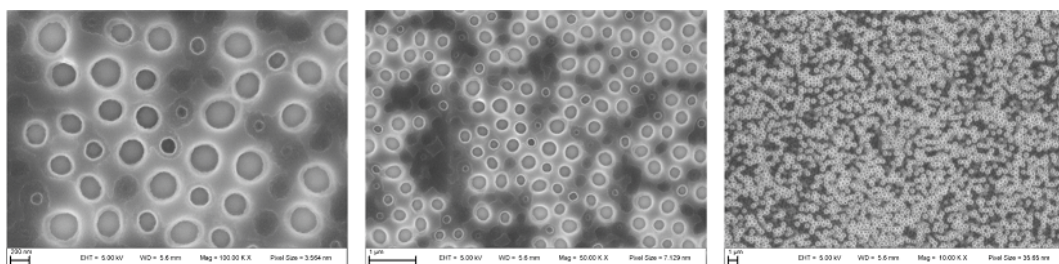
A *nanogömb fotolitográfia* (*NanoSphere Photolithography, NSP*) egy speciális fotolitográfia [18, 19, 20]. Az NSP-nél nem drága fotomaszkot használunk a fény fókuszálására, hanem egy réteg nano dielektromos gömböt. Ezek a nanogömbök alacsony költséggel előállíthatók és akár nagy felületre is felvihetők önszerveződési eljárások alkalmazásával. Ebből következik, hogy olcsóbb a hagyományos fotolitográfiánál. Hátránya, hogy csak periodikus lyuk illetve rúd mintázatot lehet elkészíteni vele, ellentétben a hagyományos fotolitográfiával, ahol majdnem bármilyen mintázat megvalósítható. Tehát nem tudunk mindenhol NSP-t használni, ahol hagyományos fotolitográfiát használunk (például integrált áramkörök), de egyes speciális nanostruktúráknál alkalmazható, mint például a dolgozatban vizsgált nanorúd napelemnél.

Az NSP főbb technológiai lépései a 2.4. ábrán láthatók.

1. lépés a hordozó felületének megtisztítása és a reziszt felvitele spin coat technikával.
2. lépés a nanogömbök felvitele. A gömböket Langmuir-Blodgett (LB) technológiával vihetjük fel.
3. lépés a megvilágítás. A fényt a gömbök fókuszálják.
4. lépés a gömbök eltávolítása. A hordozót olyan oldószerbe tesszük ami a gömböket feloldja, viszont a rezisztet nem.
5. lépés az előhívás



2.4. ábra. A nanogömb fotolitográfia technológiai lépései



2.5. ábra. Az előhívott reziszt három pásztázó elektron mikroszkóppal készített képe. Az ábrákon ugyanaz a minta látható, három különböző nagyításban.

Ezek a lépések, majdnem megegyeznek a hagyományos fotolitográfia technológiai lépéseivel. A különbség, hogy itt maszk helyett gömböket teszünk a reziszt fölé (2. lépés), és a gömböket kémiai módszerrel kell eltávolítani (4. lépés).

A 2.5. ábrán pásztázó elektron mikroszkóppal (Scanning Electron Microscopy, SEM) készült kép látható az előhívott rezisztről. A képet az MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézetének Kerámiák és nanokompozitok osztályán készítették. Itt az NSP-hez használt gömbátmérő 430nm, az expozíciós idő 0.6s és az előhívási idő 35s és az alkalmazott fény hullámhossza 405nm.

A nanogömbök fókuszálják a fényt így előhívás után minden gömb alatt kialakul egy lyuk. Tehát az NSP-vel kialakított mintázatnak a rácsállandója megegyezik a gömb réteget alkotó gömbök átmérőjével. Ha csökkentjük a gömb átmérőt, akkor elérünk egy határ helyzetet, amitől kezdve már nem fókuszálják megfelelően a gömbök a fényt így nem alakul ki megfelelő mintázat a rezisztben. Tehát minden hullámhosszra és reziszt vastagságra van egy minimális rácsállandó amit még el lehet érni az NSP-vel.

A másik két kritikus paraméter az NSP eljárásnál a megfelelő expozíciós és előhívási idők megválasztása. Túl rövid expozíció esetén nem nyel el a reziszt megfelelő mennyiségű fényt, így előhívás után nem alakul ki mintázat a rezisztben. Ha túl

hosszú az expozíció, akkor a nem kívánt részek is elegendően nagy dózist kaphatnak ahhoz, hogy előhívódjanak. Ha az előhívási idő túl kevés, akkor a kialakult lyukak nem lesznek elég mélyek. Ha túl hosszú az expozíció, akkor a nem kívánt részek is előhívódhatnak.

3. fejezet

A szimulációs módszer ismertetése

A dolgozat további részében az NSP numerikus szimulációjával foglalkozom. A cél meghatározni merőleges beesésű betáplált síkhullám esetén az elektromos térerősséget (\mathbf{E}) a vizsgálati tartományban. A számításokat véges elem módszerrel végeztem.

3.1. A peremérték feladat megfogalmazása

Határozzuk meg a vizsgálati tartomány belsejében megoldandó parciális differenciál egyenletet. A frekvencia tartományban oldjuk meg a térszámítási feladatot, ezért az elektromos és mágneses térerősségeket írjuk fel komplex fázorokkal. Így az első két Maxwell egyenlet a következő alakban írható:

$$\nabla \times \mathbf{H} = j\omega\epsilon\mathbf{E}, \quad (3.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -j\omega\mu\mathbf{H}, \quad (3.2)$$

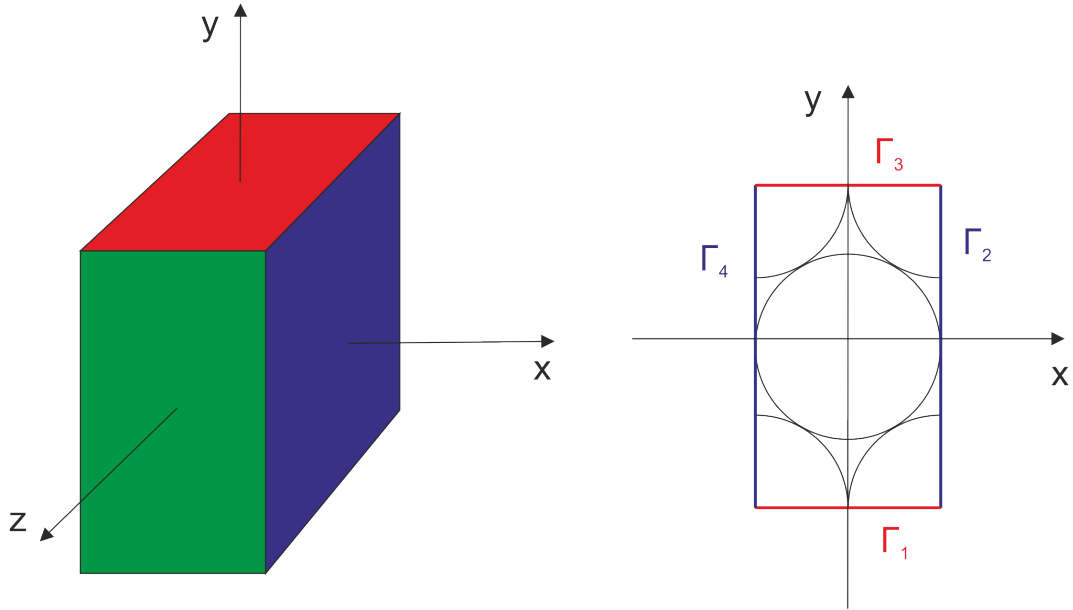
ahol \mathbf{H} a mágneses térerősség, ω a körfrekvencia, μ a mágneses permeabilitás és ϵ a komplex elektromos permittivitás $\epsilon = \epsilon_0\epsilon_r$. Az ϵ_r a komplex relatív dielektromos állandó. Képezzük az 3.2 egyenlet rotációját:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = -j\omega\mu\nabla \times \mathbf{H}. \quad (3.3)$$

A 3.3 és a 3.1 egyenlet felhasználásával, és a $k^2 = \omega^2\epsilon\mu$ jelölést bevezetésével, a következő egyenletet kapjuk:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k^2\mathbf{E} = 0. \quad (3.4)$$

Mivel a számításokhoz használni fogunk tökéletesen illesztett réteg peremfeltételt, ezért az elektromos térerősséget fel kell bontani beiktatott (\mathbf{E}^i) és szórt (\mathbf{E}^s) összetevőkre, vagyis $\mathbf{E} = \mathbf{E}^i + \mathbf{E}^s$, amiből a beiktatott összetevőt mi írjuk elő, így az



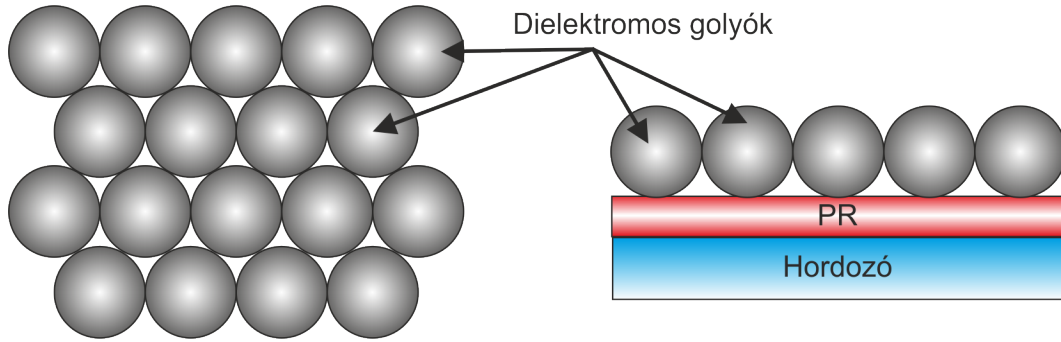
3.1. ábra. Az elemi cella

új ismeretlen a szórt összetevő lesz. A beiktatott összetevőt válasszuk x polarizációjú z irányban haladó síkhullámnak, vagyis $\mathbf{E}^i = E_0 e^{-jk_0 z} \mathbf{e}_x$, ahol $k_0^2 = \omega^2 \epsilon_0 \mu_0$ és \mathbf{e}_x az x irányú egységvektor. Ezek alapján felírható a $k^2 = \epsilon_r k_0^2$ összefüggés. Ezt a 3.4 egyenletbe behelyettesítve a következőt kapjuk:

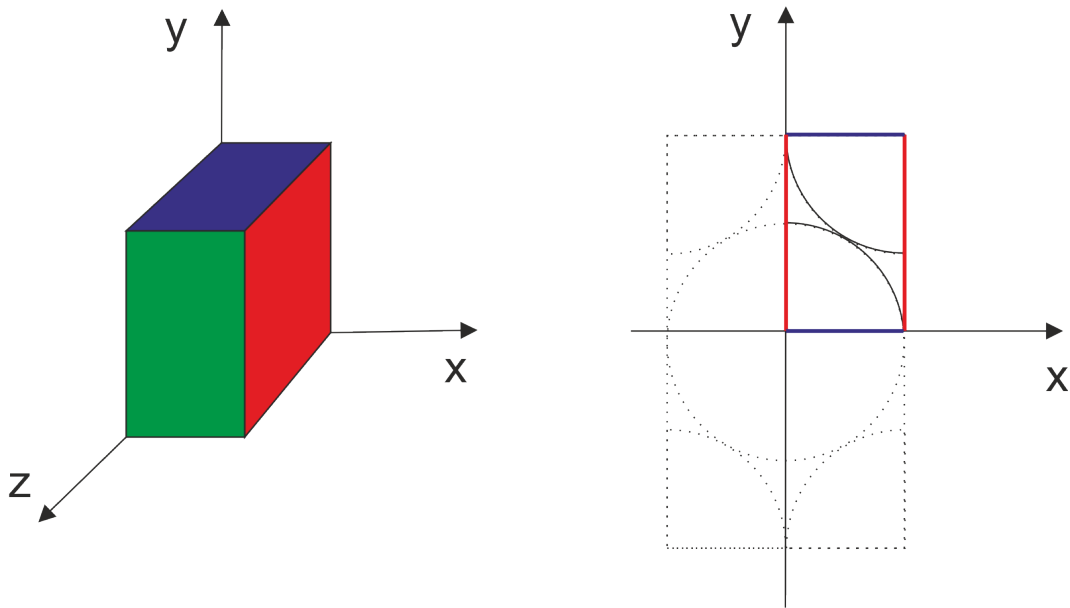
$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}^s - k^2 \mathbf{E}^s = (\epsilon_r - 1) k_0^2 \mathbf{E}^i. \quad (3.5)$$

Ebben az egyenletben az \mathbf{E}^s az ismeretlen. Tehát \mathbf{E}^s -re kaptunk egy ugyanolyan típusú egyenletet, mint a 3.4 egyenlet. Ezt a parciális differenciál egyenletet kell megoldani a vizsgálati tartományon.

Fogalmazzuk meg milyen peremfeltételeket kell előírni a vizsgálati tartomány határain. A szimulálandó feladat egy $x - y$ irányokban végtelen periodikus struktúra. A periodicitás miatt elegendő egy elemi celláját vizsgálni (3.1. ábra). A kézzel és pirossal jelölt határoló felületekre periodikus peremfeltételeket kell előírni, vagyis $\mathbf{E}_{\Gamma_1} = \mathbf{E}_{\Gamma_3}$ és $\mathbf{E}_{\Gamma_2} = \mathbf{E}_{\Gamma_4}$. Azokon a peremeken ahol a teljesítményt betápláljuk, illetve kivezetjük, vagyis a zölddel jelölt határookra tökéletesen illesztett réteget (Perfect Matched Layer, PML) kell tenni. A PML feladata reflexió mentes lezárást biztosítani ezekre a peremekre.



3.2. ábra. A vizsgálandó elrendezés



3.3. ábra. Az elemi cella negyede

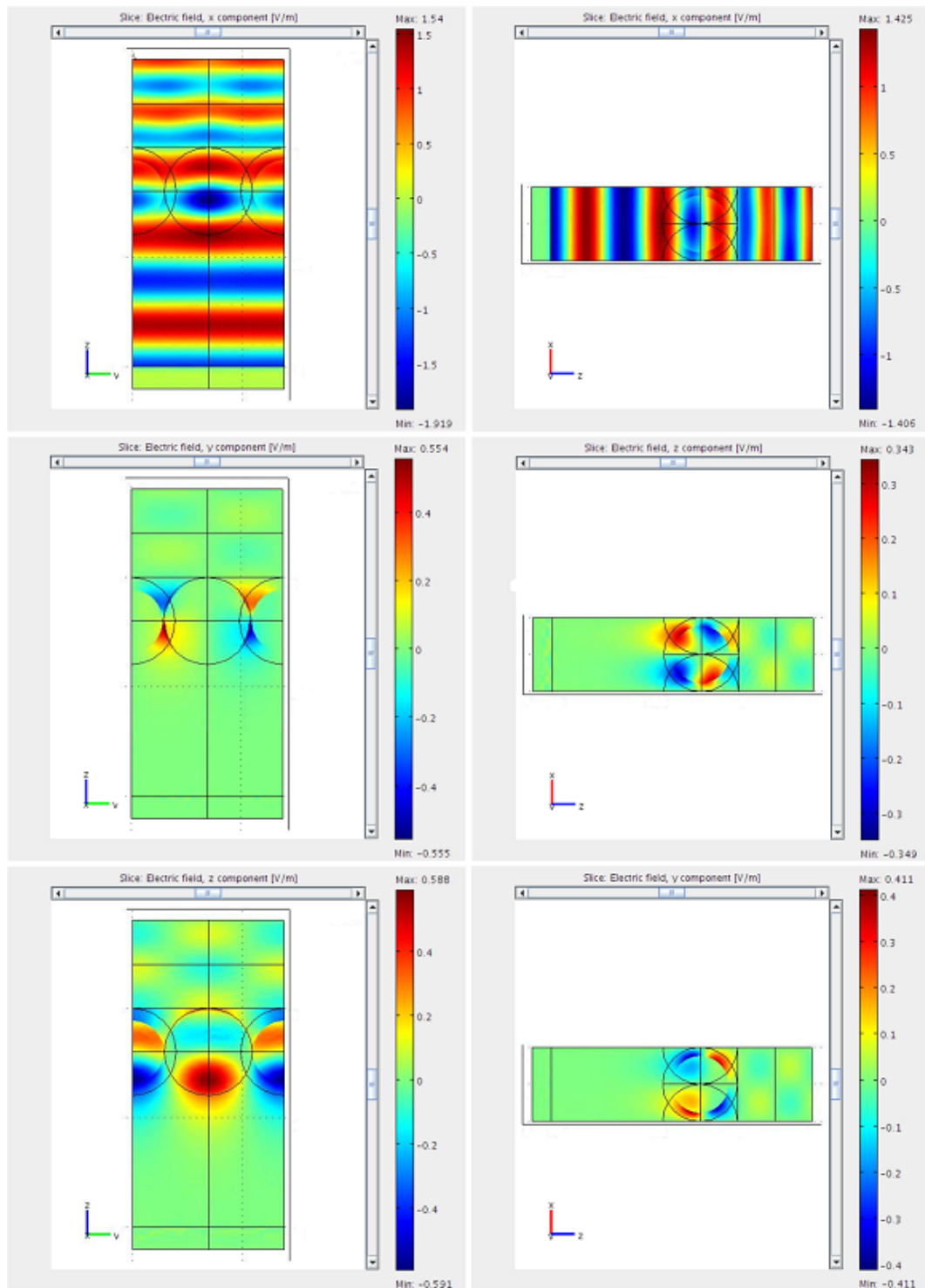
3.2. A vizsgálati tartomány

3.2.1. A vizsgálati tartomány egy réteg gömb esetén

A 3.2. ábrán látható az elrendezés amit a továbbiakban vizsgálni fogok. Ez a hagyományos elrendezése az NSP-nek, ami tartalmaz egy hordozót az erre felvitt rezisztivel, és dielektromos gömböket. A számítások során végtelen vastagnak tekintem a hordozót. A gömbök szorosan pakolt hatszög rácsban helyezkednek el.

A 3.4. ábrán az előző részben definiált peremérték feladat megoldása látható. Az ábrán az elektromos térerősség komponensei (E_x, E_y, E_z) láthatók egy $x = konstans$ és egy $y = konstans$ síkban. Az ábráról le lehet olvasni a kialakult elektromos térnek a következő tulajdonságait:

1. $E_x(x) = E_x(-x)$



3.4. ábra. Az elektromos térerősség a vizsgált elrendezésben. Az ábrákon megfigyelhető, hogy a tereeloszlások szimmetrikusak ezért elegendő az elemi cella negyedét vizsgálni. Mondd meg a hullámhosszat, gombátmérőt, rezisztvastagságot. Gömbátmérő 400nm, hullámhossz 405nm és a rezisztvastagság 200nm.

2. $E_x(y) = E_x(-y)$
3. $E_y(x) = -E_y(-x)$
4. $E_y(y) = -E_y(-y)$
5. $E_z(x) = -E_z(-x)$
6. $E_z(y) = E_z(-y)$

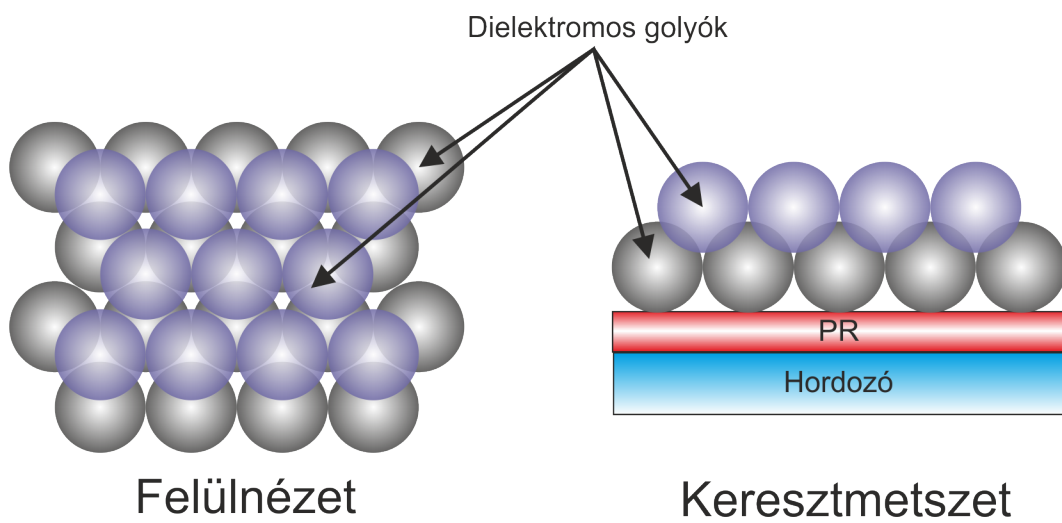
Szimulációkkal igazoltam, hogy ezek a tulajdonságok fennállnak az egész tartományban az általam későbbiekben vizsgálandó gömb átmérőkre $405nm$ hullámhosszúságú megvilágítás mellett. Ezért elég az elemi cella $x > 0$ és $y > 0$ részében ismerni a megoldást, mert a többi részben is megkaphatjuk a térerősségeket a fenti transzformációk alkalmazásával. Tehát elegendő a 3.3. ábrán látható elrendezést vizsgálni. Ha még egyszer megnézzük a fenti tulajdonságokat akkor arra a következtetésre juthatunk, hogy a 3.3. ábrán látható piros peremeken az elektromos térerősségnek csak normális irányú komponense van, a kék peremeken pedig csak tangenciális komponense van. Vagyis az alkalmazandó peremfeltétel a piros tartományon tökéletes elektromos vezető (Perfect Electric Conductor, PEC), a kék peremeken pedig tökéletes mágneses vezető (Perfect Magnetic Conductor, PMC). Tehát nem kell a számításokat a teljes elemi cellán végezni, elegendő az elemi cella negyedén.

Ez a megállapítás azért fontos, mert a számításokat numerikus eljárással végzem, aminek nagy a memória felhasználása illetve hosszú lehet a futási ideje. Ezzel az észrevétellel lecsökkentettük a negyedére a vizsgálati tartományt, így memóriát és futási időt spóroltunk.

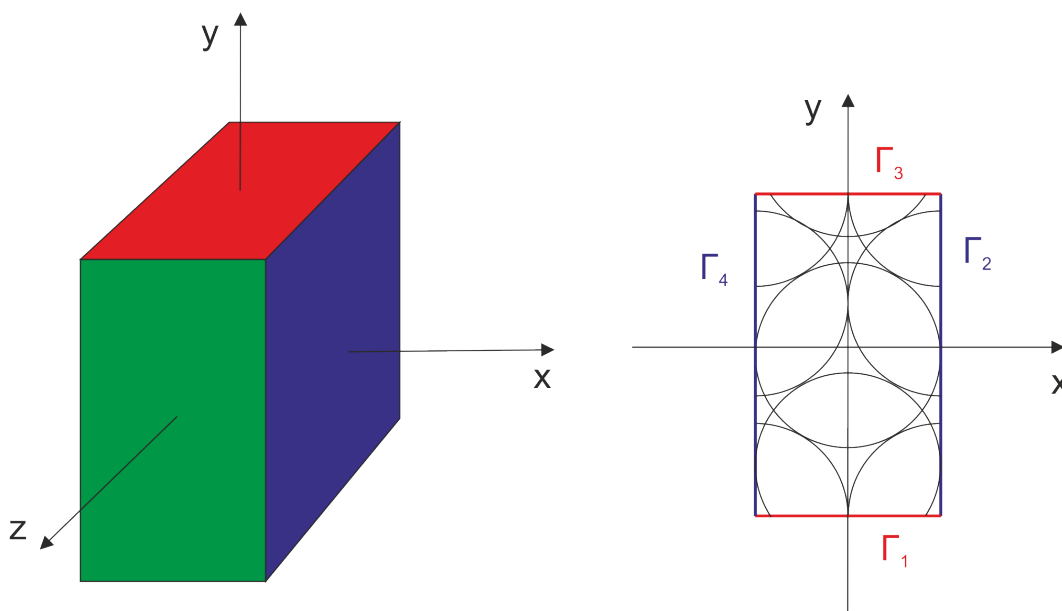
3.2.2. A vizsgálati tartomány két réteg gömb esetén

Nem csak az egy réteg gömböt tartalmazó elrendezést fogom vizsgálni, hanem a 3.5. ábrán látható struktúrát is. Az elrendezés az előzőhöz képest annyiban változott, hogy még egy réteg gömböt felvittünk az eredeti rétegre. Ez a réteg ugyanolyan átmérőjű gömbökből áll, mint az alsó réteg, a törésmutatója viszont különbözhet.

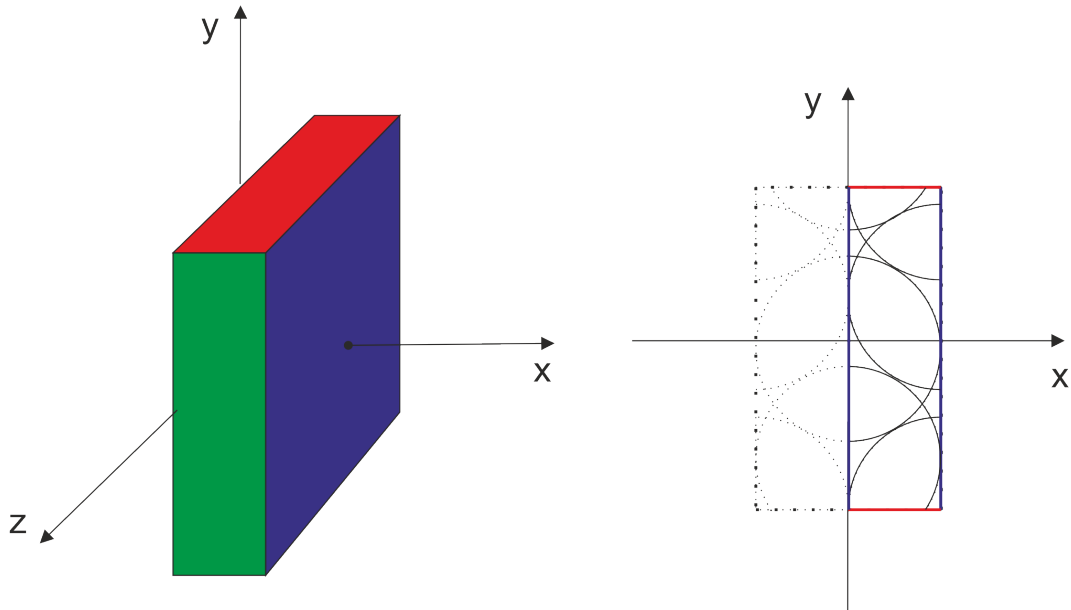
Ez a struktúra is periodikus. Az elemi celláját a 3.6. ábra mutatja. Az előző esetben elég volt ennek a tartománynak a negyedét vizsgálni. Ebben az esetben viszont nem lehet ezt az egyszerűsítést alkalmazni, mert ha elvégezzük az elemi cellára a számításokat, akkor azt kapjuk, hogy a Γ_1 és Γ_3 peremeken az elektromos tér tangenciális összetevője nem nulla. Annál az elrendezésnél tehát nem alkalmazhatjuk az elemi cella negyedét vizsgálati tartományként PEC, PMC peremfeltételekkel, mint



3.5. ábra. Az elemi cella két réteg gömböt tartalmazó struktúra esetén



3.6. ábra. Az elemi cella két réteg gömböt tartalmazó struktúra esetén



3.7. ábra. Az elemi cella fele

az ez előző esetről. Azonban itt is van lehetőség a vizsgálati tartomány csökkentésére. A szimulációval beláttam, hogy a tartomány felét elég vizsgálni. Ez a tartomány az 3.7. ábrán látható. Az alkalmazott peremfeltételek pedig a kék peremeken PEC, és pirosakon pedig periodikus peremfeltétel. Tehát a két gömb réteg vizsgálatához több, mint kétszer akkora vizsgálati tartományra lesz szükségünk, mint egy réteg gömb esetén.

3.3. A véges elem módszer

A dolgozatban a numerikus térszámításhoz véges elem módszert[21] (Finite Element Method, FEM) használok, ami a teret leíró differenciál egyenletek megoldását közelíti. A FEM első lépés a vizsgálandó tartomány felosztása véges nagyságú, könnyen leírható geometriájú (2D-ben általában háromszög vagy négyszög, 3D-ben pedig tetraéder vagy hexaéder) kisebb térrészekre. Ezeket a térrészeket hívjuk véges elemeknek, míg a felosztást, amivel az elemeket elválasztjuk hálónak. A véges elemeken belül a megoldást az élei között interpolált polinom egyenletekkel közelíti a FEM megoldó program. A közelítéshez meg kell adni a teret leíró differenciál egyenleteket, és a határoló felületek viselkedését leíró egyenleteket, az úgynevezett peremfeltételeket.

A véges elemes eljárás egyik kritikus lépése a háló generálás. A generált háló minősége határozza meg, hogy a kapott megoldás mennyire tér el a valóságtól a véges méretű térrészekre történő felosztása miatt. Minél kisebb részekre bontottuk fel a teljes teret, annál pontosabb eredményt kapunk, azonban a háló finomítása

megnöveli a szükséges számítási kapacitást, amitől megnő a kiszámításhoz szükséges idő, és a számításhoz szükséges memória. Illetve ha még tovább növeljük a pontosságot, akkor a probléma megoldhatatlanná válik. Egy véges elemes probléma számolás igényét jól jellemzi a véges elemek száma, tehát az, hogy hány kisebb térrészre osztottuk fel a vizsgált tartományt. Ennél még pontosabb információt ad a bonyolultságról a rendszer szabadság fokainak száma, amit a végeselemek kapcsolódási felületeinek száma határoz meg. Mivel a számítási kapacitás korlátozott, ezért a háló generálásánál nagyon körültekintően kell eljárni, hogy a probléma megoldható maradjon, de ennek ellenére kellően pontos eredményt kapjunk.

A véges elemes számítások elvégzéséhez COMSOL MULTIPHISICS programcsomag RF modulját használtam[22]. A COMSOL könnyen kezelhető felületet biztosít a modell felépítésére, a háló generálására, a peremérték feladat megadására. Ezek mellett az is meg kell említeni, hogy a vizsgálandó probléma elméleti háttérének ismerete nélkül nem tudjuk hatékonyan használni a szoftvert, ezért hibás eredményt kaphatunk, vagy a jó eredményhez szükségtelenül sok erőforrást kell felhasználnunk. Elmondható tehát, hogy ezek a programok nagy segítséget nyújtanak, de kellő háttértudás nélkül nem alkalmazhatóak. Továbbá a COMSOL-ban nincs lehetőség paraméterezett geometriájú feladatot megoldani, viszont a feladatom különböző gömb átmérőkre kiszámolni megoldani a peremérték feladatot. Ehhez a MATLAB programot fogom használni. A MATLAB-ban lehet használni a COMSOL függvényeit. Így a szimulációkat úgy végeztem el, hogy írtam egy MATLAB eljárást (ami COMSOL függvényeket használ) ami különböző gömb átmérőkre elvégzi a szükséges számításokat, és elmenti az eredményeket. Az eredményeket olyan formátumban menti le, amelyeket a COMSOL be tud olvasni, így a postprocesszálást már COMSOL grafikus környezetében végeztem.

4. fejezet

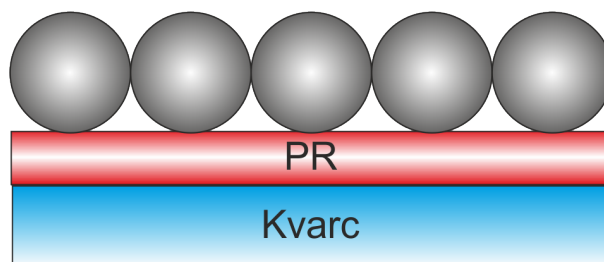
A szimulációs eredmények

A szimulációkat MICROCOMPOSIT S1805 pozitív 200nm vastagságú rezisztet használó NSP-re végzem el. Az alkalmazott megvilágítás hullámhossza 405nm. Az előző fejezetben ismertetett szimuláció eredményeként megkaptuk a megvilágítás hatására keletkezett elektromágneses tér energiasűrűségét (amit a $0.5\epsilon|\mathbf{E}|^2 + 0.5\mu|\mathbf{H}|^2$ képlettel lehet meghatározni) a rezisztben. Az energiasűrűség eloszlásából lehet következtetni az előhívás után kialakuló mintázatra. Ebben a fejezetben ismertetem ezeket az eredményeket egy illetve két réteg gömb esetére.

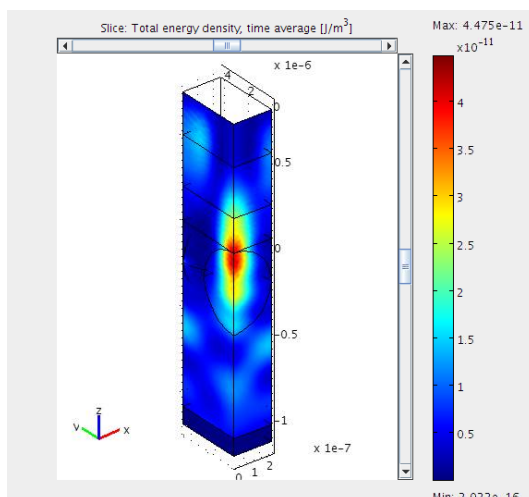
4.1. Nanogömb fotolitográfia egy réteg gömb esetén

4.1.1. Kvarc hordozón végzett litográfia

Az 2.1. a és c ábrán látható struktúra előállításához használt NSP elrendezés a 4.1. ábrán látható. A reziszt kvarc hordozón van. Ebben a részben ezzel az elrendezéssel foglalkozom. Meghatározom az elektromágneses tér energiasűrűség eloszlását a rezisztben, és ez alapján becslést adok az előhívás után kialakuló mintázatra. A szimulációkat öt féle törésmutatójú (1.3; 1.4; 1.5; 1.6 és 1.7) gömb réteg esetén végeztem el.



4.1. ábra. A vizsgált elrendezés

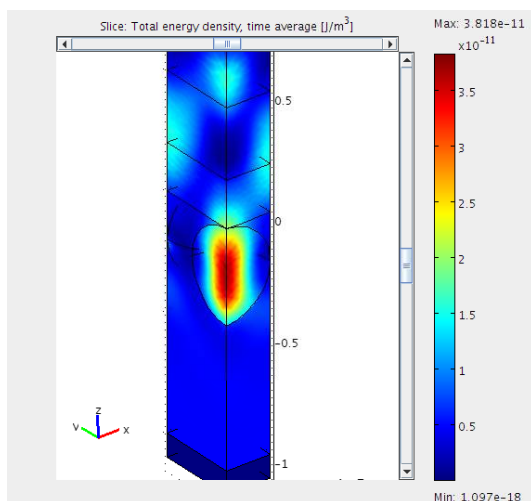


4.2. ábra. Az energia sűrűség ábrázolása. Gömb átmérő 480nm, gömb törésmutatója 1.5, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.

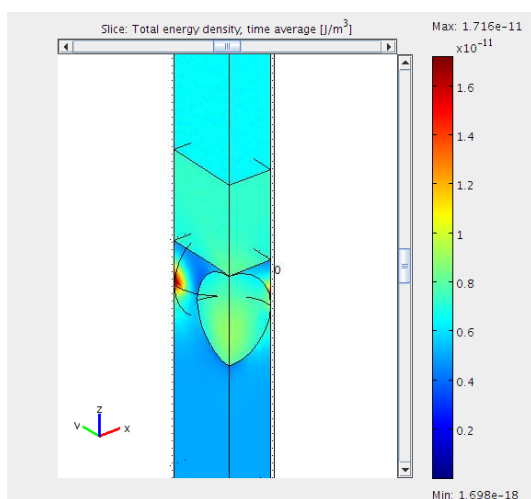
Adott hullámhosszúságú megvilágítás, és gömb törésmutató esetén van egy minimális gömb átmérő, ami alatt már nem működik megfelelően az NSP. Ez a minimális gömb átmérő megegyezik az előhívás után kialakuló mintázat rácsállandójával. A cél a vizsgált gömb törésmutatók esetén meghatározni az elérhető legkisebb rácsállandót olyan NSP technológia esetén, amit kvarc hordozón hajtunk végre.

A szimulációk segítségével megfigyelhető, hogy nagyobb gömbátmérőknél a gömbök a fényt maguk alá fókuszálják (4.2. ábra). A 4.3. ábra egy olyan esetet mutat, mikor a gömbök már túl kicsik a fény fókuszálásra, így ez az elrendezés nem alkalmas a nanórúd struktúra létrehozására. Tovább csökkentve a gömbök átmérőjét az áthaladó hullám közel síkhullám marad, a gömböket a hullám, egy effektív törésmutatóval jellemezhető metanyagrétegnek látja (4.4. ábra). A továbbiakban a gömbök átmérőjét jelöljük D_g -vel. A határt, amitől kezdve az áthaladó hullám síkhullám marad D_1 -gyel, és azt a határt ameddig a gömbök maguk alá fókuszálják a fényt D_2 fogom jelölni. Ezek alapján a gömb átmérő függvényében három esetet különböztethetünk meg.

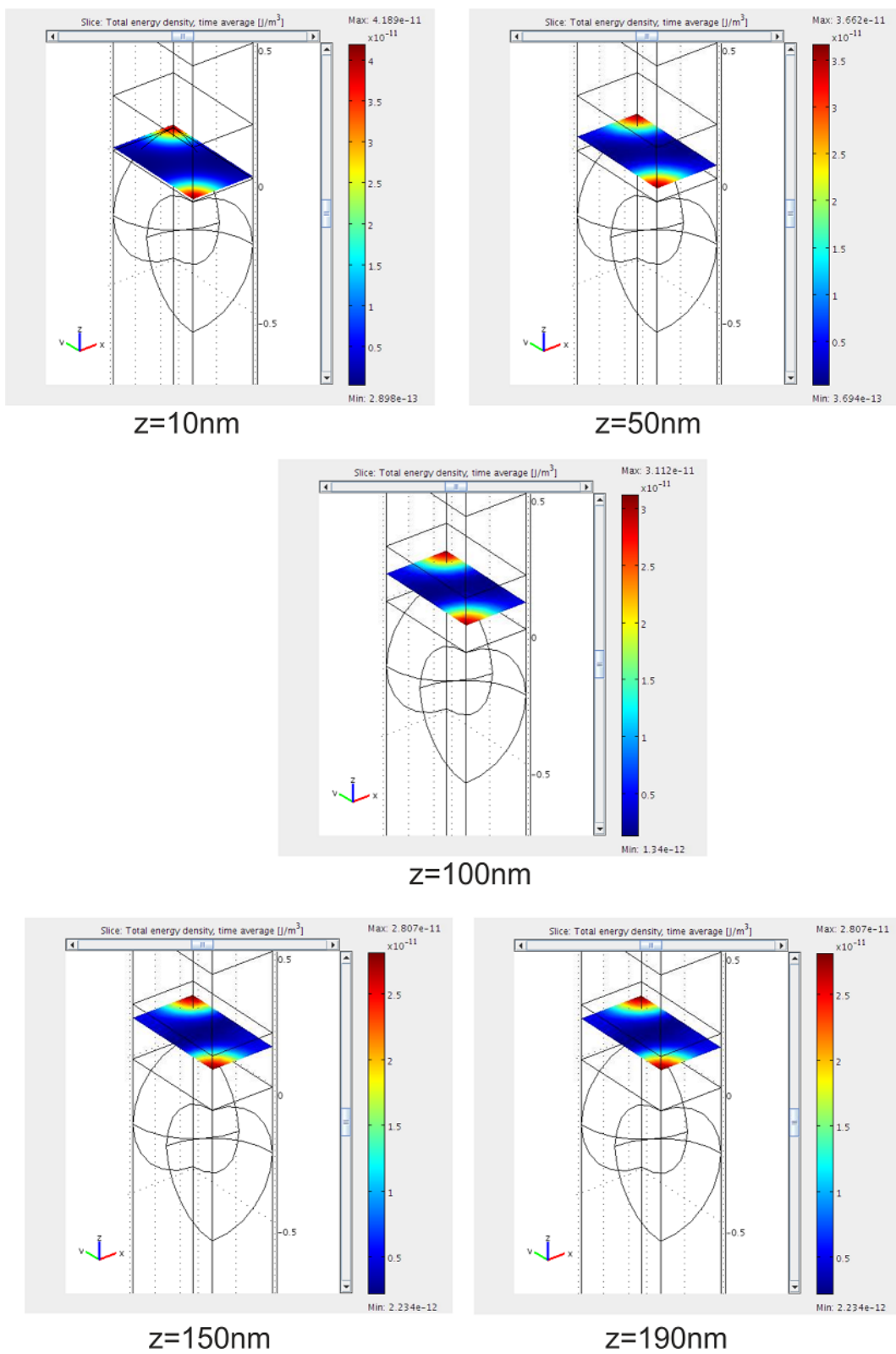
1. Ha $D_g > D_2$, akkor a gömbök szinte az egész betáplált elektromágneses energiát fókuszálják (4.2.), és így kialakul a rezisztben olyan elektromágneses energia sűrűség eloszlás ami a kívánt mintázat (periodikus lyuk struktúra a rezisztben) kialakításához szükséges. Egy ilyen energia sűrűség eloszlást mutat a 4.5. ábra.
2. Ha $D_g < D_1$, akkor olyan kicsik már a gömbök, hogy szinte irányváltóztatás nélkül halad át rajta a betáplált síkhullám, így a kialakuló energia eloszlás kö-



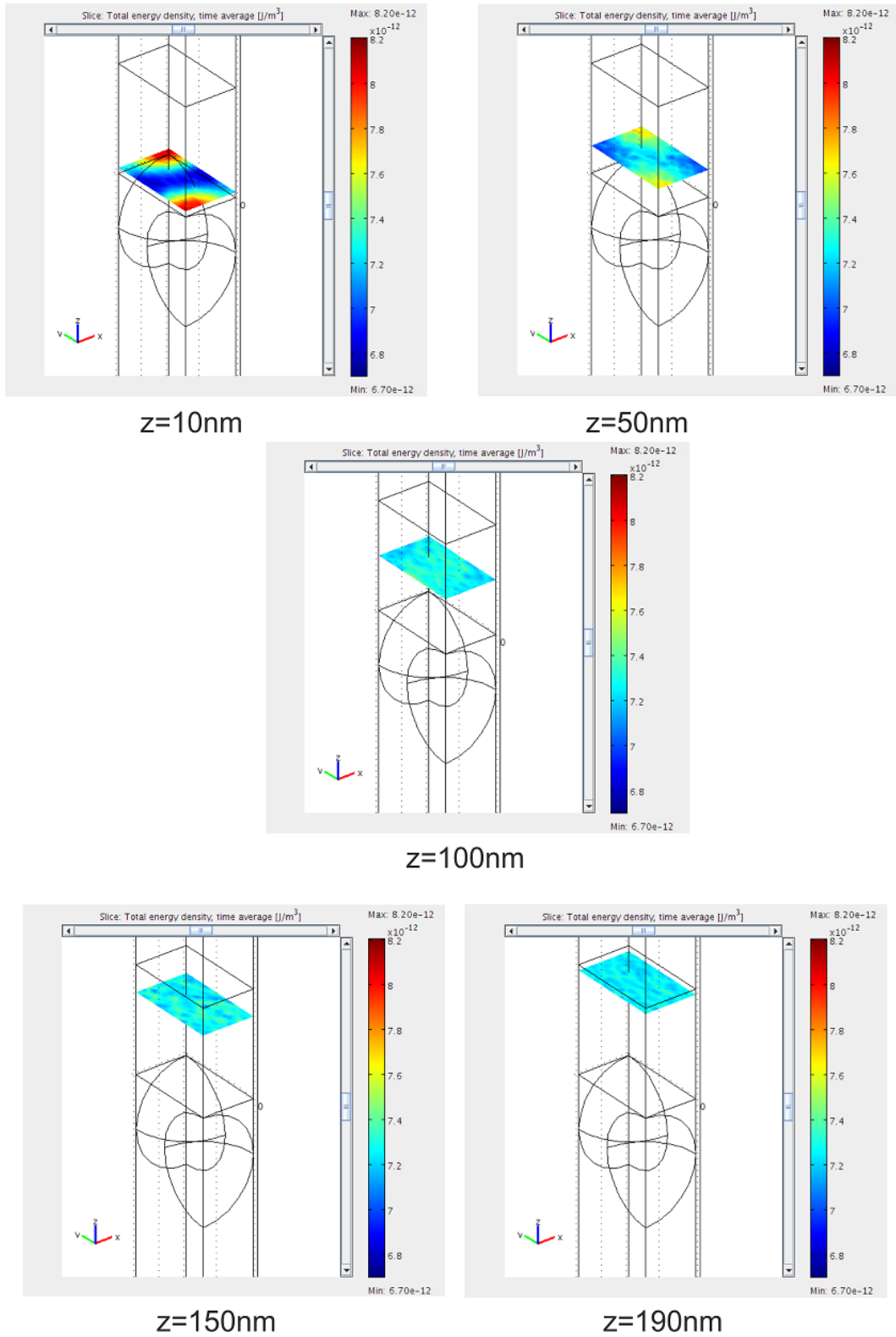
4.3. ábra. Az energia sűrűség ábrázolása. Gömb átmérő 400nm, gömb törésmutatója 1.5, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.



4.4. ábra. Az energia sűrűség ábrázolása. Gömb átmérő 200nm, gömb törésmutatója 1.5, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.



4.5. ábra. Energia sűrűség a rezisztben. Gömb átmérő 480nm, gömb törésmutatója 1.5, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.



4.6. ábra. Energia sűrűség a rezisztben. Gömb átmérő 200nm, gömb törésmutatója 1.5, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.

4.1. táblázat. A kvarc hordozón végzett NSP minimális rácsállandói

Gömb törésmutató	Minimális rácsállandó D_2
1.3	430nm
1.4	420nm
1.5	410nm
1.6	400nm
1.7	380nm

zel konstans (4.6. ábra) a reziszt minden terjedésre merőleges síkmetszetében.

- Ha $D_1 < D_g < D_2$, akkor a gömbök megtörik a fényt, de nem hoznak létre olyan energia sűrűség eloszlást, ami alkalmas nanorúd struktúra kialakításához (4.7. ábra).

Az 1. esetben leírt elrendezésű NSP esetén kapunk csak nanorúd struktúrát. Tehát az ebben a részben vizsgált NSP technológiában csak D_2 -nél nagyobb átmérőjű gömbök alkalmazhatók. A D_2 értéke függ a gömbök törésmutatójától, az elérhető legkisebb rácsállandó egyenlő D_2 -vel. A vizsgált törésmutatókra a legkisebb rácsállandó értékeket a 4.1. táblázat tartalmazza.

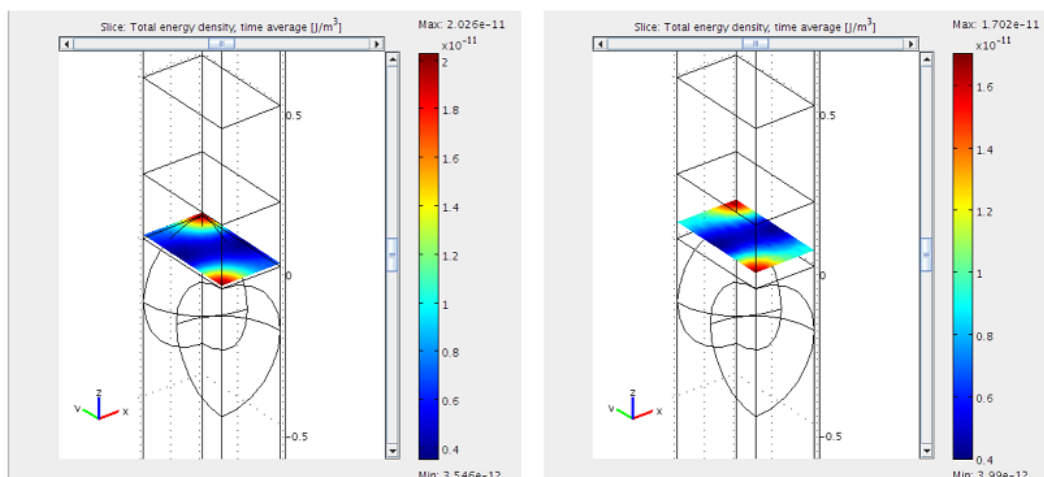
Ha meg szeretnénk becsülni a kioldás után kialakuló mintázatot, arra a legegyszerűbb model az, ha egy határ feletti energiasűrűségű helyeket oldhatónak, a határ alatti helyeket oldhatatlannak feltételezzük. A 4.5. ábrán ábrázolt esetnek a kioldás utáni mintázatának közelítését a 4.8. ábrán ábrázoltam. A határ energiasűrűség (jelöljök w -vel) $20mJ/mm^3$. Az oldható részeket K -val jelöltem.

4.1.2. Ezüst réteggel bevont hordozón végzett litográfia

Ebben a részben a 2.1. b és d ábrán látható elrendezés előállításához használt gömbök paramétereit számolom ki. A vizsgálati elrendezés a 4.9. ábrán látható. Itt a kvarc hordozó tetején van egy ezüst reflektor réteg és ezen van a 200nm vastag reziszt réteg. A szimulációkban a kvarc rétegtől eltekinthetünk, mivel az ezüst réteg a betáplált sugárzás nagy részét visszaveri, a másik részét pedig elnyeli. A szimulációkat ebben az esetben is ugyanazon gömb törésmutatók mellett végeztem, mint az előző részben.

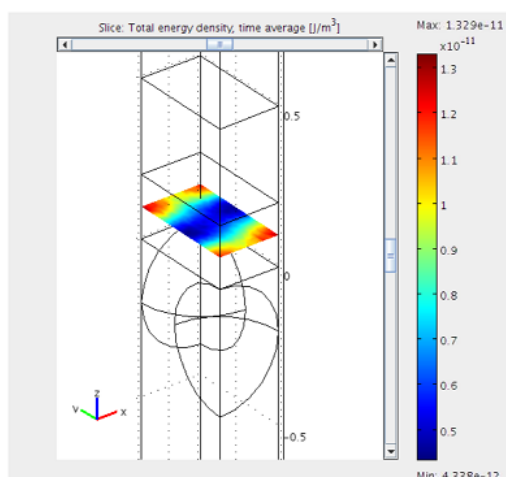
Meghatározom azon gömb átmérők halmazát, amelyek alkalmazásával elő lehet állítani nanorúd struktúrát adott gömb törésmutató és 405nm hullámhosszúságú megvilágítás mellett.

A gömbök az átmérőjük függvényében itt is három csoportra oszthatjuk. Itt

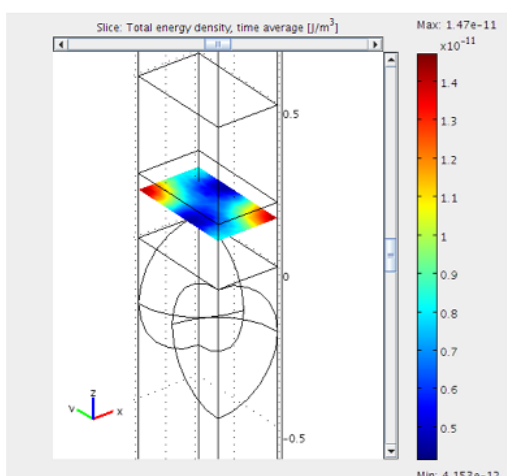


z=10nm

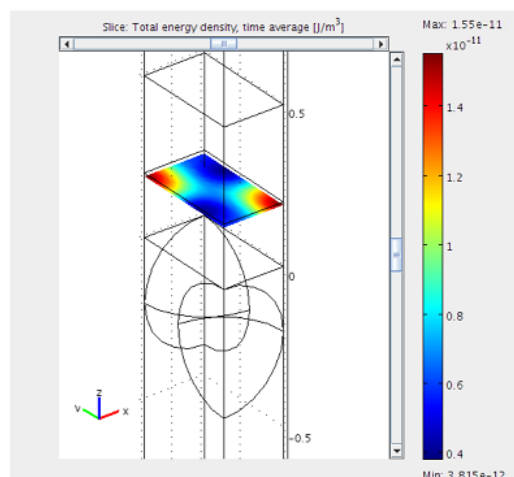
z=50nm



z=100nm

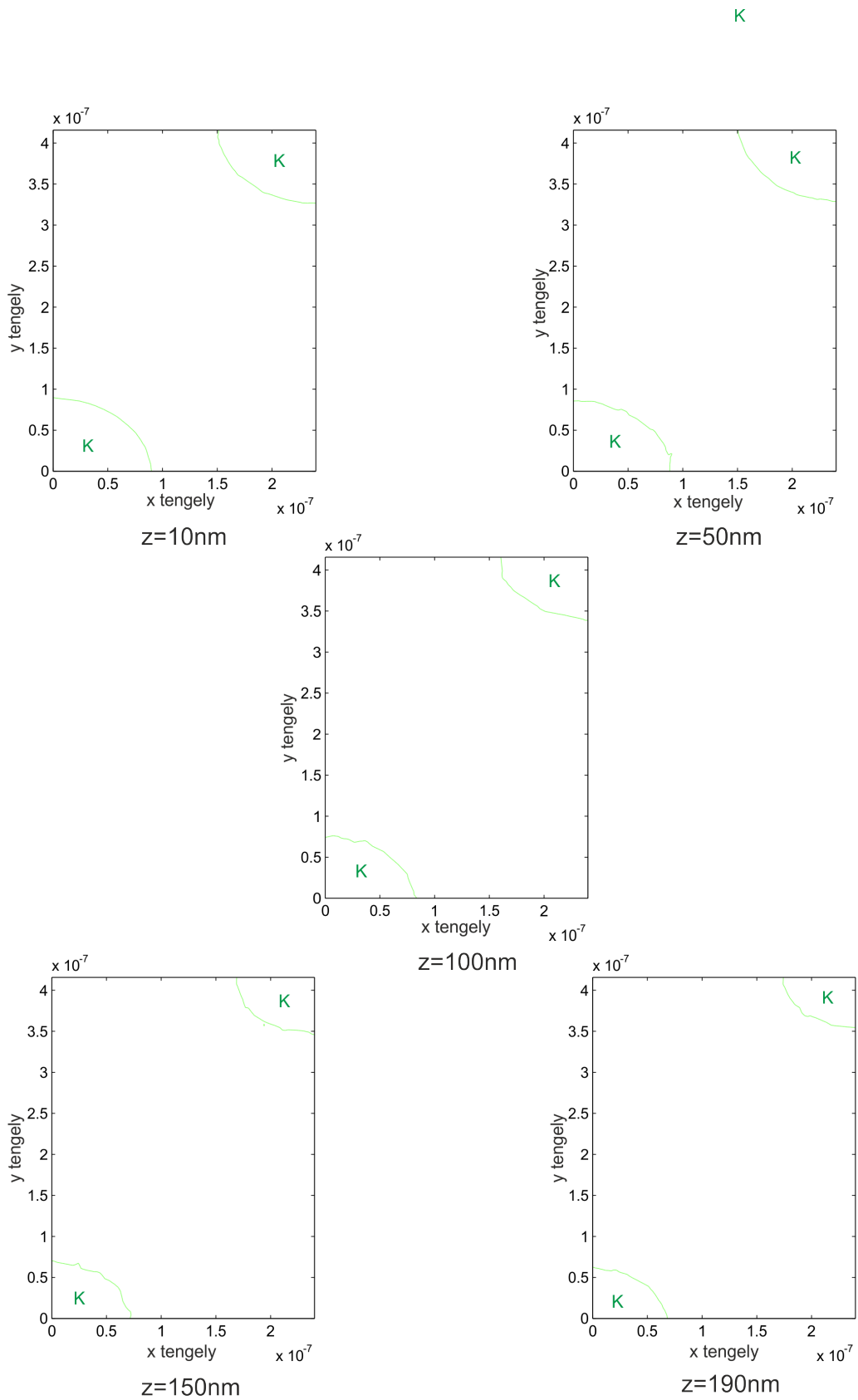


z=150nm

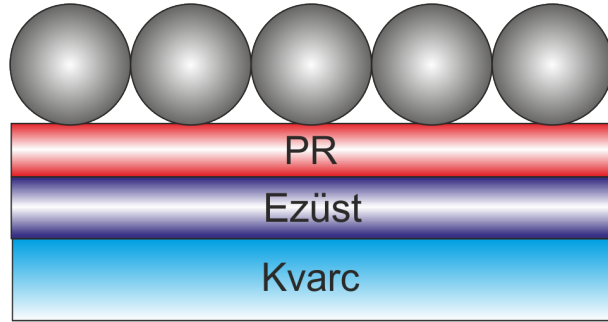


z=190nm

4.7. ábra. Energia sűrűség a rezisztben. Gömb átmérő 400nm, gömb törésmutatója 1.5, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.



4.8. ábra. A kioldás utáni mintázatra adott közelítés. Gömb átmérő 480nm, gömb törésmutatója 1.5, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt, $w = 20\text{mJ}/\text{mm}^3$



4.9. ábra. A vizsgált elrendezés

4.2. táblázat. Az ezüst réteget tartalmazó eset D_2 értékei

Gömb törésmutató	D_2
1.3	500nm
1.4	490nm
1.5	480nm
1.6	470nm
1.7	470nm

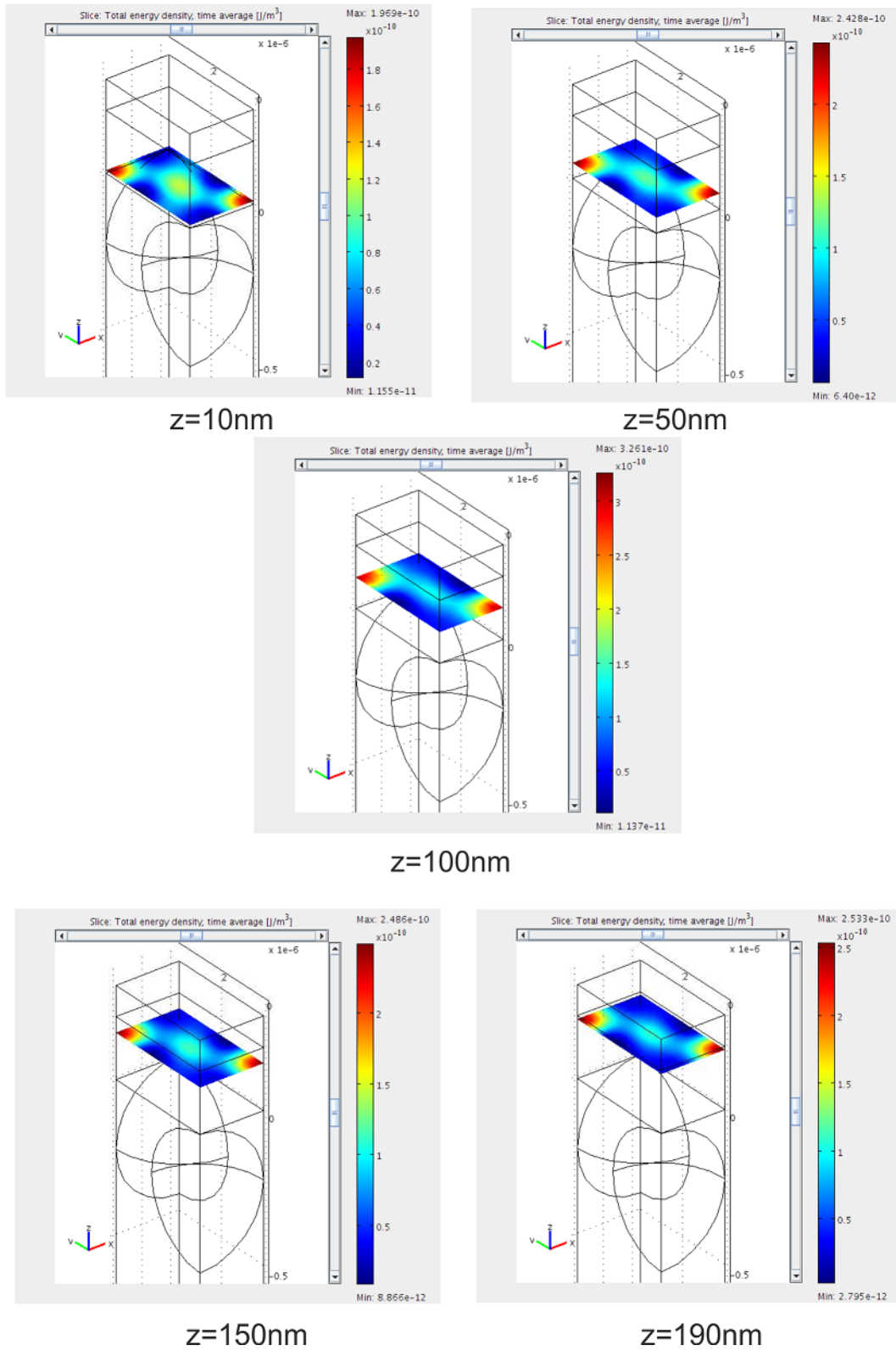
is igaz, hogy bármely 1. csoportbeli átmérőjű gömb réteg felhasználható az NSP technológiában. A 4.2. táblázat ismerteti ezeket a határ átmérőket (D_2) különböző törésmutatók esetén.

Ebben az esetben viszont nem csak az első csoport határozza meg az NSP-hez alkalmazható gömb átmérők halmazát. A harmadik csoportnak vannak olyan rész intervallumai, amelyeken belüli gömb átmérők is alkalmazhatók az NSP technológiában. A rezisztbe belépő hullám interferál az ezüstről visszaverttel, és az így keletkező eredő állóhullám energia sűrűség eloszlása bizonyos esetekben pont a kívánt eloszlás lesz. Ezeket az intervallumokat a 4.3. táblázat foglalja össze.

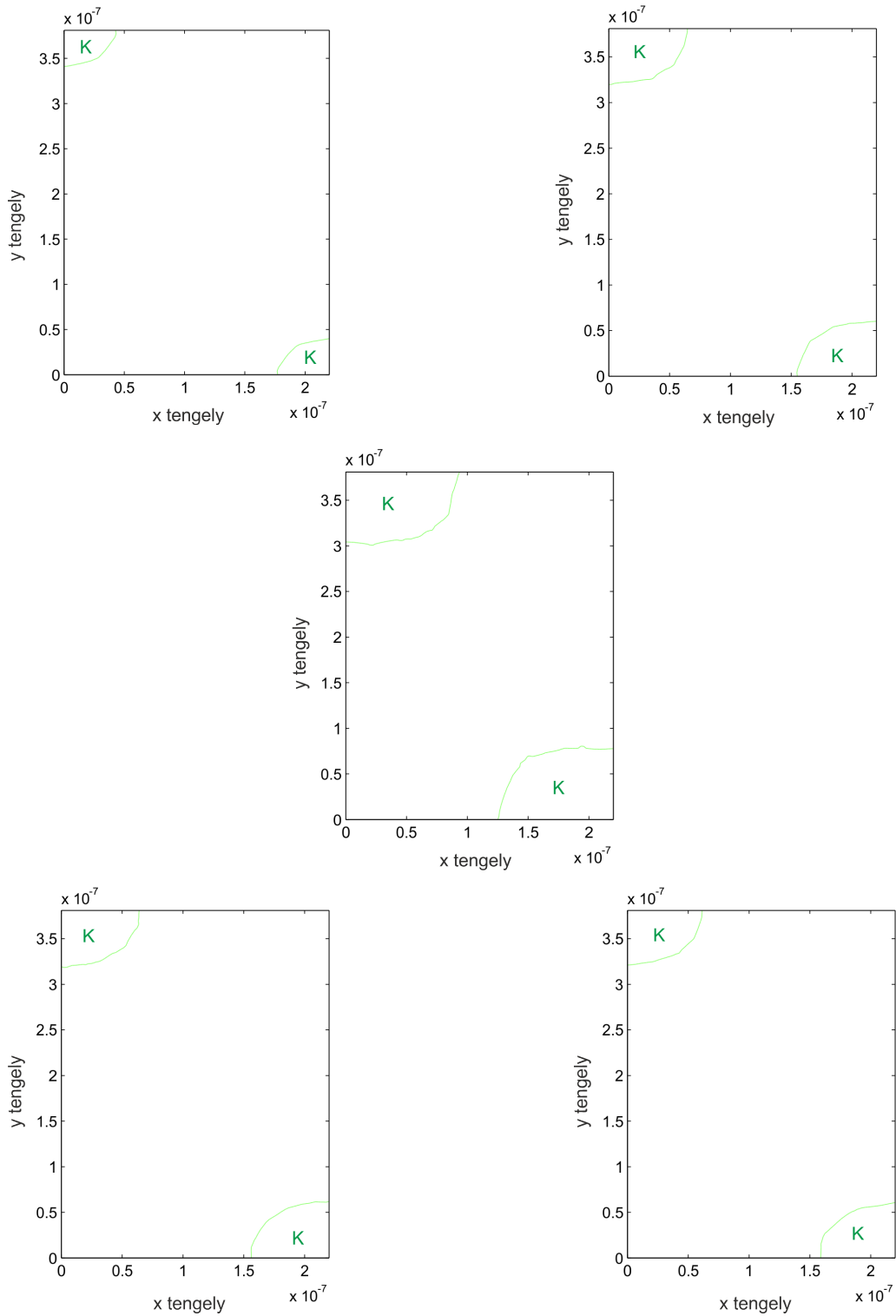
Ezekben az intervallumokban található olyan átmérők, amelyekre speciális min-

4.3. táblázat. A D_2 -nél kisebb rácsállandó kialakítására alkalmas gömb átmérő intervallumok

Gömb törésmutató	Megfelelő intervallumok
1.3	[390, 410]nm
1.4	[370, 400]nm
1.5	[360, 370]nm, [410, 430]nm
1.6	[390, 420]nm
1.7	[390, 410]nm



4.10. ábra. Energia sűrűség a rezisztben. Gömb átmérő 440nm, gömb törésmutatója 1.4, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.



4.11. ábra. A kioldás utáni mintázatra adott közelítés. Gömb átmérő 440nm, gömb törésmutatója 1.5, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt, $w = 160mJ/mm^3$

tázat adódik. Erre egy példát a 4.10. ábra mutat. Ez a mintázat nem olyan mint az eddig megszokott (vagyis a gömbök alatt vannak a nagy energiasűrűségű helyek), hanem pont a gömbök között. De ezek is alkalmasak nanorúd struktúra kialakítására. A kioldás utáni mintázatra adott becslés a 4.11. ábrán látható. A határ energia sűrűség $160mJ/mm^3$.

Másik érdekes mintázatot kialakító átmérők is találhatók az említett intervallumokban (lásd a 4.10 ábrát). Ebben az esetben a gömbök alatt és a gömbök között is vannak nagy energiasűrűségű helyek. Ez viszont azt jelenti, hogy az előhívás után kialakuló nanorúd struktúrának a gömb átmérő fele lesz a rácsállandója. Ez négy-szer olyan sűrű struktúrát jelent, mint ha a megszokott energia sűrűség mintázat alakult volna ki.

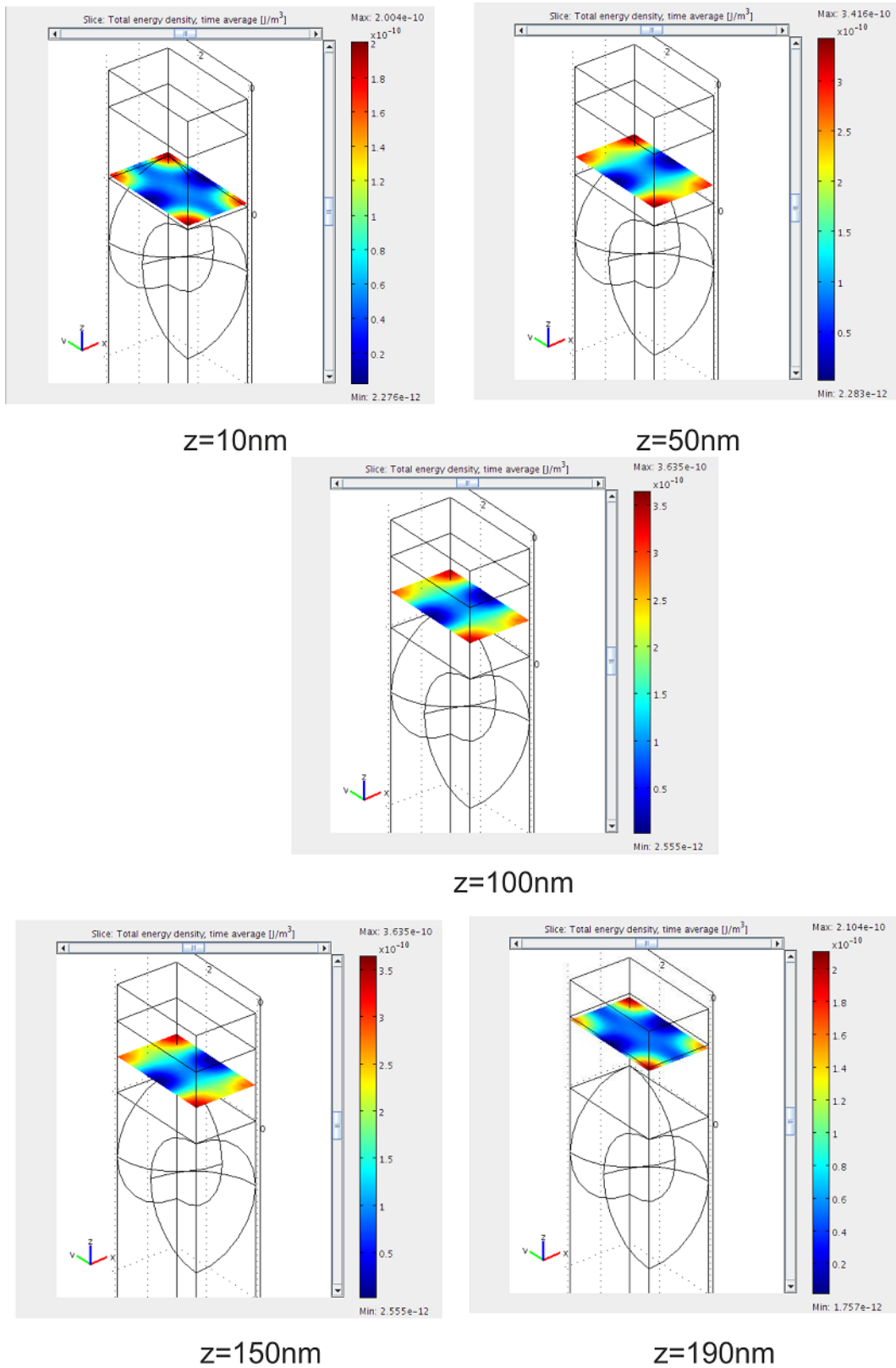
Tehát ebben az esetben a minimális elérhető rácsállandó $360nm$ (ha eltekintünk az előbb említett esettől). De ha $360nm$ és $470nm$ közötti rácsállandót akarunk, akkor azt csak bizonyos törésmutatójú gömbökkel érhetjük el. Ez akkor jelenthet problémát, ha a technológiával, amivel nanogömböket állítunk elő, csak bizonyos törésmutatójú gömbök előállítása lehetséges. Az a határ, ahonnan széles tartományú törésmutatókkal előállítható a mintázat körülbelül $480nm$ -től kezdődik.

4.1.3. Különböző polarizációjú megvilágítások eredményeinek összehasonlítása

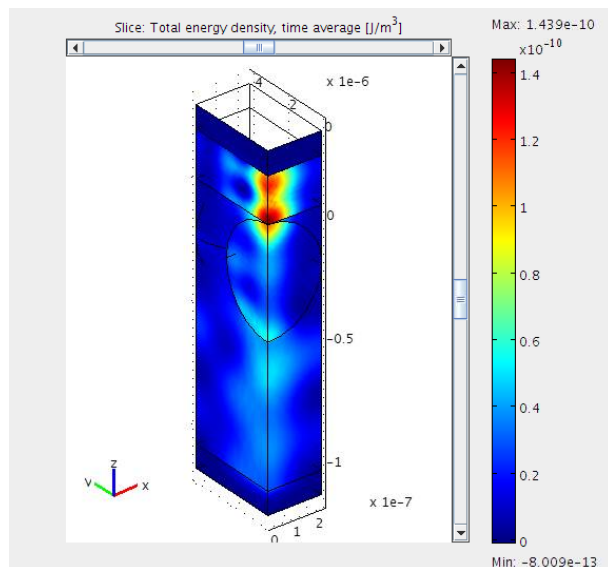
A periodikus hatszög rácsban pakolt gömb elrendezést elhelyezzük derékszögű koordináta rendszerben, akkor x és y irányban más lesz a gömbök távolsága. Ha a koordináta rendszert úgy vettük fel hogy x irányban érintkeznek a gömbök, akkor x irányban a gömbök távolsága a gömb átmérővel egyenlő, y irányban a gömb átmérő $\sqrt{3}$ szorosa. Ebből következik, hogy nem mindegy, hogy x vagy y polarizációjú megvilágítást használunk. Ez eddig összes szimulációt x polarizációjú megvilágítással készítettem. Ebben a részben megnézem pár példán keresztül, hogy mennyire változnának a kapott eredmények, ha y polarizációjú fényt alkalmaznánk. Az ezüst reflektort használó esetben teszem meg ezt az összehasonlítást.

A szimulációk során az derült ki, hogy ha $D_g > D_2$, akkor az eredmények közel azonosak. Erre egy példát mutat a 4.13. és 4.14. ábra. Ezen az ábrákon 1.5 törésmutatójú $480nm$ gömb réteg struktúrájánál kialakuló energiasűrűség van ábrázolva PEC és PMC peremeken. A megvilágítás a 4.13. ábrán x , a 4.14. ábrán y polarizációjú. Ezt a két ábrát összehasonlítva azt látjuk, hogy közel azonos a két eredmény.

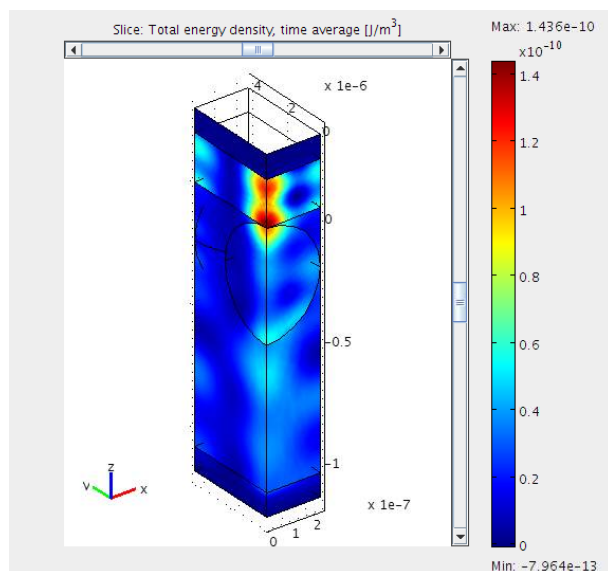
Ha a $D_2 > D_g$ akkor azt tapasztaljuk, hogy a eredmények jelentősen eltérhetnek



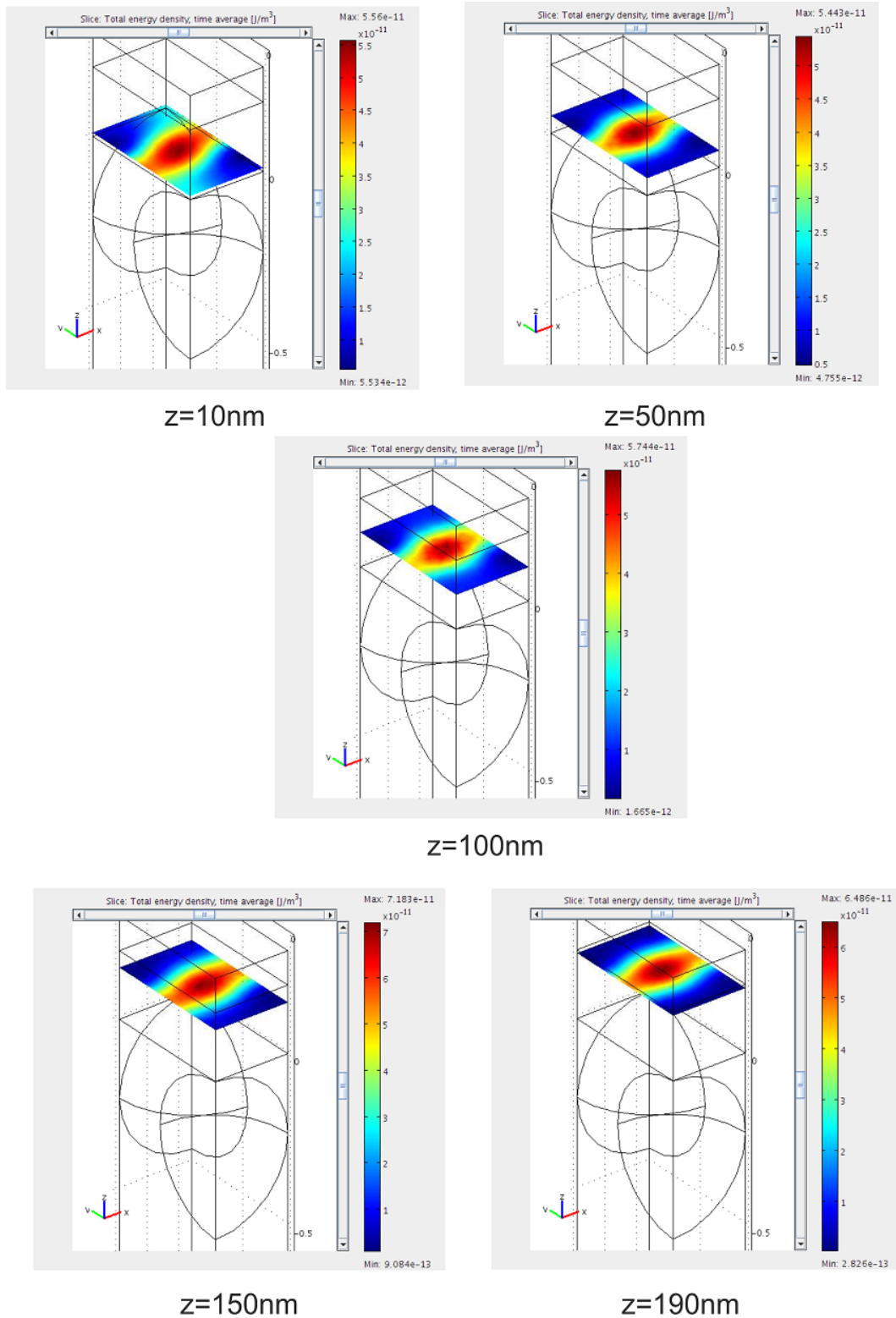
4.12. ábra. Energia sűrűség a rezisztben. Gömb átmérő 360nm, gömb törésmutatója 1.5, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.



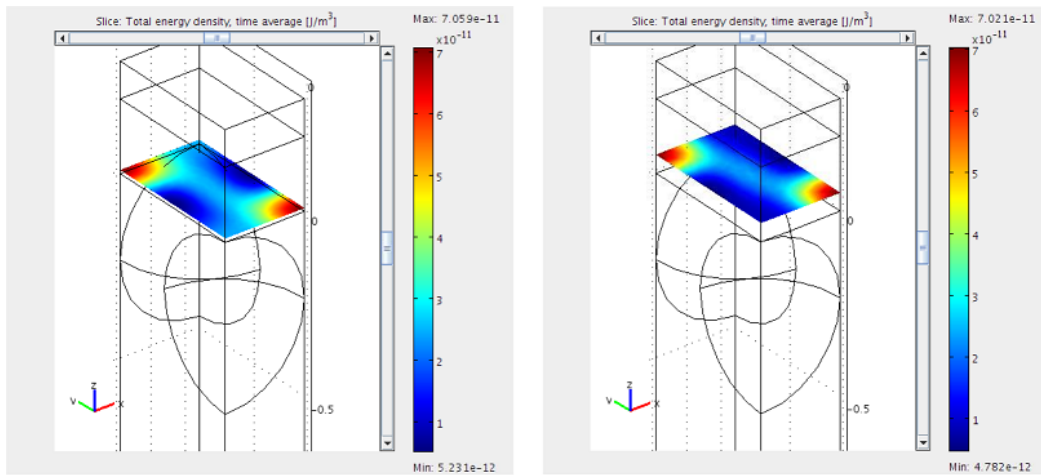
4.13. ábra. Az energia sűrűség ábrázolása. Gömb átmérő 480nm, gömb törésmutatója 1.5, x polarizáció, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt



4.14. ábra. Az energia sűrűség ábrázolása. Gömb átmérő 480nm, gömb törésmutatója 1.5, y polarizáció, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.

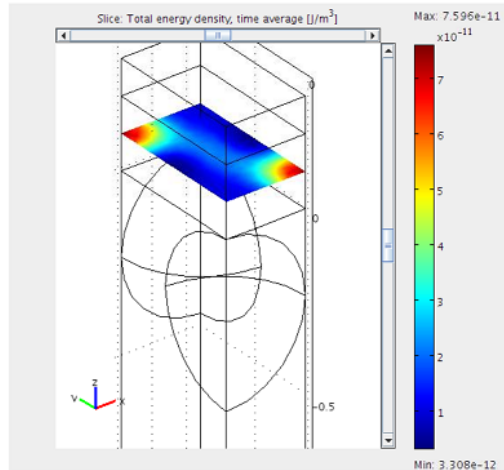


4.15. ábra. Energia sűrűség a rezisztben. Gömb átmérő 460nm, gömb törésmutatója 1.5, x polarizáció, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.

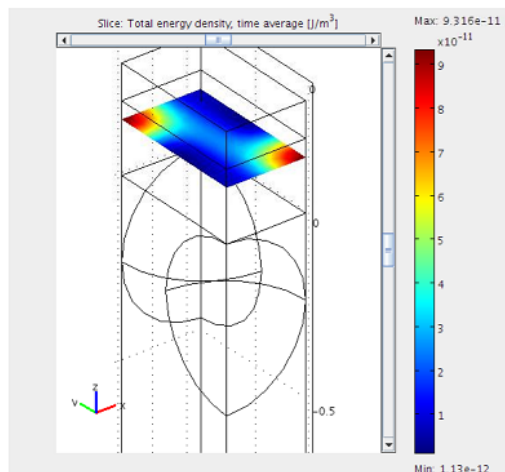


$z=10\text{nm}$

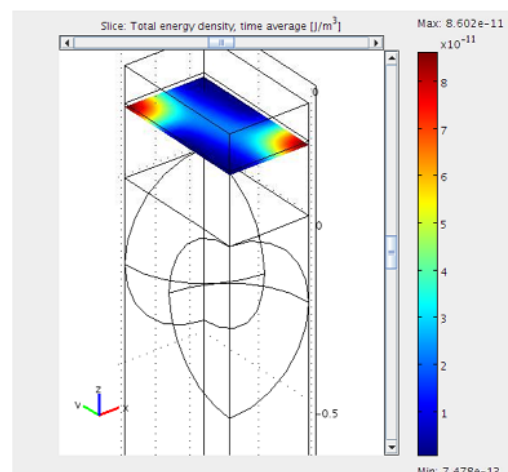
$z=50\text{nm}$



$z=100\text{nm}$

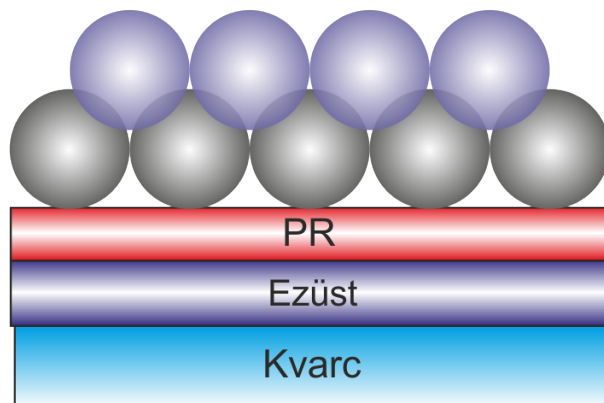


$z=150\text{nm}$



$z=190\text{nm}$

4.16. ábra. Energia sűrűség a rezisztben. Gömb átmérő 460nm, gömb törésmutatója 1.5, y polarizáció, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.



4.17. ábra. A vizsgált elrendezés két réteg gömb esetén

4.4. táblázat. A két réteg gömböt használó esetben a megfelelő eredményt adó gömb átmérők halmaza

A felső réteget alkotó gömbök törésmutatója	Megfelelő intervallumok
1.3	[360, 410]nm
1.4	[360, 380]nm
1.5	-
1.6	[370, 400]nm
1.7	[370, 400]nm

egymástól. Erre egy példát mutat a 4.15., 4.16. ábrák. A 4.15. ábra x , 4.16. ábra y irányú betáplált elektromos térerősséggel készült. Itt látható a jelentős eltérés.

4.2. Nanogömb fotolitográfia két réteg gömb esetén

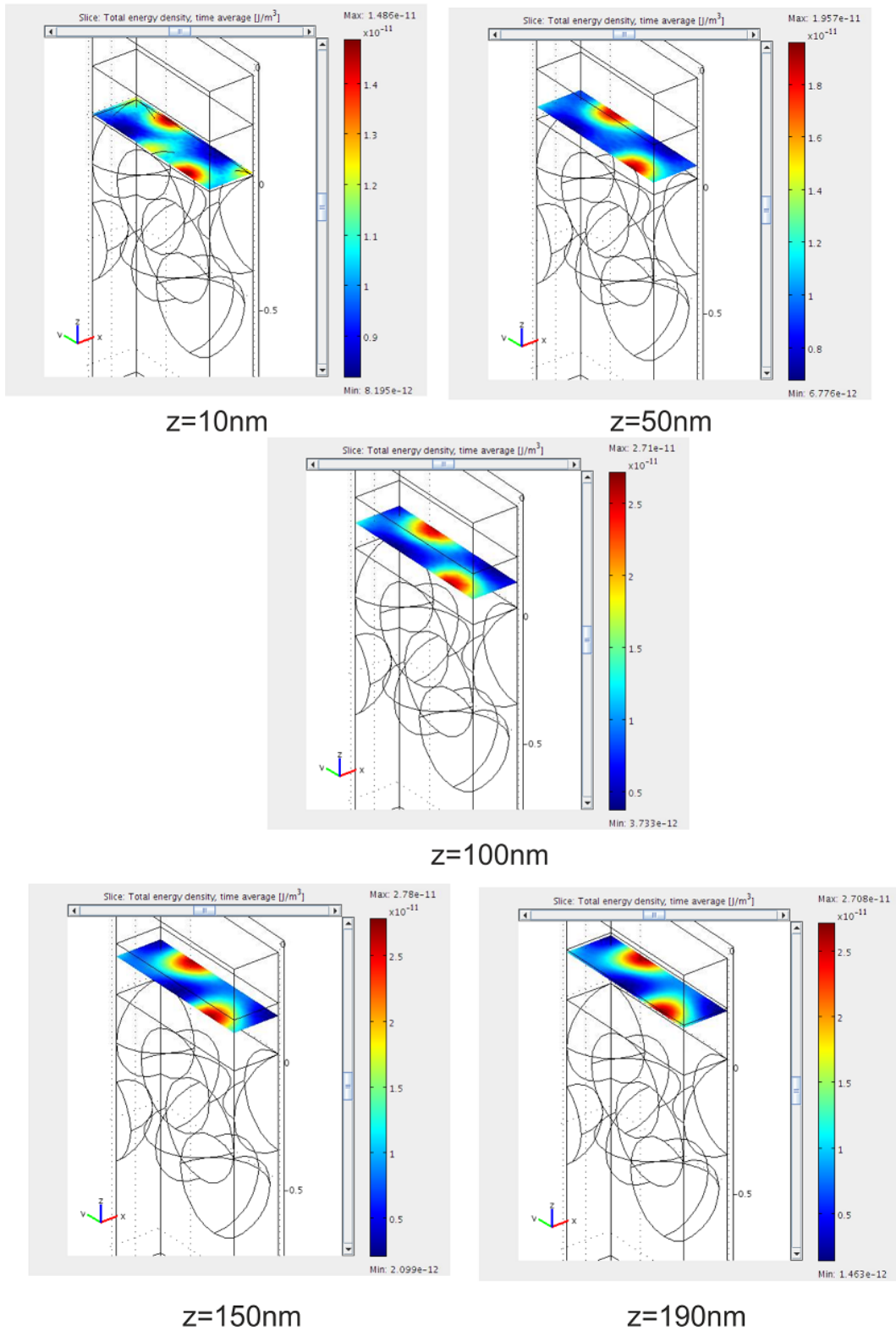
A két réteg gömb elrendezést azért vizsgálom, hogy alternatív lehetőséget találjak az ezüst reflektort tartalmazó elrendezésen végzett NSP-re. Megvizsgálom, hogy két réteg gömb segítségével létrehozható-e az egy sor gömbnél jobb energiaeloszlást létrehozó struktúra. A szimulációkat az ezüst réteget tartalmazó elrendezésre végzem el.

A vizsgálati elrendezést a 4.17. ábra mutatja. A felső réteg gömbjeinek sugara megegyezik az első réteg gömbjeinek a sugaraival, de a törésmutatók lehetnek különbözők. Azokat az eseteket vizsgáltam, ahol az alsó réteg gömbjeinek törésmutatója 1.5 a felső réteg gömbjeié pedig 1.3; 1.4; 1.5; 1.6 vagy 1.7.

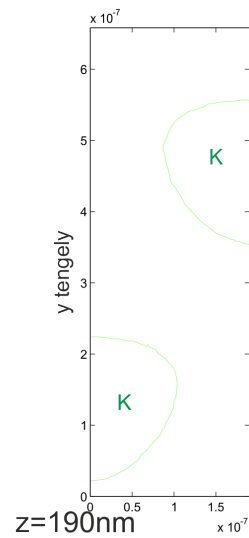
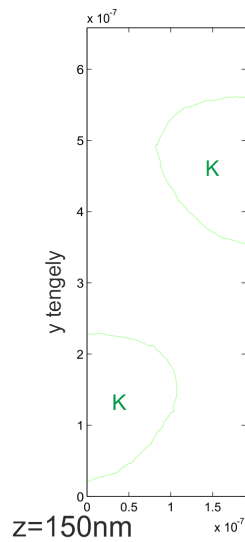
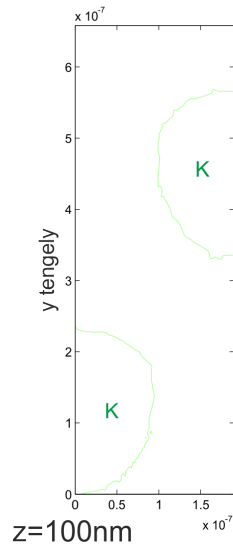
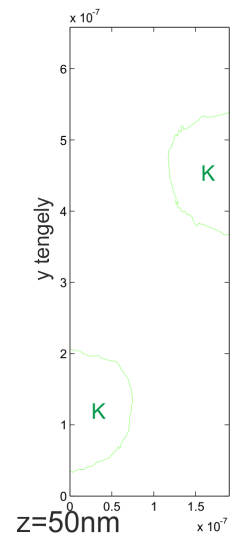
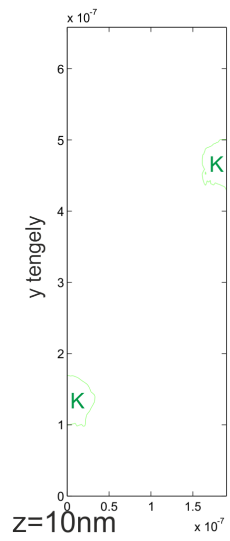
A szimulációs eredményekből a következő derült ki. Ha kisebb törésmutatójú gömböket teszünk az 1.5 törésmutatójú gömb réteg fölé, akkor kapunk egy tartományt amelyen belül az elrendezés használható mintázat kialakításához. Ha a felső

réteget alkotó gömbök törésmutatója 1.5 akkor már nem kapunk megfelelő energia-eloszlást. Ha növeljük a felső réteg törésmutatóját, akkor valamivel jobb eredményt kapunk, mint az utóbbi esetben, de rosszabbat, mint az előzőben. Az eredményeket a 4.4. táblázat foglalja össze.

Hasonlítsuk össze ezeket az eredményeket az egy rétegű ezüst reflektort tartalmazó szimulációs eredményekkel(4.3. táblázat). Látható, hogy ebben az esetben kapott intervallumok szélesebbek, mint az előzőnél voltak, tehát a kétrétegű struktúra használata célravezetőbb. Megfelelő használatával jobb eredményeket lehet elérni, mint egy rétegű esetben. Erre példa a 380nm-es gömbátmérő. Egy rétegű esetben nem lehet alkalmazni, viszont két réteg esetén igen (4.18. ábra). A kioldás utáni mintázatra adott közelítést a 4.19. ábrán ábrázoltam. A határ energia sűrűség $14mJ/mm^3$.



4.18. ábra. Energia sűrűség a rezisztben. Gömb átmérő 380nm, a felső réteget alkotó gömbök törésmutatója 1.3, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt.



4.19. ábra. A kioldás utáni mintázatra adott közelítés. Gömb átmérő 380nm, a felső réteget alkotó gömbök törésmutatója 1.3, 405nm-es hullámhossz, 200nm vastag reziszt, $w = 14\text{mJ}/\text{mm}^3$

5. fejezet

Kitekintés

Érdekes lehet megvizsgálni, milyen mintázatokat lehet elérni, ha különböző átmérőjű gömböket használunk. Erre az egyik lehetőség, hogy a rezisztre szoros pakolású hatszögrácsban felviszünk egyforma átmérőjű gömböket. Aztán az ábrán látható módon kisebb átmérőjű gömböket rakunk az összefüggő rétegre. Másik lehetőség az, hogy a kis gömbök érintik a nagy gömböket és a rezisztet egyaránt. Illetve lehet ezeket kombinálni is, és ekkor három különböző gömbátmérőt használó struktúrát kapunk. A különböző átmérőjű gömbök rendelkezhetnek különböző törésmutatóval is. Lehetséges, hogy ilyen struktúrákkal még kisebb rácsállandót érhetnénk el.

Ha napelemként szeretnénk alkalmazni a kapott nanorúd struktúrát, akkor nem csak a rácsállandó befolyásolja a hatásfokot, hanem a rudak vastagsága is, amit viszont a rezisztben előhívás után keletkező lyukak átmérőjével egyenlő. Azt pedig az alkalmazott NSP paraméterei határozza meg. Ebben a dolgozatban ezt nem vizsgáltam, csak a keletkező mintázat rácsállandóját. Ha az elkészített napelem hatásfokát akarjuk meghatározni, akkor szükség van a lyuk átmérőkre is a rezisztben. Az itt kapott energiasűrűségekből lehet kiszámolni az előhívás után kialakított mintázatot.

Az NSP-vel kapott nanorúd struktúrának számos más alkalmazása lehet a napelemeken kívül, például fotodetektor[23, 24, 25], lézer[26], passzív optikai eszközök[27], memória eszköz[28], nanogenerátor[29, 30] és nanoantennat [31].

6. fejezet

Összefoglaló

A dolgozatban a szilícium napelemekkel foglalkoztam, ami egy jó abszorpciójú, kevés anyag felhasználású napelem. Az előállításának legköltségesebb része a fotolitográfiához szükséges fotomaszk előállítása. Ezt a költséget ki lehet küszöbölni, ha nanogömb fotolitográfiát használunk, ami egy speciális fotolitográfiai eljárás, ami fotomaszk helyett nanogömb réteget használ, aminek alacsony költségű az előállítása és a rezisztre való felvitele.

A dolgozatban elvégeztem az NSP numerikus szimulációját különböző gömb átmérők mellett. A szimulációs eredményekből kiszámítottam az elektromágneses tér energia sűrűség eloszlását a rezisztben. Az energia eloszlásból lehetőség van megbecsülni a reziszt kioldás után kialakuló mintázatát. Ezek alapján megadtam az NSP eljárással elérhető legkisebb rácsállandót. Kiszámítottam a legkisebb rácsállandót kvarc hordozón végrehajtott NSP-re. Mivel a jó hatásfokú nanorúd napelemek ezüst reflektort is tartalmaznak, ezért meghatároztam a legkisebb rácsállandót ezüst rétegen végrehajtott NSP-re is. Az numerikus számítások azt mutatták, hogy az ezüst réteg hatására létrejövő nagy reflexió miatt a gömb átmérőket nézve nem egy folytonos tartományban használható az NSP. Ezt kiküszöbölendő néztem meg, hogy két réteg gömb esetén mi történik. A szimulációs eredmények azt mutatták, hogy megfelelően választott paraméterek mellett jobb eredmények érhetők el két réteg gömb esetén, mint egy réteg gömbbel.

Irodalomjegyzék

- [1] V. Székely, *Elektronika I. Félvezető eszközök*. Műegyetemi Kiadó, 2000.
- [2] M. S. Simon and K. N. Kwok, *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley-Interscience, 2006.
- [3] Ákos Nemcsics, *A napelem működése, fajtái és alkalmazása*. KKVMF jegyzet, 1999.
- [4] M. Böhm, H. C. Scheer, and H. G. Wagemann, „A two-dimensional model for polycrystalline silicon solar cells,” *Solar Cells*, vol. 13, pp. 29–41, Nov 1984.
- [5] D. E. Carlson and C. R. Wronski, „Amorphous silicon solar cell,” *Applied Physics Letters*, vol. 28, pp. 671–673, Jun 1976.
- [6] D. Tham and J. R. Heath, „Silicon nanowire photovoltaics,” in *Photovoltaic Specialists Conference*, ser. 33, San Diego, California, May 2008, pp. 1–4.
- [7] M. Borgstrom, J. Wallentin, M. Heurlin, S. Falt, P. Wickert, J. Leene, M. Magnusson, K. Deppert, and L. Samuelson, „Nanowires with promise for photovoltaics,” *Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 17, no. 4, pp. 1050–1061, July-Aug 2011.
- [8] S. Srivastava, D. Kumar, P. Singh, and V. Kumar, „Silicon nanowire arrays based "black silicon" solar cells,” in *IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, ser. 34, Philadelphia, Pennsylvania United States, Jun 2009, pp. 001 851–001 856.
- [9] M. D. Kelzenberg, M. C. Putnam, D. B. Turner-Evans, N. S. Lewis, and H. A. Atwater, „Predicted efficiency of si wire array solar cells,” in *IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, ser. 34, Philadelphia, Pennsylvania United States, Jun 2009, pp. 001 948 – 001 953.
- [10] B. M. Kayes, M. A. Filler, M. D. Henry, J. R. M. III, M. D. Kelzenberg, M. C. Putnam, J. M. Spurgeon, K. E. Plass, A. Scherer, N. S. Lewis, and H. A.

- Atwater, „Radial pn junction, wire array solar cells,” in *IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, ser. 33, Philadelphia, Pennsylvania United States, May 2008, pp. 1 – 5.
- [11] M. D. Kelzenberg, S. W. Boettcher, J. A. Petykiewicz, D. B. Turner-Evans, M. C. Putnam, E. L. Warren, J. M. Spurgeon, R. M. Briggs, N. S. Lewis, and H. A. Atwater, „Enhanced absorption and carrier collection in si wire arrays for photovoltaic applications,” *Nature Materials*, vol. 9, pp. 239–244, 2010.
- [12] H. Atwater, „Bending light to our will,” *MRS BULLETIN*, vol. 36, pp. 57–62, Jan 2011.
- [13] R. Wagner and W. Ellis, „Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth,” *Applied Physics Letters*, vol. 4, no. 5, pp. 89 – 90, March 1964.
- [14] K. Tomioka, T. Tanaka, S. Hara, K. Hiruma, and T. Fukui, „Iiiv nanowires on si substrate: Selective-area growth and device applications,” *Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 17, no. 4, pp. 1112–1129, July-Aug 2011.
- [15] H. P. T. Nguyen, Y.-L. Chang, I. Shih, and Z. Mi, „Inn p-i-n nanowire solar cells on si,” *Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 17, no. 4, pp. 1062–1069, July-Aug 2011.
- [16] P. Mohseni, G. Lawson, A. Adronov, and R. LaPierre, „Hybrid gaas-nanowirecarbon-nanotube flexible photovoltaics,” *Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 17, no. 4, pp. 1070–1077, July-Aug 2011.
- [17] C. Y. Kuo and C. Gau, „Arrangement of band structure for organic-inorganic photovoltaics embedded with silicon nanowire arrays grown on indium tin oxide glass,” *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 5, pp. 053 302–053 302–3, Aug 2009.
- [18] W. Wu, A. Katsnelson, O. G. Memis, and H. Mohseni, „A deep sub-wavelength process for the formation of highly uniform arrays of nanoholes and nanopillars,” *Nanotechnology*, vol. 18, no. 48, December 2007.
- [19] W. Wu, D. Dey, A. Katsnelson, O. G. Memis, and H. Mohseni, „Large areas of periodic nanoholes perforated in multistacked films produced by lift-off,” *Journal of Vacuum and Technology B*, vol. 26, no. 5, pp. 1745–1747, Sept/Okt 2008.

- [20] C.-H. Chang, L. Tian, W. R. Hesse, H. Gao, H. J. Choi, J.-G. Kim, M. Siddiqui, and G. Barbastathis, „From two-dimensional colloidal self-assembly to three-dimensional nanolithography,” *Nano Letters*, vol. 11, no. 6, p. 25332537, May 2011.
- [21] C. Johnson, *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Dover Publications, 2009.
- [22] „Comsol multiphysics rf module user’s guide.”
- [23] W. Weng, T. Hsueh, S. Chang, S. Wang, H. Hsueh, and G. Huang, „A high-responsivity gan nanowire uv photodetector,” *Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 17, no. 4, pp. 996–1001, July-Aug 2011.
- [24] S.-P. Chang, C.-Y. Lu, S.-J. Chang, Y.-Z. Chiou, T.-J. Hsueh, and C.-L. Hsu, „Electrical and optical characteristics of uv photodetector with interlaced zno nanowires,” *Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 17, no. 4, pp. 990–995, July-Aug 2011.
- [25] L. VJ, J. Oh, A. P. Nayak, A. M. Katzenmeyer, K. H. Gilchrist, S. Grego, N. P. Kobayashi, S.-Y. Wang, A. A. Talin, N. K. Dhar, and M. S. Islam, „A perspective on nanowire photodetectors: Current status, future challenges, and opportunities,” *Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 17, no. 4, pp. 1002–1032, July-Aug 2011.
- [26] H.-G. Park, S.-H. Kwon, and H.-S. Ee, „Ultra-small nanowire lasers and nanowire photonic devices,” in *Optoelectronics and Communications Conference*, ser. 15, Sapporo, Japan, July 2010, pp. 848 – 849.
- [27] J. Volk, A. Hakansson, H. T. Miyazaki, T. Nagata, J. Shimizu, and T. Chikyow, „Fully engineered homoepitaxial zinc oxide nanopillar array for near-surface light wave manipulation,” *APPLIED PHYSICS LETTERS*, vol. 92, p. 183114, 2008.
- [28] S. M. Weekes, F. Y. Ogrin, and W. A. Murray, „Fabrication of large-area ferromagnetic arrays using etched nanosphere lithography,” *Langmuir*, vol. 20, no. 25, p. 1120811212, Nov. 2004.
- [29] X. Wang, J. Song, J. Liu, and Z. L. Wang, „Direct-current nanogenerator driven by ultrasonic waves,” *SCIENCE*, vol. 316, pp. 102–105, April 2007.

- [30] M. Alexe, S. Senz, M. A. Schubert, D. Hesse, and U. Gösele, „Energy harvesting using nanowires?” *Advanced Materials*, vol. 20, p. 40214026, 2008.
- [31] N. Liu¹, M. L. Tang, M. Hentschel, H. Giessen, and A. P. Alivisatos, „Nanoantenna-enhanced gas sensing in a single tailored nanofocus,” *Nature Materials*, vol. 10, p. 631636, May 2011.