

Hivatalos bírálói vélemény Agócs Emil
„Szilícium alapú nanokristályos szerkezetek minősítése spektroszkópiai ellipszometriával”
című doktori értekezéséről.

Általános értékelés

A szerző a PhD fokozat elnyerése céljából benyújtott értekezését az anyagtudományi kutatások élvonalához tartozó területen, nevezetesen a szilícium nanoszerkezetek kutatása témakörben készítette. A félvezető ipar, az elektronika alapvető anyagának, a szilíciumnak alkalmazási perspektíváját jelentősen szélesíti az a technológiai fejlődés, amely lehetővé teszi különböző bonyolultságú nanoszerkezetek kialakítását. Ennek egyik eredménye, hogy a szilíciumra épülő nanostruktúrák egyre inkább teret hódítanak a napelem technológiában, a szenzorikában, a fényt emittáló diódák és töltéstárolók anyagaként. Mindezen alkalmazásoknak azonban alapvető feltétele a szilíciumra épülő szerkezetek fizikai tulajdonságainak, így például az elektronszerkezetnek, az optikai tulajdonságoknak a felderítése, továbbá mindezeknek az összekapcsolása többek között a nanostruktúrák felépítésével, az aktív alkotóelem méreteloszlásával, a nanoszemcsék felületi rétegének tulajdonságaival.

A jelölt kutatómunkáját az a célkitűzés vezérelte, hogy a gyakorlati alkalmazás szempontjából fontos, szilícium alapú nanoszerkezetek spektrál ellipszometriai vizsgálatával minél több információt nyerjen ezeknek a modell nanoszerkezeteknek az optikai tulajdonságairól és ezen tulajdonságoknak a nanoszerkezet jellemző paramétereivel való összefüggéséről. Elektrokémiai úton előállított pórusos szilícium mintasorozatot, szilíciumban gazdag oxid rétegből (SRO) és szilícium dioxidból felépülő multiréteges szerkezeteket, továbbá a leválasztási technológiával szabályozott szemcseméretű nanokristályos szilícium vékonyrétegeket tanulmányozott. Komplex optikai modelleket alkotott, amelyekkel a spektrál ellipszometriai eredményeket illesztve meghatározta a különböző nanoszerkezetek dielektromos függvényeit, továbbá következtetett az átmeneti és fedő rétegek tulajdonságaira, valamint a hőkezelés hatására végbemenő fázisátalakulási folyamatokra.

A spektrál ellipszometria az egyik leghatékonyabb és a felület közeli változásokra nagyon érzékeny technika a sokréteges struktúrák és nanoszerkezetek kutatásában. Eredményes használata azonban megkívánja a vizsgált rendszert jól leíró optikai modellek megalkotását. A dolgozatban prezentált eredmények azt mutatják, hogy a jelölt alapos felkészültséggel rendelkezik ezen modellek kidolgozása területén, jól ismeri és alkalmazni is tudja a dielektromos függvény definiálására használatos diszperziós modelleket. Otthonosan mozog a sokparaméteres illesztésben és hatékony algoritmust dolgozott ki az érzékeny paraméterek meghatározására, míg a kevésbé érzékenyek rögzítésével és csatolásával csökkentette az illesztendő paraméterek számát.

A dolgozat alapos, precíz munkát tükröz. A mű jól tagolt, áttekinthető, világos nyelvezetű, szép kivitelű. Szembetűnő helyesírási hiba a mondat közbeni vesszők gyakori elhagyása. Az ábrák, táblázatok jól szerkesztettek, tartalmazzák a szükséges információt, érthetőek. Az illesztés jóságát jellemző MSE (mean square error) értékeket és a különböző hibaszázalékokat a táblázatokban, valamint az ábrákon feltünteti a szerző. A szakirodalom feldolgozása megfelelő részletességgel történt, a témához kapcsolódó kutatási eredményekre hivatkozik a dolgozat. Ezen eredmények feldolgozása tükröződik a kutatási célkitűzés megfogalmazásában is. Az optikai modell alapján elvégzett illesztésből nyert optikai jellemzőket és a modell komponenseire kapott

értékeket részletesen analizálja a szerző összevetve azokat egyrészt korábbi irodalmi eredményekkel, valamint ugyanazon a mintasorozaton más kísérleti módszerekkel (HRTEM, kisszögű Röntgenszórás) nyert adatokkal. Összefüggéseket állapít meg a kapott dielektromos függvény képzetes részének amplitúdója, kiszélesedése és energetikai pozíciója, valamint az egyes mintasorozatok nanoszerkezetének változása között. Jelentős figyelmet szentel a vizsgált mintasorozatok sokoldalú jellemzésére, ugyanakkor kevésbé foglalkozik az általa kialakított optikai modelleknek a korábban használt modellekhez viszonyított előnyeivel.

Konkrét észrevételek, kérdések.

1. A dolgozat 4.4 Fejezetében az Adachi által c-Si-re megadott dielektromos függvényt (MDF) illeszti a Woollam cég által a Complete EASE programban megadott referencia c-Si dielektromos függvényre. A dolgozat 40. oldalán megadja a szerző a legjobb illesztéshez tartozó paramétereket, azonban jó lenne látni grafikusan is magának az illesztésnek az eredményét. Ez az 1. Tézispont megerősítése szempontjából fontos lenne, ugyanakkor alátámasztaná a későbbi illesztésekkor a paraméterek felhasználhatóságát.
2. A dolgozat 51. oldalán az alap optikai modellből (5.3 ábra) számolt dielektromos függvény valós és képzetes részei láthatóak pórútos Si-ra az 5.8 és 5.9 ábrákon, ahol a 30 % c-Si és 70% üreg komponens EMA keverékének szimulált spektrumai is láthatóak. Ez utóbbiak a c-Si-re jellemzően, két maximummal bíró függvények és nem mutatnak hasonlóságot az ugyanilyen c-Si és üreg keverékével jellemzett PS 130 minta dielektromos függvényeivel. Ezért felvetődik a kérdés, hogy az 5.2 ábrán megadott 3 réteges EMA modell, ami a c-Si és üreg komponensek keveréke, mennyiben elfogadható?
3. A dolgozat 59. oldalán található 6.2 ábrán az SRO/SiO₂ minták kisszögű Röntgen diffrakciós spektrumai vannak megadva a hőkezelés függvényében. Jól látható, hogy a kristályos Si 1000 C° hőkezelésnél kezd kialakulni. A 63. oldalon a réteg összetételét mutató 6. Táblázatban az nc-Si komponens már 600 C° hőkezelésnél megjelenik az optikai modell második rétegében. Mi ennek a magyarázata?
4. Az oszlopos szerkezetű nanokristályos vékonyrétegek optikai modellje (69. oldal 7.4 ábra) nc-Si mellett c-Si-t is tartalmaz. A 7.2 ábrán (68. oldal) látható nagy felbontású transzmissziós elektronmikroszkópos felvétel a nanokristályos szilíciumon kívül amorf szerkezetet mutat. Mi indokolja az optikai modell c-Si komponensét?

Új tudományos eredmények és Tézispontok

Összefoglalva megállapítható, hogy a szerző jelentős új tudományos eredményt ért el a vizsgált pórútos szilícium mintasorozat dielektromos függvényének meghatározásában és annak GCP (general critical points) modellel történő paraméteres leírásában. A 10 réteg párból álló SRO/SiO₂ szuperrács szerkezetet sikeresen modellezte a rétegpárok vastagságának és optikai tulajdonságainak csatolt illesztésével és következtetett a hőkezelés hatására végbemenő fázisátalakulásokra. Optikai modelleket fejlesztett ki a nanokristályos szilícium fázis leírására és meghatározta az nc-Si dielektromos függvényét és annak változását a szemcsemérettel. Jól

működő algoritmust fejlesztett ki az ellipszometriai mérések kiértékelésében alapvetően fotos illesztési folyamatokra.

A Tézispontokban megfogalmazott eredményeket új eredményeknek ismerem el. A Tézispontokat elfogadom kivéve az 1. és 3. Tézispontot. Az 1. Tézisben az utolsó mondat elhagyását javaslom, mivel az implicite azt tartalmazza, hogy elég szélesre választva a paraméterek értelmezési tartományát még “bizonytalan információk” alapján is az illesztésből jó eredményt kapunk. Véleményem szerint először jó mérési eredmények kellenek. A 3. Tézispontban az “elsőként” szó elhagyását javaslom. A kifejezés szakmabeli értéke nem vetekszik a “felfedeztem” kifejezésével, ugyanakkor nehezen ellenőrizhető.

A dolgozat tartalma, az abban foglalt új tudományos eredmények és ezek publikáltsága értékes és színvonalas munkát tükröz és alkalmas arra, hogy a PhD fokozat megadásának alapját képezze. A nyilvános vita kitűzését javaslom.

Budapest, 2014. július 28.

Dr. Koós Margit
az MTA doktora