

## Az alumínium mikroszkópikus viszkozitásának egy lehetséges új elméleti modellje

### A possible theoretical modell of the microscopical viscosity of the aluminium

FARKAS Zoltán mérnök-tanár, ÜRMÖS Antal, PhD. egyetemi adjunktus

Óbudai Egyetem, Kandó Kálmán Villamosmérnöki Kar, 1084 Budapest, Tavaszmező u. 17.  
e-mail: [farkas.zoltan@kvk.uni-obuda.hu](mailto:farkas.zoltan@kvk.uni-obuda.hu), [urmos.antal@kvk.uni-obuda.hu](mailto:urmos.antal@kvk.uni-obuda.hu)

#### Kivonat

*Különböző nanoszerkezetek segítségével újfajta félvezető eszközöket készíthetünk, vagy a jelenleg alkalmazott eszközök paramétereit is jelentős mértékben javítani tudjuk. Ide tartozik az úgynevezett invertált kvantum pontok csoportja is. Ennek az előállítási módja az, hogy először egy nanolyukat készítünk, majd ezt a lyukat betemetjük. Korábbi kutatásunkban e nanoszerkezetek kialakulását az olvadt fémek mikroszkópikus viszkozitásának a figyelembevételével, tapasztalati modell segítségével modelleztük. Ebben a cikkünkben részletesebben bemutatjuk ezt az új modellt, alumínium esetén.*

**Kulcsszavak:** GaAs, nanolyuk, újfajta félvezetők, invertált kvantum pont, csepp-epitaxia

#### Abstract

*With the help of the different nanostructures novel semiconductor devices can be produced or the parameters of the currently applied traditional devices can be improved in a significant manner also. The inverted quantum dots are belongs to this group. During the production of these nanostructures, fnanoholes are formed and filled. In our previous investigations, the formation of these nanostructures was modelled by an empirical modell, with the consideration of the microscopical viscosity of the melted metals. In this article a detailed discussion of thi modell is given, in case of the aluminium.*

**Keywords:** GaAs, nanohole, novel semiconductors, inverted quantum dot, droplet epitaxy

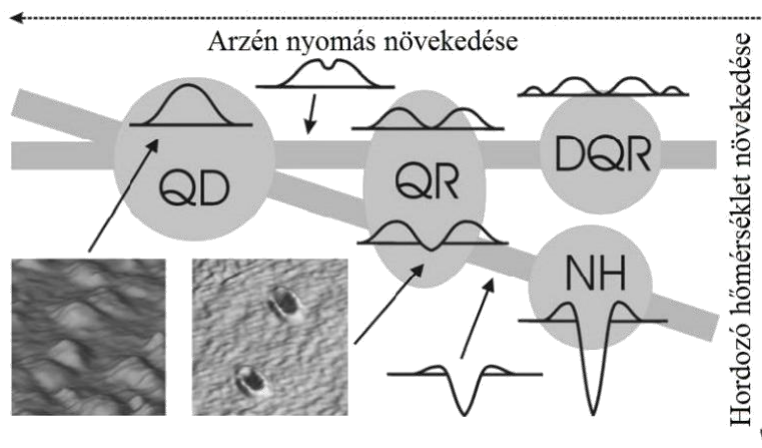
## 1. BEVEZETÉS

A különböző nanoszerkezetek alkalmazásának az előnye, hogy újfajta félvezető eszközöket készíthetünk vagy a jelenleg alkalmazott eszközök paramétereit is jelentős mértékben javítani tudjuk [1] [2]. Ezeket a nanoszerkezeteket többféle módon is elkészíthetjük, például csepp-epitaxiával [3] [4] [5], ami a molekulásugár-epitaxia (MBE) egyik fajtája [6] [7] [8]. Ezek közé a nanoszerkezetek közé tartozik az úgynevezett invertált kvantum pontok csoportja [9]. Ezeket a korábban említett csepp-epitaxiás eljárással az önszerveződés jelenségét kihasználva készíthetjük el. A csepp-epitaxia elgondolását Koguchi és munkatársai dolgozták ki először az 1990-es évek elején [10]. Ahogy az 1. ábra is mutatja nanolyukak magas hőmérsékleten, minimális As háttérnyomás esetén alakulnak ki [9] [11]. Korábbi cikeinkben a lyuk betemetését egy empirikus modellel írtuk le gallium és indium fémek esetén, valamint röviden felvázoltuk a mikroszkópikus viszkozitás egy lehetséges új elméleti értelmezését. Ebben a cikkünkben részletesebben bemutatjuk ezt a lehetséges új modellt, alumínium esetén.

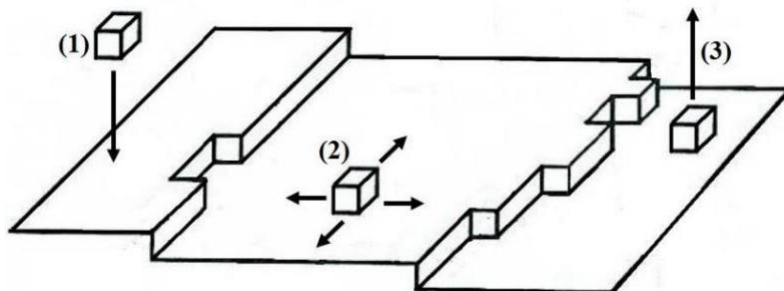
## 2. AZ ÚJ ELMÉLETI MODELL

Az atomforrásból (Knudsen cellából) érkező atomok a felületen kondenzálódnak, ahol többféle fizikai folyamat történhet. Ezeket a fizikai folyamatokat a három csoportba oszthatjuk: (1) adszorpció,

(2) felületi diffúzió, (3) deszorpció. Az MBE rendszerben, a kristálynövesztés során e három csoportba tartozó folyamatok egyszerre lépnek fel (2. ábra).



1. ábra A különféle nanostruktúrák kialakulása az arzén nyomás és a hordozó hőmérsékletének a függvényében (forrás: [12])



2. ábra A felületen fellépő fizikai folyamatok. Ezeket a folyamatoknak három csoportja van: (1) adszorpció, (2) felületi diffúzió, (3) deszorpció

E rétegnövesztési folyamatokat folytonos és diszkrét modellekkel egyaránt modellezhetjük [13]. Egy ilyen diszkrét modell az ún. Kinetik Monte-Carlo algoritmus is. A jelen cikkben ismertetendő mikroszkópikus viszkozitás lehetséges új modelljéhez a Kinetik Monte-Carlo algoritmusból indulunk ki. Ehhez mikroszkópikus megközelítésben a dinamikai viszkozitás meghatározásához írjuk fel először egy esemény bekövetkezésének valószínűségét, atomi szinten [14]:

$$P(E_a, T) = e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}}, \quad (1)$$

ahol az  $E_a$  az adott esemény aktivációs energiája,  $T$  a hőmérséklet (Kelvinben),  $R$  az univerzális gázállandó (értéke  $8,3144 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$ ). Az  $E_a$  aktivációs energia legyen egyenlő az atomok kötési energiájával ( $E_{bond}$ ). Ezekívül feltételezzük, hogy a kiindulási felület atomi szempontból teljesen sima, tehát kezdetben nincsenek a felületen atomokból álló klaszterek. Vezessük be az  $E_p$  energiát, ami az adott nanorészecske kohéziós energiája, gömb alakú nanorészecskéket feltételezve [15].

Így a mikroszkópikus viszkozitás egy lehetséges új formája a következő:

$$\mu(E_p, T) = k_0 l e^{\frac{E_p}{RT}} \quad (2)$$

ahol a  $k_0$  az atomi vibrációs frekvencia,  $l$  egy szabad paraméter, ami lehet skalár érték, illetve (egy vagy többváltozós) függvény.

### 3. DISZKUSSZIÓ

Ebben a fejezetben megvizsgáljuk, hogy milyen kapcsolat van az előző fejezetben ismertett elméleti modell és egy – az egyszerűség kedvéért – egy egytagú exponenciális függvényből álló empirikus modell között, alumínium esetén. Ebből következik, hogy a  $l$  szabad paramétert a következő módon definálhatjuk:

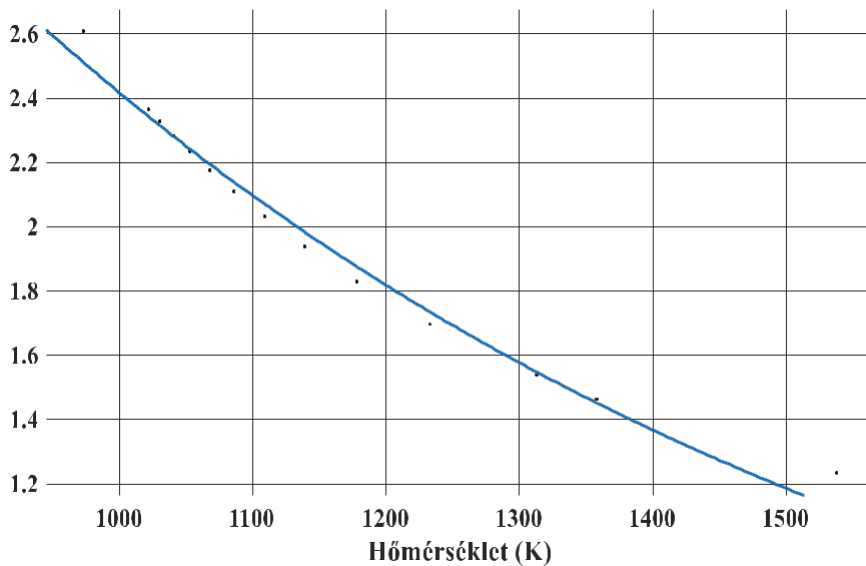
$$l = \frac{a}{k_0} = \frac{a \cdot h}{2 \cdot k_B \cdot T}, \quad (3)$$

ahol  $a$  az exponenciális függvény alaptagja, a  $k_B$  a Boltzmann állandó,  $h$  a Planck állandó.

Alumínium estében a kötési energia  $2,34 \cdot 10^{18}$  J, az atomsugár 143 pm. A 3. ábrán egy egytagú exponenciális függvényből álló empirikus modell látható, melynek képlete a következő:

$$\mu(E_p, T) = 10,03 \cdot e^{-0,001423 \cdot x} \quad (4)$$

ahol  $x$  a hőmérséklet reciprokának a -1-szerese ( $x = -\frac{1}{T}$ ).



3. ábra *A alumínium viszkozitása a hőmérséklet függvényében, egytagú exponenciális függvényből álló tapasztalati modell esetén*

A (2) egyenletben az exponenciális tag kitevőjében az  $E_p$  kohéziós energia értéke  $0,0324843608$  J.

A (3) egyenlet átrendezésével és megoldásával megkapjuk, hogy a nanorészecske 27 db Al atomot tartalmaz. Az alaptag  $k_0 \cdot l = 10,03$ . Ebből következik, hogy gallium esetén az  $l$  tényező értéke a hőmérséklet függvényében a következő:

$$l = \frac{2,4069 \cdot 10^{-10}}{T}. \quad (5)$$

### IRODALMI HIVATKOZÁSOK

- [1] G.L. Snider, A.O. Orlov, I. Amlani, X. Zuo, G.H. Bernstein, C.S. Lent, J.L. Merz and W. Porod, "Quantum Cellular Automata," *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, vol. 17, pp. 1394-1398, 1999.
- [2] A. Luque, A. Martí, C. Stanley, "Understanding intermediate-band solar cells," *Nature Photonics*, vol. 6, pp. 146–152, February 2012.
- [3] Nemcsics Akos, Urmos Antal, Toth Lajos, "Droplet Epitaxy and its Possibilities in Nano-electronics," in *IEEE*, vol. International Symposium on Next-Generation Electronics (ISNE 2018), Taipei, Taiwan, 2018, pp. 122-124.
- [4] Ákos Nemcsics, "Droplet Epitaxy as a Tool for the QD-Based Circuit Realization," in *Nonmagnetic and Magnetic Quantum Dots*, Vasilios N. Stavrou, Ed. London, United Kingdom: IntechOpen, 2017, ch. 3, pp. 43-59.

- [5] Ákos Nemcsics, "Quantum Dots Prepared by Droplet Epitaxial Method," in *Quantum Dots - Theory and Applications*, Vasilios N. Stavrou, Ed. London, United Kingdom: IntechOpen, 2015, ch. 5, pp. 120-149.
- [6] M. A. Herman, H. Sitter, *Molecular Beam Epitaxy, Fundamentals and Current Status* 2nd. ed. Berlin: Springer, 1996.
- [7] P. Frigeri, L. Seravalli, G. Trevisi G, S. Franchi, "Molecular Beam Epitaxy: An Overview," in *Comprehensive Semiconductor Science and Technology*, 3, F. Roberto, K. Hiroshi B. Pallab, Ed. Amsterdam, Netherland, 2011, pp. 480–522.
- [8] H. Mohamed, Ed., *Molecular Beam Epitaxy: From Research to Mass Production.*: Elsevier Science, 2012.
- [9] Á. Nemcsics, B. Pödör, L. Tóth, J. Balázs, L. Dobos, J. Makai, M. Csutorás, A. Ürmös, "Investigation of MBE grown inverted GaAs quantum dots," *Microelectronics Reliability*, vol. 59, pp. 60-63, 2016.
- [10] N. Koguchi, S. Takahashi, T. Chikyow, "New MBE growth method for InSb quantum well boxes," *Journal of Crystal Growth*, pp. 688-692, 1991.
- [11] C. Heyn, D. Sonnenberg, and W. Hansen, "Local Droplet Etching: Self-assembled Nanoholes for Quantum Dots and Nanopillars," in *Nanodroplets*. New York: Springer Science, 2013, pp. 363-383.
- [12] Á. Nemcsics, "Growth of GaAs and related materials based nano-structures by droplet epitaxial method," *Recent Res. Devel. Mat. Sci. Engg.*, vol. 4, pp. 53-87, 2011.
- [13] H. E. Stanley A. L. Barabási, "Basic phenomena of MBE," in *Fractal Concepts In Surface Growth*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995, ch. 12, pp. 128-230.
- [14] W. Miller, "Simulation of Epitaxial Growth by Means of Density Functional Theory, Kinetic Monte Carlo, and Phase Field Methods," in *Handbook of Crystal Growth: Fundamentals (Volume I., Part A: Thermodynamics and Kinetics)*, 2nd ed. New York: Elsevier B.V, 2015, pp. 521-559.
- [15] W.H. Qi, M.P. Wang, "Size and shape dependent melting temperature of metallic nanoparticles," *Materials Chemistry and Physics*, vol. 88, no. 2-3, pp. 280-284, 2004.