

Kristalli Katı Yüzeylerde Kuantum Nokta Oluşumlarının Elektrik ve Gerinim Alanları Altında Modellenmesi

Program Kodu: 1001

Proje No: 315M222

Proje Yürütücüsü:
Dr. Öğr. Üyesi Ersin Emre ÖREN

Araştırmacı:

Dr. Öğr. Üyesi Aytaç ÇELİK

Danışman:

Prof. Dr. Ömer Tarık OĞURTANI

Bursiyerler:

Yüksek Lisans:

Nur Seda AYDIN
Mervenaz ŞAHİN

Lisans:

Çağlanaz AKIN
Büşra DEMİR
Sümeyye GÖKCE
Gizem GÖKÇE
Defne GÖRGÜN

HAZİRAN 2018

ANKARA

ÖNSÖZ

"Kristalli katı yüzeylerde kuantum nokta oluşumlarının elektrik ve gerinim alanları altında modellenmesi" isimli 315M222 nolu proje TÜBİTAK 1001 - Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Projelerini Destekleme Programınca desteklenmiştir.

Kuantum noktalar (KN) 2-50 nm çapında metalik veya yarıiletken nano boyutlu parçacıklardır. KN'lerde enerji düzeyleri kuantize olup, iyi tanımlanmış bant aralıkları bulunmaktadır ve bu enerji düzeyleri KN'lerin şekil, boyut, belirli bir bölgedeki dizilim/yoğunluk ve malzeme kompozisyonu ayarlanarak kontrol edilebilmektedir. Bu özellikleri ile, KN'lar elektronik, fotonik ve manyetik birçok yeni cihazın (fotovoltaikler, kuantum bilgisayarlar, tek elektron transistörler, lazer üretimi ve tıbbi görüntüleme gibi) üretilmesi/geliştirilmesi için düşünülmekte ve denenmektedir. Bu çalışma kapsamında kuantum nokta ve dizilerinin heteroepitaksiyel ortamlarda oluşum dinamikleri, taşınım kinetiği ve evrimi eş zamanlı elektrik ve gerinim alanları altında ilk kez modellenmiş ve gerçekleştirilen simülasyonlar ile incelenmiştir.

Bu çalışma kapsamında, heteroepitaksiyel gerginliğe ve yön bağımlı özelliklere sahip ince filmlerde film/altlık arayüzey denge(sizlik) durumlarını ve kuantum noktaların oluşma ve evrilme kinetiklerini yöneten bir diferansiyel denklemlere elektrik alan eklenerek geliştirilmiştir. Geliştirilen bu denklem sayısal olarak çözümlenmiş ve kapsamlı bir simülasyon programı ortaya çıkarılmıştır. Hazırlanan bu program ile simülasyonlar yapılarak, sistemdeki gerilim değerlerinin ve uygulanan elektrik alanın QD oluşumuna etkileri ortaya çıkarılmıştır. Simülasyonlardan elde edilen veriler sonucunda, malzeme özelliklerine göre hangi dışsal kuvvet alanlarının uygulanması durumunda ne tür kararlı nanoyapılar elde edileceği hakkında bilgiler elde edilmiş ve bu bilgiler faz diyagramları şeklinde sunulmuştur. Bu proje sonucunda elde edilen bilgilerin, istenilen kullanım alanları için gerekli optimum özelliklere sahip kuantum nokta nanoyapıların tasarımına yardımcı olması beklenmektedir.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	i
İÇİNDEKİLER.....	ii
ŞEKİL LİSTELERİ	iv
ÖZET.....	xi
ABSTRACT	xii
1. GİRİŞ.....	1
2. LİTERATÜR ÖZETİ	3
2.1 Motivasyon	3
2.2 Kuantum Hapis Etkisi	4
2.3 Kuantum Noktalar	4
2.4 Kuantum Noktaların Kullanım Alanları	5
2.4.1 Lazerler	5
2.4.2 Güneş panelleri	6
2.4.3 KN bilgi depolayıcılar ve bilgisayarlar	7
2.5 Kuantum Noktaların Üretim Teknikleri	7
2.5.1 Stranski-Krastanow büyüme modu	9
2.6 Deneysel Çalışmalar ve Gözlemler	11
2.7 Teorik ve Modelleme Çalışmaları	13
3. TEORİ VE MATEMATİKSEL MODEL	23
3.1 Yüzey Sürüklenme Difüzyonu ve Büyümesinin Formülasyonu	24
3.2 Matematiksel Model ve Sayısal Çözüm Yöntemleri.....	27
3.2.1 Başlangıç sisteminin oluşturulması	28
3.2.2 Düğüm noktası eğriliklerinin hesaplanması	29
3.2.3 Çember gerilimlerinin hesaplanması	30
3.2.4 Elektrik potansiyelin hesaplanması.....	33
3.2.5 Düğüm hızlarının hesaplanması ve sistemin zamanda ilerlemesi	41
3.2.6 Sistemin yeniden yapılandırılması	41
4. BULGULAR	43
4.1 Yön-Bağımsız (İzotropik) Sistemler	43
4.1.1 Damlacıkların elektrik ve gerilim alanları altında simülasyonları	43
Yön-bağımsız sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve denge ıslatma açısı ile kontrolü	52
Yön-bağımsız sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve gerilim alanlarıyla kontrolü.....	56

4.1.2 Yüzeydeki rastsal pürüzlülüklerin elektrik ve gerilim alanları altında simülasyonları	60
4.2 Yön-Bağımlı (Anizotropik) Sistemler	64
4.2.1 Damlacıkların elektrik ve gerilim alanları altında simülasyonları	65
Yön-bağımlı sistemlerde KN morfolojilerinin yüzey katılığı ile kontrolü.....	70
Yön-bağımlı sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve kristal eğim açısı ile kontrolü.....	78
Yön-bağımlı sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve yüzey katılığı ile kontrolü	84
Yön-bağımlı sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve gerilim ile kontrolü	89
Yön-bağımlı sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve denge ıslatma açısı ile kontrolü	102
4.2.2 Film yüzeyindeki rastsal pürüzlülüklerin elektrik ve gerilim alanları altında morfolojik evriminin modellenmesi	109
4.3 Farklı Islatma Potansiyellerinin Etkilerinin İncelenmesi	112
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR.....	116
5.1 Gelecek İçin Önerilen Çalışmalar	119
TEŞEKKÜRLER	120
KAYNAKLAR	121
PROJE ÇIKTILARI	127

ŞEKİL LİSTELERİ

Şekil 1.1. Ge Kuantum noktalar (Kienzle vd., 1999) (sol), model kuantum nokta (orta), kuantum noktalarda boyuta bağlı enerji tayf değişimi (sağ)	1
Şekil 2.1 Kuantum hapis etkisi görülen parçacıklarda yük taşıyıcı hareketinin şematik gösterimi: (a) Kuantum hapis etkisi görülmeyen malzeme, (b) Kuantum kuyusu, (c) Kuantum teli, (d) Kuantum noktası.	4
Şekil 2.2 GaAs matris üzerinde büyütülen InAs KN dizilerinin çoklu hücre yapısını gösteren TEM görüntüsü (Raffaella vd., 2006).....	6
Şekil 2.3 Epitaksiyel gerginliğe sahip ince film büyüme modları: (sol) Frank-van der Merwe (FM) katman oluşumları, (orta) Volmer-Weber (VW) ada oluşumları ve (sağ) Stranski-Kranstanov (SK) katman-ada oluşumları	8
Şekil 2.4 Şekil 2.3'te gösterilen üç heteroepitaksiyel büyüme moduna örnek kesitsel TEM görüntüleri (a) Frank Van der Merwe (FM) (Nishiguchi ve ark., 2004), (b) Volmer-Weber (VW) (Raviswaran ve ark., 2001), (c) Stranski-Krastanow (SK) (Kienzle ve ark., 1999).	8
Şekil 2.5 Yüzey kristali atomları (yeşil) ile depozit edilen malzemenin atomları (kırmızı) arasındaki doğal kafes boşluğu. (a) Bozulmamış film (gerilimden dolayı filmin atomları sıkışmış) (b) Gerinim boşalması sonucu oluşan konfigurasyon.	10
Şekil 2.6 (sol) $Si_{0.75}Ge_{0.25}/Si(001)$ tabakasının SEM görüntüsü (Wiebach vd., 2000); (orta) $Si_{0.6}Ge_{0.4}$ için yuvarlak şekilli kubbe tipi ve kare tabanlı kulübe tipi adacık dağılımının AFM görüntüsü (Berbezier vd., 2002); (sağ) Piramit ve kubbe şeklindeki Ge/Si ada dağılımının HRAFM görüntüsü ve bu Ge/Si (001) adaların [100] kesit alanından TEM görüntüsü (Baribeau vd., 2006).....	11
Şekil 3.1 Altlık ile sistem üzerindeki adacık oluşumunun şematik gösterimi (üst) ve beyaz gürültü deneylerinin şematik gösterimi (alt)	23
Şekil 3.2 Program akış şeması	28
Şekil 3.3 Düğüm noktası i' deki elemanın dönme açısı θ_i' nin şematik gösterimi.....	29
Şekil 3.4 Yüzeydeki üç düğüm noktasından geçen bir dairenin şematik gösterimi. O noktası çemberin orta noktasıdır	30
Şekil 3.5 İki boyutlu Kelvin çözümü şematik gösterimi.....	32
Şekil 3.6 Laplace denkleminin iki boyutlu problem için temel analitik çözümünün (Denklem 3.33) grafiği	35
Şekil 3.7 Temel analitik fonksiyonun notasyonu	35
Şekil 3.8 Q' noktası Q noktasına yaklaşırken AB boyunca alınan integralin limiti.....	36

Şekil 3.9 Dairesel sistem için analitik (noktalar) ve sayısal çözümün (renkli çubuklar) karşılaştırılması.	41
Şekil 3.10 Yeniden yapılandırma. a) eleman uzunluğu maksimum kritik değerin üstünde. b) eleman uzunluğu minimum kritik değerin altında.	42
Şekil 4.1 Örnek simülasyon: başlangıçta yüzeyde oluşturulmuş bir damlacığın zamanla değişerek dengeye ulaşması.....	44
Şekil 4.2 Farklı gerilim kuvvetleri altında elde edilen kuantum noktaların denge morfolojileri	44
Şekil 4.3 Elektrik alan ($\chi=10$) ve farklı gerilim kuvvetleri altında elde edilen kuantum noktaların denge morfolojileri	45
Şekil 4.4 Farklı gerilim kuvvetleri ve ıslatma açıları altında elde edilen kuantum noktaların denge morfolojileri. Nokta renkleri artan sayıda parçalanmayı (fragmentation) göstermektedir. Kırmızıya noktalar ise çok yüksek gerilim altında adacıkta çatlak oluşumunu ifade etmektedir	46
Şekil 4.5 Farklı gerilim kuvvetleri altında elde edilen kuantum noktaların en-boy oranları	47
Şekil 4.6 Farklı gerilim kuvvetleri ve ıslatma açıları altında elde edilen kuantum noktaların en-boy oranlarını veren diyagram.....	48
Şekil 4.7 KN sistemi ve tepe eğriliklerinin hesaplandığı düğüm noktaları.....	48
Şekil 4.8. Denge ıslatma açılarının (a) ve gerilim kuvvetlerinin (b) KN tepe eğriliklerine etkisi	49
Şekil 4.9 Elektrik alan altında başlangıç damlacığının zamanla (kırmızıdan – mora doğru) ulaştığı denge şekilleri: $\Sigma = 0$, $\theta_{eq} = 45^\circ$	50
Şekil 4.10 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri: $\Sigma = 0$, $\theta_{eq} = 45^\circ$	51
Şekil 4.11 (a) KN tepe yüksekliğinin, (b) KN genişliğinin, (c) KN en-boy oranlarının (d) KN tepe eğriliklerinin elektrik alan ile değişimleri ($\Sigma = 0$, $\theta_{eq} = 45^\circ$)	51
Şekil 4.12 Filmin uzunluğunun (a) ve kalınlığının (b) elektrik alan ile değişimi	52
Şekil 4.13 Farklı denge açıları için gerinimsiz durumda KN morfolojilerinin elektrik alan ile değişimi.....	53
Şekil 4.14. KN, ara faz geçişi, film, bozulma morfoloji fazlarını gösteren denge ıslatma açısı- elektrik alan faz diyagramı ($\chi = 0$)......	54
Şekil 4.15 İzotropik sistemde denge ıslatma açısının $\theta_{eq} = 75^\circ$ için elektrik alan kuvvetlerinin KN morfolojisine etkisi	55

Şekil 4.16 KN'lerin elektrik alan altında yükseklik, genişlik, en-boy oranı ve tepe eğriliğinin değişimi ($\Sigma = 0$, $\theta_{eq} = 75^\circ$).....	55
Şekil 4.17 Elektrik ve gerinim kuvvetleri altında başlangıç damlacığının zamanla (kırmızıdan – mora doğru) ulaştığı denge şekilleri ($\Sigma = 0.5$, $\theta_{eq} = 75^\circ$).....	56
Şekil 4.18 Farklı gerinim kuvvetlerinde ve elektrik alan etkisi altında KN morfolojileri $\theta_{eq} = 15^\circ$	57
Şekil 4.19 Farklı gerinim kuvvetlerinde ve elektrik alan etkisi altında KN morfolojileri $\theta_{eq} = 45^\circ$	58
Şekil 4.20 (a) $\Sigma = 0$, (b) $\Sigma = 0.5$, (c) $\Sigma = 1$ gerinim kuvvetleri ve elektrik alan etkisindeki KN denge morfolojileri $\theta_{eq} = 45^\circ$	59
Şekil 4.21 Farklı elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri \rightarrow mavi).....	60
Şekil 4.22 Farklı gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri \rightarrow mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü A=0.2 alınmıştır.....	61
Şekil 4.23 Farklı gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri \rightarrow mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü A=0.3 alınmıştır.....	61
Şekil 4.24 Farklı gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri \rightarrow mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü A=0.4 alınmıştır.....	62
Şekil 4.25 Farklı gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri \rightarrow mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü A=0.5 alınmıştır.....	62
Şekil 4.26 Farklı gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri \rightarrow mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü A=0.6 alınmıştır.....	62
Şekil 4.27 Farklı başlangıç yüzey pürüzlülüğü, gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında film kararlılığı (Kararlı (mor) / Kararsız (kırmızı))	63
Şekil 4.28 Farklı elektrik alan şiddetleri altında kuantum noktaların zamanla aldığı denge şekilleri (gri \rightarrow mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü A=0.4 alınmıştır.....	64
Şekil 4.29 Difüzyon anizotropisinin farklı düzlemlerde göstermiş olduğu davranışlar, $A=5$	64
Şekil 4.30 Yüzey sertliği anizotropisinin farklı düzlemlerde göstermiş olduğu davranışlar, $A=5$	65
Şekil 4.31 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (yüksek anizotropi şiddeti), $\phi=0^\circ$	66
Şekil 4.32 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (düşük anizotropi şiddeti), $\phi=90^\circ$	67

Şekil 4.33 Farklı denge ıslanma açılarındaki en-boy oranının ve tepe eğriliğinin anizotropi şiddetine bağlılığı. elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (düşük anizotropi şiddeti), $\phi=90^\circ$	68
Şekil 4.34 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (üst: düşük anizotropi şiddeti; alt:yüksek anizotropi şiddeti), $\phi=0^\circ$	68
Şekil 4.35 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (üst: düşük anizotropi şiddeti; alt:yüksek anizotropi şiddeti), $\phi=0^\circ$	69
Şekil 4.36 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (yüksek anizotropi şiddeti), $\phi=30^\circ$	69
Şekil 4.37 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (yüksek anizotropi şiddeti), $\phi=30^\circ$	70
Şekil 4.38 Yüzey katılığı parametresi ile KN en-boy oranları ve KN tepe eğriliklerinin kontrolü	70
Şekil 4.39 Yüzey katılığının KN'lerin en-boy oranları ve KN tepe eğriliklerine etkisi.....	71
Şekil 4.40 {110} düzleminde farklı kristal eğim açılarının KN morfolojilerine etkisi.....	72
Şekil 4.41 (a) {100} düzleminde (b) {111} düzleminde farklı kristal eğim açılarının KN morfolojilerine etkisi.....	73
Şekil 4.42 {110} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 90^\circ$ durumları için en-boy oranı değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq} = 45^\circ$)	74
Şekil 4.43 {110} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 90^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq} = 45^\circ$).	75
Şekil 4.44 {100} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 45^\circ$ durumları için en boy değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq} = 45^\circ$).	75
Şekil 4.45 {100} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 45^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq} = 45^\circ$).	76
Şekil 4.46 {111} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 30^\circ$ durumları için en-boy oranlarının değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq} = 45^\circ$).	77
Şekil 4.47 {111} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 30^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq} = 45^\circ$).	77
Şekil 4.48 $\phi = 0^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.....	79
Şekil 4.49 $\phi = 60^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.....	80

Şekil 4.50 $\phi = 120^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.	81
Şekil 4.51 {110} yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.	82
Şekil 4.52 {100} yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.	83
Şekil 4.53 {111} yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.	84
Şekil 4.54 {110} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü $\phi = 90^\circ$	85
Şekil 4.55 {110} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi = 0^\circ$).....	86
Şekil 4.56 {110} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).....	86
Şekil 4.57 {100} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	87
Şekil 4.58 {111} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).....	88
Şekil 4.59 {111} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü.	89
Şekil 4.60 {110} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	90
Şekil 4.61 {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).	90
Şekil 4.62 {110} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	91
Şekil 4.63 {110} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).....	92
Şekil 4.64 {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).	93
Şekil 4.65 {110} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).....	94
Şekil 4.66 {100} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	95
Şekil 4.67 {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).	95
Şekil 4.68 {100} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	96

Şekil 4.69 {100} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).....	96
Şekil 4.70 {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).	97
Şekil 4.71 {100} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).....	98
Şekil 4.72 {111} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).....	99
Şekil 4.73 {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).	99
Şekil 4.74 {111} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	100
Şekil 4.75 {111} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).....	101
Şekil 4.76 {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).	101
Şekil 4.77 {111} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).....	102
Şekil 4.78 {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).	103
Şekil 4.79 {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=90^\circ$).	104
Şekil 4.80 {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).	105
Şekil 4.81 {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=45^\circ$).	106
Şekil 4.82 {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).	107
Şekil 4.83 {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=30^\circ$).	108
Şekil 4.84 YMK (110) düzlemi için, gerilim ve farklı elektrik alan ve anizotropi şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü A=0.4 alınmıştır, $\phi=0^\circ$	109

Şekil 4.85 YMK (110) düzlemi için, gerilim ve farklı elektrik alan ve anizotropi şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü $A=0.4$ alınmıştır, $\phi=90^\circ$	110
Şekil 4.86 Gerilim – elektrik alan – film kararlılığı diyagramları. (a) film adacık geçişleri (b) oluşan adacık yoğunlukları $m=1$, $\phi=0$ ve $B=0.2$	111
Şekil 4.87 Gerilim – elektrik alan – film kararlılığı diyagramları. (a) film adacık geçişleri (b) oluşan adacık yoğunlukları $m=1$, $\phi=0$ ve $B=0.5$	111
Şekil 4.88 Gerilim – elektrik alan – film kararlılığı diyagramları. (a) film adacık geçişleri (b) oluşan adacık yoğunlukları $m=1$, $\phi=0$ ve $B=0.8$	112
Şekil 4.89 Farklı Helmholtz serbest enerji yoğunluklarının karşılaştırılması.....	113
Şekil 4.90 Farklı ıslatma potansiyellerinin karşılaştırılması.....	113
Şekil 4.91 Farklı ıslatma potansiyelleri kullanılarak yapılan simülasyonlar.....	114
Şekil 4.92 Farklı ıslatma potansiyelleri kullanılarak yapılan simülasyonlar. $\chi=0$, $\Sigma=0$, $f_d=1$ ve $f_{sd}=0.001$	114
Şekil 4.93 Farklı ıslatma potansiyelleri kullanılarak yapılan simülasyonlar. $\chi=1$, $\Sigma=0$, $f_s=1.7$, $f_d=1$ ve $f_{sd}=0.001$	115
Şekil 4.94 Farklı ıslatma potansiyelleri kullanılarak yapılan simülasyonlar. $\chi=1$, $\Sigma=0.65$, $f_s=1.7$, $f_d=1$ ve $f_{sd}=0.001$	115

ÖZET

Kuantum noktalar (KN, Quantum dots) 2-50 nm çapında metalik veya yarıiletken nano parçacıklar olup enerji düzeyleri, içerisindeki elektron-boşluk çiftlerinin boyutsal olarak kısıtlanması nedeniyle, kuantize olmuştur. KN'lerin enerji spektrumları optik ve elektronik birçok fiziksel özelliklerini kontrol ederken aynı zamanda malzemenin kompozisyonu, yoğunluğu, boyutları, kafes gerinimleri ve morfolojisi ile ayarlanabilmektedir. Stranski-Krastanow morfolojisi olarak bilinen, birbirlerinden çok ince bir ıslatma tabakası ile ayrılmış nanoboyutlu adacıkların oluşumu, epitaksiyel-gerinimlere sahip sistemlerde gözlenmektedir. Bu fabrikasyon tekniği ile yeni optoelektronik cihazların üretiminin önündeki en önemli kısıt, küçük boyutlu malzemelerin yapısal kontrolünün zorluğu ve özelliklerini kolay kaybetmeleridir. Bu nedenle, yüzey ve arayüzeylerin kapiler etkiler ve farklı dış kuvvetler altındaki davranışlarının anlaşılması son derece önemli bir malzeme problemidir. Bu tip nanosistemlerde, yüzey pürüzlülüğü, difüzyon anizotropisi ve kristal yapının yönü ince filmlerin morfolojik evrimi üzerinde büyük etkilere sahiptirler. Bu çalışma kapsamında, heteroepitaksiyel gerginliğe ve yön bağımlı özelliklere sahip ince filmlerde film/altlık arayüzey denge(sizlik) durumlarını ve kuantum noktaların oluşma ve evrilme kinetiklerini yöneten diferansiyel denklemlere elektrik alan eklenerek geliştirilmiştir. Geliştirilen bu denklem sayısal olarak çözümlenmiş ve kapsamlı bir simülasyon programı ortaya çıkarılmıştır. Hazırlanan bu program ile simülasyonlar yapılarak, sistemdeki gerilim değerlerinin ve uygulanan elektrik alanın QD oluşumuna etkileri ortaya çıkarılmıştır. Simülasyonlardan elde edilen veriler sonucunda, malzeme özelliklerine göre hangi dışsal kuvvet alanlarının uygulanması durumunda ne tür kararlı nanoyapılar elde edileceği hakkında bilgiler elde edilmiş ve bu bilgiler faz diyagramları şeklinde sunulmuştur. Bu proje sonucunda elde edilen bilgilerin, istenilen kullanım alanları için gerekli optimum özelliklere sahip kuantum nokta nanoyapıların tasarımına yardımcı olması beklenmektedir.

Anahtar Kelimeler: Kuantum noktalar, ince filmler, epitaksiyel katmanlar, yüzey ve arayüzeyler, difüzyon, yüzey enerjisi, ıslatma katmanı, kendiliğinden organize olma, bilgisayar modellemesi.

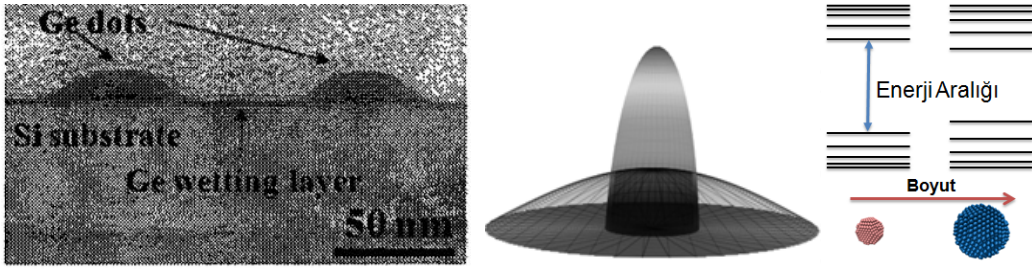
ABSTRACT

In quantum dots (QD), the excitons are spatially confined and their energy spectrum, which controls many physical properties of interest, can be adjusted over a wide range by tuning composition, density, size, lattice strain and morphology. The formation of QDs joined by a thin flat wetting layer, known as the Stranski-Krastanow (SK) morphology, is a general growth mode observed in many epitaxially-strained thin solid films. These features make semiconductor QDs attractive for the design and fabrication of novel electronic, magnetic and photonic devices. The success of this endeavor has mainly been enabled by research leading to reliable means for estimating forces in small material systems and by establishing frameworks, in which the integrity and/or functionality of the systems is satisfied. The material failure continues to be a main technology-limiting barrier and thus, the subject of capillary-driven morphological evolution of surfaces and interfaces, especially under the action of applied force fields e.g., electrostatic and thermo-mechanical, is still a challenging materials problem. In such nano-scale systems, the magnitude of the surface roughness, diffusion anisotropy and texture orientation may have a significant influence on the thin film surface evolution. In this study, electric field is included into the coupled differential equations that govern the formation and evolution kinetics of quantum dots during heteroepitaxial growth. The developed differential equation system was solved numerically and a comprehensive simulation program was developed. The simulations demonstrated the interplay between the stable QDs and the material properties (e.g., crystallographic orientation and initial thickness of the film, diffusion and surface stiffness anisotropies, surface and interfacial energies, wetting contact angle and mismatch/external stresses). The investigation of stable QD morphologies enabled us to generate phase diagrams that show the stable QD configurations for a given set of material/process parameters. This information will provide design capability for QDs and hence desired QD-based device technologies.

Keywords: Quantum dots, thin films, epitaxial layers, interfaces and surfaces, diffusion, anisotropic surface energy, wetting layer, self-assembly, computer simulation.

1. GİRİŞ

Kuantum noktalar (Quantum dots, KN), 2-50 nm boyutlarında metalik veya yarıiletken nanoboyutlu malzemelerdir. KN'ler çok küçük boyutlara sahip olmaları nedeni ile kuantize olmuş enerji düzeylerine sahiptirler. Bu enerji düzeyleri (enerji bant aralıkları), KN'lerin boyut (Norris ve Bawendi, 1995), şekil (Vossmeier vd., 1994; Han vd., 2015), belirli bir bölgedeki dizilim/yoğunluk ve malzeme kompozisyonu (Jbara vd., 2016; Badawi, 2016) ayarlanarak kontrol edilebilmektedir. Bu özelliklere ek olarak, Stranski-Krastanov (SK) ince film büyütme metodu ile üretilen KN'lerin dislokasyon gibi kusurları içermediği ve birbirlerine ince bir ıslatma katmanı ile bağlı olduğu gösterilmiştir (Kienzle vd., 1999). Bu tip dislokasyon bulunmayan ve birbirlerine bağlı KN'lerin önemi, enerji bant yapılarında kontrol edilemeyen enerji düzeylerinin olmamasından ve ıslatma katmanı sayesinde üretilen fotoelektronların taşınımının sağlanabilmesinden kaynaklanmaktadır. Tüm bu özellikleri nedeni ile, KN'ler fotovoltaikler (Luque, 2011; Popescu vd., 2008), tek elektron transistörler (Lu vd., 2000; Kumar ve Kaur, 2010), lazerler (Scalari vd., 2009, Tang vd., 2016) gibi elektronik, fotonik ve manyetik birçok yeni cihazın üretilmesi/geliştirilmesi için düşünülmekte ve denenmektedir (Şekil 1.1).



Şekil 1.1 Ge Kuantum noktalar (Kienzle vd., 1999) (sol), model kuantum nokta (orta), kuantum noktalarda boyuta bağlı enerji tayf değişimi (sağ).

KN'ler üzerinde yapılan deneysel ve modelleme çalışmaları, kararlı KN'lerin oluşumunun kristal düzlem yönü, filmin başlangıç kalınlığı (García vd., 2000) difüzyon ve yüzey sertliği anizotropileri (Korzec vd., 2012; Ogurtani vd., 2010a) yüzey ve arayüzey enerjileri, ıslatma açısı, kafes parametrelerinin uyumsuzluğundan kaynaklanan içsel gerinimler gibi malzeme özellikleri ile dışarıdan uygulanan gerinim ve elektrik alanın yönü/şiddeti gibi üretim parametrelerinden (Ogurtani vd., 2010b; Du ve Maroudas, 2017; Shklyayev ve Budazhapova, 2017) etkilendiğini göstermektedir. KN'lerin yapısal ve dolayısıyla optoelektronik özelliklerinin kontrol edilmesi için gerinim kuvvetlerine ek olarak önerilen bir diğer yöntem ise elektrik alan

uygulanmasıdır. Bu tekniğin, teknolojik açıdan (üretim sırasında) gerinim alanlarına göre daha kolay ve kontrollü bir şekilde uygulanabileceği öngörülmektedir.

Eğriliğe sahip yüzey ve arayüzeylerin çeşitli kuvvet alanları altındaki morfolojik gelişimi/evrimi olgusu; embriyo oluşumu, biyolojik dokuların çeşitlenmesi, gezegen yüzeylerinin oluşumu, ince filmlerin oluşumu ve KN'lerin oluşumu, gibi birbirlerinden çok farklı fiziksel sistemlerde karşımıza çıkmaktadır. Tüm bu konular üzerindeki yoğun ilgi ve araştırmalara rağmen, bu morfolojik dönüşümleri modelleyip gerçekçi öngörülerde bulunmamızı sağlayacak teorik modeller halen yetersiz kalmaktadır. Bu nedenle, SK büyüme modu ile, kendi kendine organize olabilen (self-organized) ve istenilen morfolojik özelliklere sahip KN'ler oluşturabilmek için, farklı kuvvet alanları (elektrik ve gerinim alanları) altında KN çekirdeklenmesi, büyümesi ve morfoloji değişimleri hakkında detaylı bilimsel bilgi birikimine ihtiyaç vardır. Bu bilgilerin, nanoyapılı KN'lerin optoelektronik özelliklerinin hassas bir şekilde kontrol edilebilmesini sağlayarak, yeni KN fabrikasyon tekniklerinin geliştirilmesi ve yeni KN-tabanlı cihazların tasarlanması önünü açması beklenmektedir.

Bu proje kapsamında, kuantum nokta ve dizilerinin heteroepitaksiyel ortamlarda oluşum dinamikleri, taşıma kinetiği ve evrimi **eş zamanlı elektrik ve gerinim alanları** altında ilk kez modellenerek simülasyonlar ile incelenmiştir. Proje sonucunda, simülasyonlardan elde edilen veriler kullanılarak, hangi malzeme özelliklerinin kullanılması ve hangi dışsal kuvvet alanlarının uygulanması durumunda ne tür kararlı nanoyapılar elde edileceğini gösteren faz diyagramları elde edilmiştir. Bu proje sonucunda elde edilen bilgiler, istenilen kullanım alanları için gerekli optimum özelliklere sahip kuantum nokta nanoyapıların tasarlanmasına yardımcı olması beklenmektedir.

2. LİTERATÜR ÖZETİ

2.1 Motivasyon

Teknoloji ilerledikçe cihazlarda kullanılan yapıların küçülmesi aynı zamanda bu yapıların morfolojilerinde oluşan en küçük değişime karşı hassasiyetlerini arttırmaktadır ve bu değişim yapının mekanik, optik ve elektronik özelliklerini etkilemektedir. Bu nedenle nano cihazların üretilebilmesi bu yapılardaki yüzey ve ara yüzeyleri kontrol edebilme yeteneğimize bağlıdır (Ogurtani vd. 2010a; 2010b).

Günümüzde, bilgisayar modelleme çalışmaları, hem deneysel çalışmalara harcanan bütçenin ve zamanın azaltılması hem de yeni ve sonuca odaklanmış deney setlerinin geliştirilmesi açılarından büyük önem taşımaktadır ve bu sebeple ön plana çıkmaktadır.

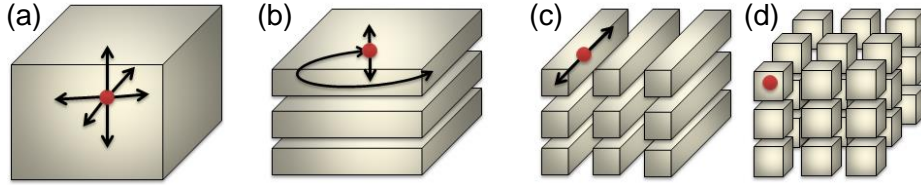
Kuantum hapis etkisi görülen yapılara (Reed ve ark, 1988) enerji bantlarının kuantize olması nedeniyle olan ilgi giderek artmaktadır (Bimberg ve Pohl, 2011). Kuantum hapis etkisi görülen (detaylı bilgi için bkz Bölüm 2.2) nano boyutlu parçacıklardan bir tanesinde kuantum noktalarıdır (KN) (Reed ve ark, 1988). Bu nano-parçacıklar, her üç boyutta da yük taşıyıcı hareketlerinin kısıtlanması ile kesikli enerji düzeylerine sahiptirler. Bu özelliklerinden dolayı literatürde suni atomlar olarak da anılmaktadırlar (Bimberg ve Pohl, 2011). Yarıiletken endüstrisine baktığımızda gün geçtikçe yarıiletken cihazların boyutlarının düştüğünü görmekteyiz. Yarıiletken kuantum noktaları teorik olarak yapılan çalışmalara (Tóth ve Lent, 2001) göre gelecekte yarıiletken teknolojisinde kuantum teorisi ilkelerinden faydalanmak için kullanılacaktır. Ayrıca kuantum noktalarının en önemli özelliklerinden biri de, boyutları ve dizilimleri ile elektronik ve fotonik özellikleri arasında bir ilişki olmasıdır. Bu ilişki göz önünde bulundurulduğunda bu nano parçacıkların oluşumunun kontrol edilebilmesi teknolojik açıdan yeni uygulama alanları yaratmaktadır.

Epitaksiyel ince film büyümesi sonucunda, alt tabaka ve üstüne kaplanan malzemenin örgü parametrelerinin farklı olması durumunda (heteroepitaksi), sistemde oluşan gerinim alanı sebebiyle kuantum noktalarının kendiliğinden oluştuğu deneysel olarak görülmüştür (Leonard ve ark, 1993; Eaglesham ve ark, 1990). Buna ek olarak elektrik akımı Tüm potansiyellerine rağmen günümüzde, KN gibi nano boyutlu adacıkların yapı ve dağılımlarının nasıl kontrol edilebileceği ile morfolojik evrimleri halen tam olarak anlaşılammıştır. Bu kendiliğinden oluşma mekanizmasının anlaşılması, aynı zamanda oluşan kuantum noktaların dizilimini ve şeklini kontrol etmenin bir yolunu bulmamıza da yardımcı olacaktır.

2.2 Kuantum Hapis Etkisi

Malzemelerin boyutlarındaki küçülmenin malzemelerin mekanik, optoelektronik özelliklerini etkilediği bilinmektedir. Bu etkilerin neden kaynaklandığı ve nasıl kontrol edilebileceği ise halen üzerinde çalışılan konular arasındadır. Elektronun (veya boşluğun) de Broglie dalga boyundan küçük boyutlara sahip nano-yapılarda, yük taşıyıcılarda kuantum hapis etkisi görüldüğü bulunmuştur. Kuantum hapis etkisi, parçacığın etrafındaki potansiyelden dolayı hareketinin kısıtlanmasıdır. Şekil 2.2.1'de görüldüğü gibi bir yönde kısıtlanan parçacıklar kuantum kuyusu, iki yönde kısıtlanan parçacıklar kuantum teli ve üç boyutta kısıtlanan parçacıklar ise kuantum noktası olarak adlandırılmaktadır.

Çeşitli malzemeler üstünde yapılan çalışmalar sonucunda bu düşük boyutlu yapılar deneysel olarak ortaya çıkarılmıştır: 1970'lerde kuantum kuyuları (Chang, 1974), 1980'lerde kuantum telleri (Petroff, 1982) ve 1980 ve 1990'larda kuantum noktaları (Reed vd., 1988).



Şekil 2.1 Kuantum hapis etkisi görülen parçacıklarda yük taşıyıcı hareketinin şematik gösterimi: (a) Kuantum hapis etkisi görülmeyen malzeme, (b) Kuantum kuyusu, (c) Kuantum teli, (d) Kuantum noktası.

2.3 Kuantum Noktalar

Kuantum noktalar, boyutları 2-50 nanometre arasında değişen metalik veya yarıiletken parçacıklardır. Bu parçacıkların en temel özellikleri, içerisindeki elektron-boşluk çiftlerinin (excitons) boyutsal olarak sınırlandırılmış olmasından dolayı kuantum hapis etkisinin görülmesidir (Reed ve ark, 1988). Bu sınırlandırmadan dolayı kuantum noktaların yük taşıyıcıları yığın malzemelerin aksine sıcaklık artışı ile dağılımlarını değiştirmezler. Sonuç olarak, bu parçacıklar çok küçük boyutlara sahip oldukları için enerji yüzeyleri kuantize olarak yapay bir atom gibi davranırlar (Reed vd., 1988; Bimberg ve Pohl, 2011). Kuantum noktaların enerji spektrumları, parçacık boyutu ile değişim gösterir ve bu değişim parçacığın optik ve elektronik özelliklerini etkilemektedir (Barth vd., 2005; Ogurtani vd., 2010a; 2010b). Bu özelliği kuantum noktalarının boyutlarını kontrol edebilmemiz durumunda, optik ve elektronik özelliklerini de kontrol edebilmemizi sağlamaktadır.

2.4 Kuantum Noktaların Kullanım Alanları

SK büyümesinde oluşan adacıkların arasının ince bir iletme tabakası ile bağlı olması yük taşıyıcılarının adalar arasında hareket etmesini yani iletkenliğini sağlar. Bu iletim mekanizmasından dolayı SK büyüme modu optoelektronik ve elektronik uygulamalarda kullanılabilir. Bu cihaz uygulamalarında tek bir KN kullanılabilir gibi KN dizilerinden de yararlanılabilir. Güneş panelleri için dizi KN'ler, depolama ve tek elektron transistörler için tek KN'ler kullanılmaktadır. Farklı cihazlar için KN'lerin farklı özelliklerinden yararlanılmaktadır. Örneğin, kızılötesi dedektörler için yüksek yoğunluklu ve eşit boyutlara sahip KN'lerin, LED ve lazerlerde, düşük yapı kusurlarına sahip KN dizilerinin üretilmesi önemli hale gelmektedir. Aşağıda KN'lerin kullanım alanlarına kısaca değinilerek bazı örnekler verilmiştir.

2.4.1 Lazerler

Lazerin temeli elektron ve boşluk çiftleri yaratılması ve bunların ışımaya dayanmaktadır. Lazerler, elektronların uyarılması ve yayılan fotonların dalga boylarının ve eş fazlılıklarının (coherence) kontrol edilmesi ile üretilen, aynı faz ve enerjideki ışıklardan oluşurlar. Lazer ışınları, medikal alanda göz ameliyatlarında, yazıcılarda, endüstride metallerin kaynak yapılmasında, fiber optikler ile optik iletişim gibi birçok alanda kullanılmaktadır. İlk kez, Dingle ve Henry (1976), kuantum sınırlama etkisinin, düşük uyarma seviyelerine ve kontrol edilebilir dalga boylarına sahip ışınlar yayan lazerlerin üretiminde kullanılabileceğini öne sürmüştür. 1994 yılında ise ilk yüksek verimlilikte çalışan kuantum nokta lazer üretilmiştir (Ledentsov, Grundmann, ve Kirstaedter 1994).

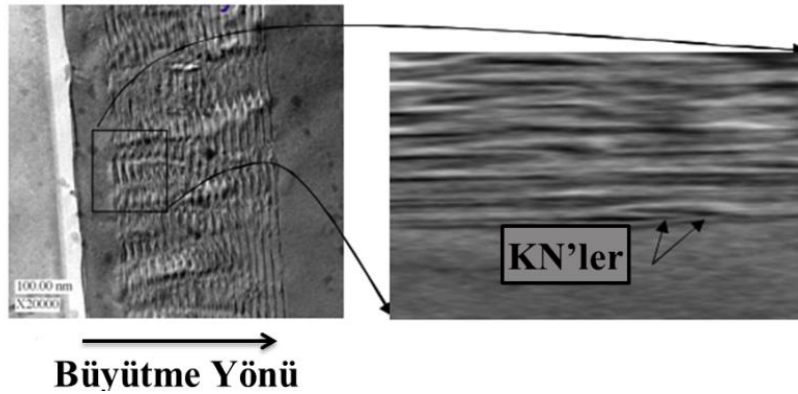
Optik kazanım, bir malzemedeki uyarılmış durumdaki elektronlar ile orantılıdır ve birim alanda daha yoğun KN dağılımı (high dot density) ile KN lazerlerde optik kazanımın artırıldığı gösterilmiştir (Kirstaedter vd., 1996). Yığın halindeki malzemelerde yük taşıyıcılar, sıcaklık arttıkça sürekli bir şekilde yüksek enerji bantlarına dağılırken, yük taşıyıcıları üç boyutta da sınırlanmış olan KN'lerde, bu durum çok az görülmektedir (Bimberg ve Pohl, 2011).

GaAs/AlGaAs hetero yapıdaki tek bir KN üzerinde yapılan teorik çalışmalara göre, malzeme kazanımının arttığı, ve daha düşük eşik akım değerlerine sahip ve sıcaklık stabilitesi sağlayacağı öne sürülmüştür (Asada vd., 1986; Arakawa ve Sakaki, 1982). Deneysel olarak ilk KN lazer, gergin altlıkla hetero-epitaksiyel olarak kendiliğinden organize olabilen KN'lerden üretilmiş ve çok daha düşük akım eşik değeri ve daha az sıcaklık bağımlılığı olduğu gösterilmiştir (Ledentsov vd., 1994; Bimberg ve Pohl, 2011).

2.4.2 Güneş panelleri

Güneş panelleri, güneş ışığını soğurarak elektrik enerjisine çeviren sistemlerdir. Kendiliğinden organize olan çoklu InAs/GaAs KN tabakalarının p-n bağlantılarının dönüştürme verimini artırarak güneş panellerinin verimini arttırabileceği teorik olarak gösterilmiştir (Aroutiounian vd., 2000). Buradaki temel yaklaşım, güneş panel hücresini oluşturan malzemenin bant aralığının arasında bir bant aralığına (intermediate band) sahip KN'nin bu ara bantta bir absorpsiyon sağlamasıdır. KN bazlı güneş panellerinde ara bant oluşumunu inceleyen Tomic (2014), KN dizilim geometrilerinin değiştirilmesiyle oluşan ara bantların kontrol edilebileceğini göstermiştir. Geniş bir soğurma tayfında daha düşük enerji bant aralıkları sahip hetero-yapı oluşturularak, çok hücreli (multi-junction) güneş panelleri elde edilebilmektedir.

Çok hücreli KN güneş panel sistemleri, teorik olarak analiz edilmiş ve deneysel olarak Stranski-Krastanov büyüme modunda MOVPE (Metalorganic vapour phase epitaxy) yöntemi ile kendiliğinden organize olan InAs KN'lerin, GaAs altlık üzerinde üretilmesiyle çalışılmıştır. KN morfoloji değişimleri, büyütme parametreleri, foto-luminesans ve optik absorpsiyon özellikleri gözlemlenerek, InAs KN'lerin, GaAs yapıları üzerinde kontrollü bir şekilde üretildiğinde (Şekil 2.2) GaAs yapılarında alt enerji bantları oluşabildiğini göstermişlerdir. Bant aralıklarındaki enerji değişimlerinin KN morfolojileri ve yoğunluklarıyla orantılı olduğu bildirilmiştir (Raffaella vd., 2006).



Şekil 2.2 GaAs matris üzerinde büyütülen InAs KN dizilerinin çoklu hücre yapısını gösteren TEM görüntüsü (Raffaella vd., 2006).

Çoklu KN dizileriyle elde edilecek güneş panellerinde farklı boyutlara sahip KN'ler arası yük transferi sonucu, güneş ışınlarındaki farklı dalga boylarından yararlanma imkanı (Kongkanand, 2008), ve tek bir fotondan çoklu yük taşıyıcıların üretilmesi (Schaller ve Klimov, 2004) gibi avantajları araştırılan özellikler arasındadır.

2.4.3 KN bilgi depolayıcılar ve bilgisayarlar

KN'ler bilgi depolanması için aday malzemelerdir. Günümüzde iki tip yarı iletken bellek vardır bunlar; hızlı ulaşım süresi fakat zayıf alıkonma zamanından dolayı yenileme döngüleri çok enerji gerektiren tip-I dinamik, rastgele ulaşım hafıza (RAM) ve uzun alıkonma zamanına sahip, fakat düşük yazma oranı olan ikinci tipteki hafızalardır. Uzun alıkonma süresi ve hızlı yazma/silme oranlarını birlikte sağlayan bilgi depolayıcı sistemler hedeflenmektedir (Bimberg ve Pohl, 2011).

KN bazlı bellekler, kalıcı bilgi depolama sağlayabilecek, aynı zamanda hızlı yazma/silme oranlarına sahip ve uzun süre dayanıklılıklarını koruyabilecek cihazlar olarak düşünülmektedir. Burada mantık, yük depolanmasını sağlayan Si/SiO₂ bariyerlerini, KN'lerin kontrol edilebilir bant yapılarıyla değiştirmektir (Geller, 2008).

KN'lerin kuantize olmuş enerji seviyeleri ve spesifik bant emisyonlarına sahip olma özelliklerinin her ikisi de kullanılarak yeni ve yüksek bit yoğunluğu olan bilgi depolama sistemlerinde kullanılabileceği öne sürülmüş ve kendiliğinden organize olan InGaAs–GaAs KN'ler üzerinde yapılan deney ile tek bir KN içinde dalgaboyuna seçici olarak yük depolanması sağlanmıştır (Kroutvar vd., 2003).

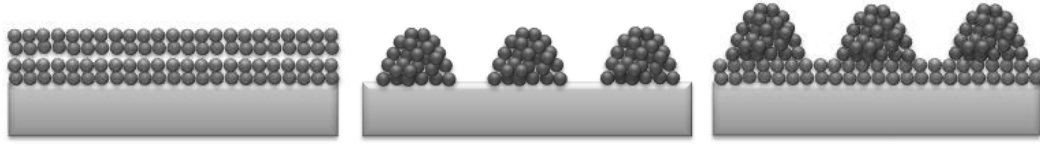
Milyonlarca kuantum biti (Qubit) kullanan kuantum bilgisayarlar yapılabilmesi teorik olarak mümkündür. Elektronların KN'lerde kuantize oluşu, bilginin kuantum bitlerine kodlanmasını mümkün kılar, bu sayede çok güçlü bilgisayarlar elde edilebilir. Kubitler bir operasyon ile 0 veya 1 durumunu sabitleyinceye, kadar bilgiyi süperpozisyon denen hem 0 hem 1 durumunda tutabilir. Yükten ziyade, qubitler, elektronların KN içindeki, yukarı (up) veya aşağı (down) olan spin değerlerini 0 ve 1 olarak temsil eder. Geleneksel bilgisayarlar, elektron spin hareketini dikkate almadan, bir sinyalin voltajı 2.4V üzerindeyse 1, altındaysa 0 konumuna geçer. Kuantum bitleri ise tek bir elektron ile elektronun pozisyonuna göre, yukarı (up) spin ise 1'i, aşağı (down) spin ise 0'ı temsil eder (Szweda, 2001).

2.5 Kuantum Noktaların Üretim Teknikleri

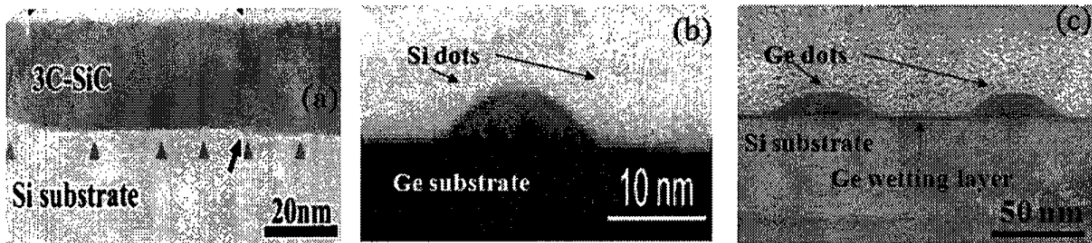
Kuantum noktaların özellikleri ve dolaylı olarak uygulama alanları üretim tekniklerine göre değişmektedir. Kuantum noktalar genellikle üç ana üretim tekniği ile hazırlanırlar: koloidal nanokristal olarak (Yin ve Alivisatos, 2005), litografik teknikler ile (Austing vd., 2001; Lu vd., 2000) veya epitaksiyel yöntemler sınıcunda yüzeyler ile desteklenen adacıklar olarak

(Snyder vd., 1991; Leonard vd., 1993; 1994). Kolloidal sentezleme yöntemi ile üretilen kuantum noktalar küreseldir ve istenen boyutlarda üretilebilir fakat kuantum noktalar arası elektron iletimi direk olarak sağlanamadığı için elektronik uygulamalarda kullanım alanları gelişmemiştir. Litografik teknikler ile kuantum noktalar istenen boyutlarda ve dizilimde üretilebilir. Ayrıca elektron iletimini sağlayacak şekilde üretilebilecekleri için cihaz uygulamalarında kullanılabilirler. Fakat üretim esnasında kullanılan prosedür sebebiyle yapılar çok hasar görmekte ve bu nedenle elektronik özelliklerinin kontrolü zor olmaktadır. Ayrıca litografik yöntemler görece çok pahalıdır. Epitaksiyel yöntemler ise litografik tekniklere göre hem daha az karmaşıktır hem de daha ucuzdur.

Üçüncü teknik, ince film büyümesi ile birbirlerinden çok ince bir ıslatma tabakası (wetting layer) ile ayrılmış nanoboyutlu adacıkların oluşumunu içerir. İnce film büyümesi sırasında altlık ile film arasındaki kafes (lattice) parametresi uyumsuzluklarından kaynaklanan gerilmelerin büyüklüğüne bağlı olarak üç tip ince film büyüme modu olduğu gözlenmektedir (Stangl vd., 2004). Volmer-Weber (VW) (Raviswaran vd., 2001), Stranski-Krastanov (SK) (Kienzle vd., 1999) ve Frank-van-der-Merwe (FM) (Nishiguchi vd., 2004) büyüme modları (Şekil 2.3 ve Şekil 2.4).



Şekil 2.3 Epitaksiyel gerginliğe sahip ince film büyüme modları: (sol) Frank-van der Merwe (FM) katman oluşumları, (orta) Volmer-Weber (VW) ada oluşumları ve (sağ) Stranski-Krastanov (SK) katman-ada oluşumları.



Şekil 2.4 Şekil 2.3'te gösterilen üç heteroepitaksiyel büyüme moduna örnek kesitsel TEM görüntüleri (a) Frank Van der Merwe (FM) (Nishiguchi vd., 2004), (b) Volmer-Weber (VW) (Raviswaran vd., 2001), (c) Stranski-Krastanov (SK) (Kienzle vd., 1999).

Düzlemsel, atomik ve tabaka tabaka oluşan ve ara yüzey enerjisinin küçük olduğu büyüme modu FM büyümesidir. Bu tip büyümede epitaksiyel yüzeyler ile yüzey kristali birbirine çok

yakın kafes parametrelerine sahiptirler (Nishiguchi vd., 2004). Büyütülen malzemenin doğrudan üç boyutlu adacıklar oluşturduğu ve ara yüzey enerjileri yüksek olan büyüme modu ise VW büyümesidir. Bu büyüme çeşidi altlık ile film kristallerinin çok farklı kafes parametrelerine sahip olduğunda görülür (Raviswaran vd., 2001). Bu iki ekstrem büyüme modu arasında ise SK büyüme modu bulunur ve başlangıçta FM büyümesine benzer düzlemsel atomik bir tabaka oluşumu ile başlayarak zamanla VM büyümesindeki gibi üç boyutlu adalara geçiş yapar. Bu geçiş gerinim enerjisi belirli bir kritik değeri geçtiğinde oluşur. SK büyümesinde geçiş sonrası oluşan adalar ince bir tabaka ile birbirine bağlıdır ve bu tabakaya ıslatma tabakası (wetting layer) denir.

Kuantum noktaların oluşumu için gereken büyüme tipine örnek olarak Stranski-Krastanov (SK) tipi büyüme morfolojileri gösterilebilir ve deneysel olarak, $[In_xGa_{1-x}As/GaAs]$ (Leonard vd., 1993; 1994) ve $[Ge/Si]$ (Eaglesham vd., 1990) gibi epitaksiyel gerginliğe sahip ince filmlerde gözlenmektedir. SK büyüme modu ile KN oluşumu, bu KN'lerin içlerinde elektronik performanslarını kötü etkileyebilecek dislokasyon gibi kusurların oluşmaması ve ıslatma katmanı sayesinde KN'ler arası iletişimin sağlanabilmesi nedenleriyle, büyük dikkat çekmiştir (Eaglesham vd., 1990; Wang vd., 1994). SK büyüme modu tabanlı fabrikasyon teknikleri yüksek yoğunlukta KN yapılar oluşturabilmekte ve bu teknik yarıiletken teknolojileri ile uyum içerisinde seri üretime ve yüksek oranda entegrasyona uygunluk göstermektedir (Stangl vd., 2004).

2.5.1 Stranski-Krastanow büyüme modu

Stranski-Krastanow büyüme modu Ge/Si ve InAs/GaAs gibi heteroepitaksiyel sistemlerde gözlemlenmiştir (Leonard ve ark, 1993; Eaglesham ve ark, 1990). Bu sistemlerde depozit edilen malzeme miktarı belirli bir kalınlığa ulaşıncaya kadar tabaka tabaka büyür ve bu kritik kalınlığa ulaştıktan sonra üç boyutlu adalar oluşturur. Bu adalar belirli kalınlıkta bir katmanın üstünde yer alırlar ve bu katmana ıslatma katmanı denir.

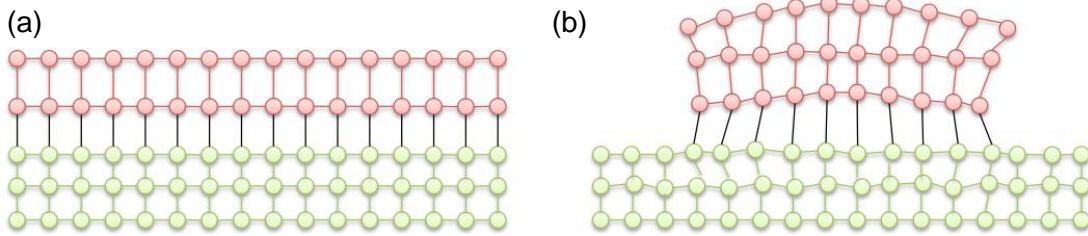
Yüzeydeki kristal ve üzerine depozit edilen malzeme arasındaki kafes parametresi uyumsuzluğu gerinim enerjisi birikmesine neden olur. Gerinim altında bulunan düzlemsel filmlerde heteroepitaksiyel büyümenin görülmesi Asaro Tiller Grinfel'd (ATG) kararsızlığı ile anlaşılmıştır (Asaro ve Tiller 1972; Grinfel'd 1993). ATG Teorisine göre depozit edilen malzeme ve yüzey malzemesi arasındaki kafes parametresi farkı, elastik enerjinin birikmesine neden olur ve belirli bir kritik kalınlıktan sonra film birbirinden ayrılmış adalara ayrılarak serbest enerjisini düşürür. Alansal elastik gerinim enerjisi elastik teoriye göre (2.1) denklemi ile verilebilir.

$$E_{el} = 2G\varepsilon_0^2(l + \mathcal{G})h / (1 - \mathcal{G}) \quad (2.1)$$

Burada, \mathcal{G} filmin Poisson oranını, G filmin kayma modülünü, h film kalınlığını, ε_0 ise gerinimi tarif etmektedir. Ayrıca gerinim iki malzemenin kafes parametreleri kullanılarak (2.2) denkleminde görüldüğü gibi hesaplanabilir.

$$\varepsilon_0 = \frac{a_f - a_s}{a_s} \quad (2.2)$$

Biriken bu gerinim enerjisi dislokasyonlar veya ada oluşumu ile harcanabilir. Filmin kalınlığı kritik kalınlığa ulaştıktan sonra gerinim enerjisi harcanarak ada oluşumu görülür (Şekil 2.5) (Jesson vd., 1997).



Şekil 2.5 Yüzey kristali atomları (yeşil) ile depozit edilen malzemenin atomları (kırmızı) arasındaki doğal kafes boşluğu. (a) Bozulmamış film (gerilimden dolayı filmin atomları sıkışmış) (b) Gerinim boşalması sonucu oluşan konfigürasyon.

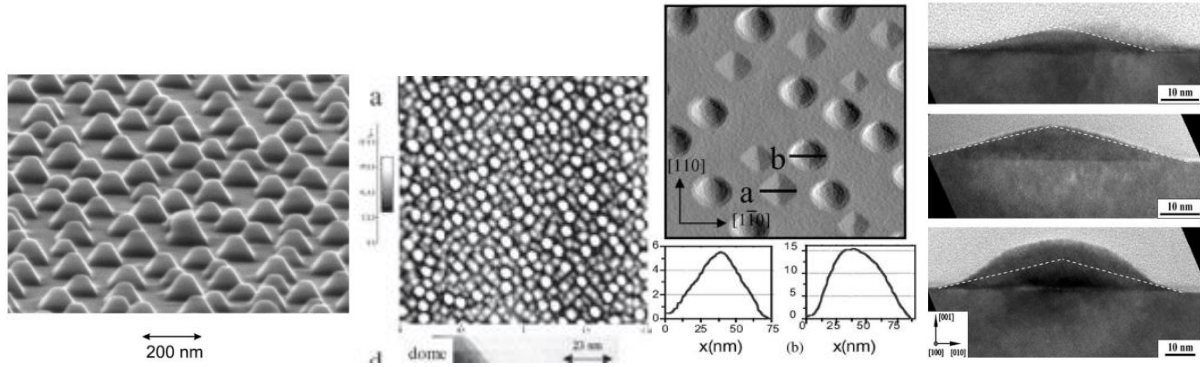
SK büyümesinde oluşan adalar genelde çukurlar veya küçük piramitler şeklindedir (Jesson vd., 1997; Mo vd., 1990; Tersoff ve LeGoues, 1994). Bu adaların daha fazla büyümesi için yeni gelen atomların belirli bir çekirdeklenme bariyerini aşması gerekmektedir. Bu bariyeri aşmaları sonucu genellikle bu tip adalarda görülen $\{105\}$ düzgün yüzleri (faset (facet)) daha fazla büyür ve adalar kubbe benzeri bir şekil alırlar (Tomitori vd., 1994).

Ge/Si ve InAs/GaAs sistemleri ile yapılan deneysel çalışmalar kritik kalınlığın 3 tek katman ile 18 tek katman arasında değiştiğini göstermiştir (Floro vd., 1997; Leonard vd., 1994). Patella ve diğerleri (Patella vd., 2006) yaptığı çalışmalarda InAs/GaAs sistemlerde geçiş için kritik kalınlığın sıcaklığa bağlılığını göstermiştir fakat ıslatma katmanı ile kritik kalınlık arasındaki bağlantı henüz açıklanamamıştır.

2.6 Deneysel Çalışmalar ve Gözlemler

Stranski-Krastanov tipi kuantum noktaları ilk olarak 1970'lerde çalışılmaya başlanmıştır ve 1990 yılında ilk Si/Ge entegre devrenin üretilmesi ile uygulama alanları ile ilgili farkındalık artmıştır. Gün geçtikçe elektronik ve optoelektronik teknolojisinde yeni uygulama alanları bulan SK tipi kuantum noktaları ile ilgili yapılan çalışmalar gittikçe artmaya başlamıştır.

Politi vd. (2000) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sisteminde yüzey pürüzlenmesi ile başlayan ve ada oluşumu ile devam eden klasik SK tipi kuantum noktaları gözlemlemişlerdir. Wiebach vd. (2000) $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}/\text{Si}$ (001) sisteminde piramit şeklinde kuantum noktalar oluşturmuşlar (Şekil 3.sol) ve bu piramit adacıklarda $\{111\}$ kristal yüzeyinin baskın yüzey (faset) olarak ortaya çıktığını göstermişlerdir. Berbezier vd., (2002) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ adacıkları üzerine çalışmalarında malzeme depozit edilen alt tabakanın kristal yöneliminin, oluşan adacıkların evrilme kinetiğini değiştirdiği gözlemlenmiştir (Şekil 3.orta). Bu çalışmaya göre ada oluşumunun başlaması için belirli bir kalınlık (Zhou vd., 2012; Lee vd., 2012) ve kristal yönelimi vardır (Berbezier vd., 2002).



Şekil 2.6 (sol) $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}/\text{Si}(001)$ tabakasının SEM görüntüsü (Wiebach vd., 2000); (orta) $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ için yuvarlak şekilli kubbe tipi ve kare tabanlı kulübe tipi adacık dağılımının AFM görüntüsü (Berbezier vd., 2002); (sağ) Piramit ve kubbe şeklindeki Ge/Si ada dağılımının HRTEM görüntüsü ve bu Ge/Si (001) adaların [100] kesit alanından TEM görüntüsü (Baribeau vd., 2006).

Zela vd., (2002) Ge/Si(001) sisteminde yaptıkları deneysel çalışmada iki kademeli Ge depozit ederek kubbe biçimli kuantum noktaları elde etmişlerdir. İlk depozit sonrası $\{105\}$ düzgün yüzeyli piramit şeklindeki adalar oluşmuş ve belirli bir kritik boyuta kadar büyümüşlerdir. Basınç düşürerek ikinci kez Ge depozit edildiğinde bu yapılar kubbe biçimli adalara dönüşmüşlerdir. Piramitten kubbe tipi adaya geçiş, gerinim gevşemesinin en çok olduğu tepe

yüzeyine en yakın {105} düzgün yüzeyinden başlamıştır. Ayrıca ikinci depozit sırasında çekirdeklenmeler sonucu yeni piramit adalar oluşmuştur (Zela vd., 2002). Bu piramit-kubbe tipi arası ada geçişi Montalenti vd. (2004) tarafından da gözlemlenmiştir.

Baribeau vd., (2006) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ (001) sisteminde moleküler ışın epitaksisi (MBE) ile yaptıkları deneylerde kubbe tipi ve piramit şeklinde kuantum ada oluşumlarını gözlemlemişler (Şekil 3.sağ) ve bu ada şekillerindeki farklılığın gerinim gevşemesinden dolayı olduğunu ileri sürmüşler ve 2006 yılında yaptıkları bu çalışma ile TEM görüntülerinden piramit ve kubbe şekilli kuantum noktaları ile alt tabaka arasındaki gerinim farkını belirlemişlerdir.

Eaglesham ve Cerullo (1990), $\text{Ge}/\text{Si}(100)$ sisteminde dislokasyon olmadığı durumda kuantum nokta oluşumunu gözlemlemiştir ve ada oluşumunun başlaması için gerekli tabaka kalınlığı için değer bulmuşlardır. Bu çalışmada $\text{Ge}/\text{Si}(100)$ sistemi için film ve altlık arasındaki kafes parametresi uyumsuzluğundan dolayı oluşan gerinimin, dislokasyon oluşturmadan gevşemesi için alt tabakada bulunan malzemede elastik deformasyon oluşması gerektiği ve böylece ada oluşumu ile filmin gerinim enerjisini boşalttığı belirtilmiştir. Hull vd., (2003) ise $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ (100) sisteminde kararlı yapının elde edilmesi için belirli sıcaklık ve büyüme hızına ihtiyaç olduğunu göstermişlerdir. Shaleev vd., (2013) Si (001) üstüne $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ film büyümesini farklı Ge yüzdelerinde incelemişlerdir. İncelemeler sonucunda depozit edilen malzemede Ge konsantrasyonunun alt tabaka ve film arasındaki örgü parametresi uyumsuzluğunu etkilediğini ve dolaylı olarak ada oluşumunun başlaması için gereken kritik kalınlığı belirlediğini görmüşlerdir.

Literatürdeki bu deneysel çalışmalar göz önüne alındığında SK tipi kuantum nokta oluşumunun farklı mekanizmalar sonucu oluştuğu görülmektedir. Kuantum noktalar, altlıklar üzerinde adacık çekirdeklenmesi (Berrehar vd., 1992) ile oluşabileceği gibi düzgün katı yüzeylerdeki morfolojik karasızlıklar sonucu görülen yüzey pürüzlenmesi (surface roughening) (Tromp vd., 2000) nedeniyle de oluşabilmektedir. Her iki durumda da büyümesi ve ilerleyen safhalarda topaklanma ile devam eder. Çekirdeklenme rastsal bir olay olduğu için bu yol ile elde edilen adaların patern oluşturması ve büyüklük kontrolü ancak çekirdeklenme bölgeleri patern oluşturularak belirlenmiş şablon altlıklar üzerinde yapılabilmektedir (Cheng vd., 2011). Diğer taraftan, birçok uygulama için altlık yüzeyinde çekirdeklenme bölgelerinin paternlenmesi işlemi zordur ve ekstra yük ve maliyet ortaya çıkarmaktadır. Çekirdeklenmesiz (nucleationless) bir yöntem olan katı yüzeylerdeki morfolojik karasızlıklar sonucu kuantum nokta oluşumu ise daha düzgün ve düzenli ada dizileri oluşturabilmektedir.

Morfolojik kararsızlıklar sonucu KN oluşumu birçok sistemde gözlenmiştir. Örneğin, Ozkan vd., (1997) $Si_{1-x}Ge_x$ epitaksiyel filmler üzerinde yüzey pürüzlenmesi sırasında oluşan kusur ve gerinim-gevşemesi (strain relaxation) mekanizmaları üzerine kontrollü tavlama (annealing) deneyleri yaparak çalışmışlardır. Bunun yanında yine aynı gurup, film yüzeylerinin pürüzlenmesi ve takip eden ada ve oluk oluşumlarını incelemişlerdir. Bunlara ek olarak, rutenyum (Ru) üzerinde gümüş (Ag) kuantum noktalar (Pohl vd., 1999); bakır (Cu) altlık üzerinde kurşun (Pb) adacık oluşumu (Plass vd., 2001) ve silisyum (Si) altlık üzerinde germanyum (Ge) noktacıkların büyütülmesi (Zhang vd., 2001) çalışılan diğer malzeme sistemleri arasında gösterilebilir.

2.7 Teorik ve Modelleme Çalışmaları

Başlangıçta tamamen düz film yüzeylerinin, pürüzlenerek kendi kendine organize olan KN yapılar oluşturması, film altlık arayüzeyinde kafes uyumsuzluğu sonucu oluşan gerinim enerjisinin azaltılması sonucu ortaya çıkan morfolojik kararsızlıklar sonucudur. Bu tip kararsızlıklar literatürde genellikle Asaro-Tiller-Grinfeld (ATG) kararsızlığı olarak adlandırılır (Asaro ve Tiller, 1972; Grinfeld, 1986; Srolovitz 1989). Katı-gaz yüzey enerjisi yada kapiler etkiler düz film yüzeyini kararlı duruma getirmeye çalışırken, gerinim ile yüzey enerjisi arasındaki çekişme de farklı boyutsal/morfolojik büyüme modlarını ortaya çıkarır (Grinfeld, 1986; 1993). Altlığın sertliği (stiffness) kararsız modların spektrumunu etkiler ve sonuçta belirli bir kalınlığın altında tamamen kararlı (stability) düz yüzeyler ortaya çıkarken kalınlık bu değerin üzerine çıktıkça farklı büyüme (instability) tipleri gözlenmeye başlar. Spencer vd., (1999) epitaksiyel gerginliğe sahip katı filmler üzerinde küçük-eğim yaklaşımını kullanarak 2 boyutlu sistemlerde tamamen doğrusal-olmayan modeller geliştirerek, farklı altlık ve film parametrelerini içeren fonksiyonlar elde etmişlerdir. Buna ek olarak diğer araştırmacılar farklı etkileri (yüzey enerjisindeki yönsellik) ve diğer oluşum mekanizmalarını incelemişlerdir (Golovin ve Davis, 1999). Bütün bu teoriler uzun-dalga kararsızlıkları (long-wave instability) göstererek ada irileşmesi (Ross vd., 1998) öngörmüşlerdir ve bu nedenle deneysel olarak gözlenen periodik ve düzgün kuantum nokta dizilerinin oluşumunu açıklayamamışlardır (Alchalabi vd., 2003). Daha sonra Spencer (1999) ve Golovin vd., (2004) daha kısa menzile sahip ıslatma (wetting) etkileşimlerini göz önüne almışlardır. Bu etki, modellerinde de kullanıldığı şekli ile boyutlar küçüldükçe daha etkin bir hale gelmektedir. Bu analizde, ıslatma etkileri altında ATG kararsızlığının belirli bir dalga boyunda ortaya çıkarak kuantum nokta dizi/patern oluşumlarına neden olabileceğini göstermişlerdir.

Bunlara ek olarak, Golovin vd. (2004) ıslatma etkileşimlerinin gerilimsiz (non-stressed) film yüzeylerinde de patern oluşumlarına neden olabileceğini göstermiştir. Yine de, kararlı KN dizi oluşumlarına giden parametre aralıkları oldukça küçüktür ve bu nedenle bu mekanizmaların gerçekte gözlenip gözlenmeyeceği tam olarak açıklığa kavuşmamıştır. Levine vd., (2007) ise ıslatma etkileşimlerinin gerilim altındaki (stressed) filmlere etkileri üzerine çalışarak bu filmlerin kararsız olduklarını göstermişlerdir. Yukarıda bahsedilen küçük-eğim modellerinin sayısal çözümlene sonuçları ıslatma etkileşimleri altında kuantum noktaların kuantum tellere doğru dönüşmesi gibi ilginç olayları da ortaya koymuştur. 2-boyutlu simülasyonlarında, Eisenberg ve Kandel (2005) yönsel yüzey enerjisine sahip filmlerde yönlü (faceted) ada oluşumu gözlemişler ve ayrıca serbest yüzey enerjisi üzerindeki tek bir bölgesel tekillik (cusp) ile gözlenen adacıkların ve çift-dağılımlı adacık boyutlarının açıklanabileceğini göstermişlerdir. Bu bulgular, daha önce Chiu (2004) tarafından, kendi kendine organize olan adaların irileşmesi üzerine yapılan simülasyon deneyleri ile uyumludur. Zhang ve Bower (1999) ve Liu vd., (2003) 3-boyutlu sistemlerde çalışarak heteroepitaksiyel adaların şekil değişimleri ve irileşmeleri üzerine serbest yüzey enerjisinin yönselliğini göz önüne alarak çalışmışlardır.

Tekalign ve Spencer (2004; 2007) dislokasyon olmayan epitaksiyel gerginliğe sahip katı filmlerde hem 2- hem de 3-boyutlu simülasyonlar üzerine çalışmışlardır. Buna benzer diğer çalışmalarda da epitaksiyel gerginliğe sahip filmlerin kararlılıkları üzerine çalışılmıştır (Chiu ve Gao, 1995; Zhang, 1999; Krishnamurthy ve Srolovitz, 2006; Medhekar ve Shenoy, 2008). Bu çalışmalarda, yüzey enerjisinin yönselliği, uyuşmazlık gerinimleri, ıslatma koşulları ve arayüzey büyüme kinetiği gibi çok farklı parametrelerin etkileri çalışılmış ve oluşan kuantum paternlerinin gerilim, kütle transferi, difüzyon, yüzey enerjisi gibi farklı durumlar arasındaki etkileşimlere bağlı olduğu gösterilmiştir. Bugüne kadar yapılan sayısal çözümlerin çok büyük bir kısmında periyodik sınır koşullarının kullanıldığını ve beyaz gürültü veya küçük genlik tedirginlikleri (perturbation) ile başlayan kararsızların çalışıldığını, belirtmek gerekir.

Filmin yeteri kadar ince olması durumunda deneysel literatürde gözlenen Stranski-Krastanov (SK) tipi adacıkların oluşumunu açıklamak için ATG teorisinin, yüzeyde oluşan dalgalar yoluyla film ve altlık arasındaki enerjik etkileşimi hesaba katacak şekilde genişletilmesi gerekmektedir. Bunun için, film kalınlığına bağlı olan yüzey serbest enerjisinin bir fonksiyonu olan çeşitli ıslatma potansiyelleri geliştirilmektedir.

Zhang ve Bower (1999), 3-boyutlu sonlu elemanlar yöntemi kullanarak yaptıkları sayısal çalışmalarda, gerinim altındaki epitaksiyel ince film sistemlerinde kuantum nokta dizilimlerini incelemişlerdir. Çalışmaları sonucunda, gerinimden kaynaklı film yüzeyinde oluşan

pürüzlenmelerin zaman içinde birbirinden ayrılan adalara dönüştüğünü gözlemlemişlerdir. Ayrıca, ada oluşumundan sonra yüzey difüzyonunun devam etmesi durumunda adaların birleşerek büyüdüklerini belirtmişlerdir. Aynı grubun, 2001 yılında yaptıkları başka bir çalışmada ise başlangıçta piramit şeklinde olan kuantum noktalarının, kritik bir hacimden sonra yüzey enerjisindeki anizotropiden kaynaklı olarak köşelerdeki denge durumunun bozulmasıyla başlayarak kubbe tipi adaya geçiş yaptıklarını sayısal modelleme ile göstermişlerdir (Zhang ve Bower, 2001).

Zhou vd., (2012) ince film yüzeylerinin morfolojik olarak evrilmesini incelemek amacıyla bir ara yüzey modeli geliştirmişlerdir. Gerilimin film yüzeyindeki etkilerini incelemek için gerilimsiz ve gerilimli morfoloji değişimlerine bakmışlar ve gerilim altındaki ince filmlerde ada oluşumunun, gerilimsiz ince filmlere göre daha hızlı gerçekleştiğini bulmuşlardır. Ayrıca yüzey anizotropisi, difüzyon ve depozit edilen madde miktarının film yüzeyine etkilerine bakmışlardır. Depozit miktarının artırılması sonucunda ATG kararsızlığından dolayı filmde oluşan derin olukların giderildiğini gözlemlemişlerdir.

Hu vd., (2012; 2014) kuantum noktalarının alt yüzey üzerinde çekirdeklenme ve büyüme mekanizmalarını incelemek için sürekli medya modeli ve ilk ilkeler hesabını birlikte kullanarak bir model geliştirmişlerdir. Çalışmaları sonucunda yüzey üstünde oluşan adaların birbirine ince filmdeki heteroepitaksi olukları aracılığıyla gerilim bağı ile bağlı olduklarını göstermişler ve olukların yakınındaki bölgelerde çekirdeklenme için gerekli parametrelerin oluk boyutları ile değiştiği sonucuna ulaşmışlardır. Çalışmalarında ayrıca ada büyümesinin kendi kendini sınırlaması da gözlemlenmiş, buna sebep olanın ada ve oluk arasındaki çekim etkisi ve ada-ada itme etkisi arasındaki çekişme olduğu ve bunun sonucu ada boyutu artışının oluk boyutu ile doğrusal olduğunu göstermişlerdir.

Vastola vd., (2012), alaşım kuantum noktalarını incelemişlerdir. Teorik olarak kuantum noktaların oluşumunda etkileri bulunan gerilim enerjisi, yüzey enerjisi, iç enerji ve entropi gibi termodinamik parametreleri göz önüne alarak alaşım dağılımını araştırmışlardır. Büyüme hızı ve sıcaklığını kullanarak alaşım dağılımını etkileyebildiklerini, buna paralel olarak alaşım nedenli gerilim alanı yaratarak elektron lokalizasyonunun kontrolünün mümkün olduğunu, dolayısıyla kuantum noktanın elektronik özelliklerinin kontrol edilebileceğini öngörmüşlerdir.

Gamage ve Huang (2013), üç boyutlu kuantum noktalarının lineer olmayan büyümesini, lineer olmayan dinamik denklemlerinin çözümü ve elastikiyet modeli kullanarak sayısal simülasyonlar yardımı ile incelemişlerdir. Simülasyonlar sonucu, ince film ve alt tabaka arasındaki ısıtma etkileşimlerinin difüzyonu etkilediğini ve dolaylı olarak ada yüksekliğini

kontrol ettiğini bulmuşlardır. Ayrıca, ada dizilerinin ileriki büyüme aşamalarında düşük uyumsuzluk gerilmeleri için stabil olduklarını gözlemlemişler ve bu bulguları deneysel ve teorik çalışmalar ile desteklemişlerdir. Gaillard vd., (2013) anizotropi ve gerilim altındaki kuantum noktalarının heteroepitaksiyel oluşumunu ve büyümesini kinetik Monte Carlo simülasyonları ile incelemişlerdir. Çalışmaları sonucunda, Si(100) üzerinde Ge piramit adaların büyüme kinetiğini, elastisite ve yüzey enerji anizotropisinden faydalanarak açıklamışlar ve anizotropi ve elastisitenin adaların irileşmesini belirlediğini öne sürmüşlerdir.

Xu vd., (2013) desenli alt tabaka üzerine kaplanan Asaro-Tiller-Grinfeld (ATG) karasızlığı olan ince filmin büyüme kinetiğini simülasyonlar yardımı ile incelemişlerdir. Simülasyonlarında, yüzey enerjisi, elastik rahatlama ve ıslatma etkileşimleri ile belirlenen yüzey difüzyonunu açıklayan sürekli medya modeli kullanmışlar ve başlangıçtaki desenin dalga boyuna, film kalınlığına, tavlama zamanına ve kaplama akısına (depozit etme hızına) bağlı olarak değişen farklı geometriler bulmuşlardır.

Tokar ve Dreysé, (2013) eş fazlı epitaksiyel nano adaların gerilim altında büyümesini Monte Carlo simülasyonu ile incelemişlerdir. Simülasyonlarında, alt tabaka ve eklenen atomlar arasındaki uyumsuzluğu, küre yarıçaplarını örgü parametresinden büyük alarak modellemiş ve Lennard-Jones potansiyeli kullanmışlardır. Çalışmaları sonucu komşu atomlar arasındaki etkileşimlerden dolayı oluşan kuantum noktalarının literatür ile uyumlu olduğunu görmüşlerdir. Spencer ve Tersoff (2013), kendiliğinden oluşan kuantum noktaların heteroepitaksiyel büyüme sırasında şekil geçişlerini incelemişlerdir. Şekil geçişleri sırasında oluşan simetri bozulmaları için hesaplamalar yapmışlar ve sonuçların literatürde görülen sonuçlar ile uyumlu olduğunu göstermişlerdir. Lozovoy vd., (2014), Ge/Si(001) sisteminde farklı tabanlara sahip piramit şeklindeki kuantum noktalarının evrilmesi ve evrilme sırasında şekil değişimlerinin yüzey enerjisine ve elastik gerilim gevşemesine olan bağlılığını gözlemek için bir teori geliştirmişlerdir. Yaptıkları simülasyonlar sonucu, kuantum noktaların boyutlarının ve yoğunluklarının belirli sıcaklıklarda incelemişlerdir ve aynı zaman şekil geçişleri için alt tabaka üzerine depozit edilen malzeme miktarında kritik değerler olduğunu gözlemlemişlerdir.

Xu ve Aqua (2013), gerinimli filmlerde tavlama sırasında oluşan kuantum noktaların dizilimini sürekli ortam dinamiği kullanarak simüle etmişlerdir. Çalışmalarının amacı kuantum nokta dizilimlerinin alt tabakada başlangıçta bulunan pürüzlerin dalgaboyuna ve alt tabakanın kalınlığına olan bağımlılığını incelemektir. Çalışmaları sonucunda bu tip büyümede oluşan kuantum nokta diziliminin farklı dalgaboyların değiştiğini fakat uzun süreli deneylerde büyük adacıkların küçükler ile birleştiğini gözlemlemişlerdir. Hernandez-Saz vd., (2013) ve Kuryliuk

ve Korotchenkov (2013), yarıiletken kuantum noktaların büyümesinin görüldüğü bölgeleri tahmin edebilmek için Sonlu Elemanlar Yöntemi kullanarak ince filmlerde gerilim-gerinim incelemeleri yapmışlardır. Bu çalışmalarını ile kuantum noktasında bulunan Ge miktarının morfolojiye ve dağılıma etkisini incelemişler ve simülasyonlar sonucunda, Ge miktarının kuantum nokta dağılımını ve sistemdeki gerinim durumunu değiştirdiğini gözlemlemişlerdir.

Kukta ve Freund (1997) yaptığı çalışmada ince film morfolojisinde yüzey enerjileri, gerinim, kimyasal potansiyel ve dislokasyonların etkisini incelemişlerdir. SK tipi kuantum noktaların oluşturmanın başka bir yoluda bu çalışmada önerildiği gibi başlangıçta dengede olduğu düşünülen pürüzsüz damlacıkların şekilsel evrimini takip etmektir. Ogurtani vd., (2010a; 2010b) başlangıçta farklı şekillere fakat aynı büyüklüklere, sahip adacıkların zamanla aynı şekle ve büyüklüğe sahip SK tipi adalara dönüştüğünü, aradaki yegane farkın ıslatma katmanının derinliğinde ortaya çıktığını göstermişlerdir. Küçük en-boy oranlarında, büyük en-boy oranlı adacıklara göre, daha sığ ıslatma katmanı oluşturduğu gözlemlenmiştir.

Yukarıda bahsi geçen film evrimleşmesi çalışmalarında elektrik alan gibi dış kuvvetlerin etkileri göz ardı edilmiştir. Yakın zamanda, Tomar vd., (2008) ıslatma kuvvetlerini dışlayarak gerginliğe sahip iletken katı filmlerde uygulanan akım altında kararlılık analizleri yapmışlardır. Bu çalışmalarında, uygulanan akımın düzgün nanoyapı oluşumlarını etkilediği ve hızlandırdığını göstermişlerdir.

Sfyrıs vd. (2012) gerilmiş ince filmlerin yüzey morfolojilerinin kararlılık analizlerini çeşitli yükler (elektrik, gerinim) altında incelemişlerdir. Geliştirdikleri 3 boyutlu modelin analizleri yüzey elektro-göç yeterli güçte uygulandığında SK (Stranski-Krastanov) kararsızlıklarını engellediğini göstermiştir. Sonuç olarak yüzey elektro-göçünün yüzey kararsızlığını kontrol etmede kullanılabileceği gösterilmiştir. Bir diğer çalışmalarında ise uygulanan elektrik ve termal alan sonucu gerçekleşen elektro-göç ve termal göçün difüzyon eşyönsüzlüğü altındaki kararlılık analizlerini yapmışlardır. Uygun şekilde ayarlanmış termal alan eğimin kritik elektrik alan ihtiyacını düşürebileceğini göstermişlerdir (Dasgupta vd., 2012; Sfyrıs vd., 2013).

Korzec vd. (2012) kristal filmlerin morfolojik evrimini eşyönsüz yüzey enerjisi altında ele almıştır. Yüzey difüzyonu sonucu kuantum noktaların oluşumunu evrimini eşyönsüz yüzey enerjisi altında çalışmayı sağlayan bir model geliştirmişlerdir. Yüksek eşyönsüzlüğün kuantum noktalara sebebiyet verdiğini 3 boyutlu benzetim ile göstermişlerdir. Khenner (2013) yaptığı çalışmada elektro-göç ve ıslanma katmanı etkisinin yüzeyin morfolojik evrimine katkısını incelemiştir. Elektrik alanı yüzeye paralel ve dik olarak uygulamış ve bu sistemin

doğrusal kararlılık analizini yapmıştır. Güçlü ıslatma katmanının ilginç kabalaşmış (coarsening) yapılara neden olduğunu göstermişlerdir.

Literatürde sistemdeki ıslatma katmanını anlamak için geliştirilen çeşitli potansiyeller bulunmaktadır. Bu ıslatma potansiyelleri incelendiğinde ıslatma potansiyelinin film kalınlığı ile olan ilişkisinin nasıl tanımlanması gerektiği konusunda bazı fikir ayrılıkları olduğu gözlenmektedir (Tekalign ve Spencer 2004; Gao, 1994).

Gergin bir kristal altlık üzerinde heteroepitaksi ile elde edilen kuantum nokta dizi yapılarının (multiple QDs) oluşumu için Du ve Maroudas (2016) tarafından geliştirilen modelde, ıslatma potansiyelinin epitaksiyal filmin serbest enerjisine katkısı ve yüzey anizotropisi dikkate alınmıştır. Simülasyonlar ile epitaksiyal filmin morfoloji değişimi ve stabilitesi incelenmiştir. Bu çalışmada Stranski krastanov kararsızlığına ek olarak lineer olmayan bir kararsızlık modunu tetikleyebilecek pertürbasyon (long wavelength perturbation) ile, bir kuantum noktanın bölünerek daha küçük boyutlu çoklu kuantum noktalarını oluşturabileceği öne sürülmekte ve bu bölünme için kritik dalga boyu değerlerini ortaya koymaktadır (Du ve Maroudas, 2016). Bu çalışma, bizim gerilim ile kuantum noktaların en-boy oranlarını, adacık sayısını ve tepe eğriliklerini kontrol edebileceğimizi gösterdiğimiz deneylerimizi desteklemektedir.

Yüzey pürüzlülüğü (roughness) elektronik cihaz performanslarında problemler yaratmaktadır. Mikro ve nano cihazların üretimlerinde yüzey pürüzlülüğünü azaltacak yöntemler önem kazanmaktadır. Stres (residual stress), difüzyon anizotropisi, filmin yapısı (texture), film ve altlık arasındaki ıslatma etkileşimleri ve yüzey elektrogöçünü dikkate alarak Du ve Maroudas (2017), dışarıdan uygulanan elektrik alanın yüzey pürüzlülüğüne etkisini, filmin morfoloji değişimlerini modelleyerek incelemişlerdir. Elektrik alan olmadığında, stres uygulanan gergin (strained) metalik ince film yüzeyi kararlı halde değildir ve ıslatma etkileşimleriyle dengeye gelene kadar yüzeyde residual stress kaynaklı pürüzlülük oluşmaktadır. Uygulanan elektrik alanın yüzey pürüzlenme prosesinin hızını azaltarak atomik düzeyde yüzeydeki pürüzlülüğü azaltabileceği gösterilmiştir (Du ve Maroudas, 2017). Bu konu da, proje kapsamında gerçekleştirdiğimiz simülasyonlarımızın sonuçlarının doğal olarak uygulanabileceği bir diğer alan olarak ortaya çıkmaktadır.

Makroskopik bir kuvvet olarak uygulanan elektrik alan ile yüzeyde morfolojik kararsızlık oluşturulması yoluyla tek katman homoepitaksiyel adacıklar oluşturulabildiği Kumar vd. (2016a) tarafından yapılan modelleme çalışmasıyla gösterilmiş ve deneysel olarak Ag/Ag sistemiyle doğrulanmıştır. Bu çalışmaya göre, tek tabaka nano tel üretiminde elektrik alan uygulanması, nano teli kırarak uniform dağılan adacıkların oluşmasını sağlamaktadır.

Uygulanan elektrik alanının nano tel eksenine göre yönü ve şiddeti ile oluşan adacıkların geometrik özellikleri ve boyutları kontrol edilebilmektedir (Kumar vd., 2016a). Bu çalışma, projede elektrik alan ile kuantum yapıların morfolojilerinin kontrol edebileceğimiz tezimizi desteklemektedir.

Benzer bir çalışmalarında Kumar vd. (2016b) nanotel oluşumlarında elektrik alan uygulaması ile oluşan nanotellerin yöneliminin ve genişliklerinin kontrol edilebileceğini göstermişlerdir (Kumar vd., 2016b). Nanoteller elektrik alan doğrultusunda hizalanmış ve tellerin genişlikleri yaklaşık 10 nm civarında olmakla birlikte, elektrik alan yoğunluğuyla kontrol edilebilmiştir. Kristalin iletken altlık üzerinde büyütülen tek tabaka iletken nano adacıklar ile başlayan proseste ada kenarlarında elektro göç ile devam eden süreçte yüzeyin kristalografik yönelimine ve necking instabilitesine bağlı olarak tek ada üzerinden çoklu ve birbirine paralel nano teller oluşabilmektedir (Kumar vd., 2016b). Bu çalışma, projede elektrik alan ile kuantum yapıların morfolojilerinin kontrol edebileceğimiz tezimizi desteklemektedir.

Kuantum noktaların kontrollü ve simetrik bir şekilde üretilmesi için bilinen yöntemlerden bir tanesi bu nano yapıların üzerinde büyütüleceği altlık yüzeyi üzerinde template oluşturulmasıdır. Surrente vd. (2016), metal organik kimyasal buharlaştırma biriktirme (Metal organic chemical vapor deposition) yöntemiyle tetrahedral piramit şeklinde kuantum noktaların üretimi için, altlık üzerinde heksagonal nano templatelerin (kalıpların) oluşumundan yararlanmışlardır. Templatelerin kontrollü üzerinde sentezlenecek adacıkların kontrollü eldesini sağlamaktadır (Surrente vd., 2016). Bu çalışma da proje konumuz olan nano yapıların şekil ve büyüklük kontrolünün önemini ortaya koymaktadır.

Dixit ve Ranganathan (2017) gerinimli heteroeptaksi'de yüzey evrimini eş-yönsüz elastik davranışı ve uyuşmazlık gerilimleri altında sonlu elemanlar yöntemi kullanarak modellemişlerdir. Bu sayede Si(001) üzerinde oluşan $Ge_{0.25}Si_{0.75}$ kuantum noktaların kompleks morfolojik evrimini üç boyutlu olarak daha doğru ve etkili bir şekilde modellemeyi amaçlamışlardır ve bu sistem için doğrusal kararlılık analizi yapmışlardır. Simülasyonlar sonucunda elastik eş-yönsüzlük yönünün kuantum noktaların dizilim yönlerini etkilediği gözlemlenmiştir. Bunun yanı sıra kuantum noktaların şeklinin sadece doğrusal olmayan bölgede yüzey enerjisi eş-yönsüzlüğünden etkilendiği sonucuna varılmıştır. Yüzey enerjisindeki eş-yönsüzlüğün başlangıçta yavaş büyümeye ama nihai olarak daha büyük pürüzlülüğe sebebiyet verdiği gözlemlenmektedir. Simülasyonlarında eş-yönsüzlüğün şiddetini belirleyen A parametresinin 1'den küçük olduğu değerlerde kuantum noktalar küçük olurken, bu değer birden büyük olması daha büyük kuantum noktalar ile sonuçlandığını gözlemlenmiştir. Bu çalışma, projede yüzey enerjilerindeki anizotropinin kuantum yapıların

oluşumu ve oluşan kuantum nanoyapıların morfolojileri üzerindeki etkileri olacağı tezimizi desteklemektedir.

Wei ve Spencer (2016) ise çalışmalarında elastik enerji ve yüzey enerji minimizasyonu ile sabit hacimli epitaksiyel kuantum noktalarının morfoloji geçişlerini simülasyonu için iki boyutlu sürekli medya modeli geliştirmişlerdir. Elastik enerjinin üçüncü dereceden yaklaşımını tanımlamaları çeşitli adacık morfolojilerinin oluşumunun gözlemlenmelerine olanak sağlamıştır. Bu sayede denge sistemlerinin çatallanma diyagramlarını, bu yapıların kararlılık analizlerini ve artan hacimle morfoloji değişiminin minimum enerji rotasını çıkarmışlardır. Çalışmalarının temel çıkarımı düzlemlerin (facet) çekirdeklenmesi ile oluşan morfoloji geçişlerinin rotası ve bu süreçte oluşan yarı karalı morfolojilerin belirlenmesi olmuştur. Bunun yanında kenar enerjilerinin bu süreçteki etkilerini deneylerde gözlemlenen asimetrik ada morfolojileri üzerinden açıklamışlardır.

Bao vd. (2017) çalışmalarında ince filmlerdeki katı-hal ısınmama problemini parametrik sonlu elemanlar yöntemi ile eş-yönsüz yüzey enerjisi altında modellemiştir. Hesaplamalarında eş-yönsüz yüzey difüzyonu ve ıslatma açısını göz önüne almışlardır. Çalışmalarında ince filmlerin özellikle yüksek yüzey enerjisi eş-yönsüzlüğüne sahip ise birkaç adacığa parçalandığını gözlemlemiş ve bu geçiş sürecinde yüzey pürüzlülüğünün artışı ile gerçekleştiğini göstermişlerdir. Bu çalışma, projede yüzey enerjilerindeki anizotropinin kuantum yapıların morfolojilerinin kontrol edebileceğimiz tezimizi desteklemektedir.

Khennar metal nano-adacıklarında elektron yoğunlaşmasının etkisini göz önüne alarak morfolojik evrimlerini, büyüme ve yükseklik değişimlerini incelemiştir. Çalışmasında film yüksekliğinin nihai morfoloji ve büyüme dinamikleri kuvvetli şekilde etkilediği bulunmuştur. Düşük yükseklikteki ince filmlerde yüksek eş-yönsüzlük ve yüksek gerilim durumunda büyümenin durduğu gözlemlenmiştir. Khennar uyumsuzluk gerilimlerinin etkisi yanında yüzey gerilimlerinin etkisini de göz önüne alarak birleşik etkilerini kuantum boyut etkisi altında gözlemlenmiştir. Bu etkilerden kuantum boyut etkisinin sonuç morfolojinin oluşumunda kilit rol oynadığını göstermiştir.

Wang vd. (2017) ince filmlerdeki doğrusal olmayan yüzey morfoloji evrimini faz alan teorisini kullanarak modellemiştir. Kullandıkları faz alan modelinde, literatürün aksine Galerkin sonlu elemanlar formülasyonu türetmişler ve bu yolla türettikleri zayıf form denklemlerini çözmüşlerdir. Başlangıçta bulunan yüzey pürüzlülüğünün tavlama sürecindeki evrimi incelemiştir. Heteroepitaksiyel ince filmlerin tavlama sürecinde oluşturdukları adacıklar ve bu adacıkların büyüme dinamikleri incelemiştir. Hesaplanan ortalama dalga boyları ve

büyüme kinetikleri literatürdeki deneyler ile uyumlu olduğunu göstermişlerdir. Başlangıç adalar arası mesafenin uygulanan uyumsuzluk geriniminin karesi ile ters orantılı olduğunu göstermişlerdir. Bu çalışma, yüzeydeki periyodik dalgalardaki dalga boyları ve genliğinin önemini göstermiştir bu nedenle random yüzey pürüzlülüklerine ek olarak periyodik yüzey pürüzlülüklerinin araştırılmasını da projemize ekledik.

Liao ve arkadaşları yüzey kararsızlığı sonucu küresel altlıklar üzerinde kendiliğinden oluşan adacıkları deneysel ve teorik olarak incelemişlerdir. Bu çalışmanın deneysel kısmında Ag çekirdekten oluşan küresel altlık üzerindeki SiO₂ katmanda gözlemlenen adacık oluşumu çekirdek yarı çapı ve uyumsuzluk gerinimi ile değişimi araştırılmıştır. Teorik kısmında ise 3 boyutlu faz alan teorisi kullanılarak bu oluşumlar modellenmeye çalışılmıştır. Çalışmalar sonucunda adacık oluşumunun kinetiğinin yüksek yüzey eğriliği ve uyumsuzluk gerilimlerinde hızlandığı gözlemlenmiştir. Bu çalışma, projede yüzey enerjilerindeki anizotropinin ve uyumsuzluk gerilimlerinin kuantum yapıların morfolojilerine etkisi üzerindeki önemini göstermektedir.

Sitnikov vd., yaptıkları çalışmada yüksek sıcaklıkta epitaksiyel büyüme çalışması ile iki boyutlu adacıkların çekirdeklenme sürecini gözlemlemişlerdir. Aşırı yüksek vakum yansıtma elektron mikroskopisi ile yaptıkları çalışmada 900-1180 °C sıcaklıklarda Si adacıklarının oluşumu gözlemlenmiş ve kritik çekirdeklenme yarıçapı D_{kri} değerinin ada çekirdeklenme frekansının üstel fonksiyonu olduğunu gözlemlemişlerdir.

Shklyayev ve Budazhapova yaptıkları çalışmada yüksek sıcaklıklarda Si(100) düzlemi üzerine Ge yoğunlaştırılması sırasında oluşan SiGe adacıklarının oluşumu için gerekli kritik şartları incelemişlerdir. Adacık oluşumunda Ge difüzyon hızı ile Ge yoğunlaşma hızı arasındaki yarışın etkili olduğunu gözlemlemişlerdir, eğer Ge difüzyon hızı daha yüksek ise adacık oluşumunun engellendiği aksi durumda ise adacık oluşumunun gerçekleştiğini belirtmişlerdir. Ge atomlarının Si içindeki difüzyonunun 800 °C altında Ge yoğunlaşma hızına göre daha hızlı olması nedeniyle adacık oluşumu gerçekleşirken, 840-960 °C kritik aralığında bu iki sürecin dengede olduğunu ifade etmişlerdir. Bu aralıkta birbirinden 1µm mesafe uzaklıkta dengede bulundan pürüzsüz adacıkların oluşumunu gözlemlemişlerdir. Bu pürüzsüzlüğün yüzey gerilimlerinin homojen dağılmasından kaynaklandığını söylemişlerdir. Bu çalışma da proje konumuz olan nano yapıların şekil ve büyüklük kontrolünün önemini ortaya koymaktadır.

Ogurtani vd., (2010a; 2010b) kafes uyumsuzluğu bulunan adacık/altlık sistemleri üzerinde gerilim ve yönsel yüzey difüzyonu konularında çalışmışlar ve simülasyon sonuçları ile çok ilginç morfolojik dönüşüm ve davranışlar gözlemlemişlerdir. Ogurtani vd., (2014) yılındaki

çalışmalarında ise gerinim altında yüzey pürüzlenmesi kararsızlığı ile oluşan kuantum noktalar için gereken gerinim değerlerini ve başlangıç yüzey pürüzlülüğünün değerinin birbirleri ile olan ilişkilerini göstermişlerdir. Bu çalışmalar, gurubumuz tarafından son 10 yıl içerisinde geliştirilen yüzey ve arayüzeylerin geri-dönüşümsüz termodinamik teorisi temeline dayanmaktadır (Oren ve Ogurtani 2000; Ogurtani ve Oren 2001; 2005, Ogurtani vd. 2010a; 2010b; 2014 Akyildiz vd., 2012).

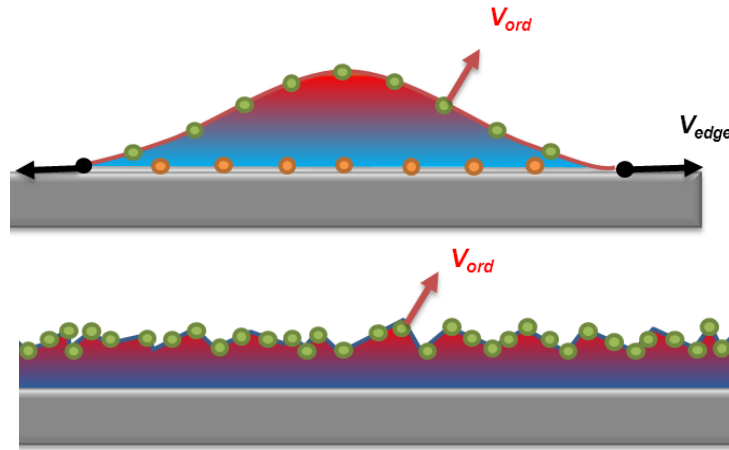
Bu teori bugüne kadar yüzey kararsızlıklarının gözlemlendiği, tane sınırı difüzyonu ve uygulanan elektrik ve gerilim alanlarının önemli olduğu sisteme başarı ile uygulanmıştır (Oren ve Ogurtani 2000; Ogurtani ve Oren 2001; 2005, Ogurtani vd. 2010a; 2010b; 2014 Akyildiz vd., 2012). Bu teoride, içsel entropi üretimi (internal entropy production, IEP) hipotezi kullanılarak üçlü kavşakların (triple junction, TJ) hızları, temas açıları ve ıslatma parametreleri elde edilmiştir. Bu çalışmalarda, üçlü kavşaklardaki hareketli sınır koşullarının, ada oluşum ve gelişim dinamiği üzerindeki etkileri ve önemi gösterilmiştir.

Özet olarak, günümüzde, uyumsuz altlık/katı film sistemlerinde makroölçekli olaylar hakkındaki bilgimiz bazı kısıtlı durumlarla sınırlıdır ve film sistemlerinin kararlılığı ve bu özelliklerin uzunluk ölçeği seçiminin anlaşılması halen büyük oranda eksiktir. Bu durum, elektrostatik ve gerilim gibi dış kuvvetlerin uygulanması ile daha da karmaşık bir hal almaktadır. Buna ek olarak yığın malzemelerdeki elektron/boşluk taşınımı çok iyi anlaşılmiş olmakla beraber, KN nanoyapılardaki taşınımın bu yapılarıdaki gerilim dağılımları, bu yapıların büyüklüğü ve morfolojisi ile olan ilişkileri hakkındaki bilgimiz kısıtlıdır. Bu ilişkileri anlamak, gelecek uygulamalar için gerekli optimum özellikleri sahip nanoyapıları ulaştırmak için çok önemlidir.

3. TEORİ VE MATEMATİKSEL MODEL

Literatürdeki teorik çalışmalar incelendiğinde, geliştirilen modellerin, genel olarak ince film morfoloji değişimi esnasında ada oluşumunu etkileyen faktörleri ve bu faktörlerdeki kritik değerleri bulmak amacıyla yapıldığı görülmektedir. Ayrıca, bu çalışmalarda kullanılan modeller denge termodinamiğine dayalı olup, sistem hareketsiz periyodik sınır koşulları kullanılarak ifade edilmiştir (Ogurtani ve Oren, 2001; 2005). Gerçek sistemlerde ise katı yüzey ve arayüzeylerin denge-dışı (geri dönüşümsüz) termodinamik kullanılarak modellenmesi gerekmektedir. Denge termodinamiğine dayalı modeller, ince film ve alt tabakanın birleştiği sınırdaki köşelerin yani üçlü kavşakların (triple junction) hareketini kısıtlar ve film yüzeyinin zaman içinde ulaşabileceği olası kararlı hallerin ortaya çıkışını kısmen engeller (Ogurtani vd., 2010a; Ogurtani vd., 2010b). Bu kısıtlamanın, araştırma grubumuz tarafından önerilen iç entropi üretimi hipotezine dayalı geri dönüşümsüz termodinamik model kullanılarak kaldırılabilceği gösterilmiştir.

Ogurtani ve Oren (2001; 2005), içlerinde üçlü kavşakları bulunduran yüzey ve arayüzeyler için, geri dönüşümsüz (irreversible) termodinamiğin mikroayrık formülasyonunu temel alarak, sürekli medya teorisini geliştirmiştir. Bu teori, yüzey ve arayüzeyler içeren elektrogöç (Ogurtani ve Oren, 2001), ve tane sınırı oluk oluşumu (Akyıldız vd., 2012) gibi farklı malzeme problemlerine başarı ile uygulanmıştır. Bu proje kapsamında, geri dönüşümsüz termodinamiğin mikroayrık formülasyonu, epitaksiyel ince filmlerin şekil değiştirme süreçlerinin ve Stranski-Krastanow adacıklarının oluşumlarının bilgisayar modellemesi aracılığıyla araştırılması için kullanılmıştır.



Şekil 3.1 Altlık ile sistem üzerindeki adacık oluşumunun şematik gösterimi (üst) ve beyaz gürültü deneylerinin şematik gösterimi (alt)

Bu bölümde, öncelikle yönetici denklemler Şekil 3.1'in yardımı ile tanıtılacak, daha sonra ise bu diferansiyel denklem takımlarının sayısal çözümlenmesi özellikle de **bu projenin en önemli aşamalarından bir tanesi olan elektrik alanın sisteme entegrasyonu** detaylı bir şekilde anlatılacaktır.

3.1 Yüzey Sürüklenme Difüzyonu ve Büyümesinin Formülasyonu

Yüzey sürüklenme difüzyonu ve büyümesinin hem gerinim hem de elektrik alanları altındaki formülasyonu nanoyapıların morfolojik gelişimlerinin modellenmesi için, Ogurtani ve Oren (2001; 2005) tarafından geliştirilen, içlerinde üçlü kavşakları da bulunduran yüzey ve arayüzeyler için, geri dönüşümsüz (irreversible) termodinamiğin mikroayrık formülasyonu temel alınmıştır. Bu modele uygulanan gerinim ve elektrik alanlar eş zamanlı olarak aşağıda belirtildiği şekilde eklenmiştir.

Bir yüzey/arayüzeyin (Şekil 3.1) şekilsel değişim kinetiği yüzey normali doğrultusundaki normalize ve orantılanmış hız vektörü \bar{V}_{ord} ile, altlık ile damlacığın oluşturduğu uçların (üçlü kavşak noktaları, (triple junction)) hız vektörü ise \bar{V}_{edge} ile ifade edilirler. Bu çalışmada, seçilen işaret düzenine göre \bar{V}_{ord} 'un pozitif değerleri adacığın lokal genişleme ve/veya büyümesini verir. Bu durumda, yüzey difüzyonu ve ıslatma (wetting) potansiyelinin yön bağımlı (anizotropik) olduğunu da göz önüne alarak aşağıdaki ifadeler elektrik alan etkilerini de içine alacak şekilde genişletilerek yazılmıştır (Ogurtani ve Oren, 2001; 2005; Ogurtani vd., 2010a; 2010b, 2014):

$$\bar{V}_{ord} = \frac{\partial}{\partial \ell} \left[\bar{D}(\theta, \phi; m) \frac{\partial}{\partial \ell} \left(\Delta \bar{f}_{dv}^o - \Sigma \bar{\sigma}_h^2 + \chi \bar{g} + \bar{f}_{d/s}(\bar{y}) \bar{\kappa} + \bar{\omega}(\bar{y}) \right) \right] - \bar{M}_{dv} \left(\Delta \bar{f}_{dv}^o - \Sigma \bar{\sigma}_h^2 + \chi \bar{g} + \bar{f}_{d/s}(\bar{y}) \bar{\kappa} + \bar{\omega}(\bar{y}) \right) \quad (3.1)$$

ve

$$\bar{V}_{edge} = -\frac{\bar{M}_{edge}}{kT} \left[(f_s - f_{sf}) - (f(\bar{h}, \theta) \cos(\theta) - \partial_{\theta} f(\bar{h}, \theta) \sin(\theta)) \right] \quad (3.2)$$

Denklem (3.1)'de iki ana terim vardır, birinci terim (mavi renkli) farklı kuvvetler altında yüzeyde madde taşınım kinetiğini tanımlarken, ikinci terim (kırmızı renkli) ise büyüme ya da

faz deęiřimi (yoęuřma ve buharlařma) kinetięini ifade eder. \bar{M}_{dv} , sıcaklık ve yzney gerinimlerine baęlı olan normalize bzyyme hareketlilięidir. Denklem (3.1)'de $\bar{\kappa}$ normalize olmuř yzney eęrilięini verir, yzney eęrilięi deęerleri iębzykey yzneylerde pozitif deęer verecek řekilde tanımlanmıřtır. Bu durumda, yzney hareketinin yny ve yzney normal vektoryny \hat{n} pozitif deęerleri katı faz ynynde olur ve dolayısıyla bzygesel kzyylme ya da buharlařma anlamına gelmektedir.

Bu ęalıřmada Helmholtz serbest enerji yoęunluęunun $f_{d/s}(y)$ izokorik sistemlerde yzney ile altlık arasındaki mesafeye (y), baęlı olduęunu varsayılmıřtır. Normalize edilmiř ıslanma potansiyeli ise $\omega(y) = \Omega_d n_y d\gamma / dy$ formyluy ile ifade edilmiřtir. Burada $n_y = -\hat{n} \cdot \hat{j}$ ifadesi yzney normalinin y eksenindeki projeksiyonunu ifade etmektedir.

Denklem (3.1)'de normalize ęember gerilimi (hoop stress) $\bar{\sigma}_h = Tr \bar{\sigma}$ ile ifade edilir, burada boyutsuz gerilim řiddeti parametresi, Σ elastik gerinim enerji yoęunluęunun (ESED) gerilim nedenli yzney sryrkenme difzyyonuna katkısını ifade ederler. χ ise uygulanan elektrik alanın yzney sryrkenme difzyyonuna etkisini belirtir. Bu ęalıřmada χ ve Σ parametrelerinin deęerleri ve birbirlerine gzyre oranları sistemin evrimini kontrol eden malzeme ozelliklerine ek olarak dıřsal olarak kolaylıkla deęiřtirilebilen ana faktoryler olarak ortaya ęıkmaktadır.

Adacık ile altlık arayzyeyindeki uyumsuzluk gerinimi Dirichlet sınır kořulu olarak sisteme dahil edilmiřtir. Bunun ięin yerdeęiřim vektory $\tilde{u} \rightarrow \hat{i} \varepsilon_o x$ tanımlanmıř ve kordinat sisteminin merkezi adacık merkezi olarak alınmıřtır. Bu sayede dengesiz gerinim sonucu oluřabilecek damlacık kaymaları engellenmiřtir. Burada, iki eksenli gerilim $\sigma_o = E_d \varepsilon_o / (1 - \nu_d)$ gerilim ile ilgili normalizasyonlarda normalizasyon parametresi olarak kullanılmıřtır. Bu seęimler sonucunda dzylemsel eřyynly elastik gerinimin sayısal ęzyzmy ięin dolayly sınır elemanı ynteminin kullanımı uygun hale gelmektedir. Bu durumda bařlangıę boyutlama parametresi olarak $E_d \rightarrow 1$, $\varepsilon_o \rightarrow 1$ deęerleri alınabilmektedir. Sonuę olarak, sadece Poisson oranının geręek deęeri verilerek normalize olmuř sistemde gerilim daęılımı hesaplanabilmektedir.

Ana formylasyonumuzda $\bar{\ell}$, 2-boyutlu yzney boyunca alınan eęrisel koordinatı belirtir ve bu deęer keyfi olarak seęilebilecek bir ℓ_o deęeri ile normalize edilebilmektedir. ℓ_o deęeri ister adacıęın tepe yzyksekligi olarak seęilebilir istenirse de filmin yzney Helmholtz serbest enerjisinin elastik gerinim enerjisi yoęunluęuna oranı olarak da seęilebilir $\ell^* = f_d / w_o$. Burada

$w_o = (1 - \nu_d^2) \sigma_o^2 / 2E_d$ elastik gerinim enerjisi yoğunluğunu belirtir. Burada E_d ve ν_d değerleri sırası ile damlacık şeklindeki filmin Young modülü ile Poisson oranını verirken ε_o da film ile altlık arasındaki uyumsuzluk gerinimini belirtmektedir. Bu çalışmada film kalınlığı h_o doğal normalizasyon uzunluğu olarak belirlenmiştir: $\ell_o = h_o$. $\Delta \hat{f}_{dv}^o(T) = (\hat{f}_v^o - \hat{f}_d^o)$ değeri ise izokorik sistemlerde meydana gelen izotermal süreçlerde Helmholtz serbest dönüşüm enerjisinin termal bölümünü tarif etmektedir. Bu değer pozitif olması durumu gaz fazının yoğunlaşması, yani damlacığın büyümesi anlamına gelmektedir. Bu sistemde \hat{f}_v^o and \hat{f}_d^o sırası ile gaz ve katı fazların hacimsel Helmholtz serbest enerji yoğunluklarına karşılık gelmektedir.

Burada sunulan problemin formülasyonunda değişkenlerin üzerlerindeki çizgiler o değişkenin normalize olduğu anlamına gelmektedir. Buna göre sistemde kullanılan normalizasyon işlemleri şu şekilde özetlenebilir:

$$\bar{t} = t / \tau_o, \bar{\ell} = \ell / \ell_o, \bar{\kappa} = \kappa \ell_o, \bar{L} = L / \ell_o, \Delta \bar{f}_{dv}^o = \frac{\Delta \hat{f}_{dv}^o}{f_d} \ell_o, \bar{\sigma}_h = \frac{\sigma_h}{\sigma_o} \quad (3.3)$$

$$w_o = \frac{(1 - \nu_d^2)}{2E_d} \sigma_o^2, \sigma_o = \frac{E_d}{(1 - \nu_d)} \varepsilon_o \quad (3.4)$$

$$\Sigma = \frac{(1 - \nu_d^2) \ell_o}{2E_d f_d} (\sigma_o)^2 = \frac{\ell_o}{\ell^*}, \Xi = (1 + \nu) \frac{\ell_o \sigma_o}{3g_s} |Tr \underline{\lambda}_s^V|, \chi = \frac{e |\hat{Z}| E_o r_o^2}{\Omega_\sigma g_\sigma} \quad (3.5)$$

$$\bar{\omega}(\bar{y}) = \frac{1}{\sqrt{1 + \bar{y}_x^2}} \frac{(f_s - f_d)}{\pi f_d} \frac{\bar{\delta}}{\bar{\delta}^2 + \bar{y}^2}, \bar{f}_{d/s}(y) = \frac{(f_d + f_s)}{2f_d} + \left(\frac{(f_d - f_s)}{f_d} \right) \frac{1}{\pi} \arctan(y / \delta) \quad (3.6)$$

Yukarıdaki denklem takımlarında, f_s ve f_d değerleri sırası ile altlığın ve filmin Helmholtz yüzey serbest enerjilerini tanımlarken f_{ds} ise damlacık ile altlık arayüzeyindeki serbest enerjiyi tanımlamaktadır. Bu çalışmada genelleştirilmiş hareketlilik değerinin \bar{M}_{vd} kristal katının yöneliminden bağımsız olduğu kabul edilmektedir. Bu değer yüzey sürüklenme difüzyonunun hareketliliğinin en küçük değeri \hat{M}_d ile normalize edilmiştir. Bu değerler sırası ile $\hat{M}_d = (\tilde{D}_d h_d / \Omega k T)$ ve $\bar{M}_{vd} = (\hat{M}_{vd} \ell_o^2) / \hat{M}_d$ formülleri ile gösterilir. Burada, $\bar{\Omega}$ yüzey

tabakasında bulunan atomların ortalama hacimlerini belirtir. \tilde{D}_d ise yüzey difüzyon katsayısının eşyönlü (izotropik) partını verir.

Kristal yapılar göz önüne alındığında karşılaştığımız anizotropik etkiler iki noktada karşımıza çıkmaktadır. Difüzyon katsayısının yön bağımlılığı ve yüzey sertliğinin (surface stiffness) yön bağımlılığı.

Yüzey atomlarının anizotropik difüzyon hızı aşağıdaki bağıntı kullanılarak nümerik hesaplamalara dahil edilmiştir.

$$\bar{D}(\theta, \phi, m) = D_{\sigma}^0 \left[1 + A \cos^2(m(\theta - \phi)) \right] \quad (3.7)$$

Bu bağıntıda θ , yüzeydeki difüzyon doğrultusunun tanjant vektörü ile x-ekseni arasındaki açıyı, A anizotropik etkinin şiddetini belirleyen sabiti, m ise simetri derecesini belirtirken, ϕ eğim açısını yani difüzyonun maksimum olduğu eksen ile x-ekseni arasındaki açıyı verir.

Yön bağımlı yüzey sertliği formülü aşağıdaki gibi elde edilmiştir:

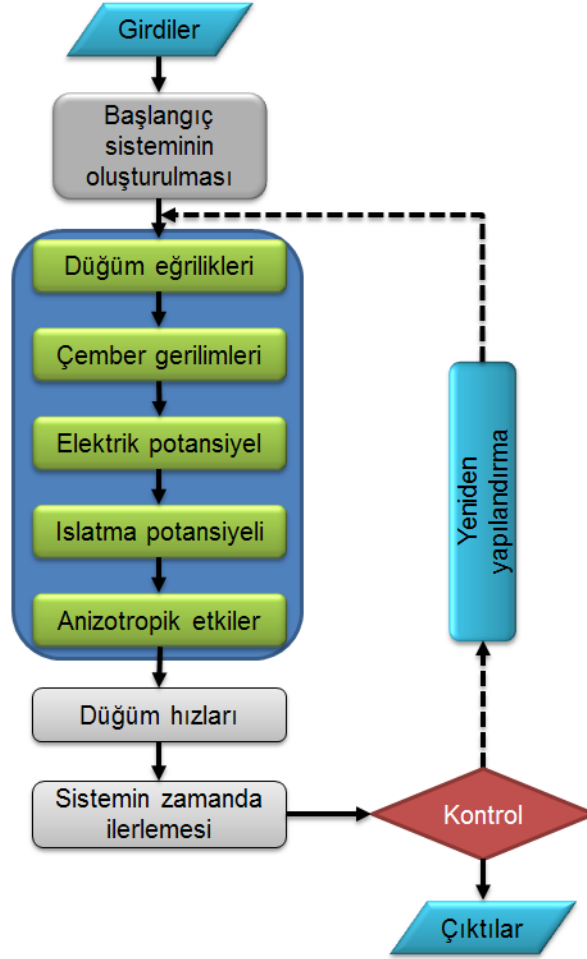
$$f(\theta, \phi, m) = \left(1 + \frac{B}{2} \right) \left[1 - \frac{B(1 - 4m^2)}{B + 2} \cos[2m(\theta - \phi)] \right] \quad (3.8)$$

Bu bağıntıda $\theta = \pi/2 - \theta$ olarak verilebilir ve iki boyutta genelleştirilmiş silindirik yüzey difüzyon düzleminin normal vektörü ile genel kartezyen referans sisteminde x-ekseninin yaptığı açıdır. Denklem (3.8)'e göre yüzey sertliği, yüzey Helmholtz serbest enerji anizotropi sabitinin $B \leq 2 / \left(\left| 1 - 4m^2 \right| - 1 \right)$ eşitsizliğini sağladığı durumlarda pozitif alınabilmektedir. Bu şartlarda B sabiti için üst limitler iki katlı, dört katlı ve altı katlı simetrisi için: $B \leq \{1; 1/7; 1/17\}$ olarak ortaya çıkmıştır.

3.2 Matematiksel Model ve Sayısal Çözüm Yöntemleri

Simülasyonun yapıldığı fiziksel model iki boyutlu olarak ele alınmıştır. Başlangıçta belirli uzunlukta çubuk elemanları kullanılarak sonlu sayıda düğüm noktası ile tanımlanan bir film yüzeyi vardır (Şekil 3.1). Sistemin evrilmesi, yüzeydeki düğüm noktalarının yer değiştirmeleri sonucu konum koordinatlarının yenilenmesi ile sağlanmaktadır. Bu noktaların yer

değiştirmesini kontrol eden denklemler (Denklem 3.1 ve Denklem 3.2) sayısal olarak çözülerek Şekil 3.2'de programın çalışma prensipleri bir akış şeması halinde özetlenmiştir.



Şekil 3.2 Program akış şeması.

Aşağıda Şekil 3.2'de verilen program akış şeması takip edilerek sayısal hesaplama yöntemleri bu projenin yeniliği olan “elektrik alan hesaplamaları” detaylı olmak üzere anlatılmıştır. Gerilim hesaplamaları daha önceki çalışmalarımızda detaylı bir şekilde açıklanmış olup rapor bütünlüğü açısından burada tekrar verilmiştir.

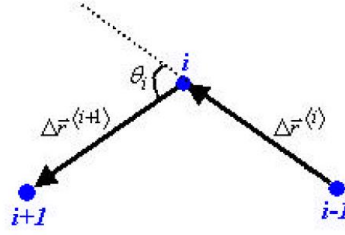
3.2.1 Başlangıç sisteminin oluşturulması

Kullanılan fiziksel model 2B olmasına rağmen vektör hesaplarından faydalanmak için sistem düğüm noktalarının (Şekil 3.1) kartezyan koordinatları 3B vektörler olarak tanımlanmış ve elemanların uzunluk vektörleri ve değerleri s , ile elemanların orta noktalarının konumları (kütle merkezi pozisyon vektörleri, \vec{r}_c) aşağıda belirtildiği şekilde hesaplanmıştır.

$$\vec{r}^{(i)} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ 0 \end{pmatrix}, s^{(i)} = |\Delta \vec{r}^{(i)}|, \Delta \vec{r}^{(i)} = \vec{r}^{(i+1)} - \vec{r}^{(i)} \text{ ve } r_c^{(i)} = \frac{\vec{r}^{(i+1)} + \vec{r}^{(i)}}{2} \quad (3.9)$$

Sistemin geometrik şekli bu şekilde ortaya çıkarıldıktan sonra ise yönetici denklem sistemleri içerisindeki parametrelerin hesaplanması için kullanılan yöntemler aşağıda açıklanmıştır.

Düğüm noktalarındaki dönme açıları Şekil 3.'de şematik olarak gösterildiği gibi uzunluk vektörleri ve bu vektörlerin nokta çarpımları kullanılarak aşağıdaki gibi hesaplanır.



Şekil 3.3 Düğüm noktası i' deki elemanın dönme açısı θ_i ' nin şematik gösterimi.

$$\theta_i = \begin{cases} \arcsin \left(\frac{|\Delta \vec{r}^{(i)} \times \Delta \vec{r}^{(i+1)}|}{|\Delta \vec{r}^{(i)}| |\Delta \vec{r}^{(i+1)}|} \right) & \text{if } \Delta \vec{r}^{(i)} \cdot \Delta \vec{r}^{(i+1)} \geq 0 \\ \pi - \arcsin \left(\frac{|\Delta \vec{r}^{(i)} \times \Delta \vec{r}^{(i+1)}|}{|\Delta \vec{r}^{(i)}| |\Delta \vec{r}^{(i+1)}|} \right) & \text{if } \Delta \vec{r}^{(i)} \cdot \Delta \vec{r}^{(i+1)} < 0 \end{cases} \quad (3.10)$$

3.2.2 Düğüm noktası eğriliklerinin hesaplanması

Eğrilik yarıçapının ve normal vektörü ile bağlantılı kesikli uzay geometrisi kullanılarak her bir düğüm noktasının eğrilikleri hesaplanır. Bu geometrik bağıntılar açıklanırsa; yarıçapı ρ_i olan bir dairenin eğriliği (curvature) ρ_i^{-1} olarak verilir. Bir düzlemde tanımlanan üç noktadan sadece bir çember geçebilir. Şekil 3.4'te $i-1$, i ve $i+1$ düğüm noktalarından geçen bir çemberin şematik gösterimi verilmiştir. Çubuk elemanların uzunlukları $i-1$ ve i düğüm noktaları ile tanımlandığı durumda $s_i = [DN]$, $s_{i+1} = [CN]$, $[OB] \perp [DN]$, $[OA] \perp [CN]$ ve $[AB] \parallel [CD] \perp n^{(i)}$. Ayrıca $i+1$ ve i elemanlarının birbiri ile yaptığı açı, dönme açısı, θ_i olarak

$$\vec{t}_1 = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \check{t}_{xy} \\ \check{t}_{xz} \end{bmatrix}; \vec{t}_2 = \begin{bmatrix} \check{t}_{yx} \\ \sigma_y \\ \check{t}_{xz} \end{bmatrix}; \vec{t}_3 = \begin{bmatrix} \check{t}_{xz} \\ \check{t}_{zy} \\ \sigma_z \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

Kartezyan koordinat sisteminde x , y , z yönlerinde oluşan sonsuz küçük gerinim değerleri, gerilim bileşenlerini kullanarak aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u_x}{\partial x}; \varepsilon_y = \frac{\partial u_y}{\partial y}; \varepsilon_z = \frac{\partial u_z}{\partial z} \quad (3.15)$$

$$\gamma_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}; \gamma_{yz} = \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y}; \gamma_{zx} = \frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \quad (3.16)$$

Elastik malzemelerde gerilim-gerinim davranışı Hooke Yasası ile formüle edilir. İzotropik bir malzeme için hesaplamalar üç boyutta yapılabilir.

$$\varepsilon_x = \frac{1}{E} [\sigma_x - \nu(\sigma_y + \sigma_z)]; \varepsilon_y = \frac{1}{E} [\sigma_y - \nu(\sigma_x + \sigma_z)]; \varepsilon_z = \frac{1}{E} [\sigma_z - \nu(\sigma_y + \sigma_x)] \quad (3.17)$$

$$\gamma_{xy} = \frac{1}{G} \check{t}_{xy}, \gamma_{yz} = \frac{1}{G} \check{t}_{yz}, \gamma_{zx} = \frac{1}{G} \check{t}_{zx} \quad (3.18)$$

Yukarıdaki denklemlerde tanımlanan parametreler, E elastik modülü, ν Poisson oranı ve G ise kayma modülüdür. Bu parametreler arasındaki bağıntı aşağıda verilmiştir.

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (3.19)$$

Türetilmiş olan diferansiyel denklemler denge durumu koşulunda elde edilmiştir. Düzlem gerinimi (plane strain) koşullarında aşağıdaki denklemler yazılabilir:

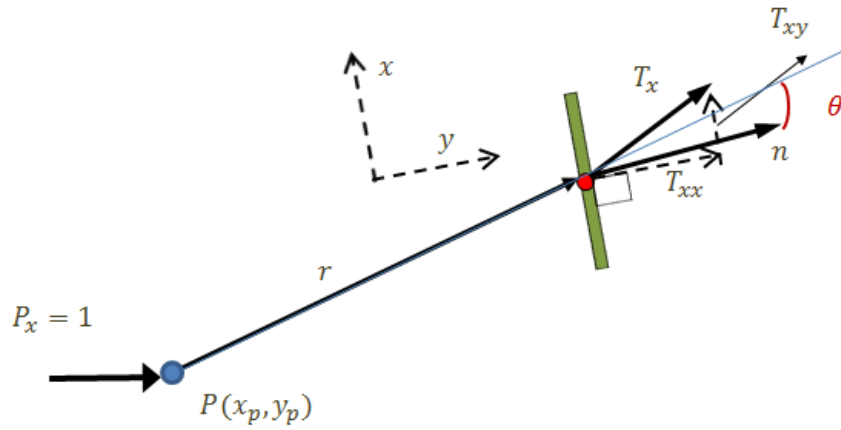
$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \check{t}_{xy}}{\partial y} + b_x &= 0 \\ \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \check{t}_{xy}}{\partial x} + b_y &= 0 \end{aligned} \quad (3.20)$$

Burada, b_x ve b_y , x ve y yönündeki gövde kuvveti bileşenleridir. Yukarıda çıkarılan denklemler ile yapılan işlemler sonucu aşağıdaki bağıntılar elde edilebilir.

$$G \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} + G \right) \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} \right) + b_x = 0 \quad (3.21)$$

$$\left(\frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} + G \right) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y \partial x} \right) + G \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) = 0 \quad (3.22)$$

İki boyutlu düzlem gerinim probleminin temel çözümü (fundamental solution), noktasal birim yükler için ilk olarak Lord Kelvin tarafından yapılmıştır.



Şekil 3.5 İki boyutlu Kelvin çözümü şematik gösterimi.

Sistemde x ve y yönündeki yer değiştirmelerin x yönündeki birim yük için çözümü aşağıdaki gibi hesaplanabilir:

$$U_{xx}(P, Q) = C \left[C_1 \ln \left(\frac{1}{r} \right) r_x^2 \right] \quad (3.23)$$

$$U(P, Q) = C r r \quad (3.24)$$

$$C = 1 / [8\pi G(1-\nu)], \quad C_1 = 3 - 4\nu \quad (3.25)$$

Sınır eleman yöntemini (Beer, 2008) bir sistemde kullanmak için sınır gerilmeleri (traksiyonları) gerekmektedir. Bu traksiyonlar yüzeyden dışarı doğru normal yönünde etkirler (çevresel gerilme). Yer değiştirme çözümünün türevini alarak gerinim için temel çözümler hesaplanabilir. Daha sonra Hooke Yasası kullanılarak traksiyonlar için temel çözümler hesaplanabilir.

Sınır eleman yöntemi' ne göre, P noktasındaki x yönündeki birim yük için Q noktasındaki traksiyonlar aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\overline{T_{xx}}(P,Q) = \frac{C_2}{r} \left[C_3 \ln(2r_x^2) \right] \cos \theta \quad (3.26)$$

$$\overline{T_{xy}}(P,Q) = \frac{C_2}{r} \left[2r_x r_y \cos \theta + C_3 [n_y r_y - n_x r_x] \right] \quad (3.27)$$

$$C_2 = \frac{1}{4\pi(1-\nu)}, \quad C_3 = 1 - 2\nu, \quad \cos \theta = \frac{1}{r} \cdot n \quad (3.28)$$

Şekil 3.5'de θ açısı tanımlanmıştır. Eğer incelenen bölgeye etkiyen bir kuvvetin olmadığını varsayarsak, bu şartlarda aşağıdaki denklemi yazabiliriz.

$$u_x(P) = \int \left[t_x(Q) U_{xx}(P,Q) + u_x(Q) U_{xy}(P,Q) \right] dS - \int \left[u_x(P) T_{xx}(P,Q) + u_y(P) T_{xy}(P,Q) \right] dS \quad (3.29)$$

Lineer cebir kullanarak aşağıdaki çözümü elde ederiz.

$$u(P) = \int U(P,Q) t(Q) dS - \int T(P,Q) u(Q) dS \quad (3.30)$$

Sonuç olarak, yay gerilimleri Denklem 3.30 kullanılarak hesaplanır. Bu iki integralli denklem sisteminde, traksiyonlar, sınırdaki u yer değiştirmeleri ile doğrudan bağlantılıdır. Bu şartlarda hayali kuvvetlerin hesaplanması durumu ortadan kalkmış olmaktadır.

3.2.4 Elektrik potansiyelin hesaplanması

Elektrik alanın etkilerinin incelenebilmesi için öncelikle geometrisi belirlenen (şekli bilinen) bir KN için Laplace denklemi Sonlu Elemanlar Yöntemi kullanılarak çözülmüş ve simülasyon programına entegre edilmiştir.

Sınır elemanları yöntemi (BEM, boundary element method) bir çok mühendislik probleminin çözümüne başarı ile uygulanan bir sayısal hesaplama yöntemidir. Bu yöntemin en önemli avantajı çözümün sadece sınır değerleri kullanılarak elde edilebilmesidir (Brebbia ve Dominguez, 1992), sınırlaması ise çözülecek olan diferansiyel denklemin eşleniği sınır

integral denkleminin elde edilebilmesi için temel analitik çözümünün bilinmesi gerekliliğidir (Partridge vd., 1992). Sınır elemanları yönteminin öncüsü Trefftz yöntemi (Brebbia ve Dominguez, 1992) olup, bu yöntemde yaklaşık çözüm, temel analitik çözümün etki alanı (domain) dışında konumlanan kaynak noktaları ile çakıştırılması ile elde edilir. Sınır elemanları yönteminde de çözüm benzer bir şekilde temel analitik çözüm ile elde edilir, ancak bu yöntemde kaynak noktaları belirli noktalara yerleştirilmek yerine sınır boyunca sürekli bir şekilde yerleştirilir. Kaynak şiddetinin dağılımı yoğunluk fonksiyonu ile ifade edilir. Doğru bir yoğunluk fonksiyonunun bulunması ile parçalı diferansiyel denkleminin çözümü tüm etki alanı için sağlanır. Yoğunluk fonksiyonu bulunduktan sonra etki alanı ve sınırlarda fiziksel olarak anlamlı sonuçlar elde etmek için tek yapılması gereken sınır üzerinde integralin alınmasıdır.

Kuantum nokta probleminde ihtiyacımız olan elektrostatik potansiyelin hesabı için aşağıda verilen Laplace denkleminin iki boyutlu uzayda Neuman sınır koşulları altında çözümü gerekmektedir:

$$\nabla^2 g(r) = 0 \quad (3.31)$$

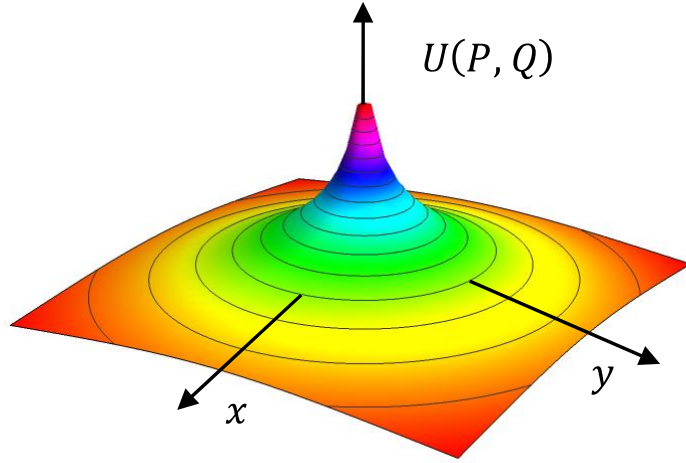
$$\hat{n} \cdot \nabla g(r) = \hat{n} \cdot \frac{\partial g(r)}{\partial r} \hat{r} = 0 \quad (\text{Neuman sınır koşulu}) \quad (3.32)$$

Burada, $g(r)$ sınırlardaki elektrostatik potansiyeldir. Problemin iki boyutlu çözümünde kaynak $z = -\infty$ dan $z = +\infty$ 'a kadar uzanan sonsuz uzunlukta bir çizgi üzerinde varsayılır. P (kaynak noktası) noktasındaki birim yük sahibi kaynağın Q noktasında (gözlem noktası) yarattığı kuvvet alanı temel analitik çözüm $U(P, Q)$ ile ifade edilir.

Laplace denklemini sağlayan temel analitik çözüm aşağıdaki gibidir (Paris and Canas, 1997):

$$U(P, Q) = \frac{1}{2\pi} \ln\left(\frac{1}{r}\right) \quad (3.33)$$

Bu denklemde r , P ile Q arasındaki mesafedir (Şekil 3.6).



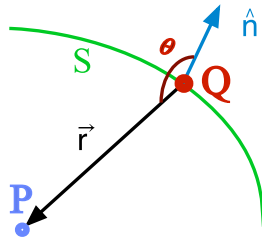
Şekil 3.6 Laplace denkleminin iki boyutlu problem için temel analitik çözümünün (Denklemler 3.33) grafiği.

Temel analitik çözümün yönelimsel türevi Laplace denklemini sağlar ve aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned}
 T(P, Q) &= \hat{n} \cdot \nabla U(P, Q) \\
 &= \hat{n} \cdot \frac{\partial U(P, Q)}{\partial r} \hat{r} = \hat{n} \cdot \frac{\partial U(P, Q)}{\partial r} \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} \\
 &= -\frac{1}{2\pi |\vec{r}|} \hat{n} \cdot \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} = -\frac{1}{2\pi} \frac{|\hat{n}| |\vec{r}| \cos(\theta)}{|\vec{r}|^2} \\
 &= -\frac{1}{2\pi} \frac{\cos(\theta)}{|\vec{r}|}
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

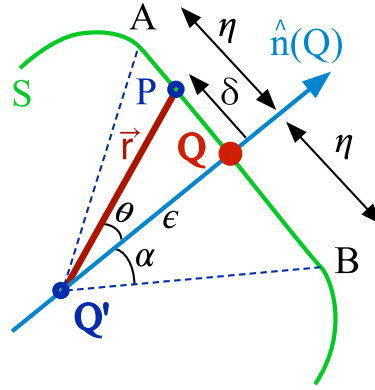
Burada θ açısı QP doğrusu ile sınırın dış normalinin \hat{n} yaptığı açıdır (Şekil 3.7). Dolaylı sınır elemanları yöntemi ile çözüm aşağıdaki integral formu ile bulunur:

$$u(Q) = \int_S U(P, Q) \mu(P) dS_P \tag{3.35}$$



Şekil 3.7 Temel analitik fonksiyonun notasyonu.

Kaynakların, yani elektrik yüklerin şiddetini veren $\mu(P)$ yoğunluk fonksiyonu etki alanı sınırı boyunca sürekli dağıtılmıştır. İki boyutlu problemde dS_p integralin yüzeydeki yay uzunluğunca alınacağını ifade eder. Alt indis P, Q noktası sabit kalırken integrasyon noktasının sınır boyunca ilerlediğini göstermektedir. $U(P,Q)$, P noktası dışında her yerde parçalı diferansiyel denklemi sağladığı için $u(Q)$ etki alanı içindeki her yerde parçalı diferansiyel denklemi sağlarken, sınırda sağlamamaktadır. Bu noktada ise sadece sınır koşulları sağlanmalıdır. İntegral gösterimi etki alanı içinde geçerli olsa da sınırlarda geçerli değildir, fakat çözüm hem etki alanının içinde hem de sınırlarda geçerli olmalıdır. Neuman sınır koşulunu sağlamak için S sınırı üzerindeki Q noktasına $u(Q)$ etki alanı içerisinden yaklaşırken limit değerlerin sınır koşullarına eşitlenmesi gerekir (Şekil 3.8).



Şekil 3.8 Q' noktası Q noktasına yaklaşırken AB boyunca alınan integralin limiti.

Neuman sınır koşullarının sağlanması için Q' noktası Q noktasına yaklaşırken $n(Q)$ yönündeki türev $\bar{t}(Q)$ ile verilen limit değere eşitlenmelidir. Fonksiyon $U(P,Q')$ sınırlandırılmış olduğundan integral altında türevi alınabilir:

$$\begin{aligned} \hat{n} \cdot \nabla u(Q) &= \int_S \hat{n} \cdot U(P, Q') \mu(P) dS_p \\ &= \int_S T(P, Q') \mu(P) dS_p \end{aligned} \quad (3.36)$$

ve bu durumda sınır koşulu aşağıdaki şekilde ifade edilmiştir.

$$\lim_{Q' \rightarrow Q} \frac{\partial u}{\partial n}(Q') = \bar{t}(Q) \quad (3.37)$$

$\frac{\partial u}{\partial n}(Q')$ ifadesinin Q' noktası S 'ye yaklaşip geçtiği andaki davranışını göstermek için Q' 'nin iki boyutlu alanın sınırının düz bir parçası olduğu ve bu düz sınır çizgisin üzerinde $\mu(P)$ yoğunluk fonksiyonunun da değişmediğini kabul edilebilir. Dolayısıyla, $\mu(P) = \mu(Q)$ eşitliği geçerli olacaktır. $S(Q, n)$ Şekil 3.8'deki düz AB sınırını ifade ederken ε QQ' çizgisini gösterir.

$$\frac{\partial u}{\partial n}(Q') = I_1(Q') + I_2(Q') \quad (3.38)$$

Burada

$$\begin{aligned} I_1(Q') &= \int_{S(Q, n)} T(P, Q') \mu(P) dS_p \\ I_2(Q') &= \int_{S-S(Q, n)} T(P, Q') \mu(P) dS_p \end{aligned} \quad (3.39)$$

Q' S 'e yaklaşip geçerken $I_2(Q')$ fonksiyonunu devamlı bir şekilde değiştirir. Q' etki alanı içerisinde iken $I_1(Q')$ aşağıdaki gibi olur:

$$I_1(Q') = \int_{-n}^n \frac{1}{2\pi} \frac{\cos(\theta)}{r} \mu(P) dS_p = \mu(Q) \int_{-\alpha}^{\alpha} \frac{1}{2\pi r} d\theta \quad (3.40)$$

Burada $\alpha = \tan^{-1}\left(\frac{n}{\varepsilon}\right)$ olduğu için,

$$I_1(Q') = \mu(Q) \frac{\alpha}{\pi} \quad (3.41)$$

Q' Q noktasına yaklaştıkça α değeri $\frac{\pi}{2}$ 'ye yaklaşmaktadır. Dolayısıyla, $I_1(Q')$ için aşağıdaki ifade elde edilir.

$$I_1(Q') = \frac{1}{2} \mu(Q) \quad (3.42)$$

Q' Q 'ya yaklaştıkça tüm P noktaları için $T(P, Q') = 0$ değerini alır dolayısıyla $I_1(Q') = 0$ olur.

$$\lim_{Q' \rightarrow Q} \frac{\partial u}{\partial n}(Q') = \int_S T(P, Q') \mu(P) dS_p + \frac{1}{2} \mu(Q) \quad (3.43)$$

Denklem (3.43)'deki sonuç Denklem (3.37)'de yerine konduğunda Neuman sınır koşulunun integral ifadesi aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\bar{t}(Q) = \int_S T(P, Q) \mu(P) dS_p + \frac{1}{2} \mu(Q) \quad (3.44)$$

Laplace denkleminin dolaylı sınır elemanları yöntemi ile çözümünün en basit uygulamasında S sınırı iki boyutlu düz çizgi ile tanımlanır ve bu eleman üzerindeki her yerde $\mu(Q)$ değeri sabittir. $\mu(Q)$ değerini hesaplamak için gerekli eş zamanlı denklemleri kurmak için Denklem (3.35)'deki Q noktası her elemanın ortasında konumlandırılır. N elemanı olan $S_1, S_2, S_3, \dots, S_N$ bir sistem için, eş zamanlı denklemler aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$\bar{t}(Q_i) = \frac{1}{2} \mu(Q_i) + \sum_{j=1}^N \Delta T_{i,j} \mu(Q_j) \quad (3.45)$$

burada

$$\Delta T_{i,j} = \int_{S_j} T(P_j, Q_i) dS_{p_j} \quad (3.46)$$

Denklem (3.45)'de Q_i noktası eleman ortalarında bulunduğu için, denklemin geçerliliği için gerekli olan düzgün yüzey koşulu sağlanır. Sınırlı etki alanında, eleman sayısı sonsuza yaklaştıkça denklem katsayılarından oluşan matris tekildir ve elemanlardan bir tanesinde

$u(Q)$ sıfır alınması gerekir. Sonsuzdaki integral ifade $u(Q) = \ln \frac{1}{r_o} \int_S \mu(P) dS_p$ şeklinde

yazılabilir. Bu denklemde r_o rasgele seçilmiş sıfırdan farklı bir referans noktasıdır. Dolayısıyla Neuman sınır koşulunun çözümü ve denklem katsayılarının matrisi eleman sayısı

sonsuzu gittiğinde tekil olmazlar. $\Delta T_{i,j}$ integralini analitik olarak almak mümkündür: elemanlar düz olduğundan S_i elemanı üzerindeki her yerde $T(P_j, Q_i) = 0$ olacaktır ve dolayısıyla $\Delta T_{i,j} = 0$ 'dır ve denklem katsayıları matrisindeki tüm köşegen elemanlar 0.5 olacaktır. Denklem katsayılarının matrisi boyutsuzdur ve dolayısıyla seçilecek birimlerden bağımsız olarak aynı değeri alırlar.

Şimdi pozitif x yönünde elektrik alan uygulanan Kuantum Nokta problemimize yoğunlaşalım ve çözümü iki parçalı olarak hesaplamaya çalışalım. İlk parça hesabın yapılacağı yüzey olduğu yerde bulunmasa idi uygulanan elektrik alan nedeniyle burada oluşacak olan elektrostatik potansiyeldir. İkinci parça ise ilk parça çözümüne sınır koşullarını sağlamak için eklenecek olan perturbasyonun hesabıdır.

$$\mathcal{G}(r) = \mathcal{G}^I(r) + \mathcal{G}^{II}(r) \quad (3.47)$$

Denklem (3.32)'de ifade edilen Neuman sınır koşulu bize sınır boyunca elektrik alanın yüzey normali doğrultusundaki bileşeninin sıfır olduğunu ifade eder.

$$E(Q) = -grad(\mathcal{G}(r)) = -grad(\mathcal{G}^I(r)) - grad(\mathcal{G}^{II}(r)) = E^I(Q) + E^{II}(Q) = 0 \quad (3.48)$$

Eğer yüzey bulunmasaydı aynı yerdeki elektrik alan nedeniyle oluşan elektrostatik potansiyel, yüzeyin normalinin uygulanan elektrik alan yönü olan x eksenine ile yaptığı açı ϕ ile orantılı olarak aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\mathcal{G}^I(Q) = -E_0 x = -E_0 \vec{r} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} = -E_0 r \cos(\phi) \quad (3.49)$$

Elektrik alanın yüzey normali yönündeki bileşeni aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$E^I(Q) = -grad(\mathcal{G}^I(Q)) = -\hat{n} \cdot \nabla \mathcal{G}^I(Q) = -E_0 \cos(\phi) \quad (3.50)$$

Bu sonucu Denklem (3.48) ile karşılaştırarak Neuman sınır koşulunu sağlamak için yüzeye yerleştirilmesi gereken hayali yükler hesaplanır:

$$E^H(Q) = -E^I(Q) = E_0 \cos(\phi) \quad (3.51)$$

Dolayısıyla Q_i noktasında sınır koşulunu sağlamak için Denklem (3.45)'den yararlanılarak aşağıdaki eşitlik yazılabilir:

$$E^I(Q_i) = \frac{1}{2} \mu(Q_i) + \sum_{j=1}^N \Delta T_{i,j} \mu(Q_j) \quad (3.52)$$

Burada N yük sayısını belirtirken, $\Delta T_{i,j} = \Delta T(P_j, Q_i)$ 'dir ve Denklem (3.46)'da verilen integral ile hesaplanır. Buradan sınır koşullarını sağlayan yük dağılımı hesaplandıktan sonra $g^H(Q)$ hesaplanır.

$$g^H(Q) = \sum_{j=1}^N \Delta U_{i,j} \mu(Q_j) \quad (3.53)$$

Burada $\Delta U_{i,j} = \Delta U(P_j, Q_i)$ 'dir ve aşağıdaki integral yardımıyla hesaplanır:

$$\Delta U_{i,j} = \int_S \Delta U(P_j, Q_i) dS_{P_j} \quad (3.54)$$

Denklem (3.46) ve Denklem (3.54)'de tanımlanan integralleri yamuk elamanlar (trepozoidal) kuralı ile sayısal olarak hesaplamaktayız.

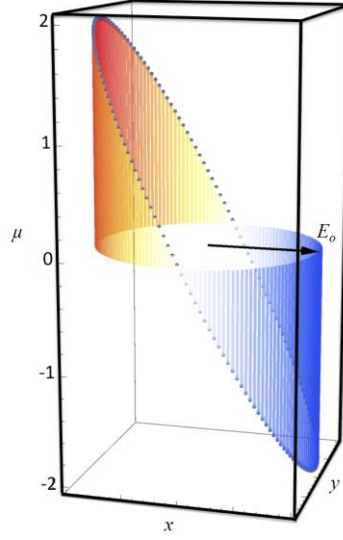
$\Delta T_{i,j}$ matrisi ve $E_i^I = E_i^I(Q_i)$ vektörü yukarıda anlatıldığı üzere oluşturulduktan sonra, bilinmeyen hayali yükleri μ_i bulmak için aşağıdaki eş zamanlı denklemler sistemi çözülür.

$$\Delta T_{i,j} \cdot \mu_j = E_i^I \quad (3.55)$$

yukarıdaki sistemin çözümü için Gauss-Jordan eliminasyon yöntemi kullanılmıştır ve bu şekilde sistemdeki yük dağılımı ve elektrik potansiyeller hesaplanmıştır.

Yazılan programın doğru çalışıp çalışmadığını kontrol etmek için öncelikle analitik çözümünü bilinen dairesel bir sistem kullanarak test edilmiştir:

Dairesel bir kuntum nokta çevresinde yük dağılımının analitik çözümü $\mu(\phi) = -2\cos(\phi)$ ifadesi ile verilir. Bu durumda, Sınır Elemanları Yöntemi ile yapmış olduğumuz yük hesabı analitik çözüm ile karşılaştırılmış ve dairesel sistem sınırlarındaki yükler Şekil 3.9'da verilmiştir. Her iki sonucun da üst üste çakıştığı ve hata farkının 60 düğüm noktası kullanılması durumunda % 0.1 'in altına indiği belirlenmiştir.



Şekil 3.9 Dairesel sistem için analitik (noktalar) ve sayısal çözümün (renkli çubuklar) karşılaştırılması.

3.2.5 Düğüm hızlarının hesaplanması ve sistemin zamanda ilerlemesi

Denklem 3.1'de tanımlanan kısmi diferansiyel denklem Euler'in sonlu farklar yöntemi kullanılarak çözülmektedir. Bu yöntem (Mathews, 1992) yüzey düğüm noktalarının hızlarını belirleyebileceğimiz Denklem 3.1'in zamana göre integralini almak ve yüzey evrilmesini incelemek için kullanılmıştır. Zaman adımı maksimum yüzey hızı kullanılarak hesaplanmaktadır. Böylece yüzeyin evrimi sırasında yer değiştirmesi zamanda atılan her adım için sabit kalmaktadır. Buna adapte olabilen zaman adımı oto kontrol mekanizması denmektedir ve bu mekanizma eğrilik terimi ile bağlantılı olarak kendini yenileme etkisi ile birleştirilerek, uzun süreli nümerik kararlılık sağlanmıştır.

3.2.6 Sistemin yeniden yapılandırılması

Sistem şeklinin zaman içerisinde değişmesi sonucu ortaya çıkacak çok uzun ve çok kısa elemanlar devamlı bir şekilde kontrol edilerek sistem düğümleri gerektiği anda yeniden

4. BULGULAR

Elektrik ve gerilim alanlarını içeren yönetici diferansiyel denklemler Bölüm 3'te anlatıldığı şekilde sayısal olarak çözülmüş ve tüm sistemin farklı kuvvet alanları altında simülasyonunu yapmamızı sağlayacak program geliştirilmiştir.

Gerinim, sisteme hem içsel hem de dışsal gerinimler olarak etki edebilir ve sistem üzerindeki toplam gerinimin şiddeti simülasyonlarda Σ parametresi ile ifade edilmektedir. Sistem üzerindeki içsel gerinimler altlık ve depozit edilen malzeme arasındaki kafes parametrelerinin uyumsuzluğundan ve/veya ısıl genleşme katsayılarının (thermal expansion coefficient) farklı olmasından kaynaklanır. Dış kaynaklı gerinimler ise altlık malzemeye isteğe bağlı basma (compression) ve çekme (tension) kuvvetlerinin uygulanmasıyla oluşur. Elektrik alan şiddeti ise χ parametresi ile ifade edilmektedir.

Bu bölümde bu program ile yapılan simülasyonlar ve elde edilen bulgular incelenmiştir. Öncelikle yön-bağımsız (izotropik) sistemlerin daha sonra da kristal etkilerini gözlemleyebileceğimiz yön-bağımlı (anizotropik) sistemlerin elektrik ve gerinim alanları altındaki davranışları ve denge şekilleri irdelenecektir.

4.1 Yön-Bağımsız (İzotropik) Sistemler

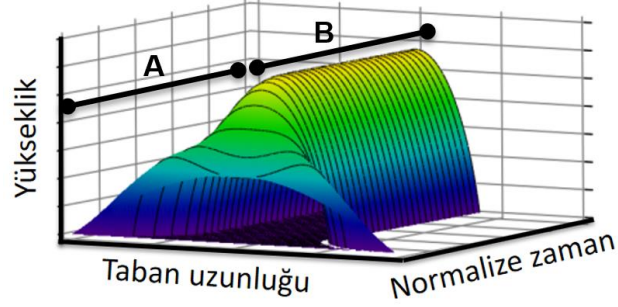
Burada, öncelikle malzeme özelliklerinin izotropik yani yönden bağımsız olduğu kabul edilerek sistemin davranışı elektrik ve gerilim alanları altında incelenmiştir.

4.1.1 Damlacıkların elektrik ve gerilim alanları altında simülasyonları

Bu bölümde, tek bir adacığın elektrik ve gerinim alanları altında morfolojik değişiminin modellenmesi üzerine çalışılmıştır. Burada amaç, başlangıçta yüzeyde çekirdeklenen bir kuantum noktacığının zamanla (elektrik ve gerinim alanları ile kapiler etkiler altında) yüzey sürüklenme difüzyonu ile nasıl şekil değiştirdiğinin ve nasıl bir denge morfolojisine sahip olduğunun bulunmasıdır.

Simülasyon sonuçlarının daha kolay analiz edilebilmesi için Şekil 4.1'de örnek bir simülasyon çıktısı verilmiştir. Bu şekilde başlangıçta yüzeyde oluşturulmuş bir damlacığın zamanla değişimi verilmektedir. Zamanda ilerledikçe (A zaman aralığı) şekil değişimi sonucunda tek bir adacık oluşmuş ve dengeye gelmiştir. Sistemin dengeye geldiği adacık morfolojisinin

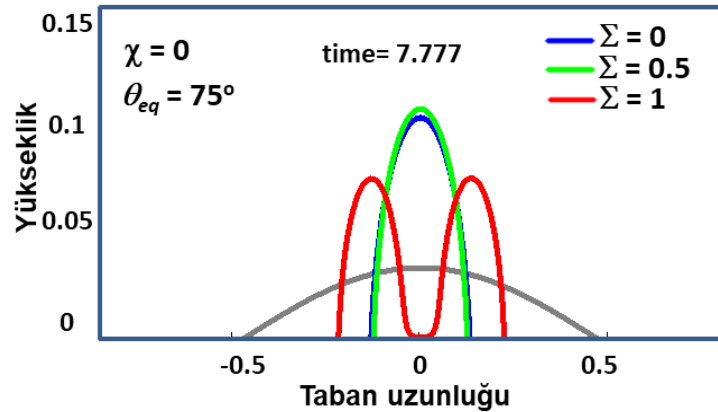
belirli bir süre sonra sabitlenerek zamanla değişmemesinden (B zaman aralığı) anlaşılmaktadır.



Şekil 4.1 Örnek simülasyon: başlangıçta yüzeyde oluşturulmuş bir damlacığın zamanla değişerek dengeye ulaşması.

Bu noktadan sonra farklı malzeme ve kuvvet alanları altında elde edilen kuantum nokta denge yapıları incelenecektir.

Tasarım açısından elde edilen kuantum noktaların en-boy oranları (aspect ratio) ve tepe eğrilikleri büyük önem taşımaktadır. Bu iki parametrenin ayarlanması kuantum noktaların enerji bant yapılarının kontrolünü sağlar. Farklı gerilim (stress) alanları altında kuantum noktaların denge morfolojileri öncelikle elektrik alan olmadan hesaplanmış ve Şekil 4.2'de verilmiştir. Burada sistemi kontrol eden kuvvetler sadece kapiler kuvvetler, ıslatma potansiyeli ve üçlü kavşaklardaki (uçlardaki) ıslatma açılarıdır. Aşağıdaki simülasyonda ıslatma açısı 75° olacak şekilde seçilmiştir.



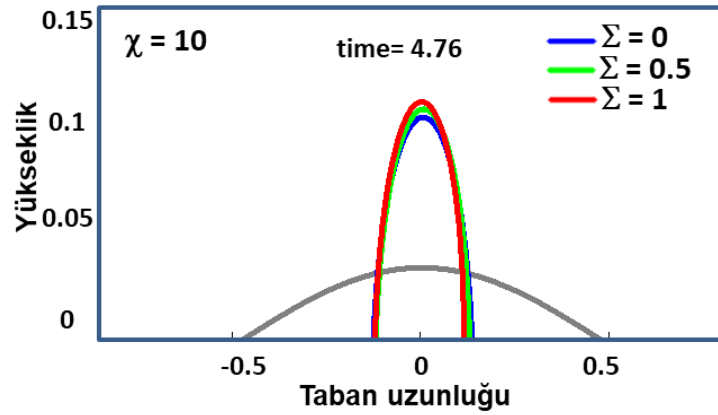
Şekil 4.2 Farklı gerilim kuvvetleri altında elde edilen kuantum noktaların denge morfolojileri.

Şekil 4.2'den de görülebileceği üzere kuantum noktaların denge halinde en-boy oranları arttırılan gerilim kuvvetleri ile yükseltilebilmektedir. Ancak bu artırım belirli bir eşik değerinden sonra en-boy oranlarını daha fazla arttıramamakta ve kuantum nokta toplam enerjisini küçültebilmek için ikiye ayrılarak (fragmentation) daha küçük boyutlu ve daha düşük en-boy

oranlarına sahip ikili bir sisteme dönüşmektedir. Gerilimdeki artış ile sistemdeki fragmentasyonunda arttığı gözlenmektedir. Bu konu aşağıda detaylı olarak irdelenecektir.

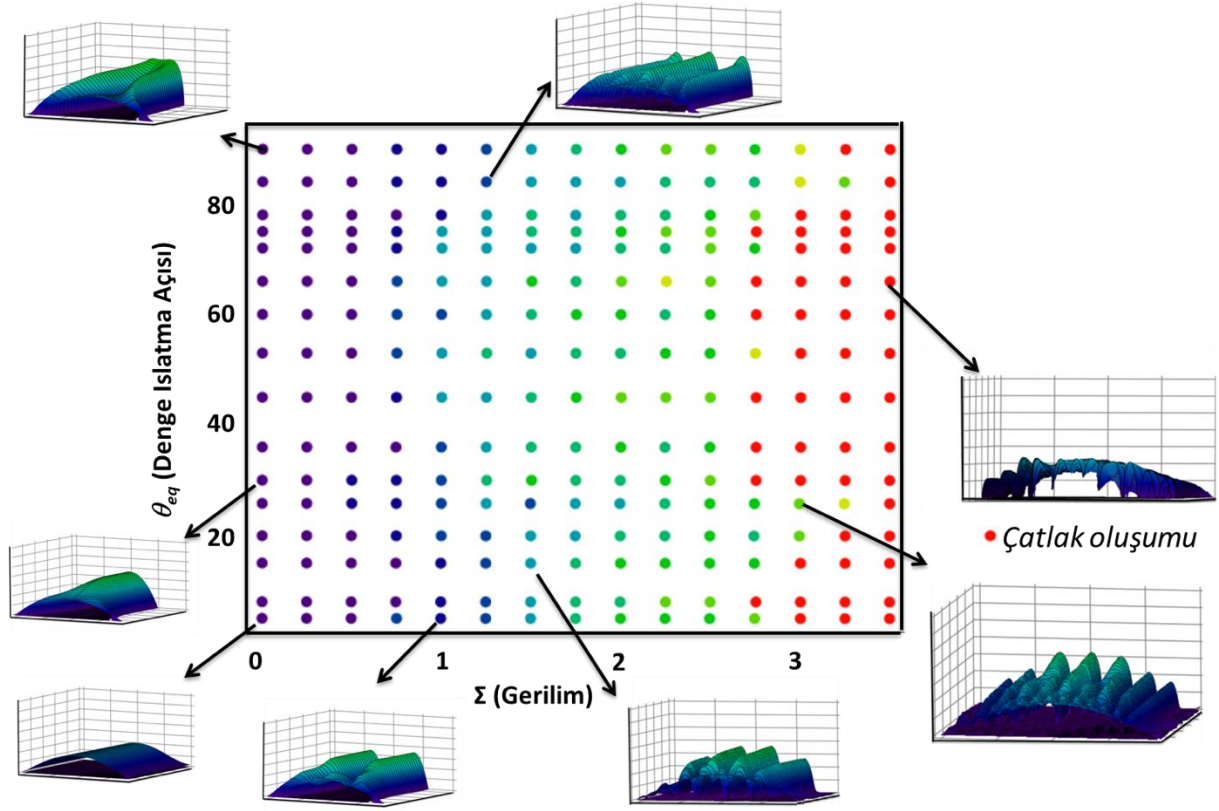
Elektrik alanın etkisini incelemek için geliştirdiğimiz programda tanımlanan farklı χ parametreleri ile çalıştık. χ sisteme uygulanan elektrik alan altında hareket eden elektronların malzeme içerisindeki atomlara momentum transferi sonucunda (elektrogöç, electromigration) hareketini kontrol eder. Bu sistemde uygulanan elektrik alanın yönü $+x$ yönünde olup elektronlar ve dolayısı ile elektronlar tarafından sürüklenen yüzey atomları $-x$ yönünde hareket etmektedir. Şekil 4.3'de şekil 4.2'de çalışılan sistemlere elektrik alan uygulanmış ve modellenmiştir.

Elektrik alanın etkileri Şekil 4.3 ile Şekil 4.2 karşılaştırılarak anlaşılabilir. Şekil 4.3'te sistemi kontrol eden kuvvetlere elektrik alan da eklenmiştir. Sonuç olarak sistemin özellikle $\Sigma = 1$ değerinde ikiye ayrılma durumunun ortadan kalktığını gözlenmektedir. Ayrıca adacıklarda daha yüksek en-boy oranları elde edilmiştir.



Şekil 4.3 Elektrik alan ($\chi=10$) ve farklı gerilim kuvvetleri altında elde edilen kuantum noktalarının denge morfolojileri.

Sistem görüldüğü üzere çok karmaşık olup farklı gerilim ve elektrik alan değerlerinde farklı davranmakta ve bu karmaşıklık sistemdeki ıslatma açılarının da dikkate alınması ile daha da artmaktadır. Bu karmaşıklığı incelemek için öncelikle, farklı ıslatma açıları ve gerilim altında yapılan deneyler toplu olarak Şekil 4.4'de sunulmuştur.

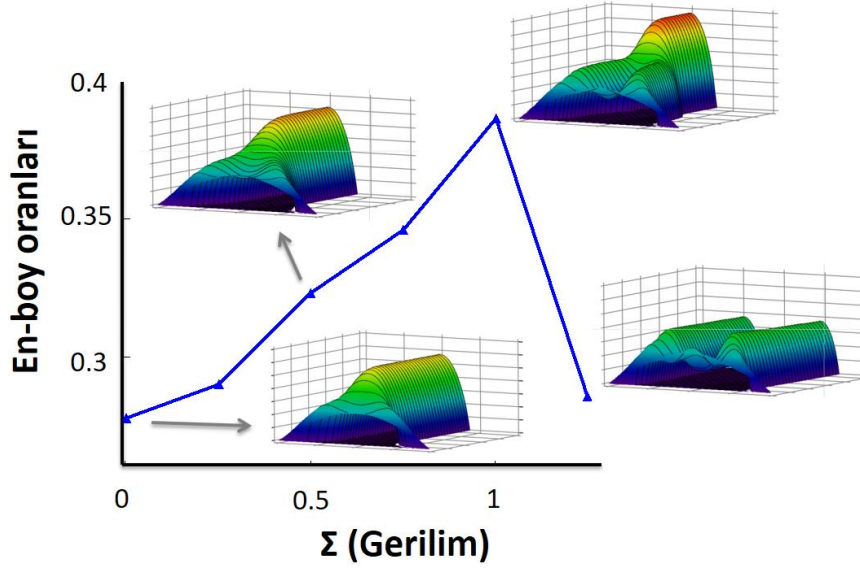


Şekil 4.4 Farklı gerilim kuvvetleri ve ıslatma açıları altında elde edilen kuantum noktaların denge morfolojileri. Nokta renkleri artan sayıda parçalanmayı (fragmentation) göstermektedir. Kırmızıya noktalar ise çok yüksek gerilim altında adacıkta çatlak oluşumunu ifade etmektedir.

Şekil 4.4'de gerilim arttıkça adacıkların daha fazla sayıda küçük adacığa parçalandığı gözlenmektedir. Düşük gerilim değerlerinde tek adacık oluşurken adacığın en-boy oranları ıslatma açısınca kontrol edilmektedir. Gerilim değerleri arttıkça daha fazla sayıda küçük adacığa parçalanma olmakta çok yüksek gerilim değerlerinde ise çatlak oluşumu tanımlanmaktadır. Bu durum simülasyonlarımızda adacığın parçalanması ile oluşan küçük adacıkların birleşme noktalarının altlık ile kesişmesi ile kendini göstermektedir.

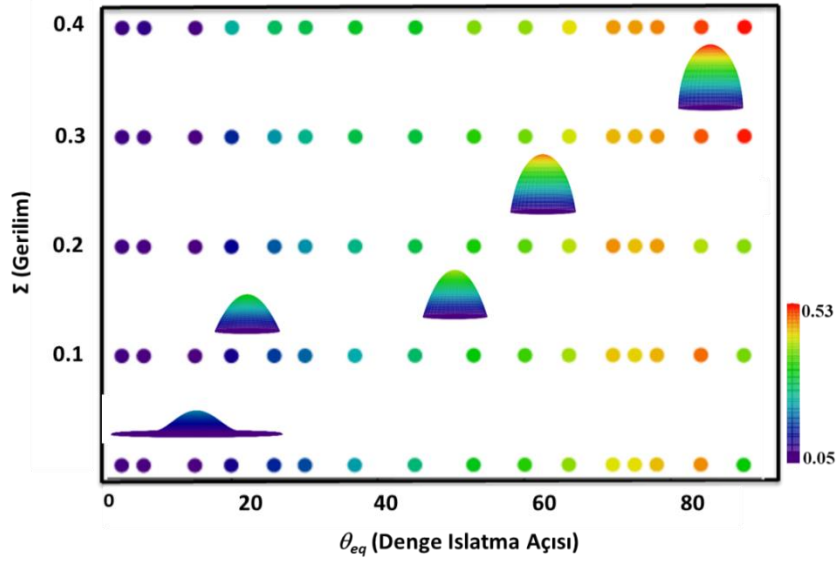
Farklı gerilim (stress) alanları altında en-boy oranlarının değişimi Şekil 4.5'te ıslatma açısı 75° için verilmiştir. Şekil 4.5'den de görülebileceği üzere kuantum noktaların denge halinde en-boy oranları arttırılan gerilim kuvvetleri ile yükseltilebilmektedir. Ancak bu arttırım belirli bir eşik değerinden (Σ 1-1.25 civarında) sonra en-boy oranlarını daha fazla arttıramamakta ve kuantum nokta toplam enerjisini küçültebilmek için ikiye ayrılarak (fragmentation) daha küçük boyutlu ve daha düşük en-boy oranlarına sahip ikili bir sisteme dönüşmektedir. Buna ek olarak kuantum noktaların tepe noktalarının eğriliği (curvature) de stress ile kontrol edilebilmektedir. Ancak bu kontrol sisteme kristal yapıları (difüzyon ve yüzey enerjilerinin

yönselliği) eklediğimizde gerçekçi bir şekilde ortaya çıkmaktadır. Bu konu ilerleyen bölümlerde detaylı bir şekilde incelenecektir.



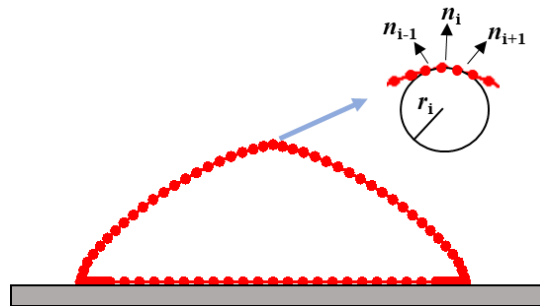
Şekil 4.5 Farklı gerilim kuvvetleri altında elde edilen kuantum noktalarının en-boy oranları.

Şekil 4.4'de tek adacık oluşum bölgesi (mor noktalar) genelde gerilim değerlerinin 0.5'ten küçük olduğu bölgelere denk gelmektedir. Burada oluşan denge şekillerinde adacık morfolojilerinin en-boy oranları hesaplandığında Şekil 4.6 elde edilmiştir. Bu denge ıslatma açısı-gerilim diyagramında hem gerilimin hem de ıslatma açısının etkileri gözlenebilmektedir: KN'lerin en-boy oranları artan denge ıslatma açısı ve gerilim ile artmaktadır. En-boy oranlarına ek olarak KN'lerin morfolojilerindeki değişim de görülmektedir. Denge açılarının ve gerilimin çok küçük olduğu durumlarda elde edilen KN'lerde ıslatma tabakası varken (KN etrafındaki ince film tabaka), denge ıslatma açısı ve gerilim artmaya başladığında bu katman KN üzerine toplanarak KN'leri en-boy oranını arttırmaktadır. Bu parametrelerin değişimiyle grafikte kubbe ve çan gibi farklı şekillerde KN'ler görülmektedir. Bu şekil farklılıkları, KN'lerin enerji düzeylerini kontrol etmektedir. Yüksek en-boy oranına ve yüksek tepe eğriliğine sahip kuantum noktalar elde edebilmek için hem yüksek gerilim değerleri (parçalanma için gereken gerilim değerini aşmayacak şekilde) hem de yüksek ıslatma açılara sahip altlık/damlacık sistemleri seçilmelidir.



Şekil 4.6 Farklı gerilim kuvvetleri ve ıslatma açıları altında elde edilen kuantum noktaların en-boy oranlarını veren diyagram.

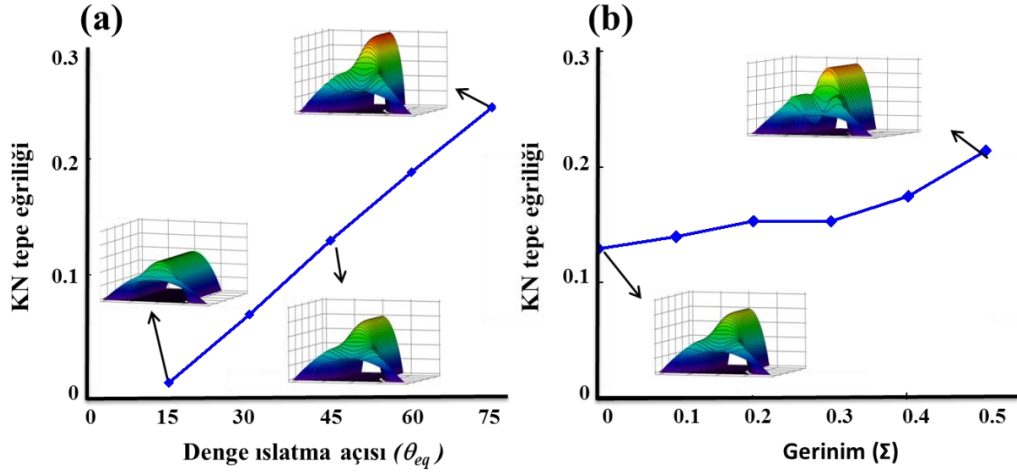
Nano küre, nano tüp ve KN gibi farklı nanoyapılar üzerinde yapılan çalışmalar sonucunda kuantum nokta tepe eğriliklerinin (curvature), enerji seviyelerinde değişikliklere sebep olarak elektronik ve manyetik özellikleri etkilediği gösterilmiştir (Entin ve Magarill, 2001; Bulaev vd., 2000; 2004; Huang vd., 2012). Bu sebeple KN'lerin tepe eğriliklerinin ayarlanabilmesi enerji seviyelerinin kontrolünde önemli hale gelmektedir. Bu kısımda, yapılan deneyler sonucunda, KN tepe eğriliklerinin nasıl kontrol edileceği ile ilgili elde edilen sonuçlar paylaşılacaktır. Öncelikle KN'lerin tepe eğrilikleri şu şekilde hesaplanmıştır: KN'nin tepe noktasında (KN yüksekliğinin en fazla olduğu düğüm noktası n_i) belirlenir. Bu düğüm noktası ortada kalacak şekilde, bir önceki n_{i-1} ve bir sonraki n_{i+1} düğüm noktaları da kullanılarak bu üç noktadan bir çember geçirilir ve Bölüm 3.2.2'de anlatılan yöntem ile çemberin eğrilik yarıçapı r ve eğriliği, r^{-1} 'dir (Şekil 4.7).



Şekil 4.7 KN sistemi ve tepe eğriliklerinin hesaplandığı düğüm noktaları.

Denge ıslatma açısının ve gerilim kuvvetlerinin KN'lerin en-boy oranlarını ve birim alandaki KN sayısını kontrol ettiği, daha önce elde edilen sonuçlardan bilindiği için, bu parametrelerin

KN'lerin tepe eğriliklerini de etkileyecekleri düşünülerek bu etkiler araştırılmıştır. Bunun için öncelikle farklı denge ıslatma açılarında sahip sistemlerde tepe eğrilikleri hesaplanmıştır (Şekil 4.8a). Daha sonra incelenen bu sistemde KN ıslatma açılarından bir tanesi $\theta_{eq} = 45^\circ$ seçilerek farklı gerinim kuvvetleri uygulanarak modellenmiştir (Şekil 4.8b).



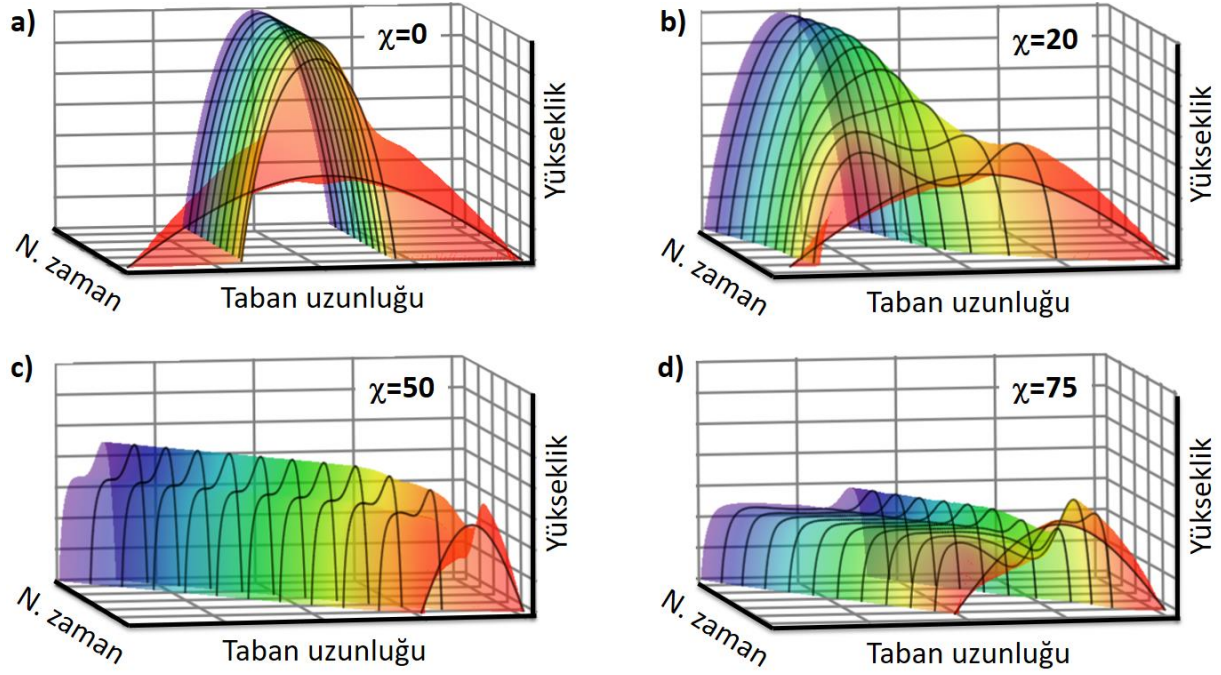
Şekil 4.8 Denge ıslatma açılarının (a) ve gerinim kuvvetlerinin (b) KN tepe eğriliklerine etkisi.

Şekil 4.8'de KN tepe eğriliklerine denge açılarının (a) ve gerinim kuvvetlerinin (b) etkisini gösteren grafikler verilmiştir. (a) incelendiğinde, en düşük tepe eğriliklerinin denge ıslatma açısının $\theta_{eq} = 15^\circ$ olduğu durumda görülürken, denge ıslatma açısının artışıyla, tepe eğrilikleri artmaktadır. (b)'de $\theta_{eq} = 45^\circ$ 'de gerinim kuvvetlerinin uygulanmasıyla da tepe eğriliklerinin arttığı görülmektedir. Bu bilgiler ile KN cihaz uygulamalarında istenilen KN tepe eğriliklerine sahip sistemlerin denge ıslatma açıları ve gerinim kuvvetlerinin kontrol edilmesiyle elde edilebileceğini göstermiştir.

Elektrik alanın adacık morfolojisine etkisini daha detaylı incelemek için sistem giderek daha yüksek elektrik alanlara maruz bırakılmıştır. Bu deneylerde kullanılan χ parametresi sisteme uygulanan elektrik alan altında hareket eden elektronların malzeme içerisindeki atomlara momentum transferi sonucunda (elektrogöç, electromigration) hareketini kontrol eder. Bu sistemde uygulanan elektrik alanın yönü $+x$ yönünde olup elektronlar ve dolayısı ile elektronlar tarafından sürüklenen yüzey atomları $-x$ yönünde hareket etmektedir.

Şekil 4.9'da sistemde hiçbir dışsal ve içsel gerinim (applied or residual stresses) olmadan sistemin elektrik alan altında hareketi incelenmiştir. Elektrik alanın etkileri Şekil 4.9a referans

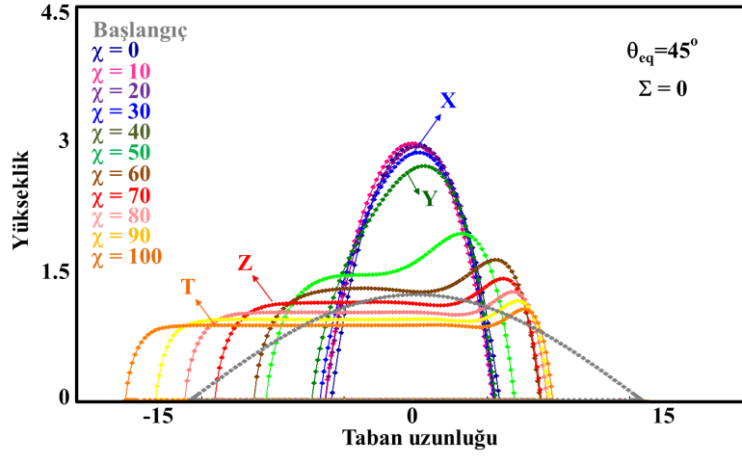
alınarak daha iyi anlaşılabilir. Şekil 4.9a'da sistemi kontrol eden kuvvetler sadece kapiler kuvvetler, ıslatma potansiyeli ve uçlu kavşaklardaki (uçlardaki) ıslatma açılarıdır.



Şekil 4.9 Elektrik alan altında başlangıç damlacığının zamanla (kırmızıdan – mora doğru) ulaştığı denge şekilleri: $\Sigma = 0$, $\theta_{eq} = 45^\circ$.

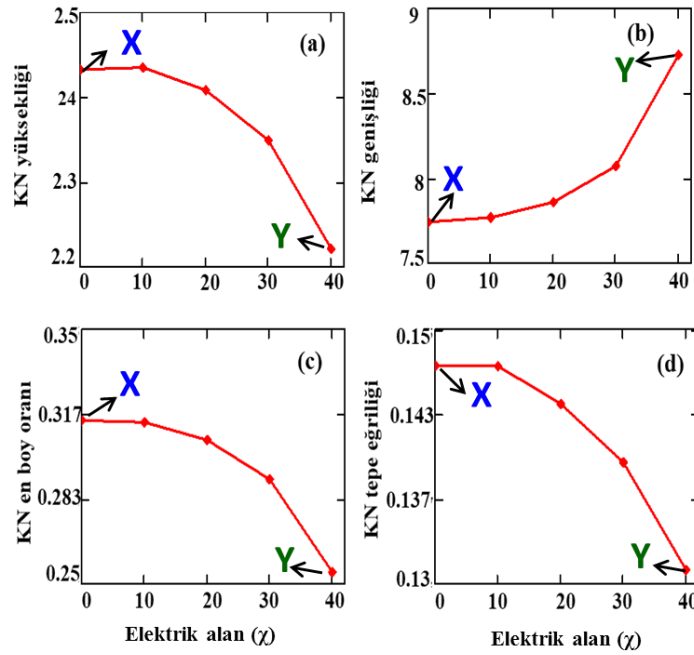
Şekil 4.9b,c ve d de ise sistem giderek daha yüksek elektrik alanlara maruz bırakılmıştır. Elektrik alan altında sistemin hem şekil değiştirdiği hem de altlık üzerinde elektrik alana ters yönde hareket ettiği gözlenmiştir. Elektrik alanın denge şekli üzerindeki etkilerini daha iyi inceleyebilmek için denge morfolojileri Şekil 4.10'da merkezleri ortalanarak aynı grafik üzerinde verilmiştir.

Şekil 4.10 incelendiği zaman, orta şiddetteki ($20 < \chi < 40$) parametreleri ile asimetric bir tarafa yatık veya iki tepeli, biri diğerinden daha uzun kuantum nokta sistemleri üretilebileceği görülmektedir. Ayrıca yüksek elektrik alanlarının başlangıçtaki damlacığı kuantum noktalarına dönüştürmek yerine, film şeklinde altlık yüzeyine yaydığını gözlemliyoruz. Bu sonuç, 2017 yılında Du ve Maroudas (2017) tarafından dışarıdan uygulanan elektrik alanın yüzey pürüzlülüğünü azaltabileceği gözlemi ile uyumludur. Bu sonuç bize hem kuantum noktaların şekillerinin elektrik alan uygulayarak kontrol edilebileceğini hem de elektronik cihaz performanslarında problemler yaratmakta olan yüzey pürüzlülüğünün kontrol altına alınabileceğini göstermektedir.



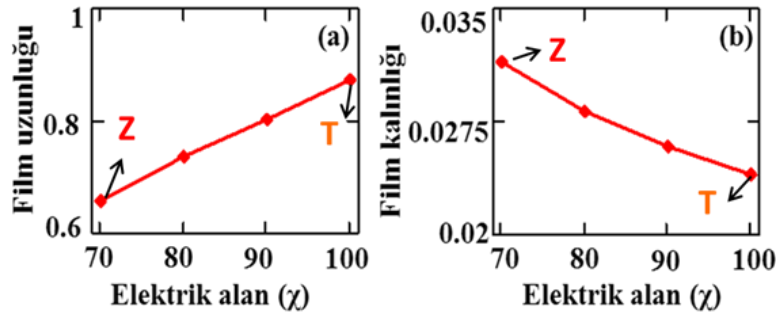
Şekil 4.10 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri: $\Sigma = 0$, $\theta_{eq} = 45^\circ$.

Şekil 4.10'da KN'lerin $\chi = 50$ değerine kadar KN olarak kaldığını, bu değerden sonra elektrik alan şiddetinin daha fazla artırılmasıyla film şeklinde yayıldığı görülmektedir. Bu sistemde kritik değer, KN'lerden film morfolojisine geçiş için eşik değerini ifade etmektedir. Kritik değere ulaşılan kadar elektrik alanın KN'ler üzerindeki etkilerini anlamak için KN'lerin yükseklik, genişlik, en boy ve tepe eğriliği değerlerinin değişimi araştırılmıştır. Bunun sebebi, bu parametrelerin KN'lerin enerji aralıklarının kontrolünü sağlamalarıdır. Elde edilen sonuçlar Şekil 4.11'te verilmiştir.



Şekil 4.11 (a) KN tepe yüksekliğinin, (b) KN genişliğinin, (c) KN en-boy oranlarının (d) KN tepe eğriliğinin elektrik alan ile değişimleri ($\Sigma = 0$, $\theta_{eq} = 45^\circ$).

Başlangıç morfolojisinin KN'ye dönüştüğü elektrik alan bölgesinde ($\chi < 50$), elektrik alandaki artışın hem oluşan KN'nin en-boy oranını hem de tepe eğriliğini azalttığı gözlenmiştir. Burada sistemin izotropik olduğu unutulmamalıdır. Elektrik alan şiddeti artırıldığında ise sistemin, film oluşturma eğiliminde olduğu görülmektedir. Oluşan filmin uzunluğu ve kalınlığı uygulanan elektrik alan şiddetine göre değişmektedir. Bunu gösteren grafik aşağıda verilmiştir. İnce filmlerde yüzey pürüzlülüğünün azaltılması elektronik cihaz performanslarını önemli ölçüde etkilemektedir. Bu sebeple, filmlerin kalınlık ve uzunluklarının uygulanan elektrik alan ile kontrol edilebilirliği araştırılarak gösterilmiştir (Şekil 4.12).

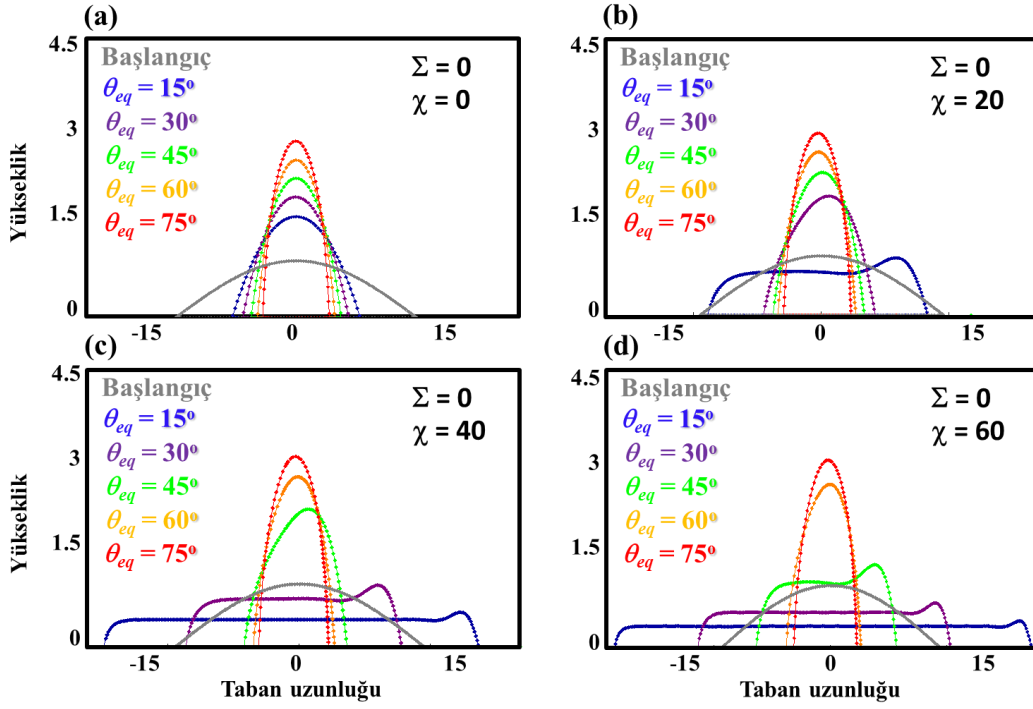


Şekil 4.12 Filmin uzunluğunun (a) ve kalınlığının (b) elektrik alan ile değişimi.

Şekil 4.12'de uygulanan elektrik alan altında oluşan filmin elektrik alan şiddeti artırıldığında uzunluğunun arttığı, kalınlığının ise azaldığı görülmektedir. Bu sonuçlar bize hem kuantum noktaların şekillerinin elektrik alan uygulayarak kontrol edilebileceğini hem de elektronik cihaz performanslarında problemler yaratmakta olan yüzey pürüzlülüğünün filmin kalınlık ve uzunluğu ayarlanarak kontrol altına alınabileceğini göstermektedir.

Yön-bağımsız sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve denge ıslatma açısı ile kontrolü

Denge ıslatma açısı, KN morfolojilerinin kontrol edilmesinde önemli bir parametredir, ve KN'lerin yükseklik, genişlik, en-boy oranları ve tepe eğriliklerini kontrol etmektedir. Denge açılarının uygulanan elektrik alan altında KN morfolojilerini nasıl etkilediğini anlamak için farklı denge açıları altında sisteme elektrik alan uygulanmış Şekil 4.13'deki sonuçlar elde edilmiştir.

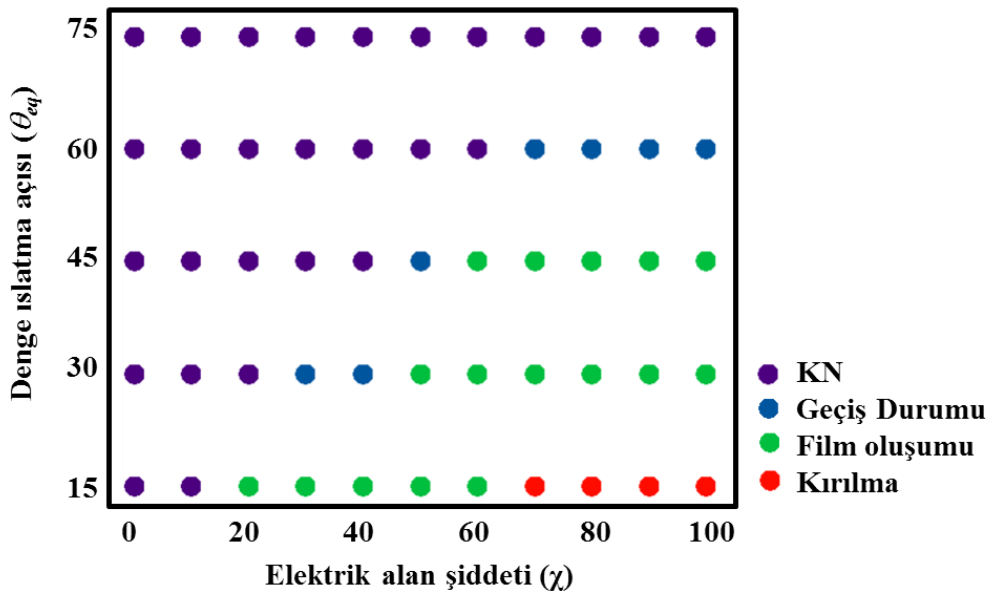


Şekil 4.13 Farklı denge açıları için gerinimsiz durumda KN morfolojilerinin elektrik alan ile değişimi.

Şekil 4.13'de gerinimsiz ortamda, farklı denge ıslatma açlarına sahip sistemlerde, artan elektrik alan şiddeti $\chi = 0$ (a), $\chi = 20$ (b), $\chi = 40$ (c), $\chi = 60$ (d) ile elde edilen morfoloji değişimleri verilmiştir. (a)'da, $\chi = 0$ iken, denge açılarının KN'lerin şekillerini, en-boy oranları ile tepe eğriliklerini kontrol ettiği daha önce de belirtildiği gibi görülmektedir. Elektrik alan sisteme uygulanmaya başladığında ise hem oluşan KN'ler de simetri bozulumu hem de KN-film geçişinin değişimi gözlenmiştir. Düşük elektrik alan şiddetinde, $\chi = 20$, değişen KN morfolojilerinde, sadece düşük denge ıslatma açısına sahip sistemlerde ($\theta_{eq} = 15^\circ$), KN'den filme geçiş olmaktadır. Elektrik alan şiddeti arttırıldıkça KN'den filme geçiş daha yüksek ıslatma açlarına sahip sistemlerde de gözlenmektedir. Örneğin, $\chi = 40$ 'da $\theta_{eq} = 30^\circ$ 'de (c) ve $\chi = 60$ 'da ise $\theta_{eq} = 45^\circ$ (d) film oluşumu gözlemlenmiştir. Bu aynı zamanda belirli bir elektrik alan altında, yüzey pürüzlülüğünün denge ıslatma açısıyla kontrol edilebileceğini de ortaya çıkmaktadır. $\theta_{eq} = 15^\circ$ 'de oluşan film (b), (c), ve (d)'de incelendiğinde, filmin kalınlığının artan elektrik alan ile azaldığını, uzunluğunun da arttığı gözlemlenmiştir. Bu sonuç literatürde, Du ve Maroudas (2017)'in dışarıdan uygulanan elektrik alanın yüzey pürüzlülüğünü azaltacağını öne süren çalışmalarını destekler niteliktedir. Buna göre, eğer yüzey pürüzlülüğünün azaltılması amaçlanıyorsa, düşük denge ıslatma açlarına sahip altlık/adacık malzemeleri seçilerek yüzey pürüzlülüğünün kontrol edilebileceği gösterilmiştir.

Burada aynı zamanda oluşan filmin özelliklerinin kontrol edilmesi konusunda, denge açılarının da etkisi olduğu görülmektedir.

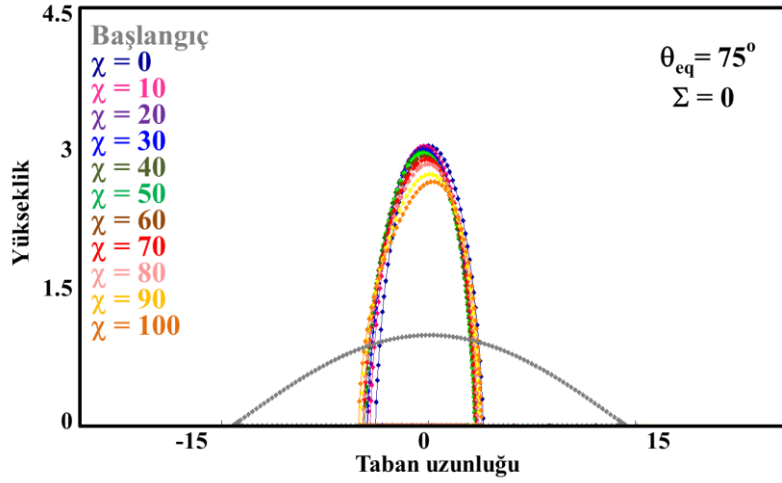
Farklı elektrik alan ve denge ıslatma açısı değerlerinin KN morfolojilerindeki etkilerinin daha net anlaşılabilmesi için, Şekil 4.13 deneyleri genişletilerek, oluşan KN, film ve KN-film arası geçiş fazlarını da içine alan morfolojileri gösteren, bir faz diyagramı haline getirilmiştir (Şekil 4.14). Bu faz diyagramındaki renkler farklı fazları göstermektedir; mor ile gösterilen KN, mavi ile gösterilen KN-film arası geçiş, yeşil ile gösterilen film ve son olarak kırmızı ile gösterilen ise filmde çatlakların oluştuğu morfolojileri ifade etmektedir.



Şekil 4.14 KN, ara faz geçişi, film, bozulma morfoloji fazlarını gösteren denge ıslatma açısı- elektrik alan faz diyagramı ($\chi = 0$).

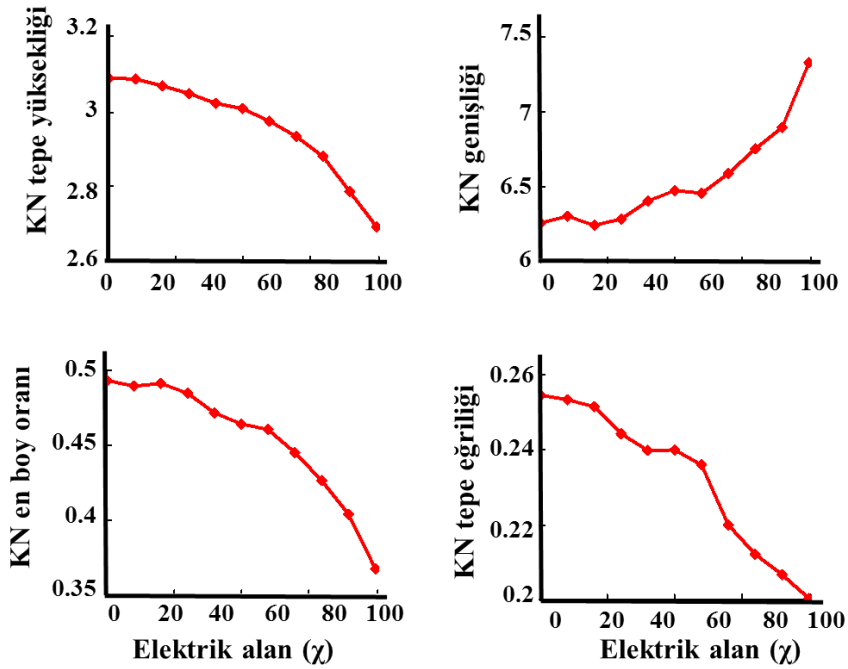
Bu diyagram KN-ince film geçişleri hakkında bilgi vererek, teknolojik olarak KN veya film morfolojilerinden hangisi elde edilmek isteniyorsa, denge ıslatma açısı ve uygulanması gereken elektrik alan değerlerini söylemekte ve malzeme bozunumu için kritik değerleri söyleyerek üretim sırasında malzeme kayıplarını elimine etmekte kullanılabilir.

Denge ıslatma açısı, daha önce ele alındığı gibi, KN'lerin en-boy oranlarını kontrol etmektedir. Elektrik alan altında KN-film geçiş ve bozunum kritik değerlerinin yanında, denge açılarının elektrik alan altında KN'lerin en-boy oranlarını etkileyip etkilemediği araştırılarak sonuçlar Şekil 4.15 ve Şekil 4.16'da verilmiştir.



Şekil 4.15 İzotropik sistemde denge ıslatma açısının $\theta_{eq} = 75^\circ$ için elektrik alan kuvvetlerinin KN morfolojisine etkisi.

Şekil 4.15'de izotropik bir sistemde $\theta_{eq} = 75^\circ$ denge ıslatma açısına sahip sisteme elektrik alan uygulanmasıyla KN'lerin morfoloji değişimleri görülmektedir. Elektrik alan şiddeti arttıkça hafif sağa doğru eğimli, asimetrik KN'ler oluşmaktadır. Elektrik alanın KN morfolojilerinde meydana getirdiği bu farklılıkları daha iyi analiz edebilmek için, KN'lerin yükseklik, genişlik, en-boy oranı ve tepe eğriliklerinin nasıl etkilendiğini araştırdık ve simülasyonlardan elde edilen denge morfolojileri üzerinde yaptığımız hesaplamalar sonucu şekil 4.16 elde edilmiştir.

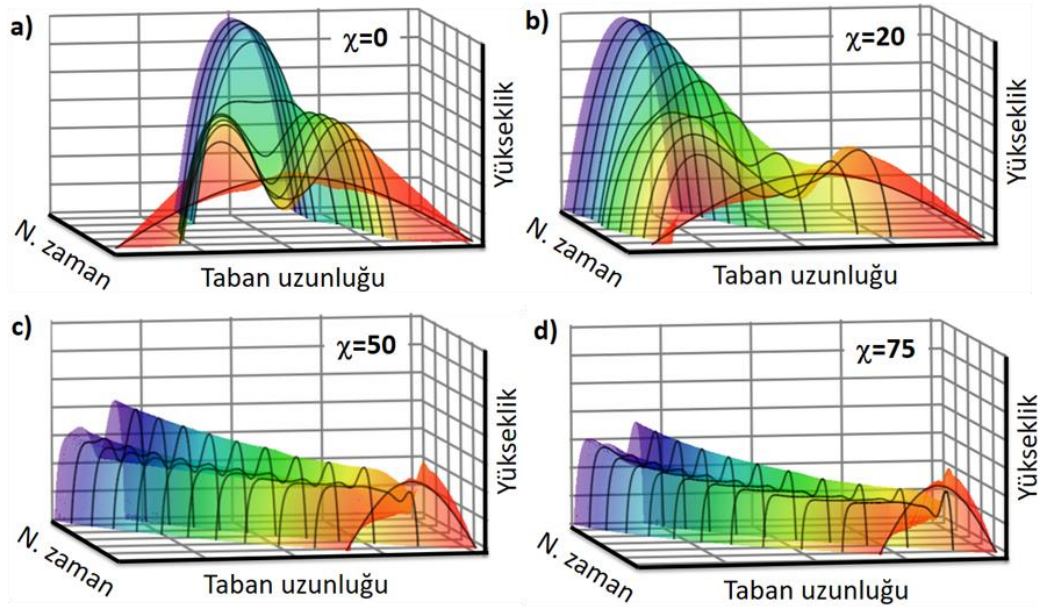


Şekil 4.16 KN'lerin elektrik alan altında yükseklik, genişlik, en-boy oranı ve tepe eğriliklerinin değişimi ($\Sigma=0$, $\theta_{eq} = 75^\circ$).

Şekil 4.16'da uygulanan elektrik alan şiddetinin artışıyla KN yüksekliğinin azalışı (a), genişliğin artışı (b), en-boy oranının azalışı (c) ve tepe eğriliklerinin azalışı gözlenmiştir ve bu daha önce belirttiğimiz Şekil 4.11'deki bulgularla uyumludur. Bu iki farklı deney seti (Şekil 4.11'te $\theta_{eq} = 45^\circ$ Şekil 4.16'da $\theta_{eq} = 75^\circ$ karşılaştırıldığında) bize, farklı ıslatma denge açılarında elektrik alan etkilerinin benzer olduğunu, Şekil 4.14 ise bu benzer etkilerin görülmesi için kritik değer geçişi bilgilerini sağlamaktadır.

Yön-bağımsız sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve gerilim alanlarıyla kontrolü

Bu kısımda KN morfolojilerinin hem elektrik alan hem de gerilim kuvvetleri altındaki davranışlarını incelenmiştir. Öncelikle sisteme orta şiddette bir gerilim kuvveti ($\Sigma = 0.5$) uygulanmış ve 4 farklı elektrik alan uygulanarak simülasyonlar yapılmıştır (Şekil 4.17).

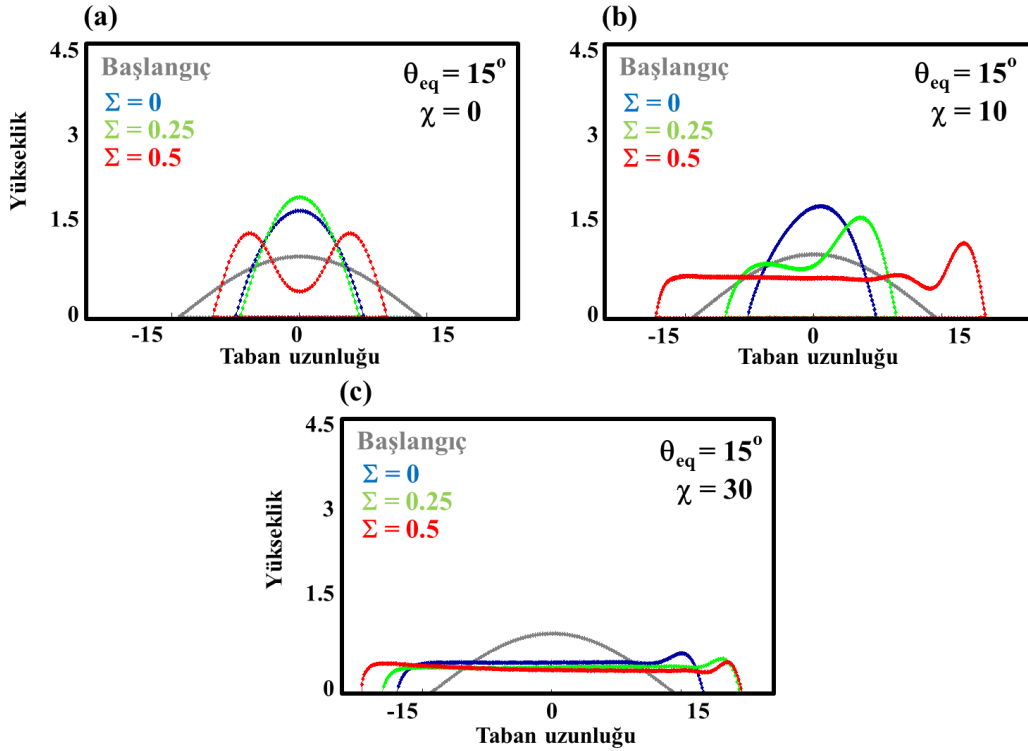


Şekil 4.17 Elektrik ve gerilim kuvvetleri altında başlangıç damlacığının zamanla (kırmızıdan – mora doğru) ulaştığı denge şekilleri ($\Sigma = 0.5$, $\theta_{eq} = 75^\circ$).

Şekil 4.17'de elektrik alan şiddetinin değerinin $\chi = 20$ (b), $\chi = 50$ (c), $\chi = 75$ (d) durumları, $\chi = 0$ (a), referans alınarak incelenebilir. $\chi = 20$ (b)'de KN'nin zamanla sola doğru kaydığı, tek ada olarak dengeye geldiği, daha yüksek elektrik alan şiddeti değerleri olan $\chi = 50$ (c), $\chi = 75$ (d)'de ise gerilim etkisiyle tek KN'nin fragmente olarak ve sola kayarak ilerlediği görülmektedir. Bu sonuçlar bize, gerilim kuvvetleri altında uygulanan elektrik alan değerlerinin artırılmasıyla birim alandaki KN sayısının kontrol edilebileceğini göstermiştir.

Birim alandaki KN sayısı, KN'lerin dizi halinde kullanıldığı fotovoltaik uygulamalar için çok önemli bir parametredir.

Sisteme uygulanan gerinim kuvvetinin KN'lerin en-boy oranlarını kontrol ettiğini gösteren daha önceki deney sonuçlarını göz önünde bulundurarak, gerinim kuvvetlerinin elektrik alan kuvveti altında KN morfolojilerindeki etkileri iki farklı denge ıslatma açısına sahip sistem üzerinde araştırılmıştır (Şekil 4.18 ($\theta_{eq} = 15^\circ$) ve Şekil 4.19 ($\theta_{eq} = 45^\circ$)).

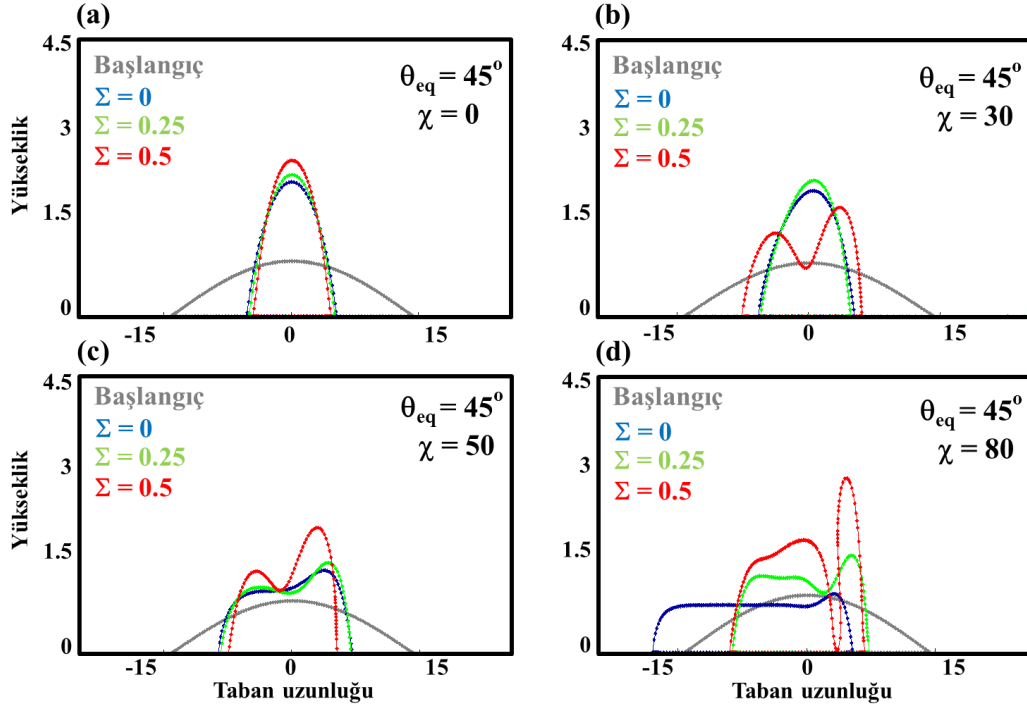


Şekil 4.18 Farklı gerinim kuvvetlerinde ve elektrik alan etkisi altında KN morfolojileri $\theta_{eq} = 15^\circ$.

Şekil 4.18 (a)'da daha önce gösterdiğimiz ve gerinim kuvvetinin artışı ile KN en-boy oranı ve tepe eğriliğinin belirli bir eşik değere kadar arttırılabileceği ve daha yüksek gerinim değerlerinde KN'nin fragmente olduğu durum referans olarak yeniden verilmiştir. Şekil 4.18 (b)'de aynı sisteme düşük şiddette $\chi = 10$ elektrik alan kuvveti uygulanmıştır. $\Sigma = 0$ (mavi) olduğunda KN'nin hafif sağa doğru eğimli bir denge morfolojisi olduğu, $\Sigma = 0.25$ (yeşil) değerinde KN'nin sağa yaslı bir tepelik oluşturan ara bir geçiş morfolojisinde olduğu, $\Sigma = 0.5$ (kırmızı) değerinde sağa yaslı bir tepelik ve sol kısmında film oluşumu görülmüştür. Bu durum bize, sistemde elektrik alan kuvveti olduğunda uygulanan stres değerinin, sistemi film oluşumuna doğru yönlendirdiğini söylemektedir. Şekil 4.18 (c)'de ise elektrik alan şiddeti $\chi = 30$ 'a çıkartılmış ve sistemde film oluşumu görülmüştür. Buna ek olarak, izotropik

sistemlerde gerinim kuvvetinin artmasıyla oluşan filmin uzunluğunun arttığı ve kalınlığının azaldığı görülmektedir.

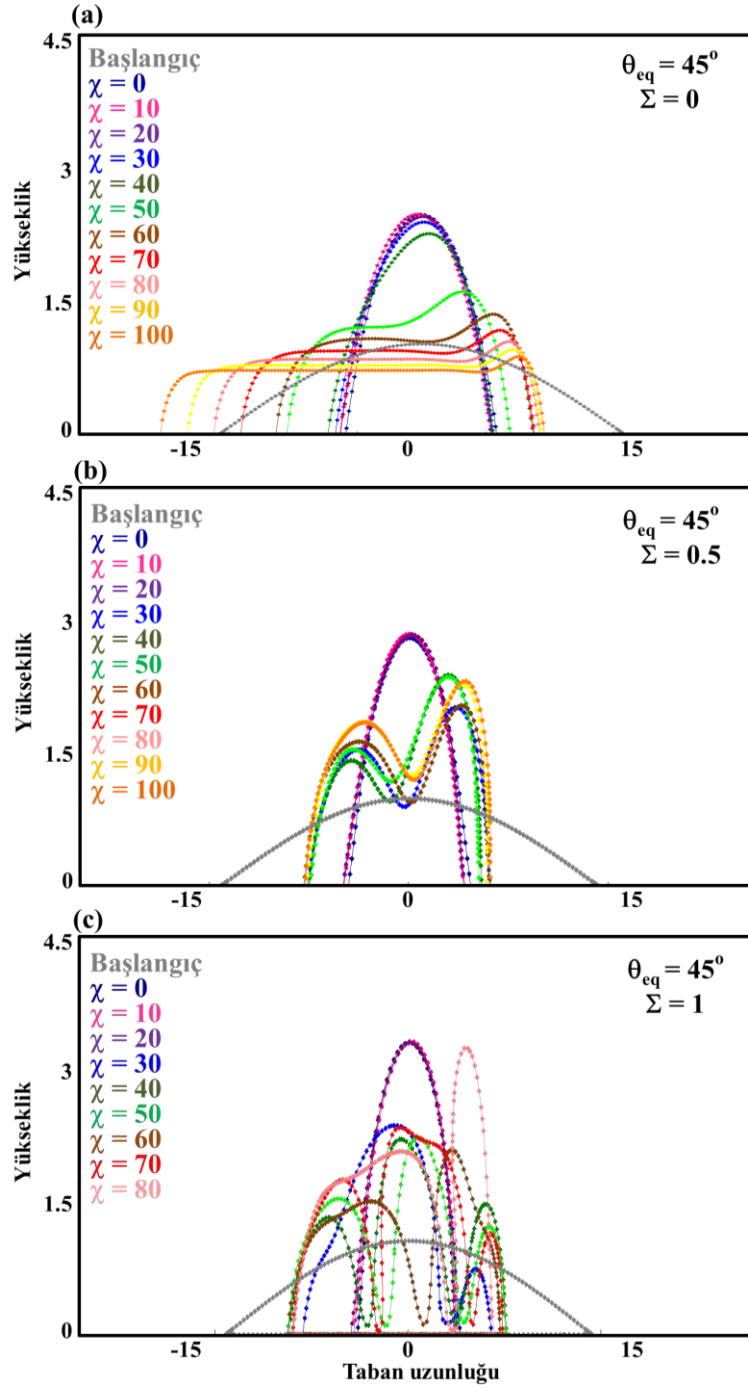
Şekil 4.19'da ise Şekil 4.18'deki benzer deneyler daha yüksek bir denge ıslatma açısı altında tekrarlanmıştır. 4.18'deki sistemde film geçişini görebilmek için daha yüksek elektrik alan şiddeti değerlerine çıkmak gerekmiştir.



Şekil 4.19 Farklı gerinim kuvvetlerinde ve elektrik alan etkisi altında KN morfolojileri $\theta_{eq} = 45^\circ$.

Şekil 4.19'da sisteme gerinim kuvvetleri ($\Sigma=0$, $\Sigma=0.25$ ve $\Sigma=0.5$) uygulanırken aynı zamanda $\chi=0$ (a), $\chi=30$ (b), $\chi=50$ (c) ve $\chi=80$ (d) değerlerinde elektrik alanın da sisteme uygulanması durumunda ne gibi değişiklikler olacağı gösterilmektedir. Gerinim kuvvetinin $\Sigma=0$ (mavi) ve $\Sigma=0.25$ (yeşil) değerleri incelendiğinde elektrik alan şiddetinin artışıyla KN'ler, film oluşturmuştur. Gerinim kuvveti, oluşan filmin kalınlığını ve şeklini kontrol etmektedir. Gerinim kuvvetinin $\Sigma=0.5$ olduğu durum incelendiğinde, (a)'dan (b)'ye geçildiğinde elektrik alanın sisteme uygulanmasıyla $\Sigma=0.5$ değerinde, KN'nin fragmente olduğu görülmüştür. Elektrik alan şiddeti artırılarak (c)'ye geçildiğinde KN yine iki adacıklı fragmente halde fakat biri diğerinden daha büyük iki tepeli bir sistem elde edilmiştir. (d)'de ise KN elektrik alan etkisiyle KN sistemi tamamen fragmente olmuş ve en-boy oranları ve tepe eğrilikleri çok farklı olan iki farklı KN elde edilmiştir. Bu sonuç, sabit bir gerinim kuvveti altında

elektrik alan uygulanarak KN'lerin fragmentasyonlarının ve oluşacak ikili sistemin çok farklı şekillerde elde edilebileceğini göstermektedir. Elektrik alan ve gerinim kuvvetlerinin her ikisinin de sisteme uygulandığı durumlarda, morfoloji değişim kinetiklerinin anlaşılabilmesi için sisteme farklı gerinim kuvvetlerinde elektrik alan uygulanmıştır. Denge morfolojileri, sistemin ağırlık merkezleri ortalanarak incelenmiştir (Şekil 4.20).



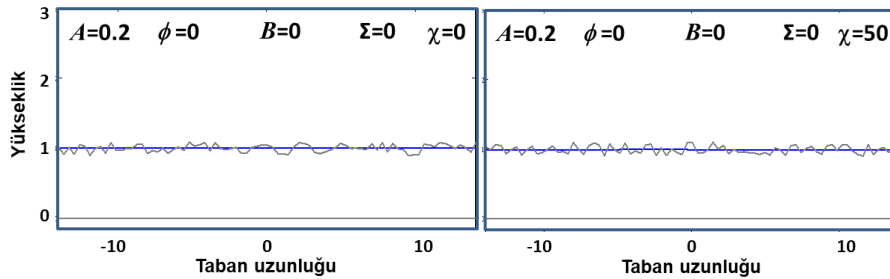
Şekil 4.20 (a) $\Sigma=0$, (b) $\Sigma=0.5$, (c) $\Sigma=1$ gerinim kuvvetleri ve elektrik alan etkisindeki KN denge morfolojileri $\theta_{eq} = 45^\circ$.

Gerinim kuvvetinin olmadığı Şekil 4.20a'da KN'ler elektrik alan şiddetinin artmasıyla filme doğru geçiş yaparken (b)'de gerinim kuvvetinin etkisiyle KN'ler artan elektrik alan şiddetiyle fragmente olmaya başlamış ve iki tepeli, biri diğerinden daha uzun KN'ler oluşmuştur. (c)'de gerinim kuvvetinin daha da artmasıyla, iki ve üç KN'ye kadar fragmente olmakta ve ana KN'ye ek, uydu yapılar oluşmaktadır. KN'lerin uydu nanoyapılara sahip olmaları çok-bantlı (multi-band) elektronik yapıya sahip sistemlerin oluşturulmasını ve bu nedenle geniş spektrumlarda foto-elektron üreten sistemlerin geliştirilmesi ile daha yüksek güneş enerjisi çevirim verimlerine ulaşmamızı sağlayabilir (Raffaella vd., 2006).

Gerinim değerinin $\Sigma=1$ olduğu durumda, $\chi=90$ kritik değerdir, bu değerden sonra film çatlayarak (film üzerindeki düğüm noktaları altlık bölgesine geçmiştir) yüzeyde parçalara ayrılmıştır. Bu sonuçlar bize, KN'den filme geçişin, KN fragmentasyonunun gerinim ve elektrik alan ile kontrol edilebileceğini ve aynı zamanda sistemin bozulmaması için uygulanacak maksimum gerinim ve elektrik alan değerlerinin deneylerimiz sonucunda belirlenebildiğini de göstermektedir. Sistemin bozulmadan (fracture olmadan) çalışacağı kuvvet değerlerini bilmek, üretim açısından maliyeti azaltacak önemli bir bilgidir.

4.1.2 Yüzeydeki rastsal pürüzlülüklerin elektrik ve gerilim alanları altında simülasyonları

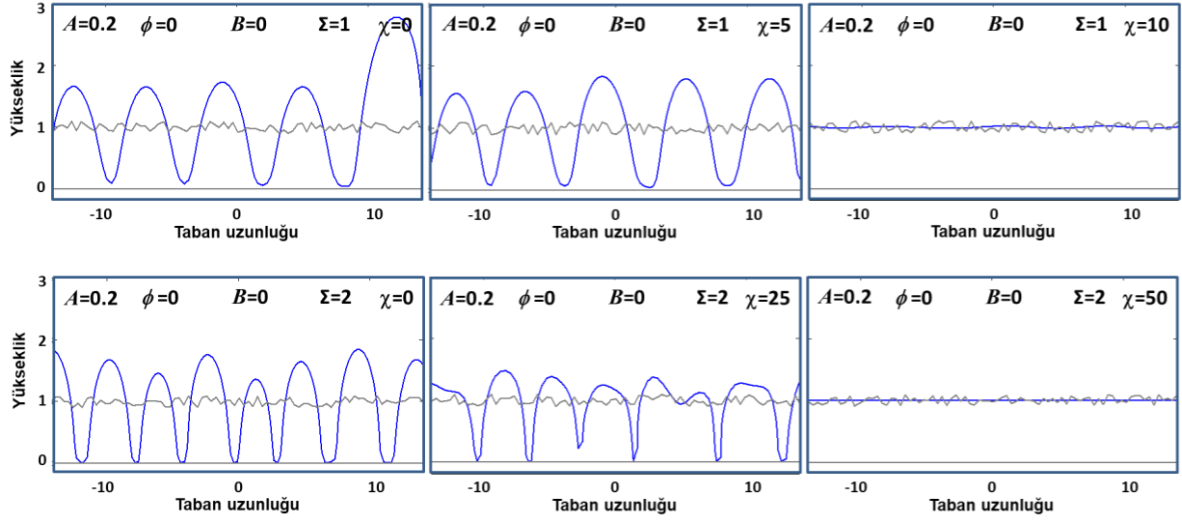
Bu bölümde, kuantum noktaların, yüzeyde belirli bir rastsal pürüzlülüğe sahip filmler üzerinde oluşumu incelenmiştir. Öncelikle yüzey pürüzlülüğünün farklı kuvvet alanları altında zamanla evrimi sonucunda filmin pürüzlülüğünün azalıp/artacağı araştırılmıştır. Deneysel veriler, gerilim (stress) altında yüzey pürüzlülüğünün artarak sistem üzerinde kuantum nokta oluşumunun sağlanabildiğini göstermektedir. Gerilimsiz ortamda, belirli bir başlangıç pürüzlülüğüne (surface roughness) sahip filmin farklı elektrik alanlar altında davranışı Şekil 21'de verilmiştir.



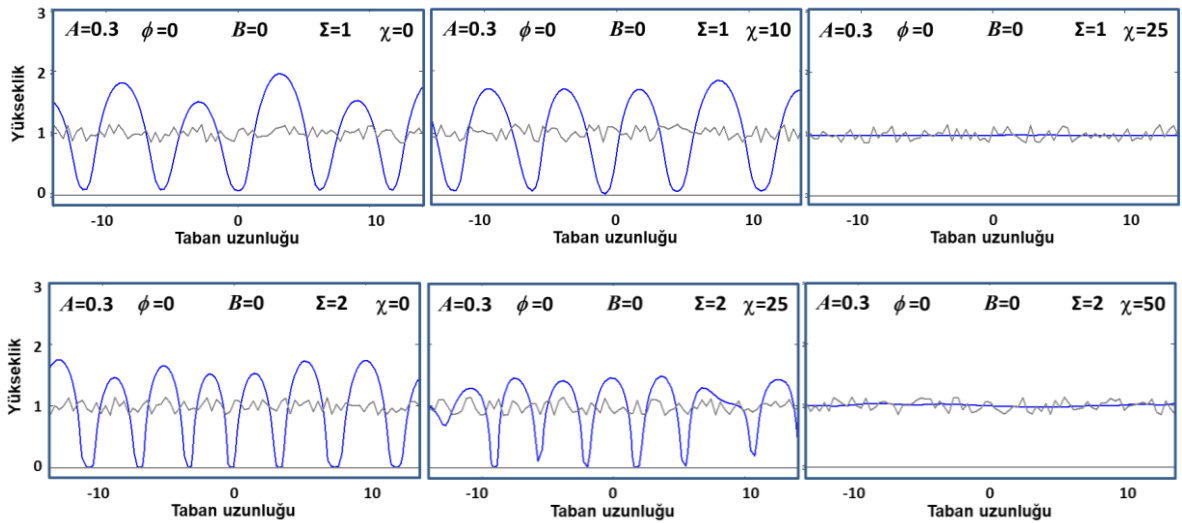
Şekil 4.21 Farklı elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi).

Şekil 4.21 incelendiğinde, sisteme uygulanan gerilim alanları olmaması durumunda yüzey pürüzlülüğünün elektrik alan olsa da olmasa da zamanla kaybolduğu gözlenmiştir.

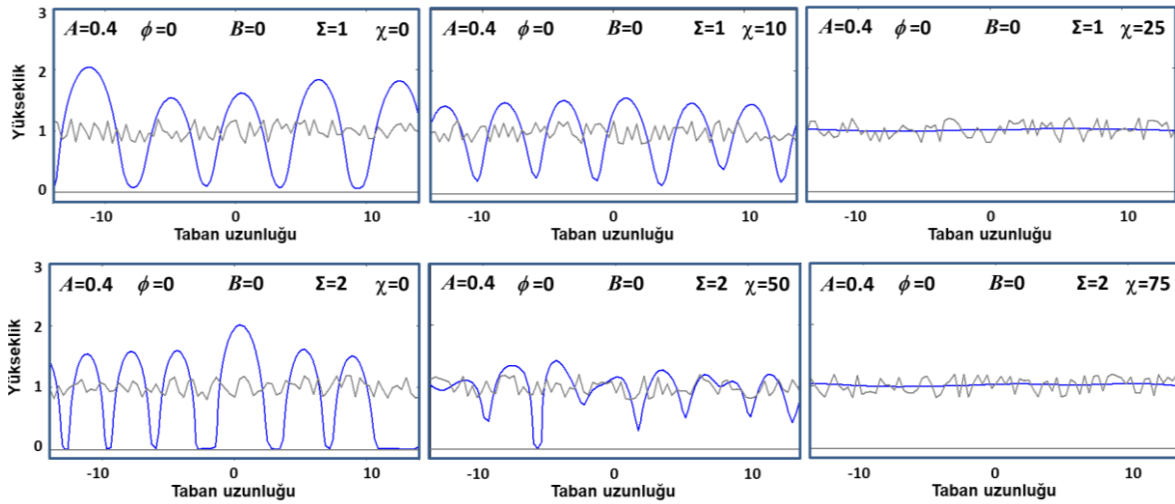
Bu noktada başlangıç anındaki yüzey pürüzlülüğü değerinin (surface roughness) etkisinin olup olmadığını bu etkinin uygulanan elektrik alanı altında değişip değişmediğini anlamak için seri deneyler yapılmış ve sonuçlar sistematik olarak aşağıda irdelenmiştir.



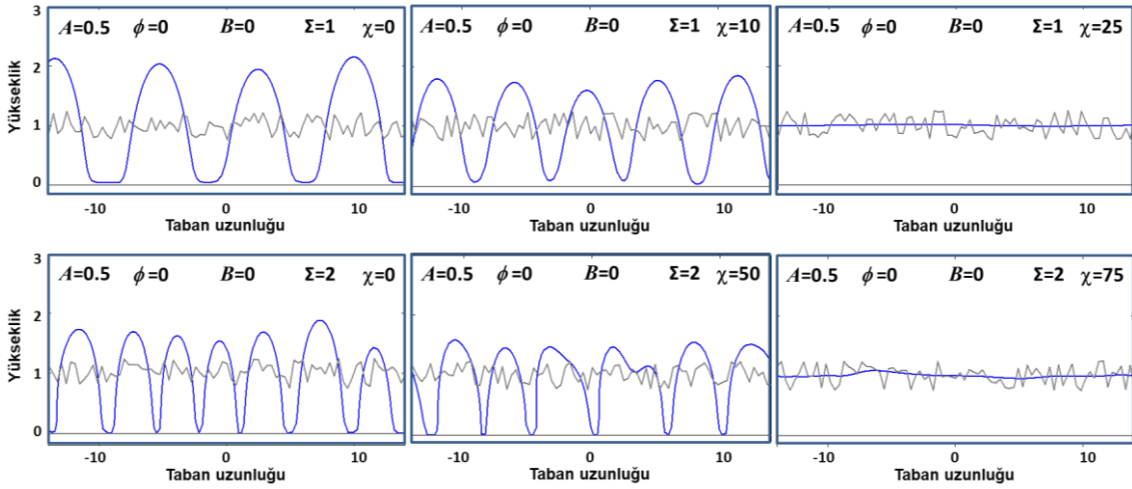
Şekil 4.22 Farklı gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü $A=0.2$ alınmıştır.



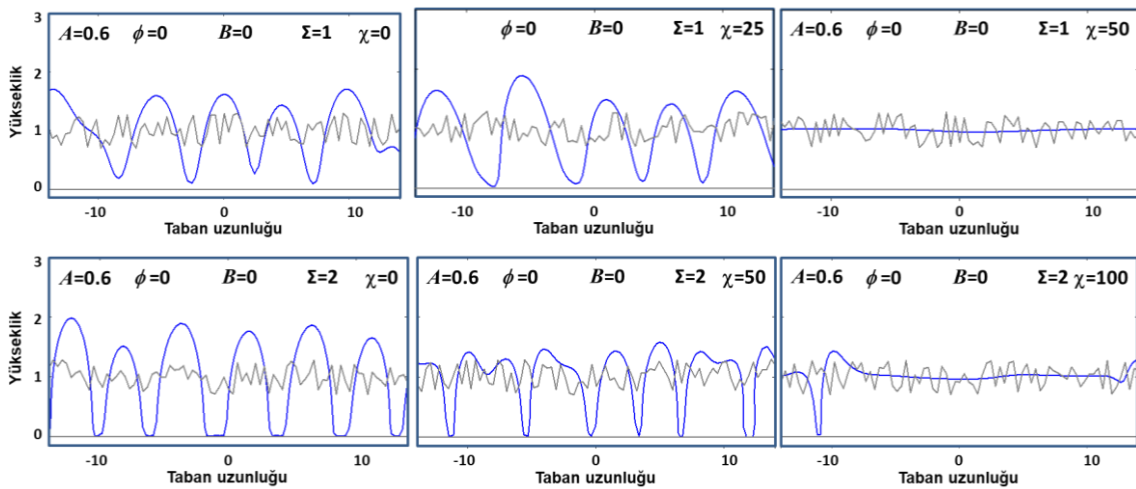
Şekil 4.23 Farklı gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü $A=0.3$ alınmıştır.



Şekil 4.24 Farklı gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü $A=0.4$ alınmıştır.



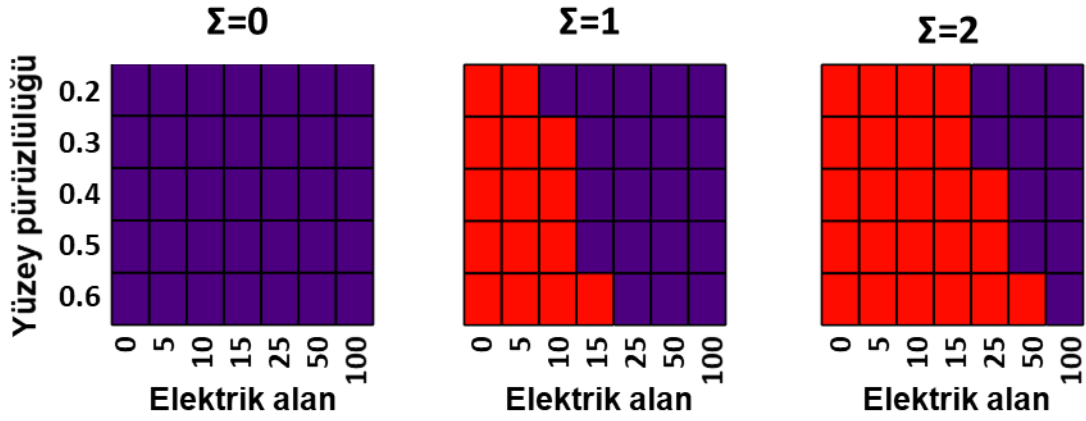
Şekil 4.25 Farklı gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü $A=0.5$ alınmıştır.



Şekil 4.26 Farklı gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü $A=0.6$ alınmıştır.

Şekil 22-26'de farklı başlangıç yüzey pürüzlülüğüne sahip sistemlerde yapılan deneyler ile ilgili sonuçlar kararlılık diyagramları olarak özetlenmiştir. Her bir sistemde tüm elektrik alanlar taranmış sadece geçiş bölgeleri farklı gerilim alanları için verilmiştir. Bu veriler ilk önce film kararlılığı açısından değerlendirilmiştir. Kararlı sistemlerde yüzey pürüzlülüğü zamanla azalarak düz filmler oluşmaktadır. Kararsız sistemlerde ise yüzey pürüzlülüğü adacıklara doğru eğilmekte ve sistemde kuantum nokta serileri oluşmaktadır.

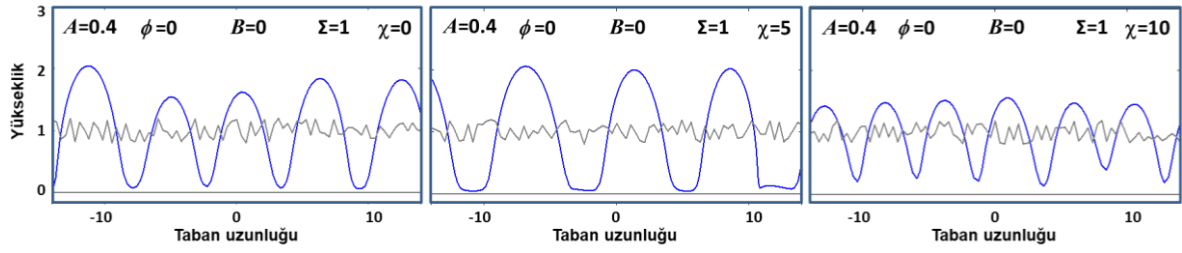
Şekil 4.27'de yapılan bu deneyler kararlılık/kararsızlık açısından değerlendirilerek özetlenmiştir.



Şekil 4.27 Farklı başlangıç yüzey pürüzlülüğü, gerilim ve elektrik alan şiddetleri altında film kararlılığı (Kararlı (mor) / Kararsız (kırmızı)).

Şekil 4.27 incelendiğinde başlangıç yüzey pürüzlülüğü ve uygulanan elektrik alandan bağımsız olarak sistemde gerilim olmaması durumunda yüzey pürüzlülüğünün ortadan kalkarak düzgün filmler elde edildiği görülmektedir. Gerilim altında ise davranış her üç etkenin göreceli değerlerine bağlıdır. Genel davranış olarak elektrik alanın belirli bir kritik değerin üzerine çıkması durumunda sistemde kararlılığa neden olduğu gözlenmektedir. Bu kritik değer hem gerilim değerine hem de başlangıç yüzey pürüzlülüğüne bağlıdır. Yüksek gerilim değerleri ve yüksek yüzey pürüzlülüğü değerleri bu kritik değerin daha büyük olmasına neden olmaktadır.

Kararsız sistemlerde kuantum nokta serileri oluştuğu gözlemlendiğini belirtmiştik. Yaptığımız deneyler ile, gerilim ve başlangıç pürüzlülüğüne ek olarak elektrik alan ile de oluşan sistemin özelliklerini kontrol edilebileceğimiz ortaya çıkmaktadır.



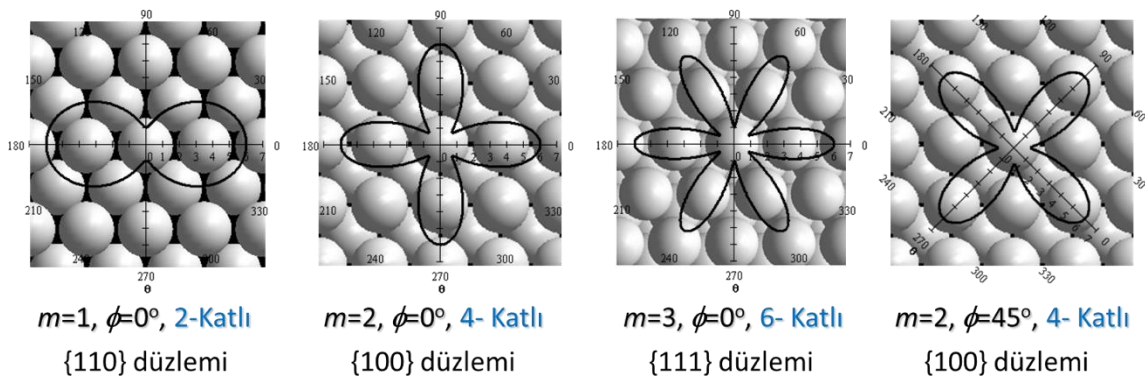
Şekil 4.28. Farklı elektrik alan şiddetleri altında kuantum noktaların zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü $A=0.4$ alınmıştır.

Şekil 4.28 incelendiğinde adacık oluşum kinetiği ve adacık denge şekillerinin uygulanan elektrik alan ile de kontrol edilebileceği gösterilmiştir. Düşük elektrik alan altında ($\chi = 5$) adacıklar aralarındaki iyi tanımlanmış ıslatma katmanı olacak şekilde dengeye gelirken (orta panel) elektrik alanın yükseltilmesi ile ıslatma katmanı yok olmuş aynı zamanda daha küçük (en-boy oranı) ve birim alanda daha fazla adacık oluşumu sağlanmıştır.

4.2 Yön-Bağımlı (Anizotropik) Sistemler

Kristal yapılar göz önüne alındığında karşılaşılan anizotropik etkiler sisteme eklenmiştir: Difüzyon katsayısının yön bağımlılığı (Denklem 3.7) ve yüzey sertliğinin (surface stiffness) yön bağımlılığı (Denklem 3.8) bu etkileri vermektedir.

Yüzey atomlarının anizotropik yayınımları kristal yüzeyine ve yönelimine bağlıdır. Denklem 3.7'nin daha iyi anlaşılabilmesi için aşağıdaki şekil incelenebilir.

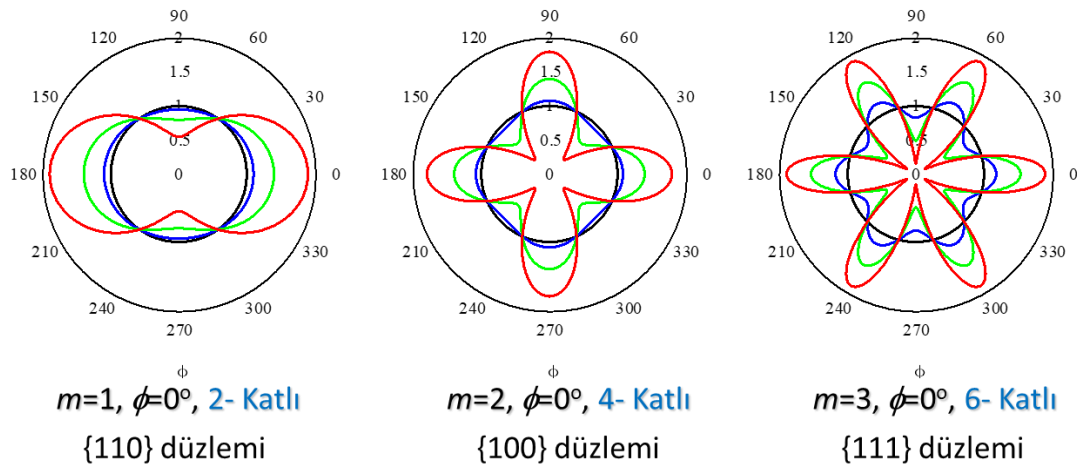


Şekil 4.29 Difüzyon anizotropisinin farklı düzlemlerde göstermiş olduğu davranışlar, $A=5$.

Denklem 3.7'de θ , yüzeydeki difüzyon doğrultusunun tanjant vektörü ile x-ekseni arasındaki açıyı, A anizotropik etkinin şiddetini belirleyen sabiti, m ise simetri derecesini belirtirken, ϕ eğim açısını yani difüzyonun maksimum olduğu eksen ile x-ekseni arasındaki açıyı

vermektedir. Şekil 4.29'da kristalografik {110}, {100} ve {111} düzlemleri gösterilmiştir ve kristal eğim açısının anlaşılması için {100} düzleminde, 45°'lik kristal eğim açısına sahip sistem örnek olarak verilmiştir. Bu çalışmada yapılan araştırmalar bu kristal yönlerine sahip sistemlerde gerçekleştirilmiştir.

Yön bağımlı yüzey sertliği formülü (Denklem 3.8) incelendiği zaman yüzey Helmholtz serbest enerjisinin kristal düzlem ve yönüne bağlı olması nedeniyle yön bağımlı olduğu ortaya çıkmaktadır. Örnek olarak yüzey merkezli kübik (YMK) kristal yapıdaki ince film yüzeyine normal [001] eksenine sahip iki {110}, dört {100} ve altı {111} katlı simetri düzlemleri için davranış Şekil 4.30'de verilmiştir.



Şekil 4.30 Yüzey sertliği anizotropisinin farklı düzlemlerde göstermiş olduğu davranışlar, $A=5$.

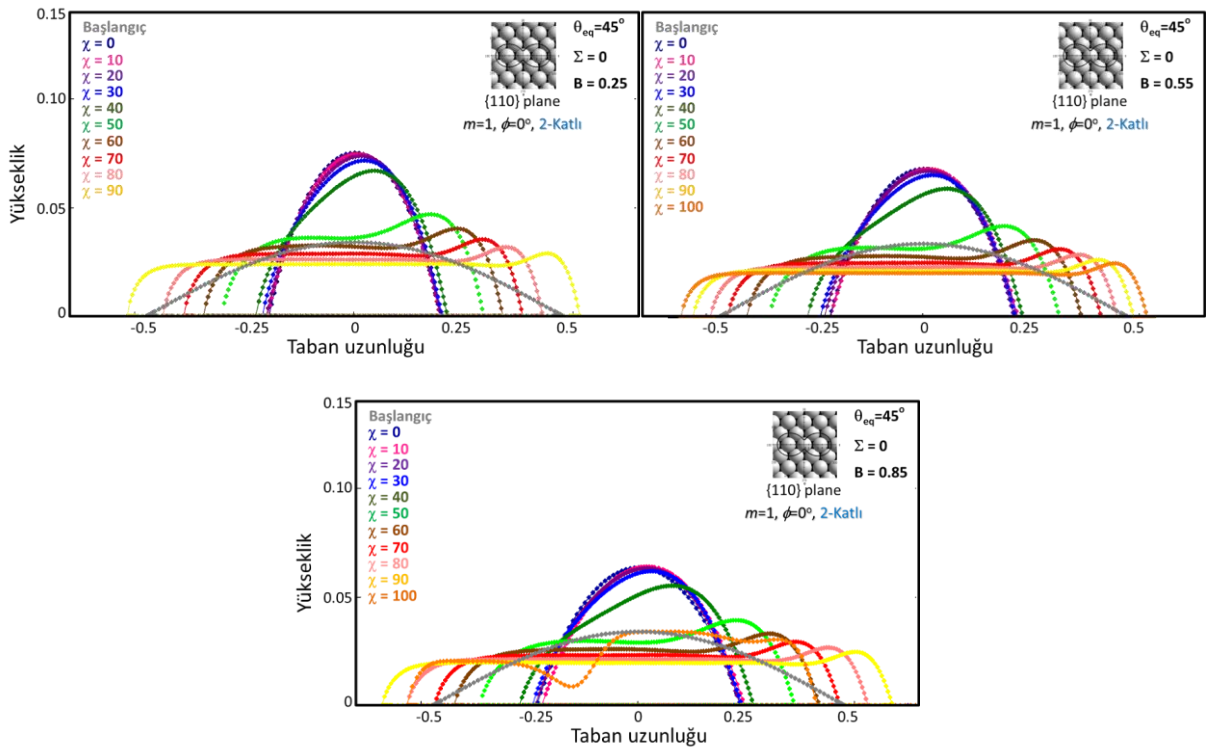
Denklem (3.8)'e göre yüzey sertliği, yüzey Helmholtz serbest enerji anizotropi sabitinin $B \leq 2 / \left(\left| 1 - 4m^2 \right| - 1 \right)$ eşitsizliğini sağladığı durumlarda pozitif alınabilmektedir. Bu şartlarda B sabiti için üst limitler iki katlı, dört katlı ve altı katlı simetriler için: $B \leq \{1; 1/7; 1/17\}$ olarak ortaya çıkmıştır. Şekil 4.30'da bu limitler içerisinde kalmak koşulu ile sisteme düşük (mavi), orta (yeşil) ve yüksek (kırmızı) düzeylerde yüzey sertliği verilmiş ve izotropik (siyah) sistemle karşılaştırılmıştır.

4.2.1 Damlacıkların elektrik ve gerilim alanları altında simülasyonları

Daha önce de belirtildiği şekilde, tasarım açısından elde edilen kuantum noktaların boyut, dağılım, en-boy oranları (aspect ratio) ve tepe eğriliklerinin (peak curvature) kontrol edilmesi büyük önem taşımaktadır. Deneysel çalışmalar, kullanılan filmin kristal yapısının ve uygulanan gerilim ve elektrik alanların kristale göre doğrultusunun önemini göstermiştir. Bu

bölümde gerçekte var olan kristal etkileri incelenecektir. Bu inceleme için öncelikle yüzey merkezli kübik (YMK) sistemler ile bu yapı içerisindeki 3 ana düzlem seçilmiştir. Deneylerde karşılaştığımız diğer kristal yapılarında gelecekte incelenmesi önemlidir. Ancak bu proje kapsamında farklı düzlem ve yönlerin etkileri YMK model sisteminde incelenecektir. YMK yüzeylerin anizotropik etkilerinin yüzey difüzyonu ve yüzey sertliği üzerindeki etkileri Şekil 4.29 ve Şekil 4.30 ile anlatılmıştı. Burada sunulan simülasyon deneyleri ile hem kristal etkiler hem de uygulanan gerilim ve elektrik alanların kristale göre doğrultusu incelenmiştir.

Kristal etkilerini gözlemlemek için öncelikle gerilim olmayan YMK yapıdaki (110) düzlemi üzerinde bir dizi deneyler yapılmıştır. Bu düzlemdeki simetri iki katlı olup asimetri şiddetini belirleyen B değerleri en fazla 1 değerini alabilmektedir. B=0.25 yani anizotropinin düşük değerde tutulduğu simülasyon sonuçları Şekil 4.31a'da verilmiştir. Benzer deney B=0.55 ve B=0.85 alınarak yani orta düzeyde ve yüksek düzeyde anizotropi etkileri altında tekrarlanarak Şekil 4.31b ve 4.31c'de verilmiştir.

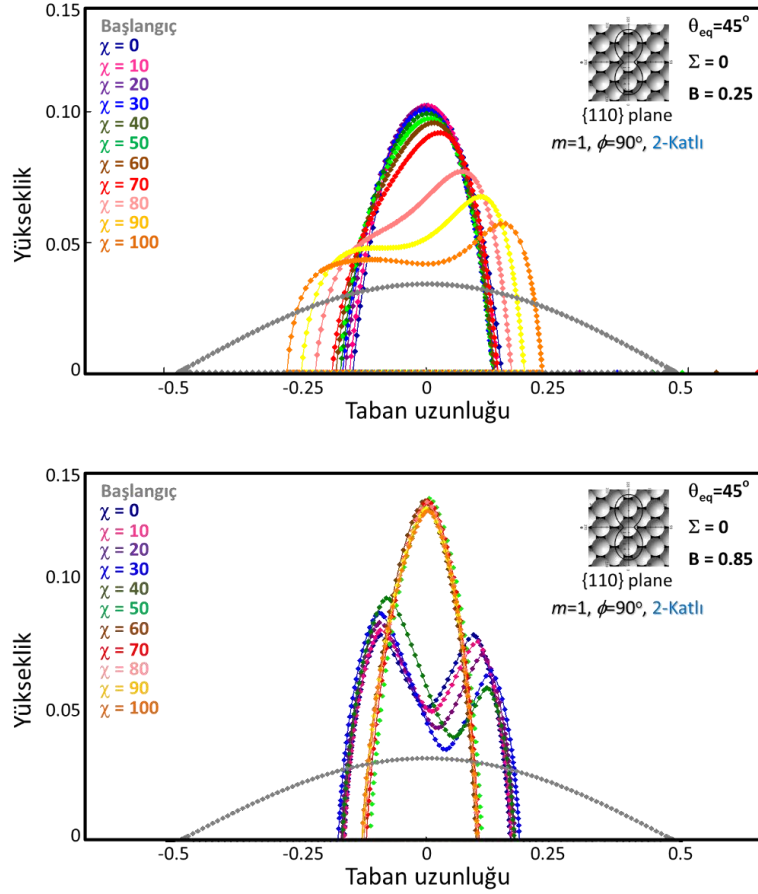


Şekil 4.31 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (yüksek anizotropi şiddeti), $\phi=0^\circ$.

Şekil 4.31 incelendiğinde elektrik alan şiddetinin artışının bu kristal sistemi için film oluşumunu desteklediği görülmektedir. Buna ek olarak yüzey sertliği anizotropisinin şiddetinin artması sonucunda film geçişlerinin daha kolay olduğu ve düşük elektrik alanlarda kendini gösteren

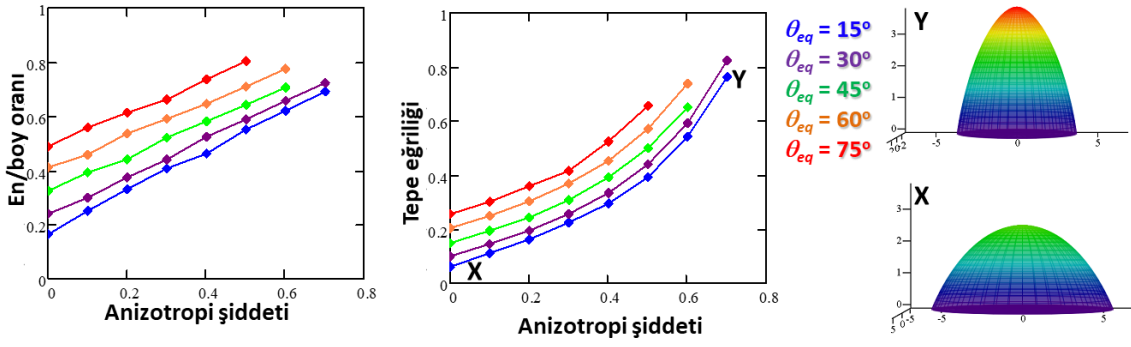
kuantum noktalarının yapılarında değişimler olduğu görülmüştür. Özellikle kuantum noktalarının en-boy oranları ve tepe eğrilikleri anizotropi şiddeti ile azalmaktadır. Bu eğilimlerin diğer sistemlerde de olup olmadığı aşağıdaki deneylerle incelenmiştir.

Öncelikle kristal düzlemini x eksenine göre $\phi=90^\circ$ döndürerek düşük ve yüksek anizotropi şiddetlerindeki deneyi tekrarladık. Elde edilen bulgular Şekil 4.32'de verilmiştir.



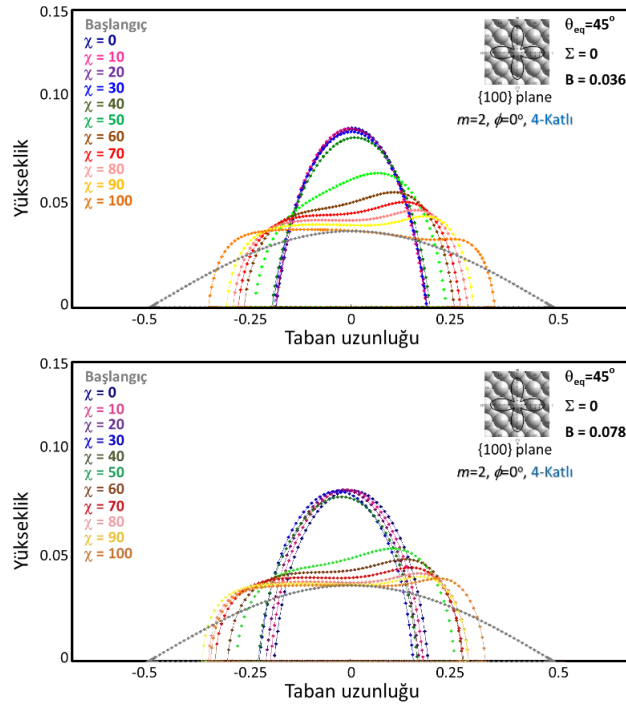
Şekil 4.32 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (düşük anizotropi şiddeti), $\phi=90^\circ$.

Şekil 4.32a ve 4.32b, Şekil 4.31a ve 4.31c ile karşılaştırıldığında, sistemdeki kristal düzlemini x eksenine göre $\phi=90^\circ$ döndürülmesi (veya uygulanan gerilim ve elektrik alanların yönünün döndürülmesi) sistemde oluşan kuantum noktalarının en-boy oranları ile tepe eğriliklerini arttırdığı gözlenmiştir. Şekil 4.31a ve 4.31c kendi içerisinde incelendiğinde anizotropi şiddetindeki artışın film oluşumu yerine 2 tepeli kuantum nokta oluşumunu sağladığı görülmektedir. Sistemi kontrol eden diğer bir parametrede damlacık ile altlık arasındaki denge ıslanma açısıdır. Şekil 4.33'de tüm bu etkiler toplu bir şekilde özetlenmiştir.

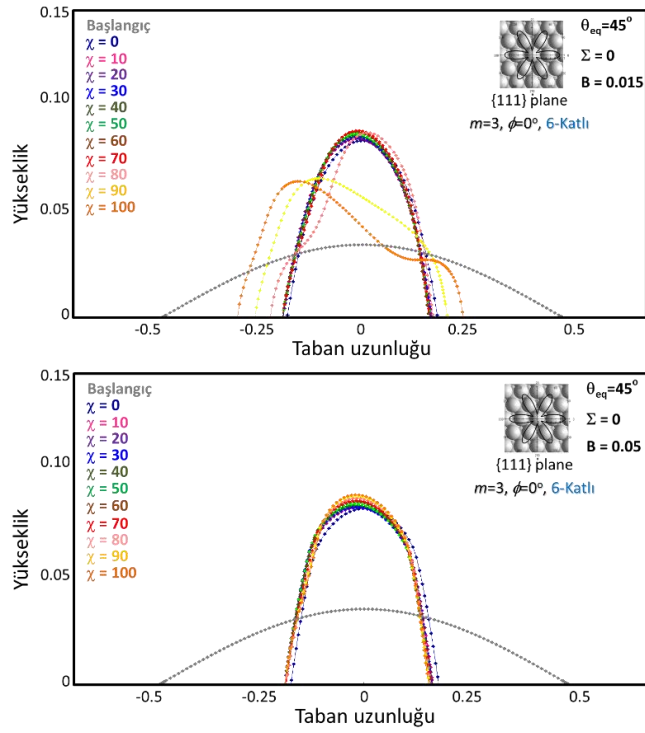


Şekil 4.33. Farklı denge ıslanma açılarında en-boy oranının ve tepe eğriliğinin anizotropi şiddetine bağlılığı. elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (düşük anizotropi şiddeti), $\phi=90^\circ$.

Şekil 4.33'de, YMK yapıda bir damlacığın (110) yüzeyi yönünde altlık üzerine yerleştiği ve $\phi=90^\circ$ döndürüldüğü durumda oluşan denge şekillerinin en-boy oranının ve tepe eğriliğinin (peak curvature) anizotropi şiddetine bağlı olarak artışı gözlenmektedir. Bu etkiler sisteme bağlıdır ve bize her sisteme göre düzgün bir kristal yönü seçilerek istenilen özellikte kuantum noktaların elde edilmesini sağlayacaktır. Şekil 4.33'de X ve Y değerleri ile işaretlenen sistemlerin yapıları ayrıca gösterilmiştir. Bu noktada, benzer deneyleri (100) 4 katlı ve (111) 6 katlı simetri düzlemlerinde öncelikle düşük daha sonra da yüksek anizotropi şiddetlerinde yaparak farklı etkiler test edilmiştir (Şekil 4.34 ve Şekil 4.35).



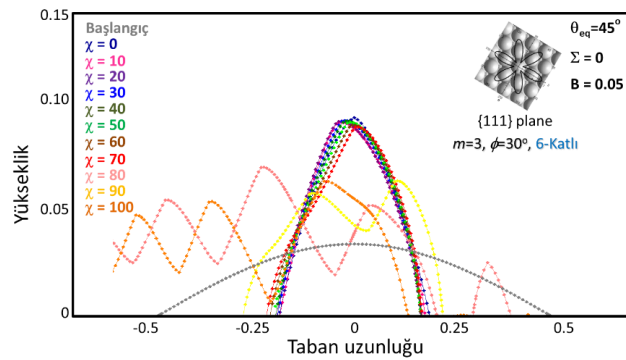
Şekil 4.34 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (üst: düşük anizotropi şiddeti; alt:yüksek anizotropi şiddeti), $\phi=0^\circ$.



Şekil 4.35 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (üst: düşük anizotropi şiddeti; alt: yüksek anizotropi şiddeti), $\phi=0^\circ$.

Şekil 4.34 ve 4.35 incelendiğinde kristal yüzeyinin etkileri de ortaya çıkmaktadır. Bu durumda, yüzeyde heteroepitaksiyel film büyütme sırasında hangi kristal düzlemin altlığa göre konumlandırıldığı büyük önem taşımaktadır. Bu kontrol mekanizmaları deneylerde elde edilen çok farklı kuantum yapıların açıklanmasında kullanılabilir. Örneğin (111) düzlemi ile yüksek anizotropi değerlerinde elde edilen yüzeylerde faset (facet) oluşumları gözlenmektedir. Elektrik alan ile faset oluşumu ve kubbe yapısı kontrol edilebilmektedir.

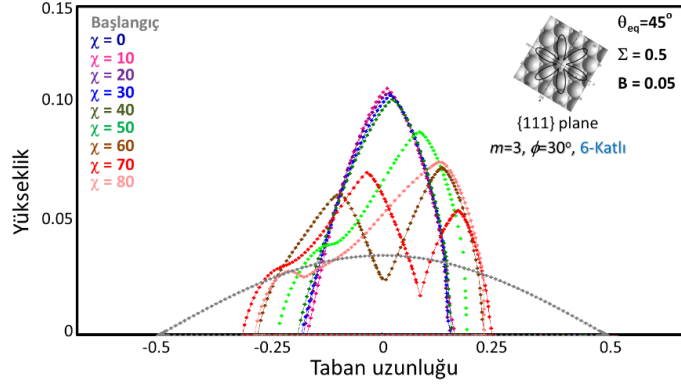
(111) kristal düzlemi yüzey’de 30° döndürüldüğünde Şekil 4.35’de gözlenen davranış şekilleri aşağıdaki şekilde gösterildiği biçimde değişmektedir.



Şekil 4.36 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (yüksek anizotropi şiddeti), $\phi=30^\circ$.

Şekil 4.36'da elde edilen yapılar elektrik alandaki artışla beraber çok ilginç değişimler göstermektedir. Şekilde gösterilen $\chi=90$ ve $\chi=100$ değerleri deney sırasında numerik kararsızlık nedeni ile bozulmuştur. Bu nedenle dikkate alınmayacaklardır.

Sisteme eş zamanlı gerilim uygulaması elde edilen yapıları değiştirmektedir. Örnek olarak aşağıda yukarıdaki sisteme gerilim uygulanması durumunda neler olabileceğini göstermektedir (Şekil 4.37).

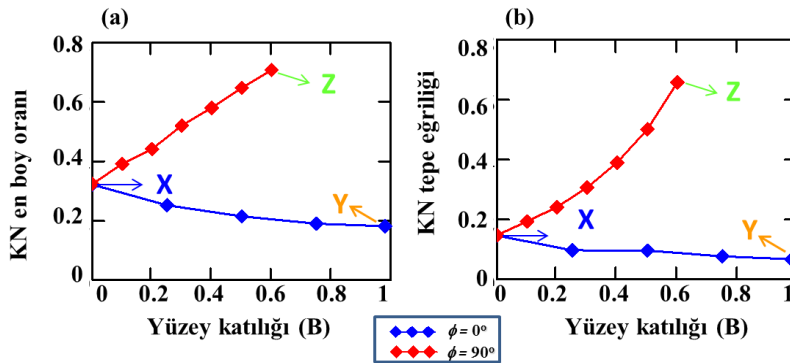


Şekil 4.37 Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri (yüksek anizotropi şiddeti), $\phi=30^\circ$.

Bu noktada sistem parametrelerinin kuantum nokta oluşumlarına etkilerini sistematik bir şekilde incelemek için çok kapsamlı deneyler yapılmıştır ve bu deneyler aşağıda özetlenmiştir.

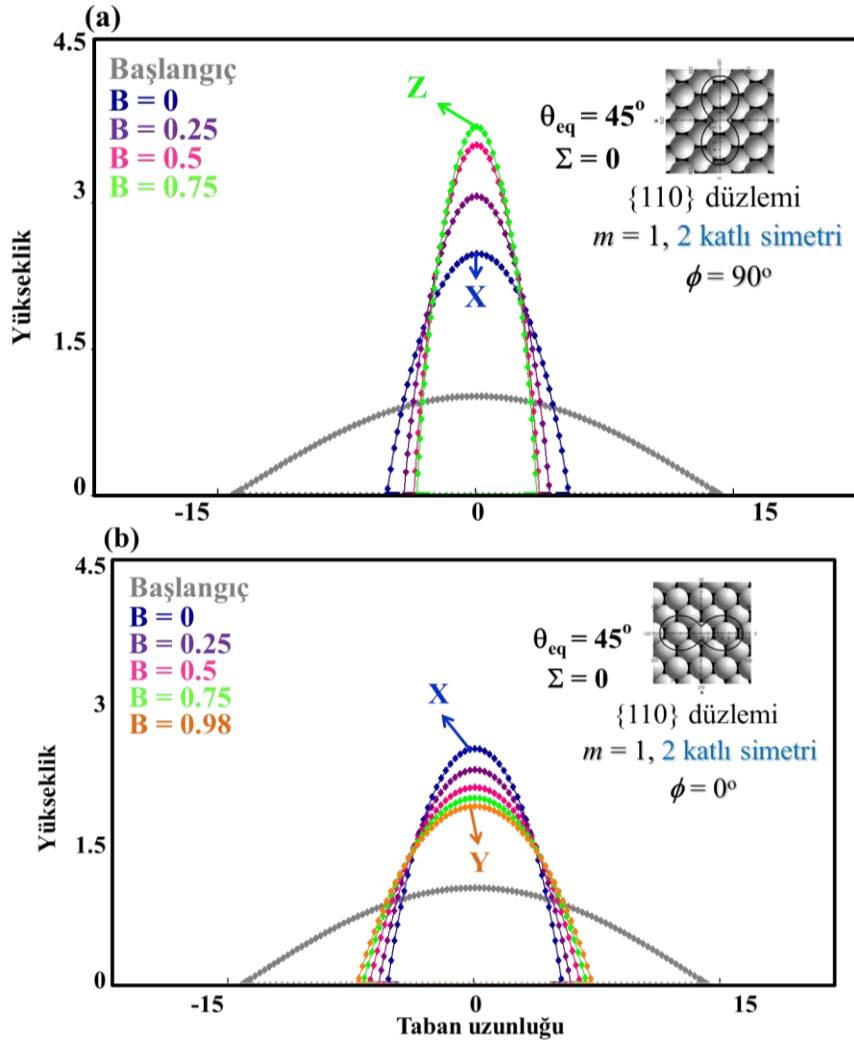
Yön-bağımlı sistemlerde KN morfolojilerinin yüzey katılığı ile kontrolü

Yüzey katılığı etkisinin sistemdeki kristal eğim açısına göre nasıl değiştiğinin anlaşılması için farklı kristal eğim açılarında yüzey katılığı artırılarak deneyler yapılmış ve elde edilen sonuçlar Şekil 4.38'de sunulmuştur.



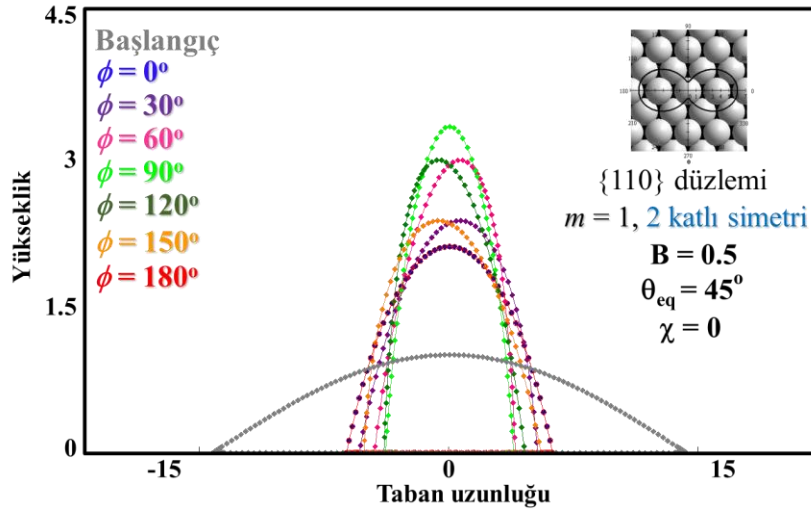
Şekil 4.38 Yüzey katılığı parametresi ile KN en-boy oranları ve KN tepe eğriliklerinin kontrolü.

Şekil 4.38'de $\{110\}$ düzleminde (2 katlı simetri) kristal eğim açısının 0° (mavi) ve 90° (kırmızı) olduğu değerlerde KN tepe yüksekliklerinin (a) ve en-boy oranlarının (b) değişimi görülmektedir. KN tepe yükseklikleri ve en-boy oranları, kristal eğim açısının 90° olması durumunda yüzey katılığının artırılmasıyla artarken, kristal eğim açısının 0° olması durumunda ise azalmaktadır. Burada elde edilen KN'lerin morfolojileri Şekil 4.39'da gösterilmiştir.



Şekil 4.39 Yüzey katılığının KN'lerin en-boy oranları ve KN tepe eğriliklerine etkisi.

Bu deneyler sonucunda teknolojik olarak kontrol edilebilen bir işlem parametresi olan kristal eğim açısı ile yüzey katılığının etkisinin kontrol edilebileceği, dolayısıyla KN'lerin morfolojilerinde istenen modifikasyonların yapılabileceği gösterilmiştir. Bir sonraki kısımda farklı kristal eğim açıları altında KN morfolojileri incelenecektir. Örnek olarak $\{110\}$ düzlemi ele alınarak incelendiğinde, bu düzlemde 2 katlı simetri olduğu için 180° periyotlarla sistem kendisini tekrar etmektedir. Bu düzlem için seçilen ortalama bir yüzey katılığı ($B=0.5$) değeri için kristal eğim etkileri $0-180^\circ$ aralığı için incelenmiştir.

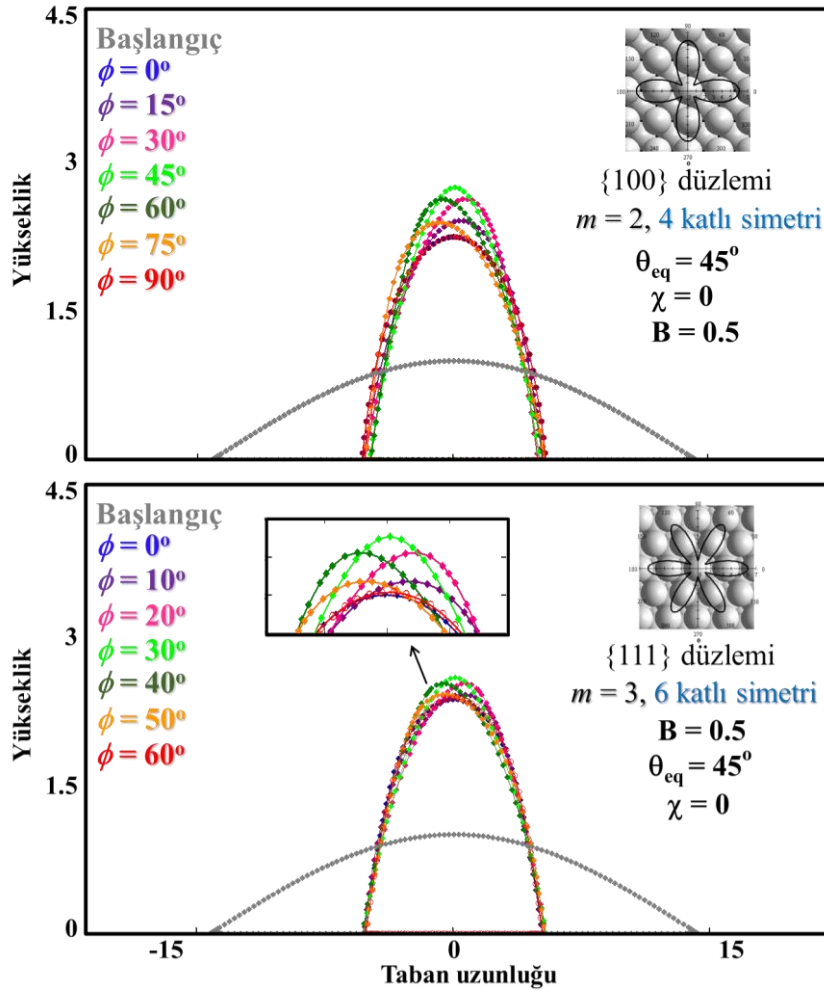


Şekil 4.40 {110} düzleminde farklı kristal eğim açılarının KN morfolojilerine etkisi.

Şekil 4.40'da farklı kristal eğim açıları ile değişen KN morfolojileri görülmektedir. Sistem incelendiğinde, kristal eğim 0° ve 180° 'nin üst üste çakıştığı (kırmızı ve mavi) görülmektedir. Bunu sebebi, {110} düzleminde 2 katlı simetri olması ve 180° periyotlarla sistemin kendisini tekrar etmesidir. Kristal eğim 30° (mor) ve 150° 'nin (turuncu) ve aynı şekilde, kristal eğim 60° (pembe) ve 120° 'nin (koyu yeşil) birbirlerinin simetriği oldukları görülmektedir. Bunun sebebi ise birbirlerini 180° 'ye tamamlayan açılar olmalarıdır. Kristal eğim 90° (açık yeşil) ise periyot açısı olan 180° 'nin tam yarısıdır bu durumda da gördüğümüz simetrik ve en yüksek en-boy oranına sahip KN'nin elde edildiğidir. {100} ve {111} düzlemlerinde kristal eğim açılarının etkilerinin anlaşılması için yapılan deneylerin sonucu ise Şekil 4.41'de incelenmiştir.

Şekil 4.41a'da {100} düzlemi için farklı kristal eğim açıları ile değişen KN morfolojileri görülmektedir. {100} düzlemi, 4 katlı simetriye sahiptir ve dolayısıyla 90° 'lik periyotlarla sistem kendisini tekrar etmektedir. Kristal eğim 45° (açık yeşil) ise periyot açısı olan 90° 'nin tam yarısıdır, bu durumda da gördüğümüz simetrik ve en yüksek en-boy oranına sahip KN'nin elde edildiğidir. Şekil 4.41b'de ise {111} düzlemi için farklı kristal eğim açıları ile değişen KN morfolojileri görülmektedir. {111} düzlemi, 6 katlı simetriye sahiptir. Diğer düzlemlerde karşımıza çıkan etki burada da gözlenmiş ve en yüksek en-boy oranına sahip KN'ler periyot açısı 60° 'nin tam yarısı olan kristal eğim 30° (açık yeşil)'de elde edilmektedir.

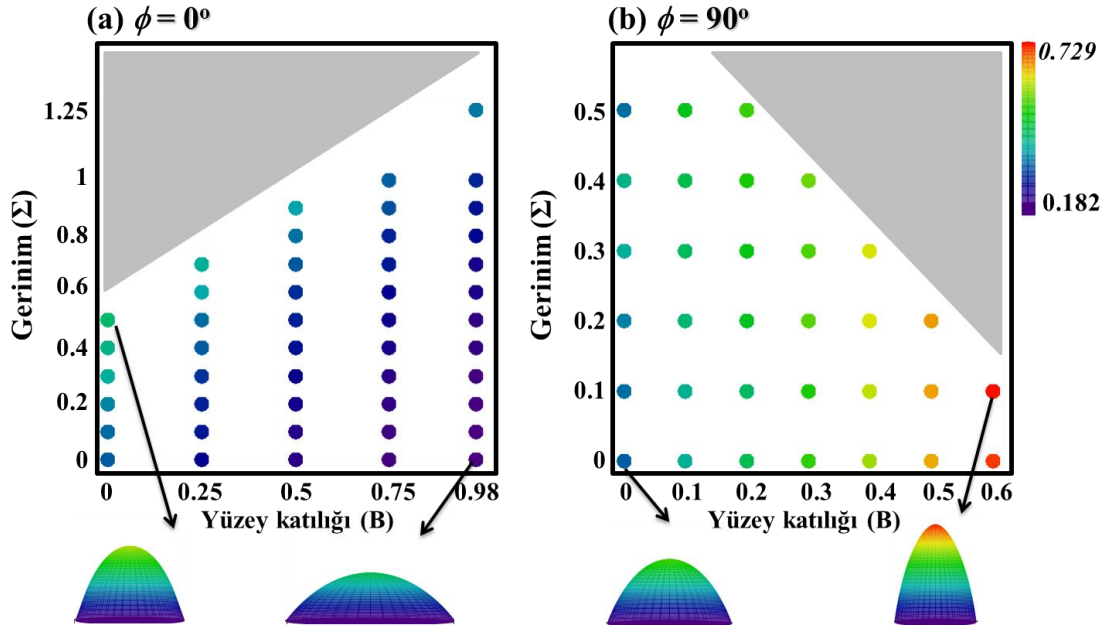
Gözlenen bu farklı KN morfolojileri, KN'lerin teknolojik kullanımları açısından büyük öneme sahiptir. Yapılan deney sonuçları bize kristal eğim parametresi ile sağa veya sola eğimli tepe noktalarına sahip veya tamamen simetrik olan KN morfolojilerinin elde edilebileceğini göstermektedir.



Şekil 4.41 (a) {100} düzleminde (b) {111} düzleminde farklı kristal eğim açılarının KN morfolojilerine etkisi.

Gerinim ve yüzey katılığının birlikte kullanılarak, KN en-boy oranları ve tepe eğriliklerini kontrol edilebilirliği, {110}, {100} ve {111} kristalografik yüzeylerinde araştırılmıştır. Deney sonuçları, faz diyagramları halinde aşağıda verilmiştir.

Şekil 4.42'de kristal eğim açısının 0° (a) ve 90° (b) olduğu iki durumda gerinim kuvvetleri ve yüzey katılığı parametreleriyle en-boy oranlarının kontrolünü sağlayan diyagram {110} yüzeyi için verilmiştir. Bu iki diyagramda da tek KN'ler incelenmektedir ve KN'lerin fragmente olarak adacık sayısını arttırdığı durumlar gri bölgeler olarak gösterilmiş ve hesaplamalara dahil edilmemiştir.

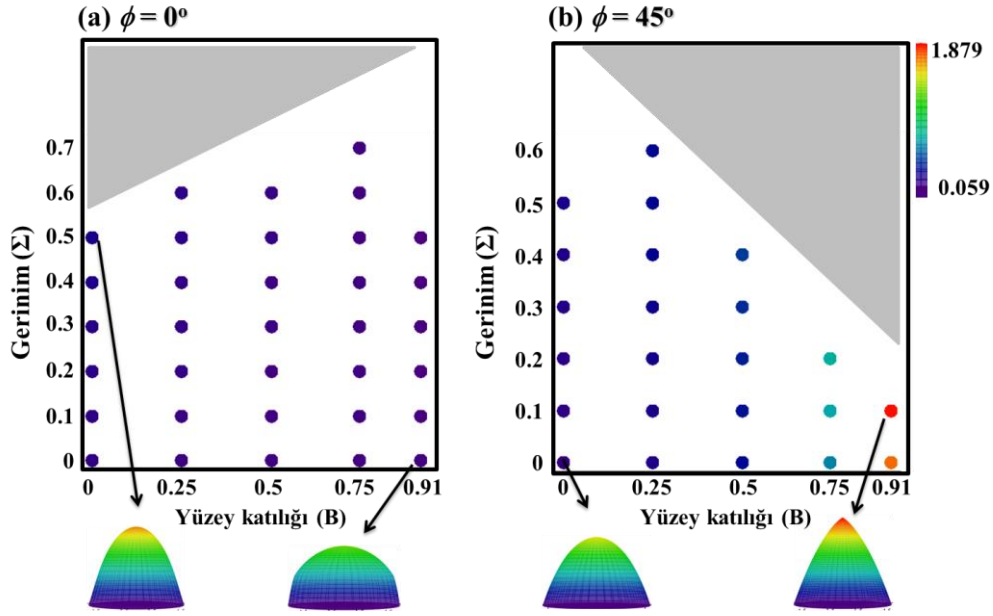


Şekil 4.42 {110} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 90^\circ$ durumları için en-boy oranı değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq} = 45^\circ$).

Şekil 4.42a'da, yüzey katılığının minimum değerlerinde görece yüksek en-boy oranları elde edilmektedir. Gerinim kuvvetinin artırılması, en-boy oranlarını arttırmaktadır. Şekil 4.42b'de ise, yüzey katılığının minimum değerlerinde en-boy oranları en düşük değerlerindedir, gerinim kuvvetinin artırılmasıyla en-boy oranları artmıştır.

Şekil 4.43'te KN tepe eğriliklerinin kristal eğim açısının 0° (a) ve 90° (b) olduğu iki durumda gerinim kuvvetleri ve yüzey katılığı parametreleriyle nasıl kontrol edilebileceğini gösteren diyagram verilmiştir. Kristal eğim açısı 90° iken adacık bölünmesinin (fragmentasyon) görüldüğü değer yüzey katılığının 0.7 olduğu değerdir. Bu sebeple yüzey katılığı değerleri 0-0.6 aralığında alınarak incelenmiştir. Burada kristal eğim açısının 0° olduğu durumda, KN tepe eğriliği de yüzey katılığının artışı ile azalmakta, kristal eğim açısının 90° olduğu durumda ise artmaktadır. Gerinim kuvvetinin, her iki durumda da KN tepe eğriliklerini arttırdığı görülmüştür.

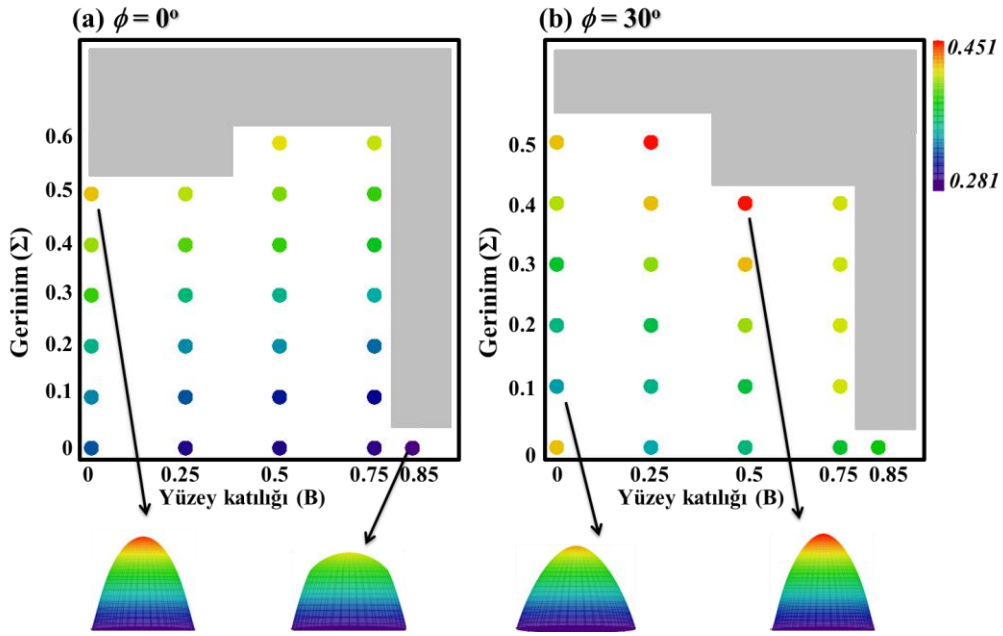
Şekil 4.45'te {100} yüzeyinde kristal eğim açılarının $\phi = 0^\circ$, $\phi = 45^\circ$ olduğu durumlarda, gerinim kuvvetleri ve yüzey katılığı parametreleriyle KN tepe eğriliklerinin nasıl kontrol edilebileceğini gösteren diyagram verilmiştir. Kristal eğim açısının $\phi = 0^\circ$ olması durumunda, en yüksek tepe eğrilikleri, izotropik ($B=0$) durumda elde edilmektedir. Yüzey katılığının artışıyla, tepe eğrilikleri azalmaktadır. Gerinim kuvvetlerinin artışı ile tepe eğrilikleri artmaktadır. (b) incelendiğinde, (a)'nın tersine en yüksek tepe eğriliği yüzey katılığının maksimum değerinde elde edilebilmektedir.



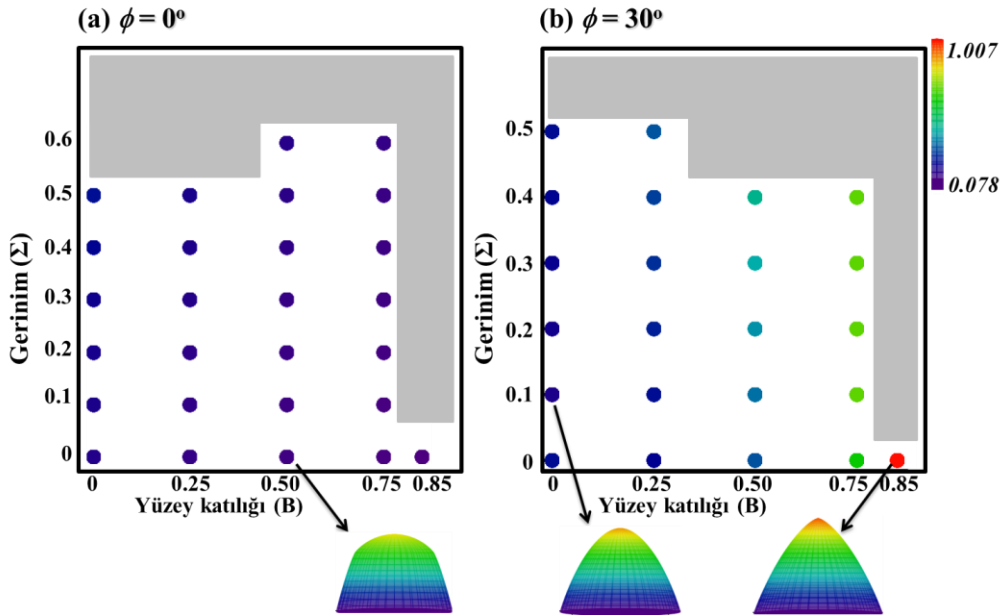
Şekil 4.45 {100} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 45^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq} = 45^\circ$).

Burada bir diğer önemli nokta da, fasetli yüzeylere sahip KN oluşumlarının kristal eğim açısı ve yüzey katılığı parametreleriyle kontrol edilebileceğinin gösterilmesidir. Şekil 4.45(a) ve (b)'de, yüzey katılığının maksimum olduğu bölgelerde elde edilen KN'ler fasetli yüzeylere sahip olacaktır. Kristal eğim açısı ise bu fasetli yüzeylerin oluşum kinetiğini ve nihai morfolojiyi kontrol etmektedir.

{111} yüzeyi için, kristal eğim açıları $\phi = 0^\circ$ ve $\phi = 30^\circ$ için, KN en-boy oranlarını ve tepe eğriliklerinin kontrol edilebilirliğini araştırmak üzere, deneyler yapılmış ve hem en-boy oranları (Şekil 4.46) hem de tepe eğrilikleri (Şekil 4.47) için gerinim-yüzey katılığı diyagramları oluşturulmuştur.



Şekil 4.46 {111} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 30^\circ$ durumları için en-boy oranlarının değişimini gösteren gerinim-üzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq} = 45^\circ$).



Şekil 4.47 {111} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 30^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-üzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq} = 45^\circ$).

Şekil 4.46'da {111} yüzeyinde kristal eğim açıları için $\phi = 0^\circ$ (a), $\phi = 30^\circ$ (b) durumları için en-boy oranlarının değişimini gösteren gerinim-üzey katılığı diyagramı verilmiştir. {110} ve {100} yüzeylerindeki farklı kristal eğim açıları arasında gördüğümüz davranışlara benzer bir şekilde, (a)

ve (b)'de birbirine zıt etkiler tekrar karşımıza çıkmaktadır. Kristal eğim açısının, $\phi = 0^\circ$ olduğu durumda (a), artan yüzey katılığı ile KN en-boy oranları azalmakta, $\phi = 30^\circ$ olduğu durumda (b), yüzey katılığının artmasıyla en-boy oranları artmaktadır.

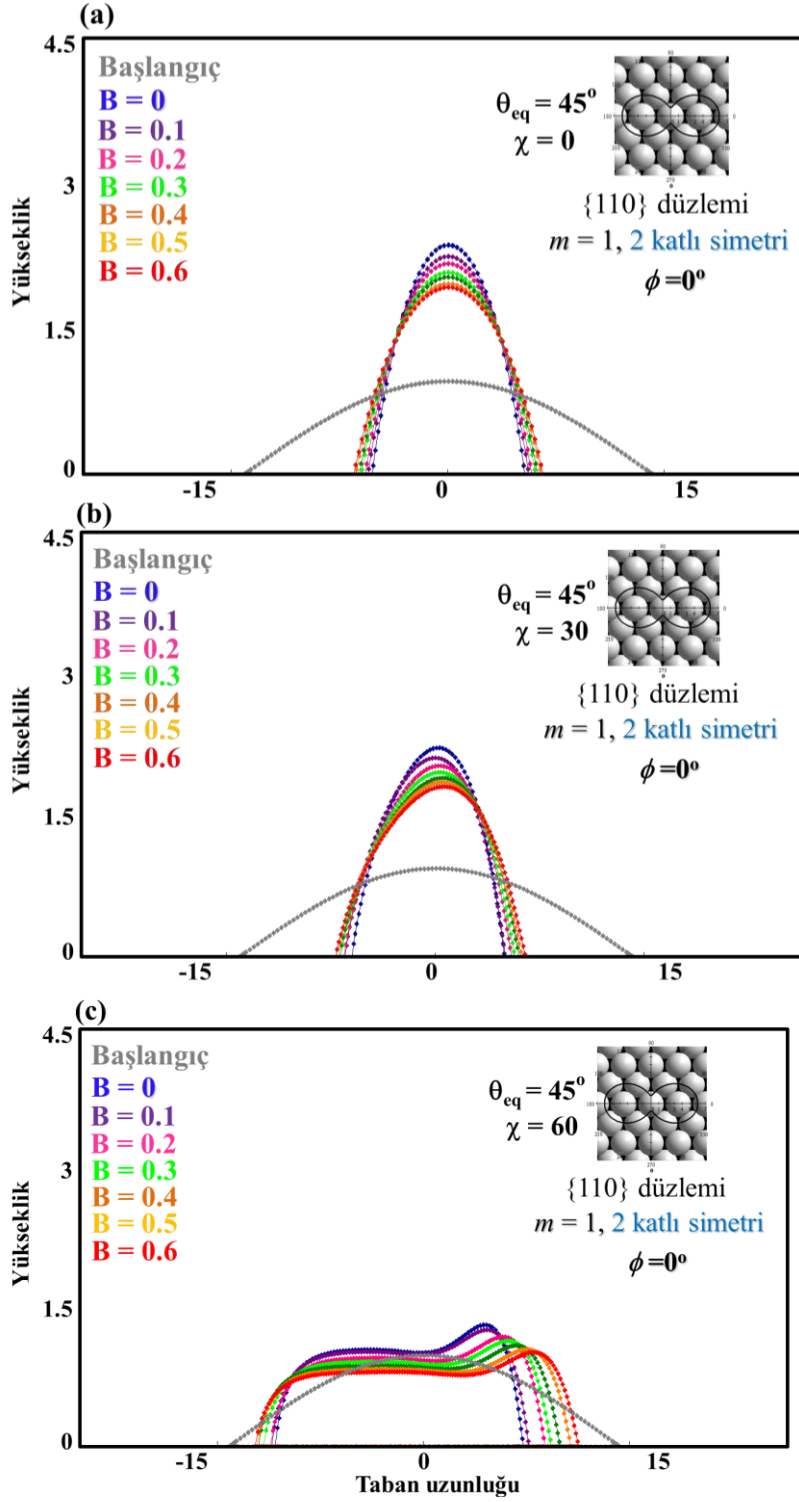
Şekil 4.47'de {111} yüzeyinde kristal eğim açılarının $\phi = 0^\circ$ (a), $\phi = 30^\circ$ (b) durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı verilmiştir. Tepe eğriliklerinin en yüksek değerleri, (a)'da düşük yüzey katılığı değerlerinde gerinim kuvvetinin uygulanmasıyla, (b)'de ise maksimum yüzey katılığı değerlerinde elde edilmiştir. (b)'de gerinim kuvvetlerinin artışıyla tepe eğriliklerinde önemli bir fark elde edilememiştir.

Bu diyagramlar bize, yüksek veya düşük en-boy oranlarına ve tepe eğriliklerine sahip KN'lerin elde edilebilmesi için kristal eğim, yüzey katılığı ve gerinim kuvvetleri parametrelerinin nasıl ayarlanabileceğini göstermektedir ve teknolojik açıdan cihazlarda kullanılabilecek KN'lerin elde edilebilmesi için büyük öneme sahiptir.

Yön-bağımlı sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve kristal eğim açısı ile kontrolü

Kristal eğim açısının KN morfolojilerini, yüzey katılığı etkisini kontrol ederek nasıl değiştirdiği yukarıda incelenmiştir. Sistemin simetri derecesine ve kristal eğim açısına bağlı olarak, KN'lerin sağa veya sola yaslı (hızalı), veya simetrik bir şekilde elde edilebilmektedir. Elektrik alan uygulanmasının KN morfolojilerine etkilerini araştırmak için farklı yüzey katılığı değerlerindeki KN'ler üzerinde yapılan deneylerin sonuçları aşağıda irdelenmiştir.

Öncelikle kristal eğimin sıfır olduğu sistem incelenecektir. Şekil 4.48'de {110} düzleminde KN'lerin, farklı yüzey katılığı değerleri için (a)'da $\chi = 0$, (b)'de $\chi = 30$ ve (c)'de $\chi = 60$ şiddetinde elektrik alan uygulanmasıyla elde edilen denge morfolojileri verilmiştir. (a) incelenirse, yüzey katılığı değerlerinin artmasıyla KN'lerin yüksekliklerinin düştüğü görülmektedir. (b)'de elektrik alan uygulanan KN'lerin hafif sağa yaslı bir morfolojiye ulaştıkları görülmektedir. Elektrik alan kuvvetleri altında yüzey katılığının etkisinin, elektrik alanın olmadığı (a)'daki ile aynıdır. En düşük yüzey katılığına sahip KN, en fazla yüksekliğe sahip, en yüksek yüzey katılığı değerinde ise en düşük yükseklikteki KN'ler oluşmaktadır. (c) 'de elektrik alan şiddeti $\chi = 60$ 'a çıkartılmıştır. Artan elektrik alan şiddeti ile KN morfolojileri film oluşturmaya başlamaktadır. Oluşan filmler incelendiğinde ise (a) ve (b) ile benzer şekilde, düşük yüzey katılığı değerlerinde daha fazla yüksekliğe sahip film, yüksek yüzey katılığı değerlerinde daha düşük kalınlığa sahip fakat daha uzun film elde edilmektedir.

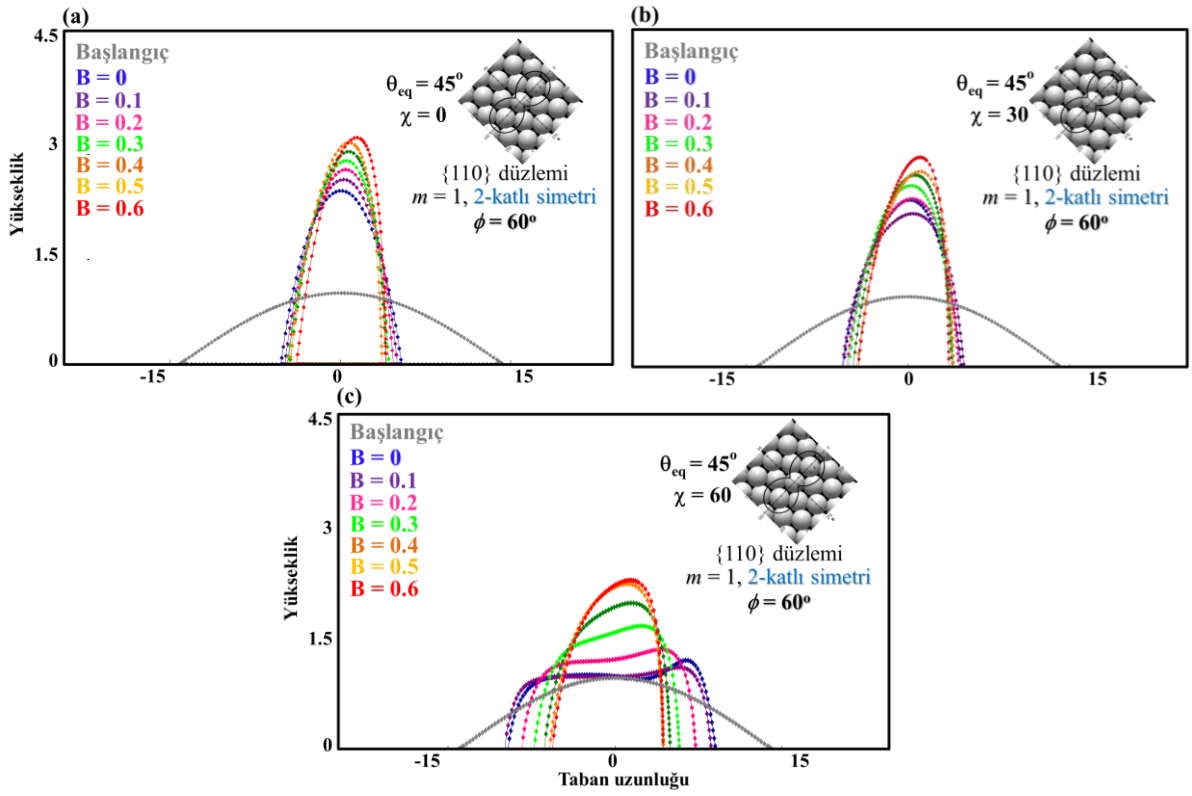


Şekil 4.48 $\phi = 0^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.

Kristal eğim açısının farklı alınması durumunda simetrisi ve hizalanışı farklı olan KN'lerin elde edildiği belirlenmişti. Kristal eğim açısının değişimiyle elde edilen hizalı/bir tarafa yaslı KN'lerin uygulanacak elektrik alan ile kontrol edilip edilemeyeceği, farklı yüzey katılığı

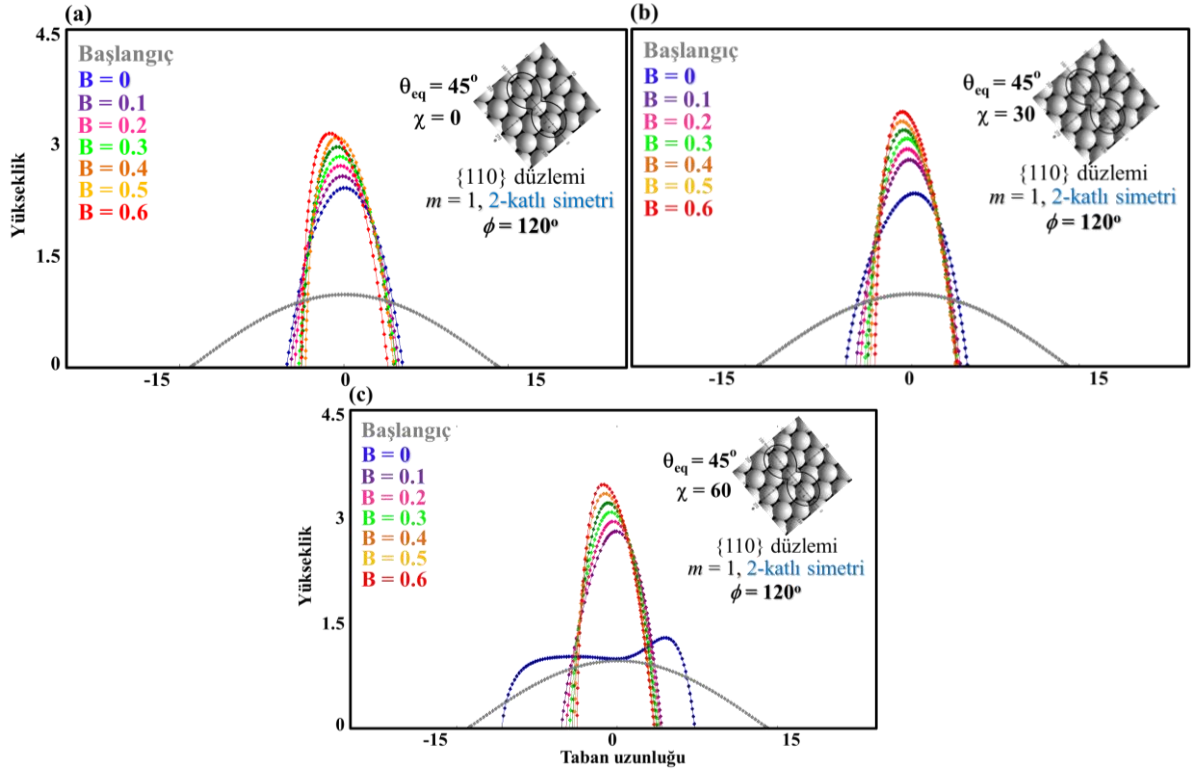
değerlerine sahip KN sistemi için araştırılmıştır. Bunun için kristal eğim açısının $\phi = 60^\circ$ (Şekil 4.49), ve $\phi = 120^\circ$ (Şekil 4.50) olduğu durumlar incelenmiştir.

Şekil 4.49'da $\phi = 60^\circ$ durumunda, başlangıçta elektrik alanın olmadığı (a)'da farklı yüzey katılığı değerlerine sahip, hafif sağa yaslı/yönelimli KN'ler elde edilmiştir. Kristal eğim açısının ve yüzey katılığının etkisiyle eğimli KN'lerin, yönelimlerinin (b) $\chi = 30$ değeri ile arttırılabildiği görülmektedir. (c) ise, $\chi = 60$ 'a çıkarıldığında, düşük yüzey katılığına sahip KN'lerde filme geçiş görülürken ($B = 0$, $B = 0.1$, $B = 0.2$), daha yüksek yüzey katılığına sahip KN'lerin yönelimlerinin arttığı görülmektedir.



Şekil 4.49 $\phi = 60^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.

Şekil 4.50, $\phi = 120^\circ$ durumunda, (a)'da farklı yüzey katılığı değerlerine sahip, hafif sola yaslı/yönelimli KN'ler elde edilmiştir. Kristal eğim açısının ve yüzey katılığının etkisiyle yönelimli elde edilmiş KN'lerin, yönelimlerinin (b) $\chi = 30$ 'a çıkıldığında, arttırılabildiği görülmektedir. (c) ise, $\chi = 60$ 'a çıkarıldığında ise yönelimdeki artış devam etmiştir. $\phi = 60^\circ$ 'den farklı olarak $\chi = 60$ değerinde filme geçiş sadece $B = 0$ (izotropik durum)'da görülmüştür.



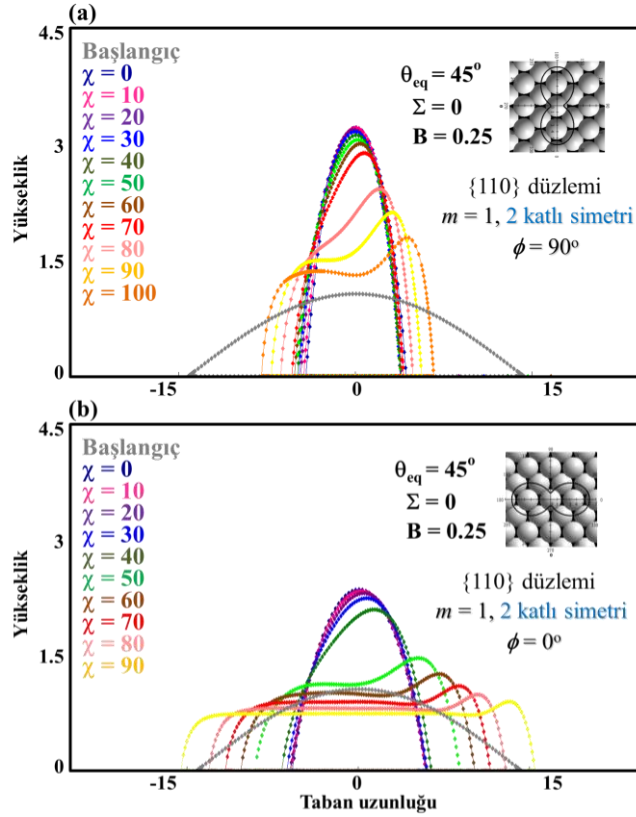
Şekil 4.50 $\phi = 120^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.

Şekil 4.48, Şekil 4.49 ve Şekil 4.50 birlikte değerlendirildiğinde, kristal eğim parametresinin ve elektrik alanın KN morfoloji kontrolündeki rolü anlaşılmaktadır. Sistemde elektrik alanın uygulanmadığı durumda, $\{110\}$ yüzeyinde birbirlerinin simetriği olan $\phi = 60^\circ$ ve $\phi = 120^\circ$ açıları KN'lerin belirli bir yönde yönelimli büyütülebilmesini sağlamaktadır, bu yönelimin artırılması ise sisteme elektrik alan uygulanmasıyla elde edilmektedir.

Kristal eğim açısı önceki bölümlerde anlatıldığı gibi, KN'lerin yönelimli morfolojilerinin oluşmasında rol oynayan ve sistemdeki yüzey katılığı etkisini kontrol eden önemli bir parametredir. Bir önceki bölümde, kristal eğim açısının sağladığı yönelimin elektrik alan uygulanarak artırılabilceği gösterilmişti. Kristal eğim açısının değişimiyle, elektrik alan kuvvetlerinin KN morfolojilerini kontrol edebilirliğinin daha iyi anlaşılması için seçilen iki farklı kristal eğim açısı için $\{110\}$, $\{100\}$, $\{111\}$ yüzeylerinde, düşük şiddetteki yüzey katılığı değerleri için elektrik alan sisteme uygulanarak oluşan KN morfolojileri incelenmiştir.

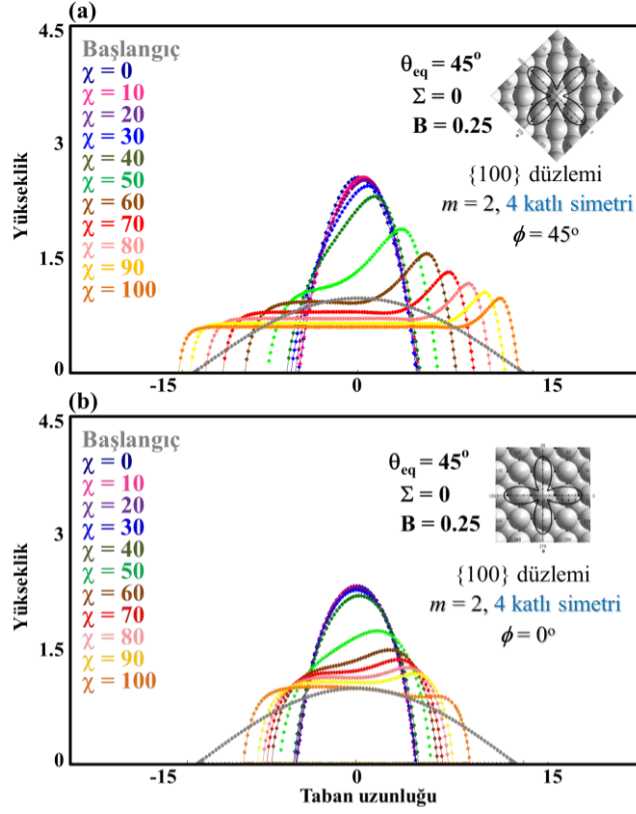
Şekil 4.51, $\{110\}$ yüzeyinde kristal eğim açısının 90° (a) ve 0° (b) olduğu iki durumda düşük şiddette yüzey katılığı durumunda KN morfoloji değişimlerini göstermektedir. (a)'da kristal eğim açısının 90° olduğu durum, görece yüksek KN en-boy oranlarının elde edilmesini sağlamaktadır. Artan elektrik alan şiddeti ile KN'ler öncelikle sağa yaslı bir morfolojiye doğru

gitmektedir $\chi = 70$ değerinden sonra sağa yaslı tepecikli, filme doğru giden bir ara faz oluşmaktadır. (b)' de ise, kristal eğim açısının 0° alınmasıyla, başlangıçta daha düşük en-boy oranlarına sahip olan KN'ler uygulanan elektrik alan şiddetinin artmasıyla kristal eğim açısının 90° olduğu duruma göre daha düşük elektrik alan değerlerinde film oluşumuna gitmiştir.



Şekil 4.51 $\{110\}$ yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.

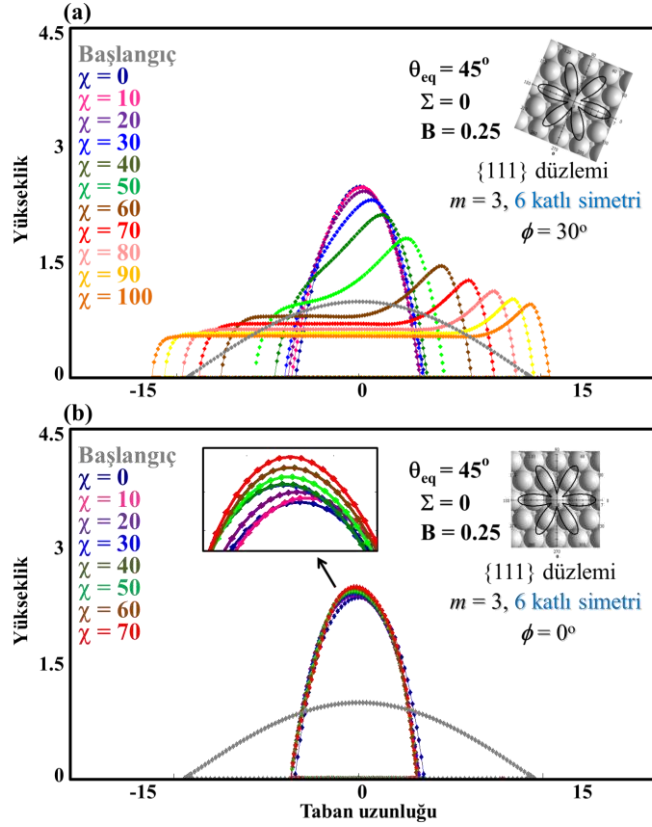
Şekil 4.52'de $\{100\}$ yüzeyinde kristal eğim açısının 45° (a) ve 0° (b) olduğu iki durumda düşük şiddette yüzey katılığına sahip sistemde KN morfoloji değişimlerini göstermektedir. (a)'da, kristal eğim açısının 45° olduğu durumda, elektrik alan şiddetinin artışı, KN'lerin filme geçişlerini sağlamaktadır. (b)'de kristal eğim açısının 0° olduğu durumda, KN'lerin elektrik alanın artmasıyla, KN'lerin tamamen film oluşturmadan KN-film arasında bir fazda kaldığı, görülmektedir. Aynı şekilde $\{111\}$ düzleminde elektrik alan şiddetinin artırılmasıyla düşük şiddetteki yüzey katılığı değerlerinde farklı kristal eğim açıları için, KN morfolojilerinin kontrol edilebildiği test edilmiştir.



Şekil 4.52 $\{100\}$ yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.

Şekil 4.53'de $\{111\}$ yüzeyinde, kristal eğim açısının 30° (a) ve 0° (b) olduğu iki durumda, elektrik alan şiddetinin artmasıyla KN morfoloji değişimleri verilmiştir. Kristal eğim açısının 30° (a)'da $\{100\}$ yüzeyindeki benzer şekilde uygulanan elektrik alanının artmasıyla, KN'ler filme doğru geçiş yapmaktadır. (b)'de ise uygulanan elektrik alan şiddetinin artmasıyla, $\chi = 80$, $\chi = 90$ ve $\chi = 100$ dedi ara fazlar dışında, KN olarak kalmışlar ve yükseklikler uygulanan elektrik alan şiddetiyle artmıştır.

Şekil 4.51, 4.52 ve 4.53 birlikte değerlendirildiğinde, kristal eğim açılarının elektrik alan kuvvetleri altında, KN-film geçişlerinin kontrolünün sağlanabildiği fakat bu etkilerin sistemlere göre değiştiği görülmektedir. Bu grafikler, uygulamalarda kullanılacak KN'lerin elde edilmesi veya film oluşumu isteniyorsa, film elde edilmesi için gereken malzeme özelliklerini, kristal yönelimlerini ve uygulanacak elektrik alan şiddetinin nasıl ayarlanması gerektiğini göstermektedir.



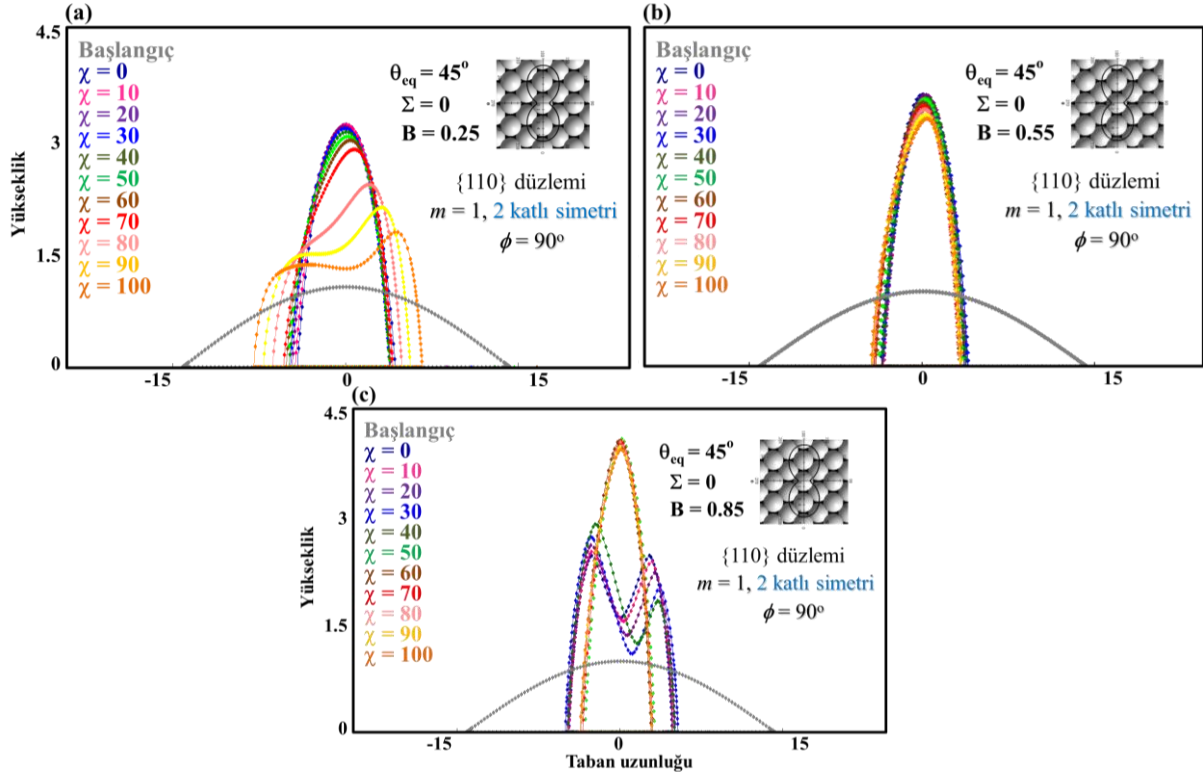
Şekil 4.53 {111} yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.

Yön-bağımlı sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve yüzey katılığı ile kontrolü

Yüzey katılığı, KN'lerin, en-boy oranlarını ve tepe eğriliklerini kontrol etmektedir. Bu etki ise, malzemenin depozit edileceği yön ayarlanarak kristal eğim parametresiyle ayarlanabilmektedir. Elektrik alan kuvvetlerinin farklı yüzey katılığı değerlerinde sistemi kontrol edebilirliğini araştırmak için {110}, {100} ve {111} yüzeylerinde düşük, orta ve yüksek şiddette yüzey katılığı değerlerindeki sistemler için elektrik alan kuvvetleri sisteme uygulanmıştır. Birbirinden farklı etkiler yaptığını önceki deneylerimizden gördüğümüz iki farklı kristal eğim açısı için $\phi = 0^\circ$ olduğu durum ve kristalografik yönler için simetri açısının tam yarı değerlerindeki ($\{110\}$ için $\phi = 90^\circ$, $\{100\}$ için $\phi = 45^\circ$ ve $\{111\}$ için $\phi = 60^\circ$) davranışlar araştırılmıştır.

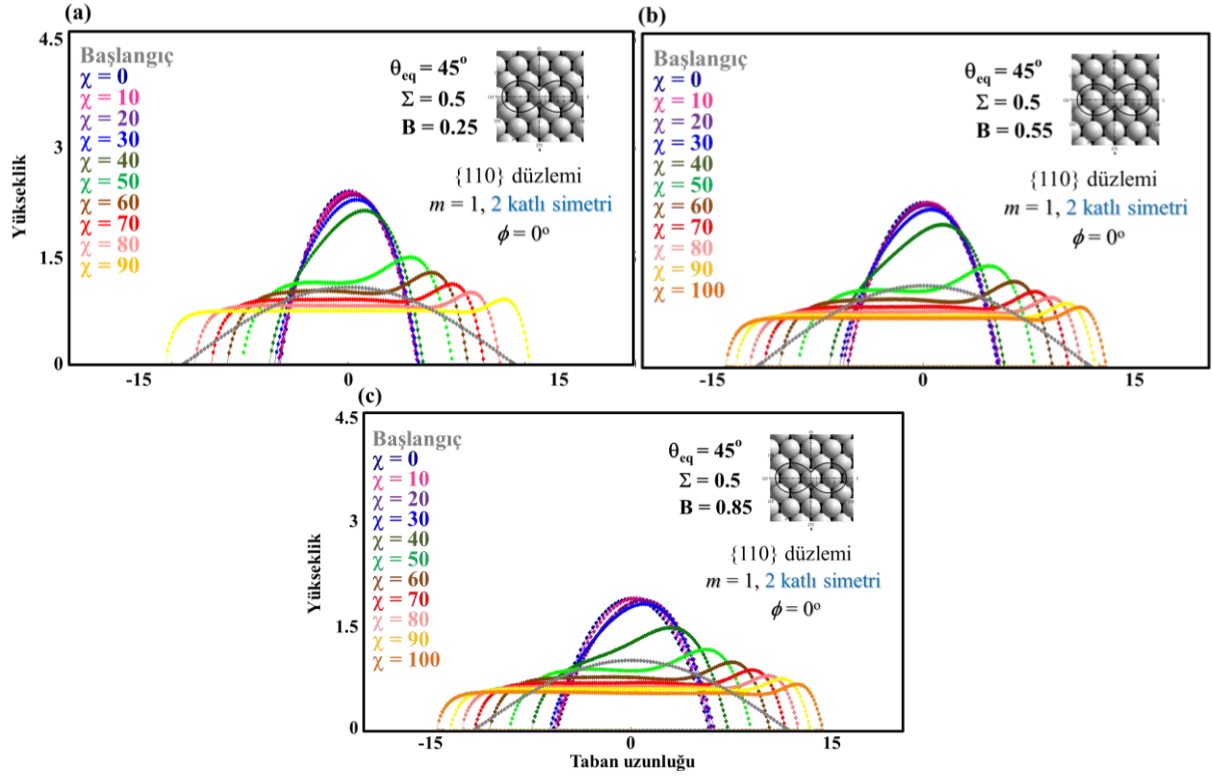
Şekil 4.54 (a)'da, düşük şiddetteki yüzey katılığı değerine sahip sistemde, elektrik alan uygulandıkça KN'ler filme geçiş yapacak ara faz morfolojilerine doğru ilerlemektedirler. Bu sonuç, izotropik sistemde düşük denge açılına sahip sistemlerde gördüğümüz davranışlarla paraleldir. (b)'de yüzey katılığının orta şiddette olduğu durumda, KN'lerde elektrik alan şiddeti

artıkça filme geçiş görülmektedir. Bu bize, yüzey katılığı şiddetinin düşük veya orta şiddette olduğu sistemler seçilerek elektrik alan etkisinin kontrol edilebileceğini göstermektedir. (c)'de ise yüzey katılığı şiddetinin yüksek olduğu sistemde elektrik alan değerinin düşük olduğu durumlarda film oluşumu yerine 2 tepeli kuantum nokta oluşumunu sağladığı, yüksek elektrik alan şiddeti değerlerinin ise fragmente olmamış tek KN oluşumunu sağladığı görülmüştür.

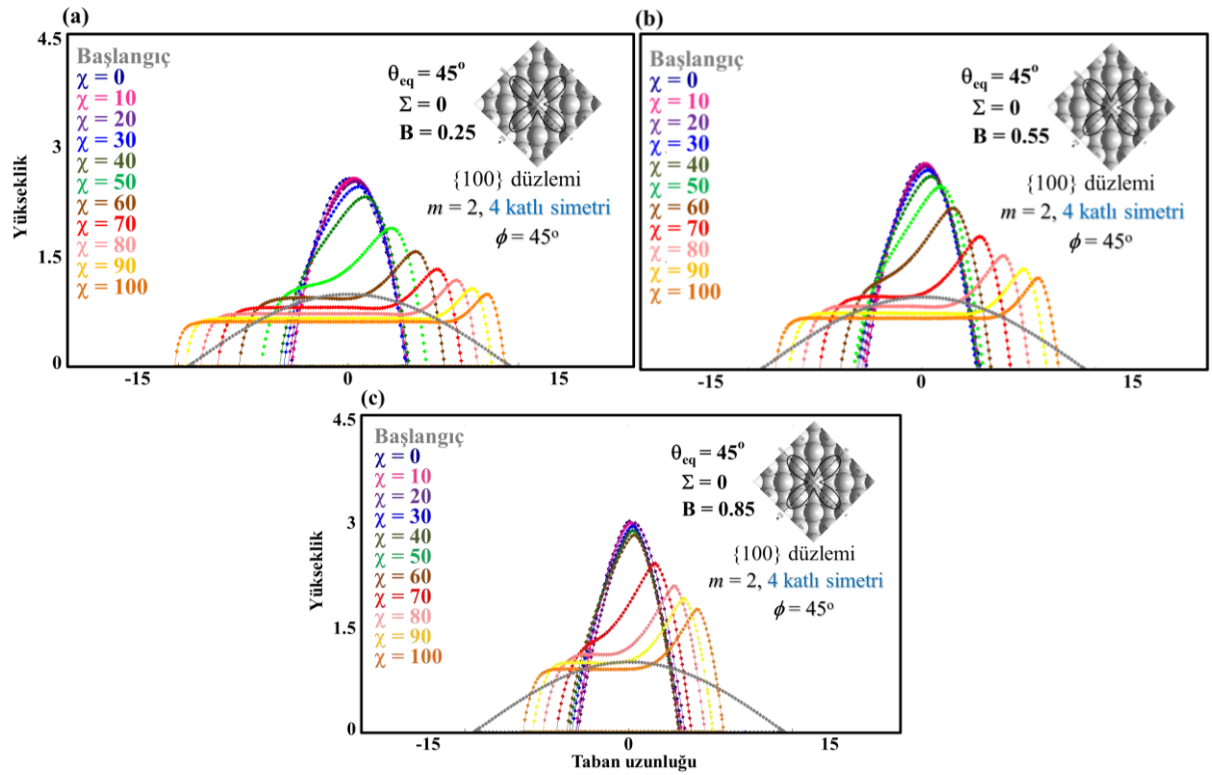


Şekil 4.54 {110} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü $\phi = 90^\circ$.

Şekil 4.55, {110} yüzeyinde, düşük (a), orta (b) ve yüksek (c) şiddetteki yüzey katılığı değerlerine sahip sistemde kristal eğim açısı $\phi = 0^\circ$ dir. Üç durumda da ortak olarak elektrik alan şiddetinin artışı KN'lerin filme dönüşmesini sağlamaktadır. Oluşan filmler incelendiğinde, yüzey katılığının artışıyla, oluşan filmlerin uzunluğunun arttığı görülmektedir. Kristal eğim açısının $\phi = 0^\circ$ ve $\phi = 90^\circ$ olduğu iki durumda elektrik alan etkilerinin de birbirinden farklı olduğunu, $\phi = 0^\circ$ durumunda film oluşumuna, $\phi = 90^\circ$ durumunda ise KN yapıda fragmentasyona sebep olduğu görülmüştür.

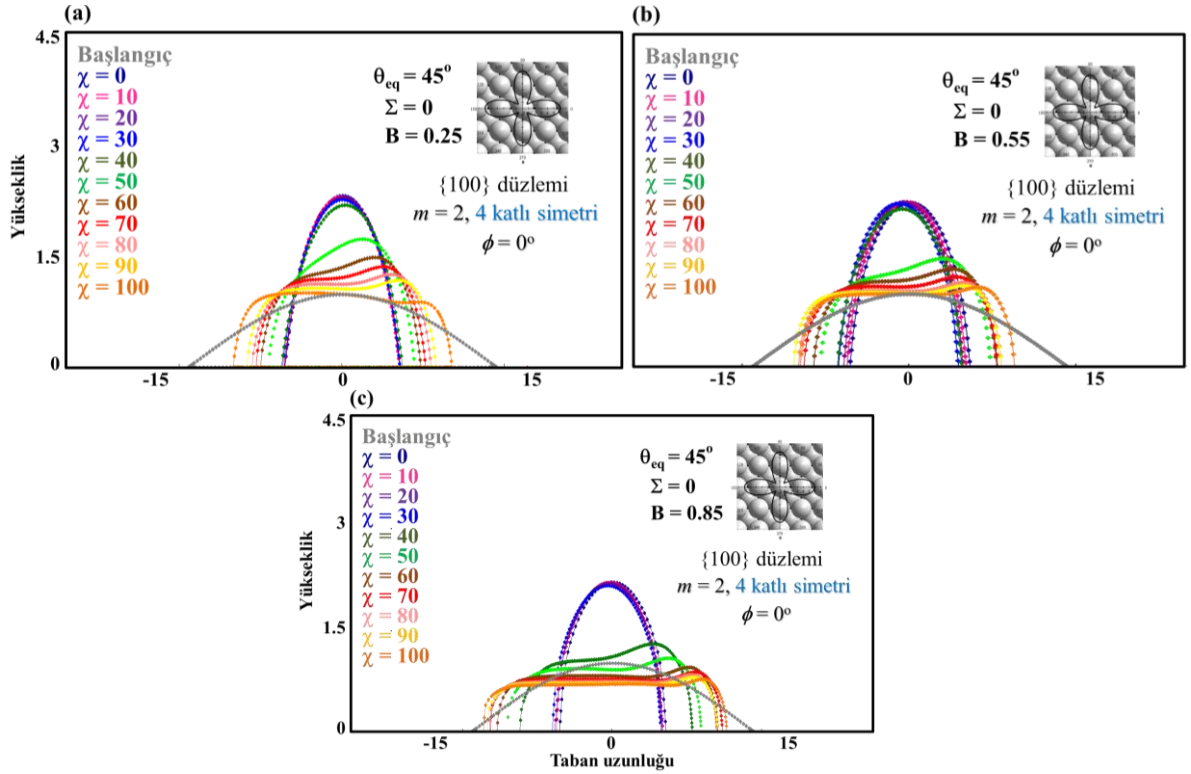


Şekil 4.55 {110} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi = 0^\circ$).



Şekil 4.56 {100} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi = 45^\circ$).

Şekil 4.56'da $\{110\}$ yüzeyinde, düşük şiddette yüzey katılığı değerinde elektrik alan şiddetinin artmasıyla KN'den bir tarafı sola yaslı adacıklarla ara fazlar oluşturarak film oluşumuna doğru gitmektedir. (b) ve (c)'de yüzey katılığının artışıyla, filme geçiş için daha yüksek elektrik alan şiddeti gerekmektedir. Örneğin, düşük şiddetteki yüzey katılığındaki sistem olan (a)'da elektrik alan değerinin 60 olduğu (kahverengi) morfolojinin filme doğru geçiş yaptığı görülürken, (b)'de aynı elektrik alan değerindeki morfolojinin KN ve film arasında bir geçiş fazı, (c)'de yüzey katılığının artmasıyla KN olduğu görülmektedir.

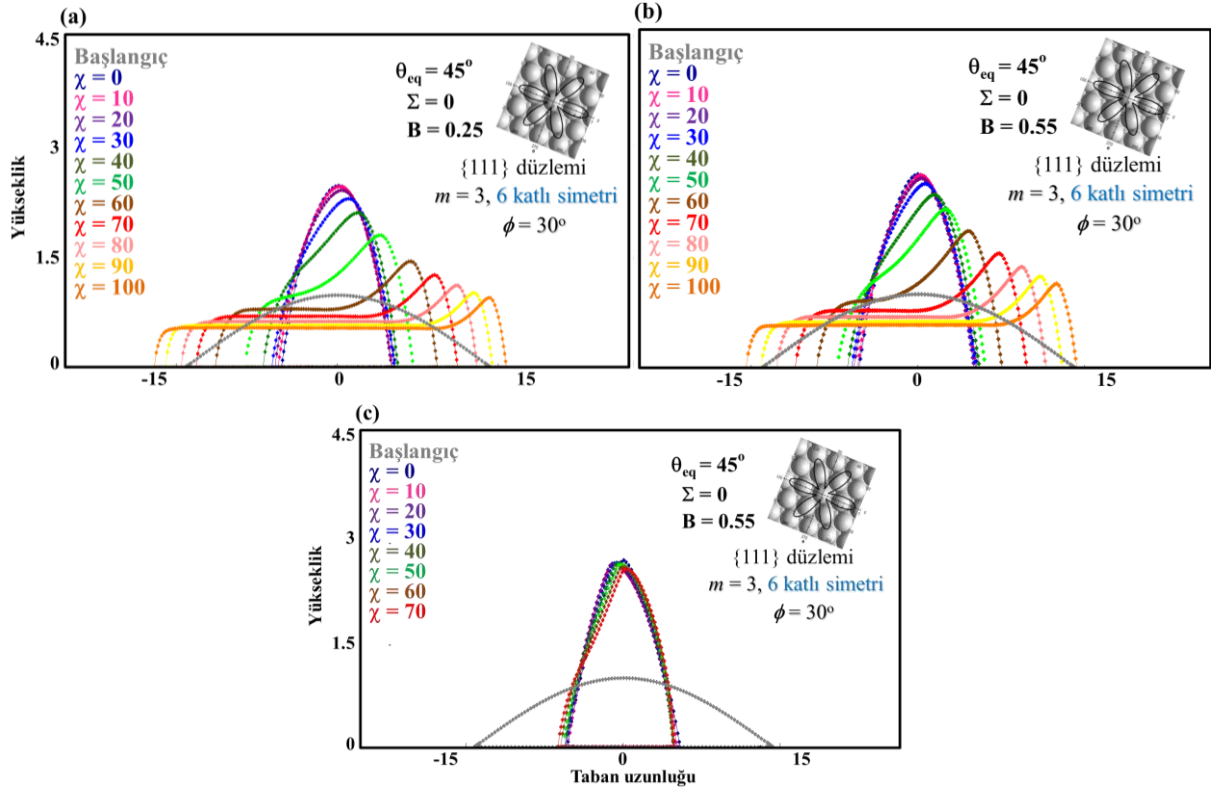


Şekil 4.57 $\{100\}$ yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.57'de $\{100\}$ yüzeyinde, düşük (a), orta (b) ve yüksek (c) şiddetteki yüzey katılığı değerlerine sahip sistemde kristal eğim açısı $\phi=0^\circ$ 'dir. (a)'da elektrik alan değerinin artışıyla KN ve film morfolojileri arasında geçiş fazları elde edilmektedir. (b)'de artan yüzey katılığı değerleri için bu geçiş devam etmektedir. (c)'de ise ara fazların filme doğru geçiş yaptığı görülmektedir. $\chi=50$ incelenirse (açık yeşil), (a)'da, geçiş morfolojisindeyken, (c)'de filme geçiş yapmıştır.

Şekil 4.56, elektrik alan kuvvetlerine maruz bırakılan bir sistemde yüzey katılığı değiştirilerek sistemde film elde edilebileceğini göstermektedir. Şekil 4.55 ve Şekil 4.56'dan edindiğimiz

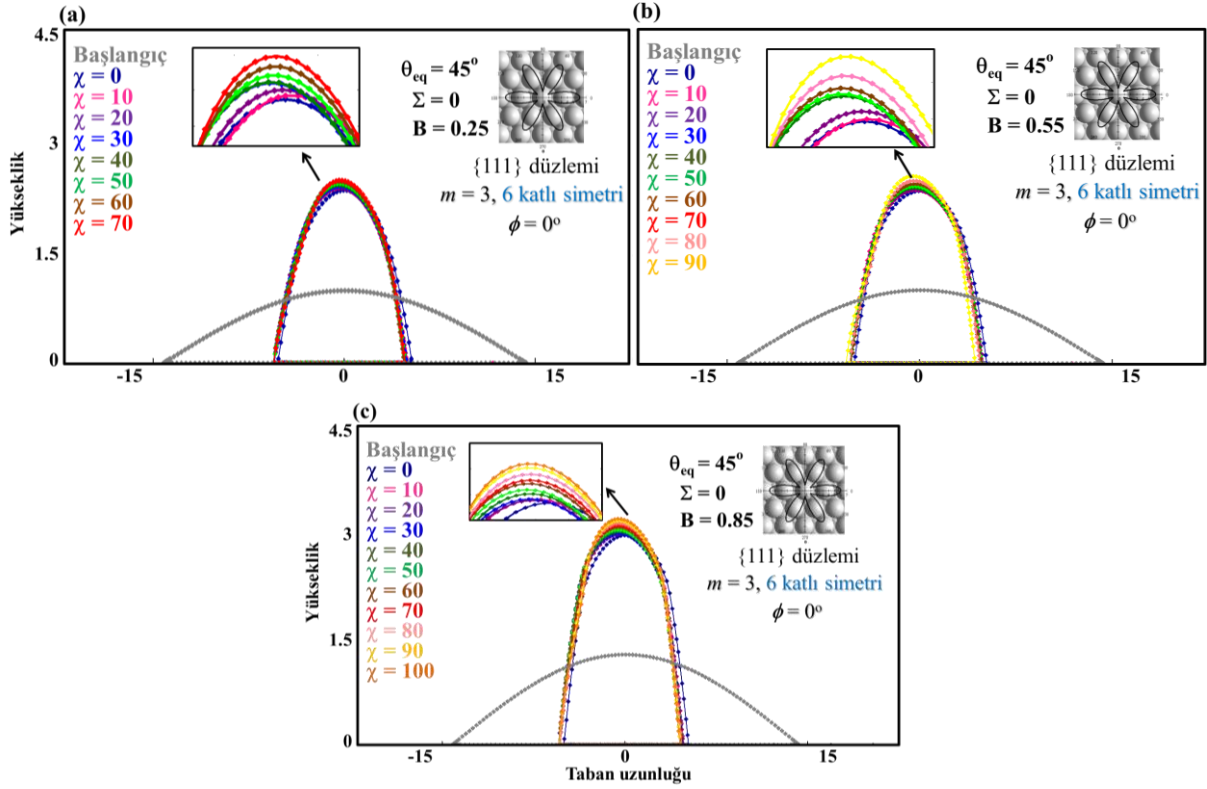
bilgiler, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ ve $\phi=45^\circ$ olduğu iki durumda, elektrik alan etkisinin sistemi farklı şekilde etkilediğini göstermektedir. Bu sonuç, önceki bölümlerde KN'lerin enboy oranlarının ve tepe eğriliklerinin kontrolünde kristal eğim açısında gördüğümüz etkilerle paraleldir.



Şekil 4.58 {111} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).

Şekil 4.58'de {111} yüzeyindeki sistemde düşük şiddetteki yüzey katılığı değerine sahip (a)'da, elektrik alanın artışı ile KN'den filme geçiş sağlanmıştır. Düşük (a) ve orta şiddetteki (b) morfolojiler kıyaslandığında, orta şiddetteki yüzey katılığı değerlerinde oluşan filmlerin uzunluklarının kısaldığı görülmektedir. Ek olarak filme geçiş yapılan elektrik alan değeri artmıştır. $\chi=60$ incelendiğinde, (a)'da film oluşumu görülürken, (b)'de film ve KN arasında bir geçiş fazında olduğu, (c)'de ise KN olarak kaldığı görülmektedir. (c)'de yüksek yüzey katılığı değerlerinde, film oluşumu gerçekleşmemiş, KN morfolojileri elde edilmiştir.

Şekil 4.59'da {111} yüzeyinde, düşük (a), orta (b) ve yüksek (c) yüzey katılığına sahip ve kristal eğim açısı $\phi=0^\circ$ için, KN'lerin elektrik alan ile değişen morfolojilerini gösteren grafikler verilmiştir.



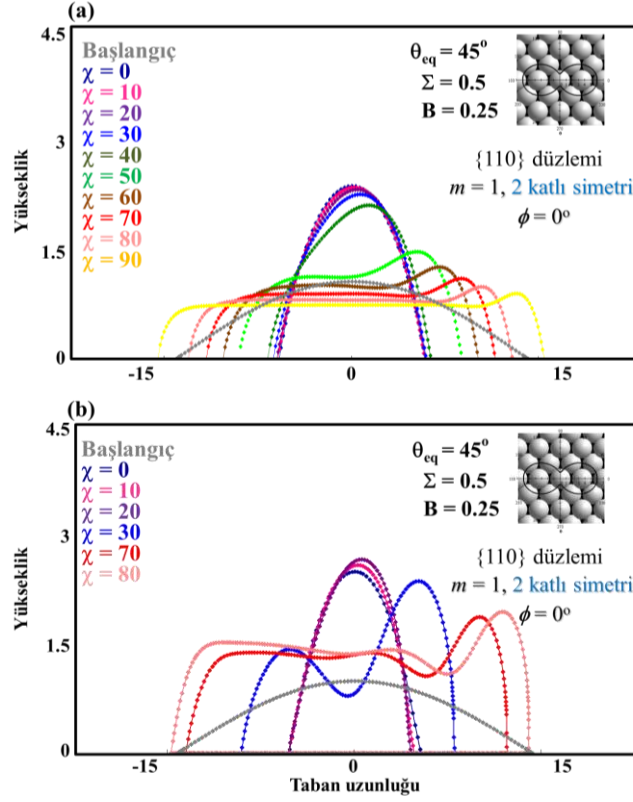
Şekil 4.59 {111} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü.

Yön-bağımlı sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve gerinim ile kontrolü

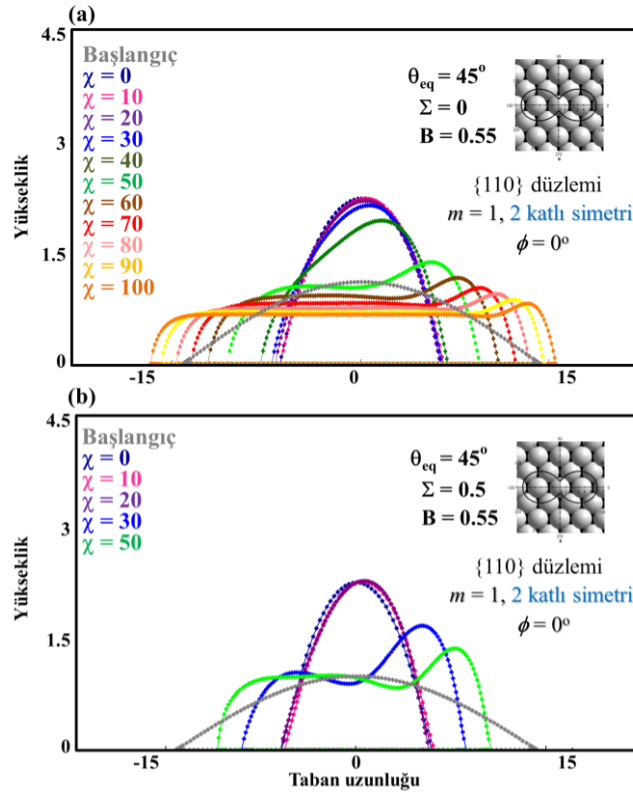
Kristal eğim açısı ve yüzey katılığı parametrelerine ek olarak uygulanan gerinim kuvvetlerinin KN morfolojilerini nasıl etkileyeceğini anlamak için, düşük şiddette gerinim kuvvetleri, {110}, {100} ve {111} yüzeylerine uygulanmıştır. Gerinim kuvvetlerinin elektrik alan altındaki etkilerinin daha kapsamlı bir şekilde incelenebilmesi için, deneyler önceki bölümde incelenen kristal eğim açısı ve yüzey katılığı değerlerindeki sistemlere uygulanmıştır.

Bu deneylerde, gerinim kuvvetlerinin düşük şiddette tutulmasının sebebi, yüksek gerinim kuvvetlerine çıkıldıkça, elektrik alanın da etkisiyle ince filmin kırılmasıdır (fracture). İlk olarak, {110} yüzeyinde seçilen iki kristal eğim açısı değeri için ($\phi=0^\circ$ ve $\phi=90^\circ$) düşük, orta ve yüksek şiddetteki yüzey katılığı değerlerine sahip sistemler için gerinim kuvvetinin etkisi incelenmiştir.

Şekil 4.61'de, kristal eğim açısının, $\phi=0^\circ$ olduğu durumda orta şiddetteki yüzey katılığındaki sistem için, gerinim kuvvetinin $\Sigma=0$ (a) ve $\Sigma=0.5$ (b) olması durumunda, elde edilecek KN yapıları verilmiştir.



Şekil 4.60 {110} yüzeyinde düşük şiddeteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

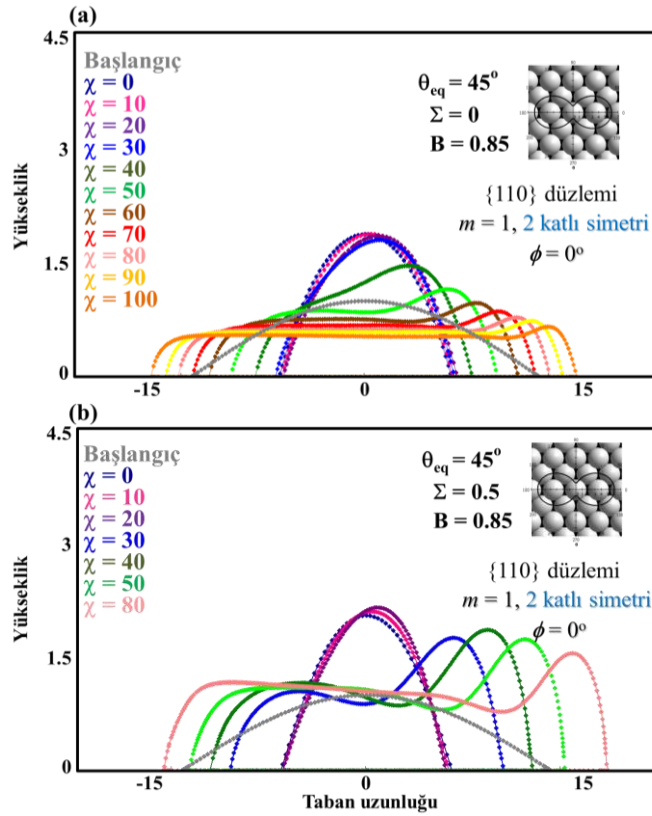


Şekil 4.61 {110} yüzeyinde orta şiddeteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.61a'da, stresin olmadığı durumda, fragmentasyon görülmeden elektrik alan etkisiyle KN'lerden filme geçiş vardır. (b) incelendiğinde ise, $\chi=0-20$ arası en-boy oranı artan KN'ler elde edilmiştir. $\chi=30$ 'da KN fragmente olmuştur. Elektrik alan şiddetinin artmasıyla ise, fragmente olan KN'ler uzayarak kalınlığı, stresin olmadığı (a) ile kıyaslandığında daha kalın ve sağ tepeciği daha büyük ikili ara-geçiş sistemleri oluşturmuşlardır.

Orta şiddetteki yüzey katılığı değerlerindeki sistemde elde edilen sonuçlar ise Şekil 4.61'de elde edilmiştir. Orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde, (a)'da, gerinim kuvvetlerinin olmadığı durumda elektrik alan etkisiyle filme geçiş görülürken, (b)'de gerinim etkisiyle daha kalın ve sağ tepeciği daha büyük filmler oluşturmuşlardır.

Yüksek şiddetteki sistemde yapılan deneylerde, Şekil 4.62'de verilen sonuçlar elde edilmiştir.

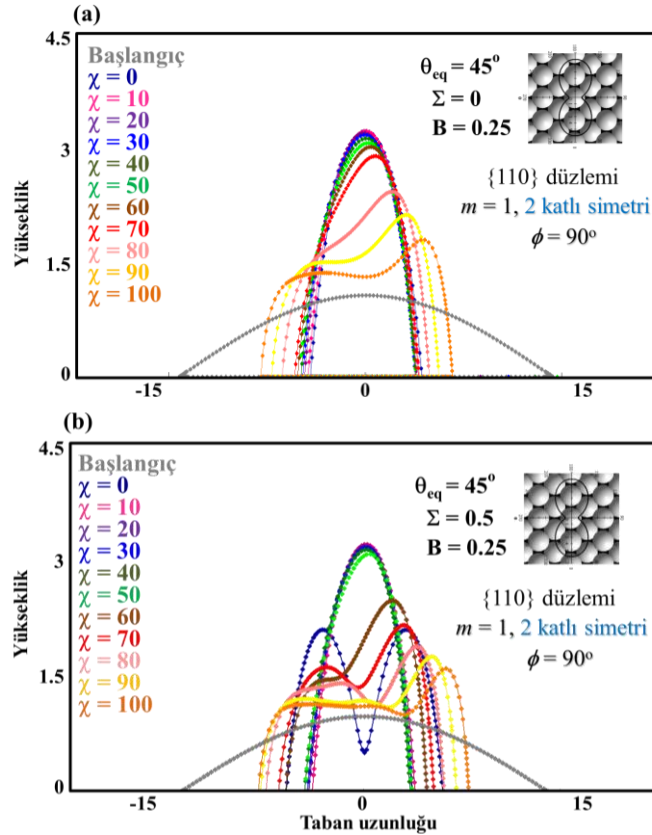


Şekil 4.62 $\{110\}$ yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.62'de düşük ve orta şiddetteki yüzey katılığı değerlerinde olduğu gibi, yüksek yüzey katılığına sahip sistemde de gerinim kuvvetinin sistemde olması daha büyük tepecikli ve kalın, film benzeri yapılar oluşturmaktadır. Bunun sebebi, adacıkların gerinim kuvveti etkisiyle fragmente olurken elektrik alana maruz kalmalarıdır.

Şekiller 4.60, 4.61 ve 4.62'de kristal eğim açısının 0° olması durumundaki, düşük, orta ve yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemlerde, genel olarak, gerinim kuvvetleri KN'lerin en-boy oranlarını arttırarak, daha sonra da fragmente olmasını sağlayarak sistemi yönetmektedir. Bu sisteme elektrik alan uygulandıgındaysa, oluşan filmin özellikleri değişmektedir. Örneğin, $\chi=30$ incelenirse, gerinim olmayan durumda, KN iken (a), gerinim kuvveti altında (b) filme doğru geçiş yapmıştır. Bu sonuç bize sabit bir elektrik alan altında, uygulanan gerinim kuvvetiyle KN'den filme geçiş sağlanabileceğini göstermektedir. Başka bir örnek olarak, $\chi=80$ incelendiğinde, her iki durumda da film oluşumu görülmele birlikte, gerinim olmadığında daha düz ve ince bir film oluşurken, gerinim kuvveti ile kalınlığı daha fazla ve sağ tarafı tepecikli bir morfoloji elde edilmektedir.

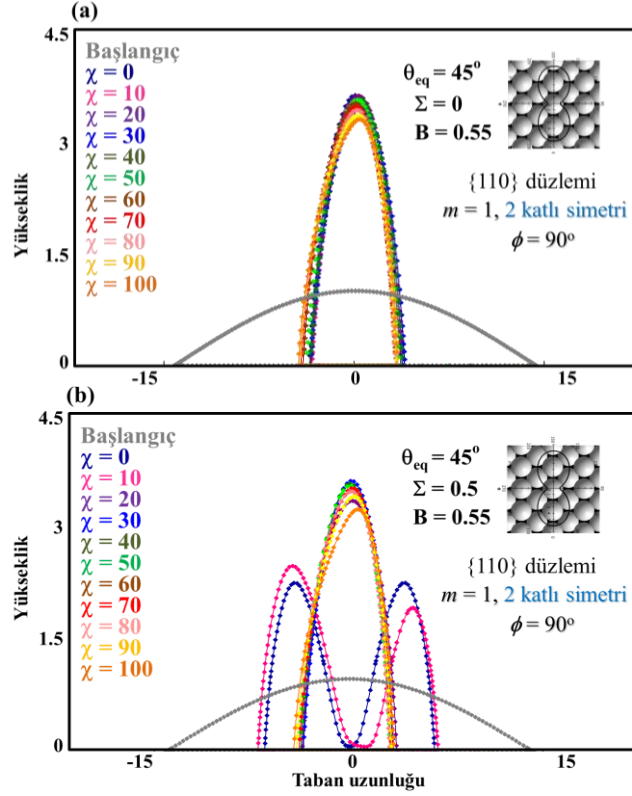
Kristal eğim açısının değiştirilmesinin bu yönelimler üzerindeki etkilerini anlamak için kristal eğim açıları 90° alınarak aynı deneyler tekrarlanmış ve sonuçlar, Şekiller 4.63, 4.64 ve 4.65'de verilmiştir.



Şekil 4.63 {110} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).

Şekil 4.63a'da gerinim kuvveti düşük yüzey katılığına sahip sistemde, gerinim kuvvetlerinin $\Sigma=0$ (a) ve $\Sigma=0.5$ değerleri için karşılaştırma grafiği verilmiştir. Gerinim etkisiyle elektrik alanın

$\chi=0$ değerinde gerinim kuvvetiyle fragmentasyon görülmektedir. (b)'de gerinim kuvveti, $\chi=70$ ve $\chi=80$ değerlerinde de biri diğerinden büyük iki KN oluşumunu sağlamıştır. $\chi=90$ ve $\chi=100$ değerlerinde ise elektrik alan etkisiyle KN'ler (a)'da bir geçiş morfolojisindeyken sağ tarafı tepeli film oluşuma doğru gittiği görülmüştür. Şekil 4.55'de gördüğümüz gibi sabit elektrik alan altında gerinim kuvvetinin KN'lerden filme geçişini sağlayabileceği sonucu tekrar karşımıza çıkmaktadır. Orta şiddette yüzey katılığına sahip sistemde yapılan deneyler sonucu Şekil 4.64'de verilmiştir.

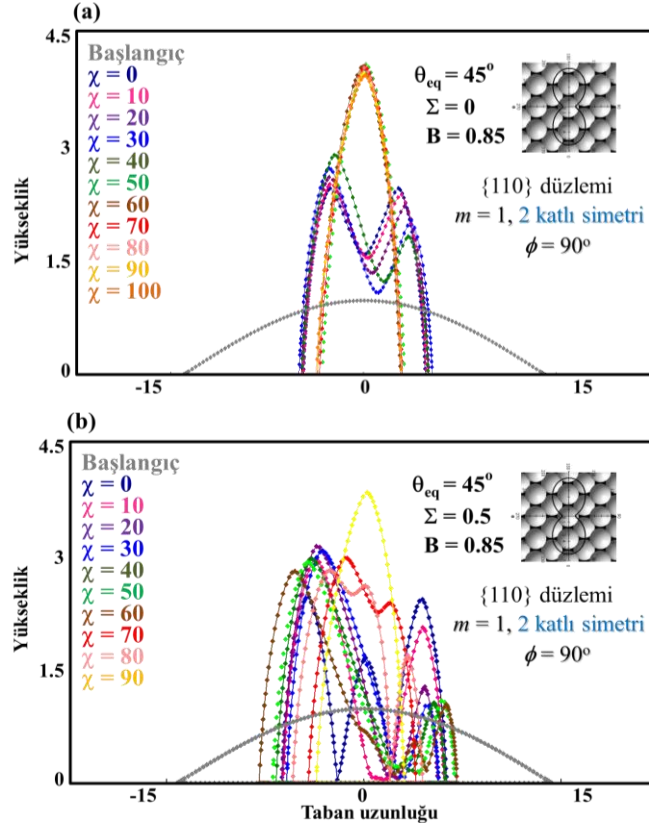


Şekil 4.64 {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).

Şekil 4.64'de orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde, gerinim kuvvetinin $\Sigma=0$ (a) ve $\Sigma=0.5$ (b) olduğu iki durum karşılaştırılmıştır. Burada gördüğümüz durum, gerinim kuvvetlerinin elektrik alanın olmadığı ya da çok küçük ($\chi=10$) değerlerinde KN'lerin fragmentasyonuna sebep olmasıdır.

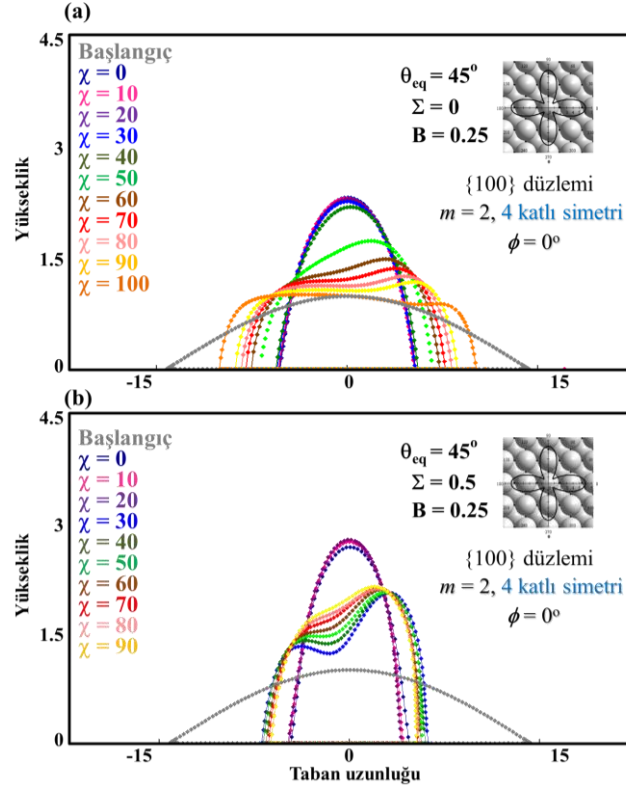
Yüksek şiddetteki yüzey katılığı değerine sahip sistemler incelendiğinde elde edilen sonuçlar Şekil 4.65'de verilmiştir. Şekil 4.65, kristal eğim açısının $\phi=90$ olduğu {110} yüzeyinde gerinim kuvvetinin etkisi (a) ve (b)'de karşılaştırılarak verilmiştir. (a)'da düşük elektrik alan değerlerinde, fragmente olmuş, daha yüksek elektrik alan değerlerine çıkıldıkça KN'ler elde edilmiştir. (b)'de ise gerinim kuvvetinin etkisiyle, (a)'daki KN'ler ($\chi=50, 60, 70, 80, 90, 100$)

fragmente olmuştur ($\chi=90$ dışında). Burada, (b)'de gördüğümüz düşük elektrik alan değerinde fragmente olan adacıklar en yüksek değer olan $\chi=90$ 'da fragmente olmamıştır. Bu deney sonucu bize, adacıkların fragmentasyonunun böyle bir sistemde yüksek elektrik alan uygulanarak engellenebileceğini göstermektedir.

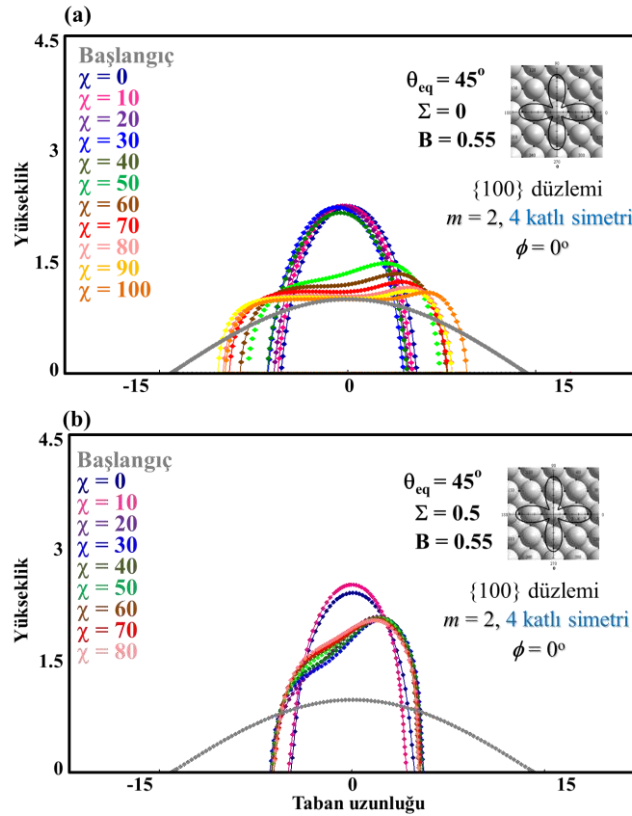


Şekil 4.65 {110} yüzeyinde yüksek şiddeteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).

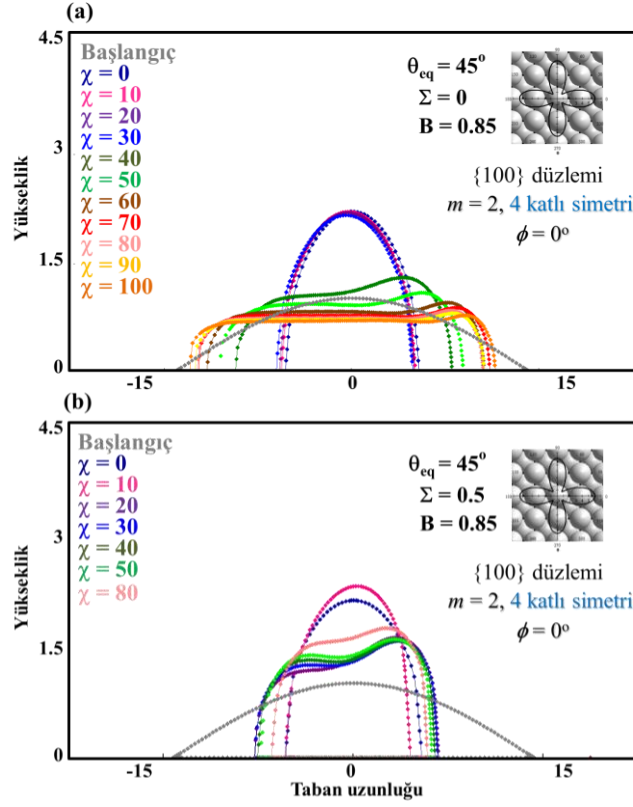
Sonuç olarak, Şekil 4.63, 4.64 ve 4.65, kristal eğim açısının değişimiyle elektrik alan ve gerinim kuvvetlerinin KN morfolojilerini nasıl kontrol edebileceğini göstermektedir. Şekil 4.66 kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu {100} yüzeyinde gerinim kuvvetinin etkisi (a) ve (b)'de karşılaştırılarak verilmiştir. (a)'da gerinimsiz sistemde, elektrik alan etkisiyle, KN'den kalınlığı {110} sisteminde görülen filmlerden görece yüksek filmler elde edilirken, (b)'de gerinim kuvvetlerinin etkisiyle, filmler ara bir geçiş fazında görülmektedir. Şekil 4.67'de ise, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu {100} yüzeyinde orta şiddette yüzey katılığı değerine sahip sistemde gerinim kuvvetinin etkisi (a) ve (b)'de karşılaştırılarak verilmiştir. (a)'da gerinimsiz sistemde, elektrik alan etkisiyle, KN'den filme geçiş görülürken, (b)'de gerinim kuvvetlerinin etkisiyle, filmler ($\chi=50, 60, 70, 80$), KN morfolojisine doğru giden bir geçiş fazı oluşturmuşlardır. Aynı etki yüksek yüzey katılığı değerindeki sistemde de görülmüştür (Şekil 4.68).



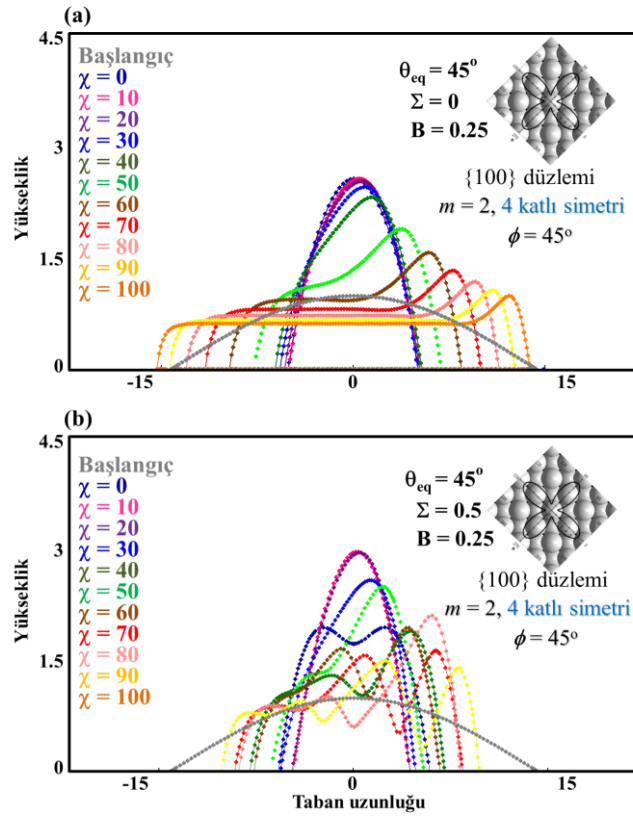
Şekil 4.66 {100} yüzeyinde düşük şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).



Şekil 4.67 {100} yüzeyinde orta şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).



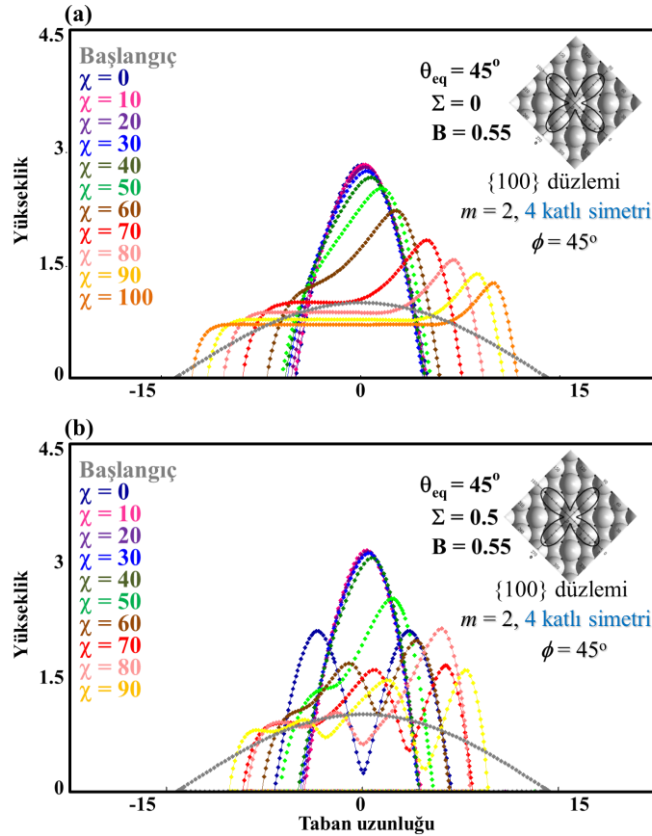
Şekil 4.68 {100} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).



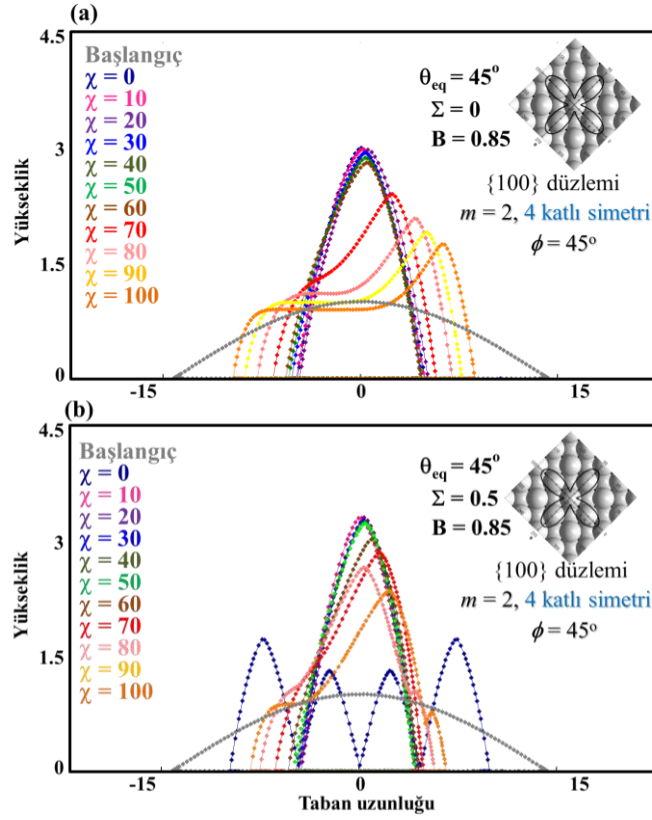
Şekil 4.69 {100} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).

Şekil 4.69'da, kristal eğim açısının $\phi=45^\circ$ olduğu $\{100\}$ yüzeyinde düşük şiddette yüzey katılığı değerine sahip sistemde gerinim kuvvetinin etkisi (a) ve (b)'de karşılaştırılarak verilmiştir. (a)'da gerinimsiz sistemde, elektrik alan etkisiyle, KN'den filme geçiş görülürken, (b)'de gerinim kuvvetlerinin etkisiyle, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu sistemden farklı olarak fragmente olan KN film arası geçiş fazları oluşmuştur. Buradan, kristal eğim açısının farklı alınması durumunda gerinim etkisinin, elektrik alan ile farklı şekillerde kontrol edilebileceği sonucu çıkmaktadır.

Yüzey katılığı değerlerinin farklı alınması durumunda farklı KN'lerin elde edilebileceği, Şekil 4.71, Şekil 4.69 ve Şekil 4.70 ile karşılaştırılarak incelendiğinde görülmektedir. Şekil 4.69 ve Şekil 4.70'de düşük ve orta şiddette yüzey katılığına sahip sistemlerde gerinim ve elektrik alan etkileriyle fragmente olmuş KN yapıları elde edilirken yüzey katılığı şiddetinin artmasıyla Şekil 4.71'de fragmentasyonun engellendiği ve elektrik alan şiddetinin artmasıyla boyları azalan KN'ler oluştuğu görülmektedir.



Şekil 4.70 $\{100\}$ yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).

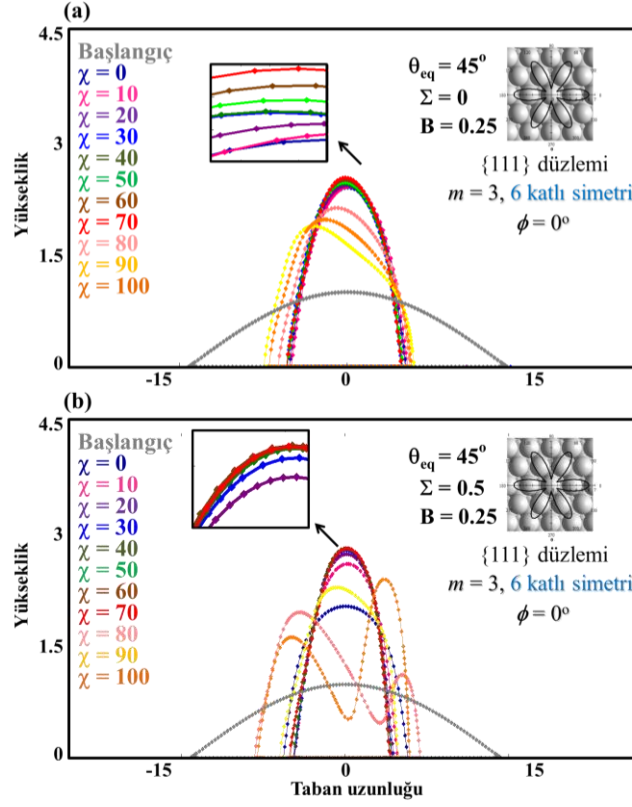


Şekil 4.71 {100} yüzeyinde yüksek şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).

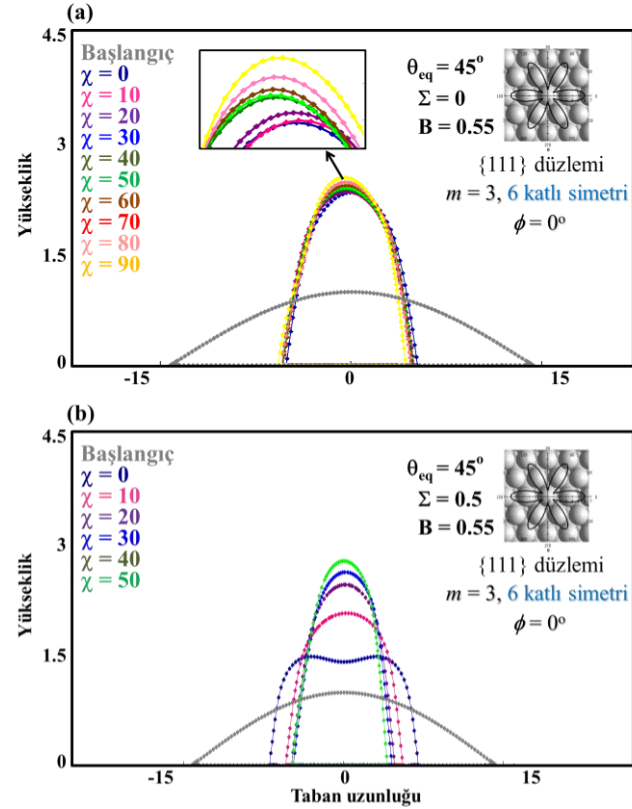
Şekil 4.72'de {111} yüzeyinde düşük şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde gerinim olmayan (a) ve gerinim kuvvetleri uygulanan (b) durumlar verilmiştir. Gerinim olmayan durumda, elektrik alan $\chi=80$ değerine kadar, elektrik alan şiddeti arttıkça KN yüksekliklerinin arttığı görülmektedir. Sisteme gerinim uygulandığında, elektrik alan şiddeti arttıkça yükseklik artışı elektrik alan $\chi=70$ değerine kadar, devam etmektedir. Bu değerden sonra KN'ler fragmente olmaktadır.

Şekil 4.73'de {111} yüzeyinde orta şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde gerinim olmayan (a) ve gerinim kuvvetleri uygulanan (b) durumlar verilmiştir. Gerinim olmayan durumda, elektrik alan şiddeti arttıkça KN yüksekliklerinin arttığı görülmektedir. Gerinim altında ise düşük elektrik alan şiddetinde fragmentasyon gözlenirken elektrik alan şiddetinin artması ile birlikte fragmentasyon önlenmekte aynı zamanda oluşan KN'lerin en-noy oranlarının arttığı gözlenmektedir.

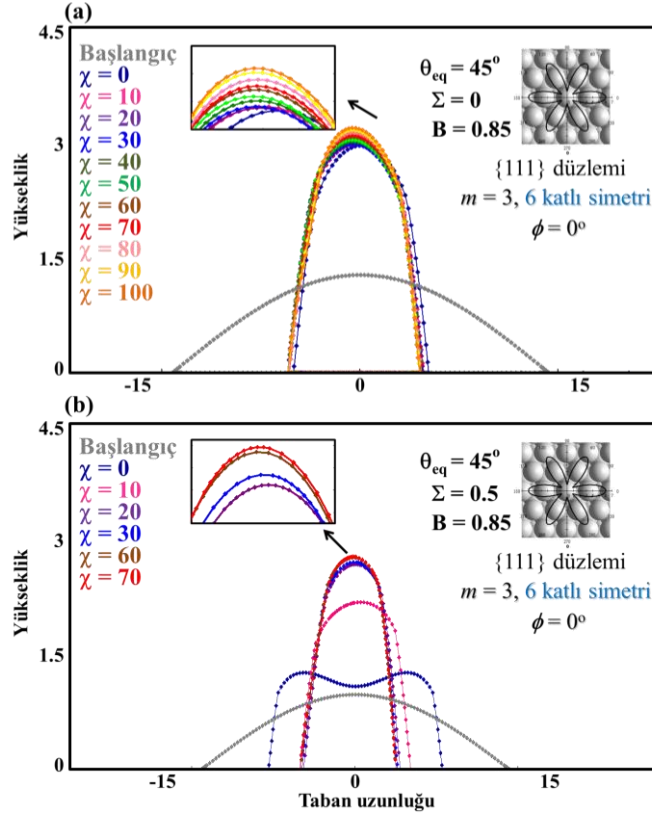
Şekil 4.74'de {111} yüzeyinde yüksek şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde gerinim olmayan (a) ve gerinim kuvvetleri uygulanan (b) durumlar verilmiştir. Gerinim olmayan durumda, elektrik alan şiddeti arttıkça KN yüksekliklerinin arttığı görülmektedir.



Şekil 4.72 $\{111\}$ yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).



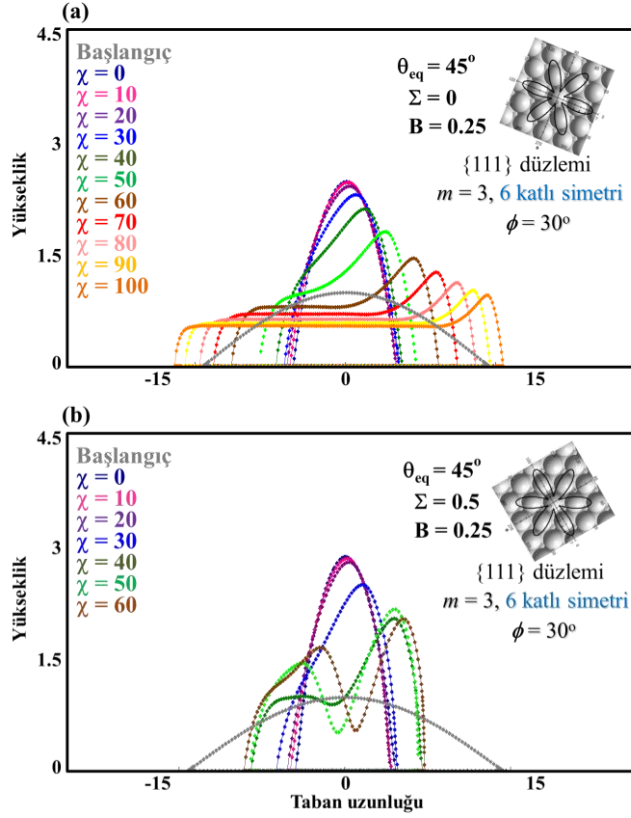
Şekil 4.73 $\{111\}$ yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).



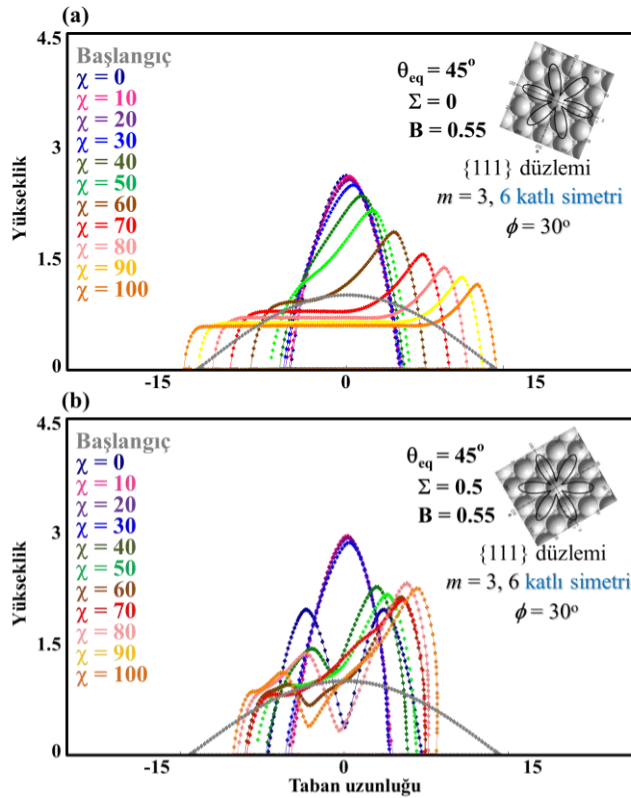
Şekil 4.74 $\{111\}$ yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.75, Şekil 4.76 ve Şekil 4.77’de ise $\{111\}$ yüzeyi altlık ile 30° açı yapacak şekilde büyütülürse farklı şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemler gerinim olmayan ve gerinim kuvvetleri altında incelenmişlerdir.

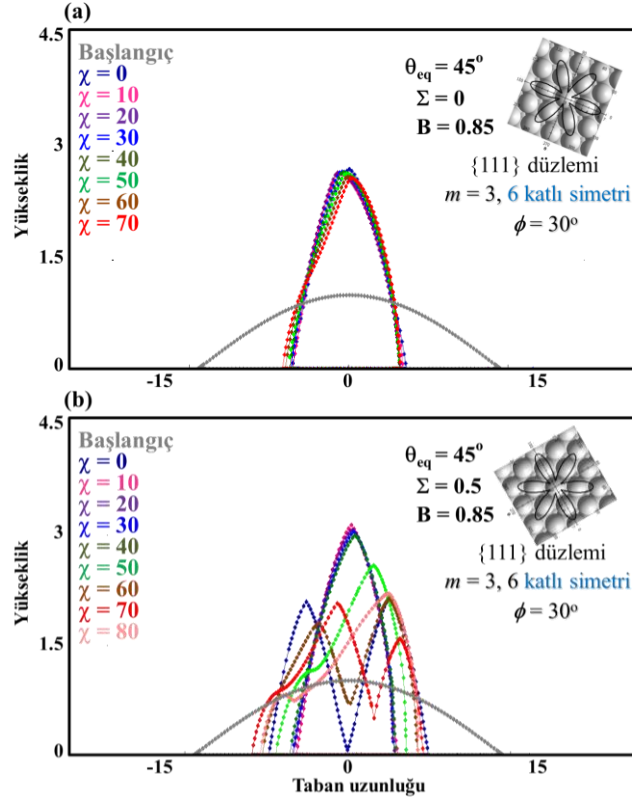
Gerinim olmayan durumda, düşük ve orta şiddetteki yüzey katılıpına sahip sistemlerde elektrik alan şiddeti arttıkça KN yüksekliklerinin azalarak sistemde film oluşumu gözlenmektedir. düşük ve orta şiddetteki yüzey katılıpına sahip sistemlerde yüksek yüzey katılıkları ise gerilimsiz sistemde asimetric ve çok yüksek tepe eğriliğine sahip kuantum noktaların elde edilmesini sağlamaktadır.



Şekil 4.75 $\{111\}$ yüzeyinde düşük şiddeteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).



Şekil 4.76 $\{111\}$ yüzeyinde orta şiddeteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).

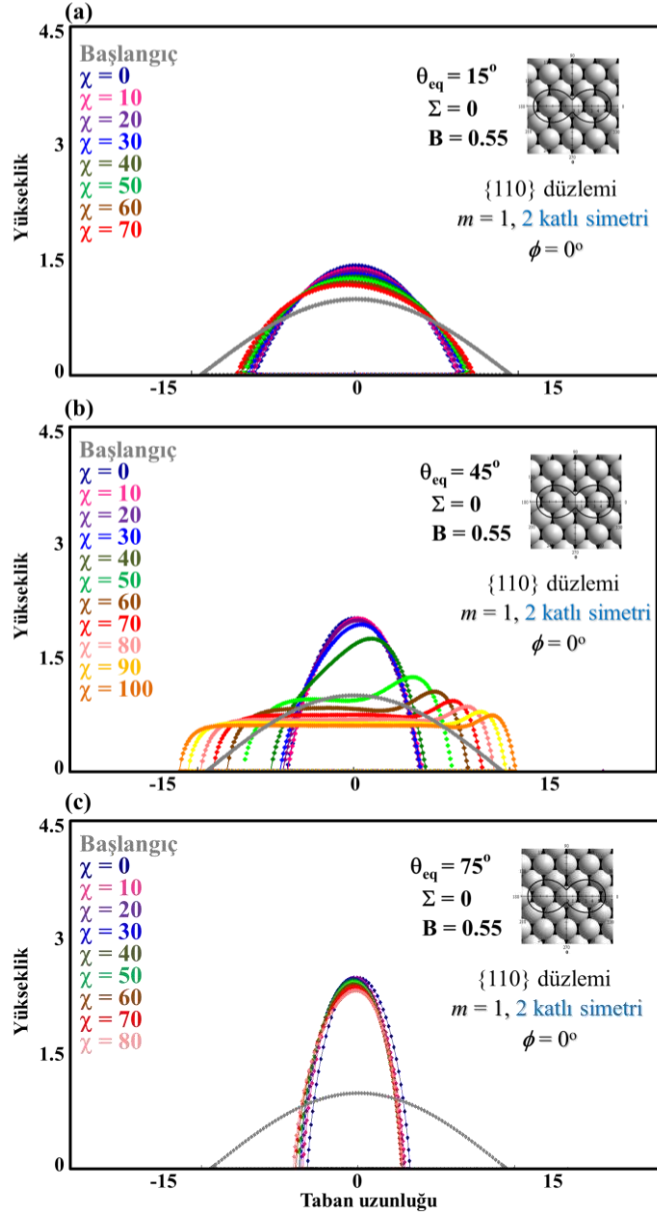


Şekil 4.77 {111} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).

Gerinim altında ise her üç durumda da artan elektrik alan şiddeti ile birlikte fragmentasyon gözlenmektedir. Düşük elektrik alan altında ise özellikle yüzey katılığının çok yüksek olduğu durumlarda (Şekil 4.77b) yüksek tepe eğriliğine sahip simetrik kuantum noktalar elde edilebilmektedir.

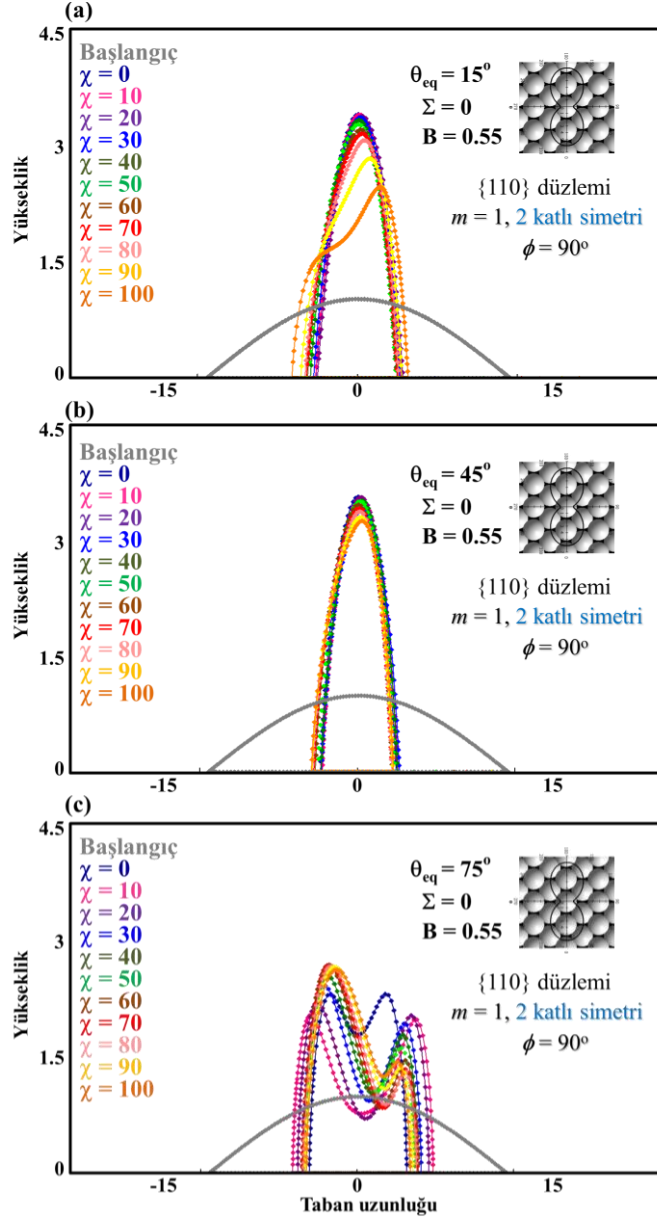
Yön-bağımlı sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve denge ıslatma açısı ile kontrolü

Denge ıslatma açılarının, elektrik alan altında, KN morfolojilerini nasıl etkilediğini anlamak için, {110}, {100} ve {111} yüzeylerinde orta şiddette ($B=0.55$) bir yüzey katılığı değeri seçilerek elektrik alan uygulanarak deneyler yapılmıştır.



Şekil 4.78 {110} yüzeyinde orta şiddetdeki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).

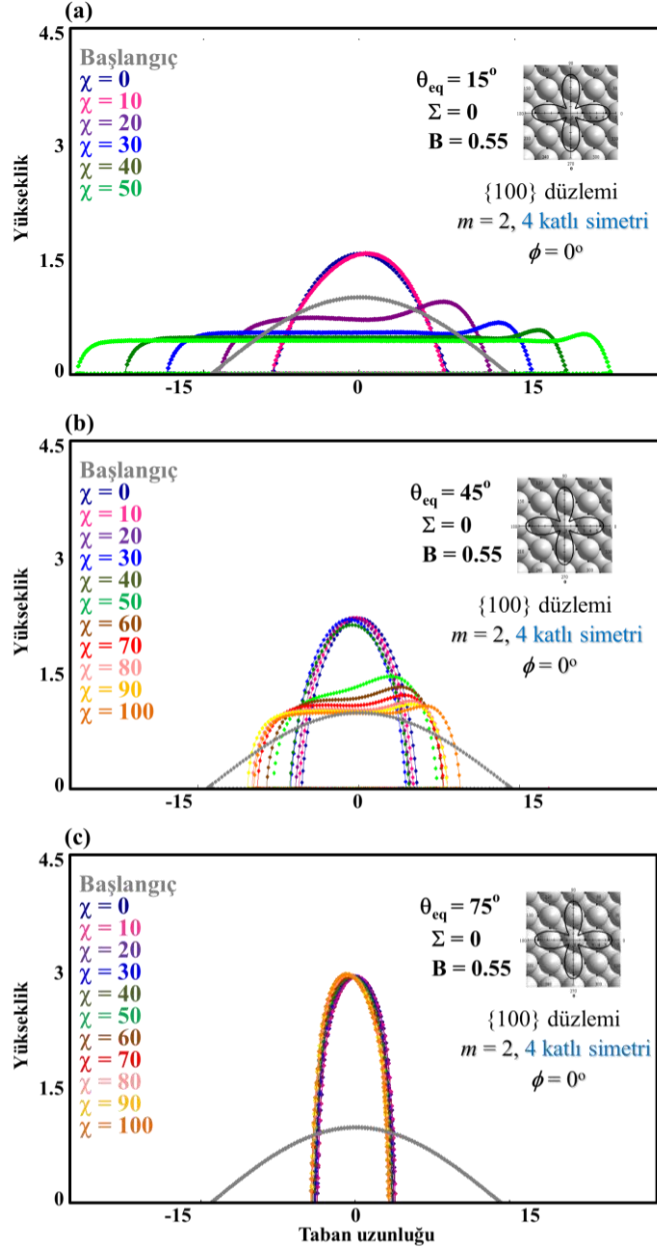
Şekil 4.78'de, {110} düzlemi ($B=0.55$), gerinimsiz ortamda, farklı denge ıslatma açı değerlerine sahip sistemlerde elektrik alan kuvvetlerinin KN morfolojilerini nasıl kontrol ettiğini göstermektedir. $\theta_{eq}=15^\circ$ durumunda (a), boyları uygulanan elektrik alan şiddetinin artmasıyla azalan, KN'ler görülmekteyken, $\theta_{eq}=45^\circ$ olan (b)'de ise artan elektrik alan ile, KN'den filme geçiş yapan morfolojiler elde edilmiştir. $\theta_{eq}=75^\circ$ olan (c)'de ise, $\theta_{eq}=15^\circ$ 'deki gibi yükseklikleri azalan ama görece uzun ve daha yüksek en-boy oranlarına sahip KN oluşumu gözlenmiştir



Şekil 4.79 $\{110\}$ yüzeyinde orta şiddetdeki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=90^\circ$).

Şekil 4.79'da $\theta_{eq}=15^\circ$ (a)'da elektrik alan şiddetinin yüksek olduğu değerlerde elde edilen sağa eğimli KN'ler dikkat çekmektedir. $\theta_{eq}=45^\circ$ (b), $\theta_{eq}=15^\circ$ (a) ile kıyaslandığında, sağa eğimli KN'lerin ortadan kalktığı görülmektedir. $\theta_{eq}=75^\circ$ (c)'de ise elektrik alan artışıyla KN'lerin fragmente oldukları görülmüştür.

Farklı kristal yönelime $\{100\}$ ve $\{111\}$ sahip sistemlerdeki etkilerde sistematik bir biçimde incelenerek sırası ile Şekil 4.80 ve Şekil 4.81'de sonuçlar verilmiştir.

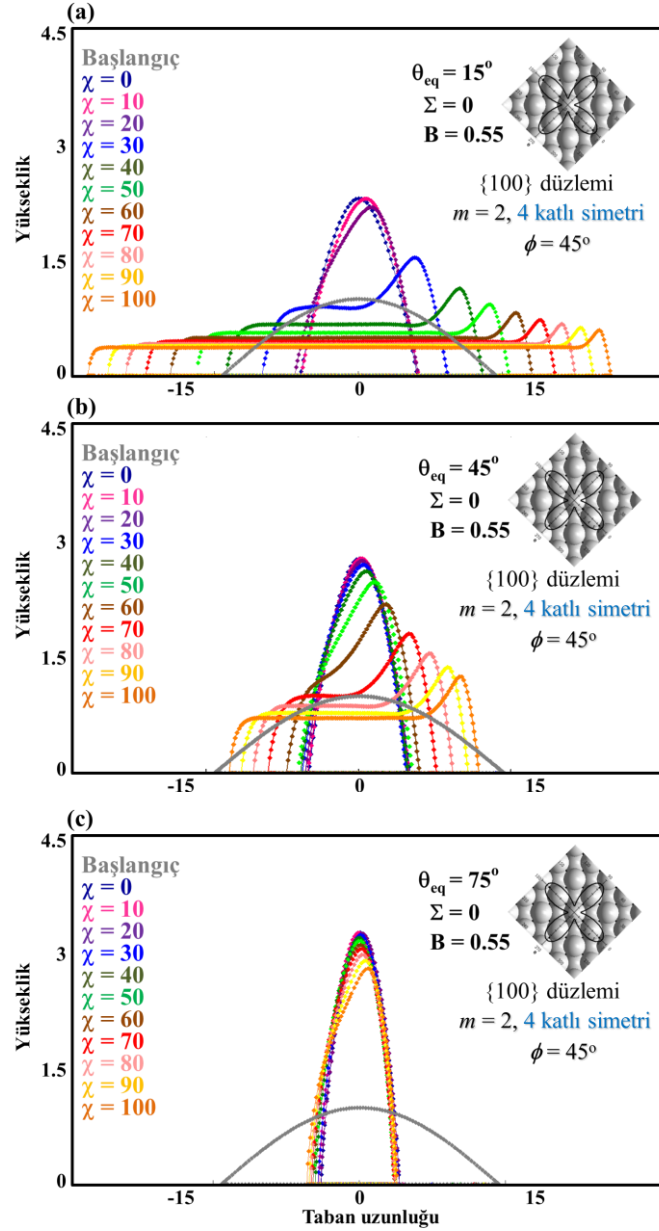


Şekil 4.80 $\{100\}$ yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.80'de kristal eğim açısı $\phi=0^\circ$ olduğu sistemlerde elektrik alan şiddeti artışı ile morfolojilerde meydana gelen değişimler incelendiğinde KNn'lerden filme geçiş ile oluşan filmlerin kalınlıklarının ve uzunluklarının kontrol edilebildiği görülmektedir.

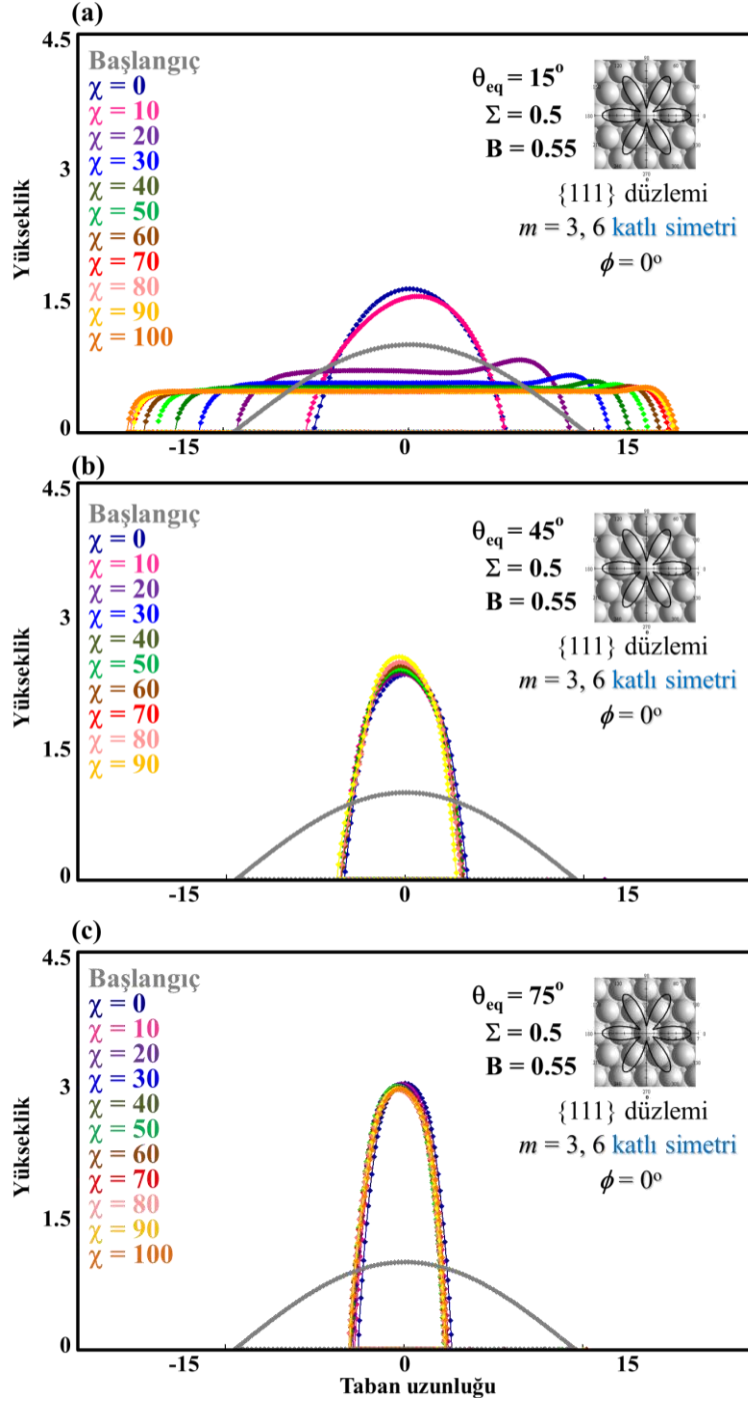
Şekil 4.81'de kristal eğim açısı $\phi=45^\circ$ olduğu sistemde ise elektrik alanın KN morfolojilerine etkilerini gösteren grafikler verilmiştir. Denge ıslatma açısının $\theta_{eq}=15^\circ$ (a) durumunda elektrik alan şiddetinin artmasıyla KN'lerden film oluşumuna doğru geçiş görülmektedir. Ancak bu geçiş için uygulanması gereken kritik elektrik alan şiddeti değeri (a)'da $\chi=30$ iken, (b)'de $\chi=70$ olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu durum bize elektrik alan altında KN'lerden filme geçiş için

kritik elektrik alan şiddeti değerinin denge ıslatma açısıyla belirlendiğini göstermektedir. Denge ıslatma açısının yüksek olduğu durumlarda ise (c), film oluşumu görülmemiş, elektrik alanın artışıyla yükseklikleri daha az olan hafif sağa eğimli asimetrik KN'lerin elde edilmiştir.



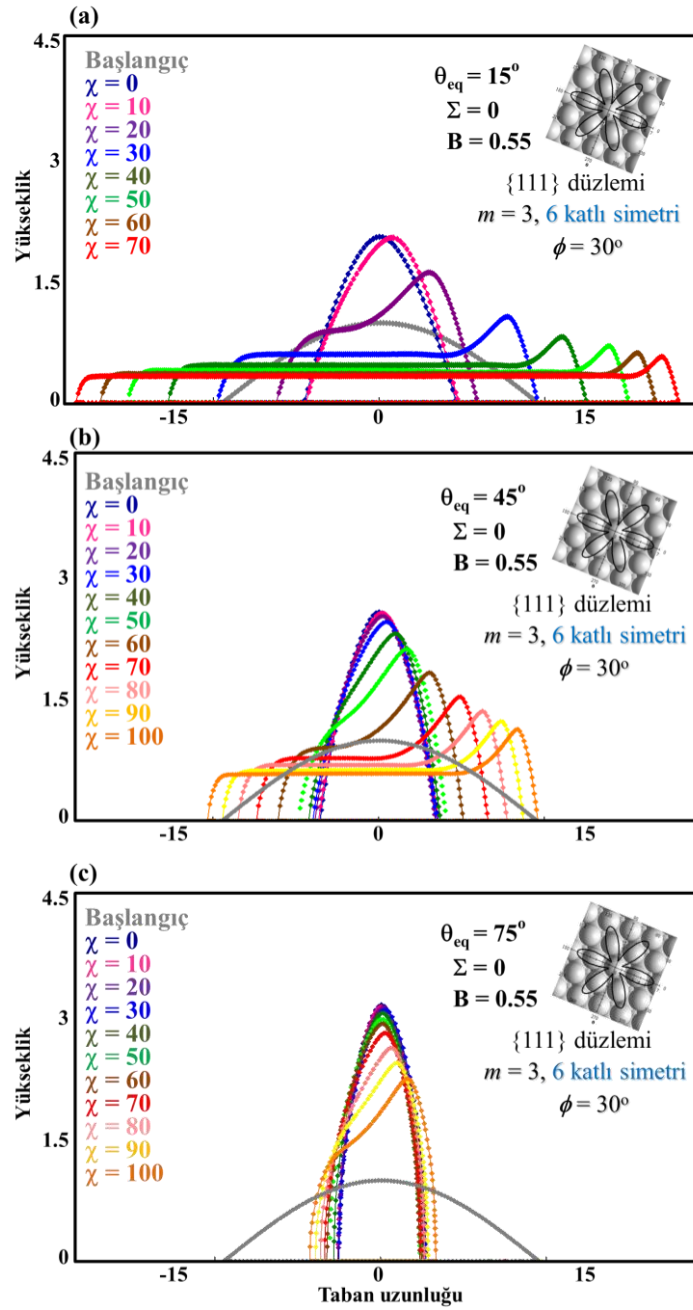
Şekil 4.81 {100} yüzeyinde orta şiddeteki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=45^\circ$).

{111} düzleminde, orta şiddette yüzey katılığına sahip sistemde, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ ve $\phi=30^\circ$ olduğu iki sistem için farklı denge ıslatma açısına sahip sistemlerde yapılan deneyler Şekil 4.82 ve Şekil 4.83'de verilmiştir.



Şekil 4.82 $\{111\}$ yüzeyinde orta şiddeteki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.82'de $\{111\}$ yüzeyinde kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu durumda, farklı denge ıslatma açı değerlerinde elektrik alanın KN morfolojileri üzerindeki etkileri verilmektedir.

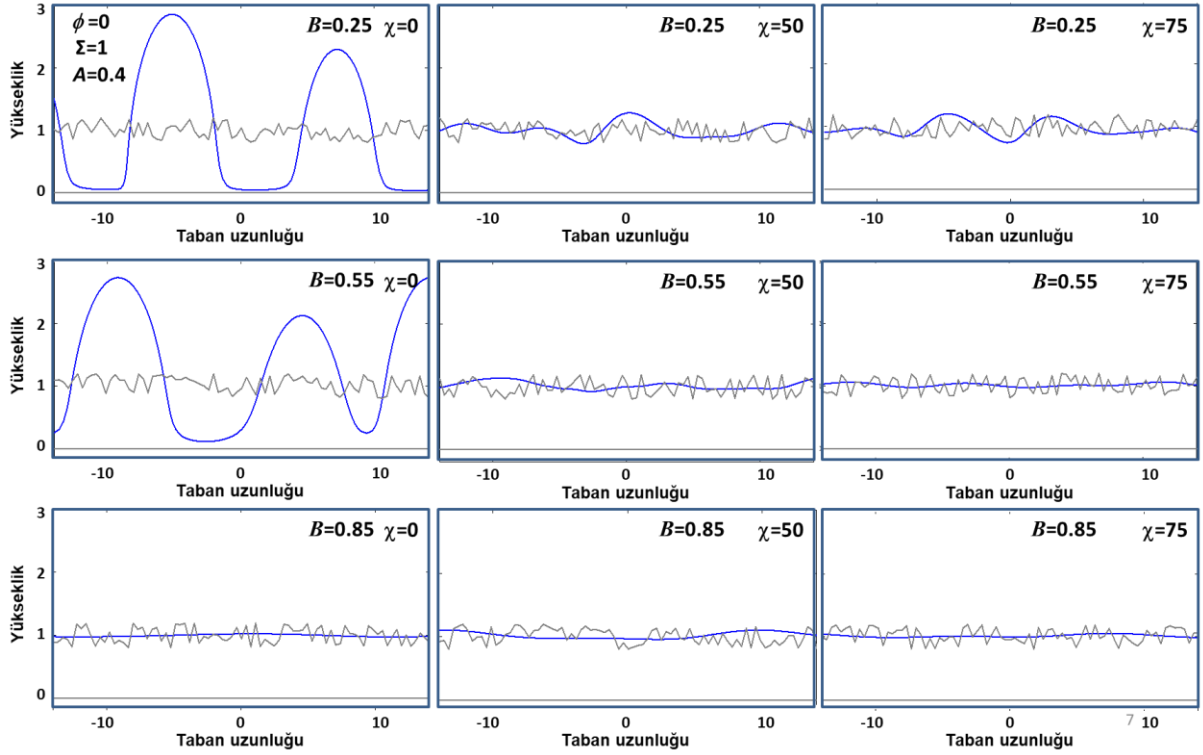


Şekil 4.83 $\{111\}$ yüzeyinde orta şiddetdeki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=30^\circ$).

Şekil 4.83'de $\{111\}$ yüzeyinde kristal eğim açısının $\phi=30^\circ$ olduğu durumda (a) ve (b)'de, sisteme uygulanan elektrik alan şiddetinin artmasıyla, KN'lerden filme geçiş olmaktadır. Düşük denge ıslatma açısına sahip (a)'da oluşan filmlerin (b)'dekilere oranla daha uzun ve kalınlıklarının daha az olduğu görülmektedir. KN'lerden filme geçiş için gereken kritik elektrik alanı şiddeti değeri, (a)'da $\chi=20$ iken (b)'de bu değer $\chi=60$ 'a çıkmaktadır. Bu durum şekil 4.82'de de gördüğümüz gibi elektrik alan altında KN'lerden filme geçiş için kritik elektrik alan şiddeti değerinin denge ıslatma açısıyla belirlendiğini göstermektedir.

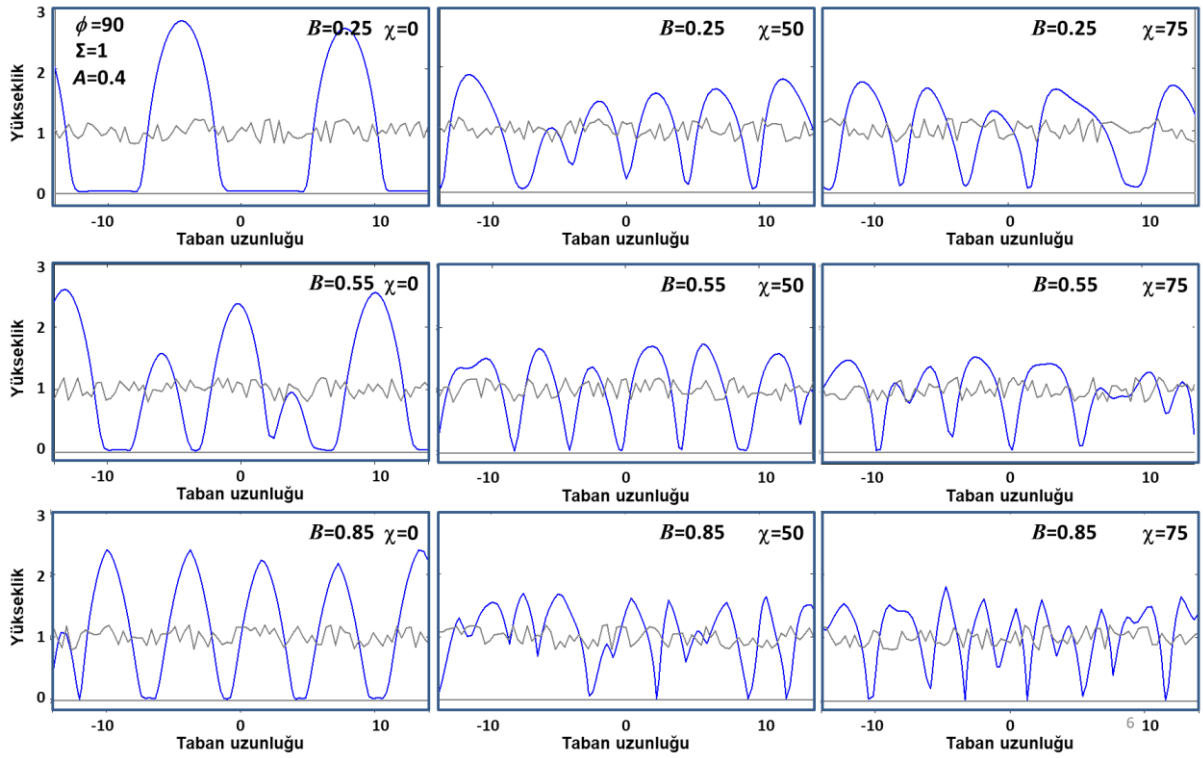
4.2.2 Film yüzeyindeki rastsal pürüzlülüklerin elektrik ve gerilim alanları altında morfolojik evriminin modellenmesi

Denklem 3.7 ve 3.8 kullanılarak, Şekil 3.2’de ana hatları verilen program akış şemasında belirtildiği şekilde yüzey difüzyonu ve yüzey sertliği anizotropilerinin etkileri yüzeydeki rastsal pürüzlülüğün gelişimi üzerinde incelenmiştir.



Şekil 84. YMK (110) düzlemi için, gerilim ve farklı elektrik alan ve anizotropi şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü $A=0.4$ alınmıştır, $\phi=0^\circ$.

Şekil 84’te YMK (110) düzleminde gerçekleştirilen simülasyon sonuçları verilmiştir. Bu sistemde elektrik alan etkisi film oluşumunu desteklediği görülmektedir. Sistemdeki anizotropi şiddetinin artması da benzer şekilde film oluşumunu desteklemektedir. Bu durumda elde edilmek istenilen sistem eğer pürüzsüz filmler ise büyütülen filmin cinsine (anizotropi şiddetine) bağlı olarak elektrik alan uygulanarak sistem kararlı hale getirilebilir. Aynı deneyi (110) kristal düzlemini x eksenine göre $\phi=90^\circ$ döndürerek aynı koşullarda tekrarlandığında Şekil 85’teki morfolojileri elde edilmiştir.

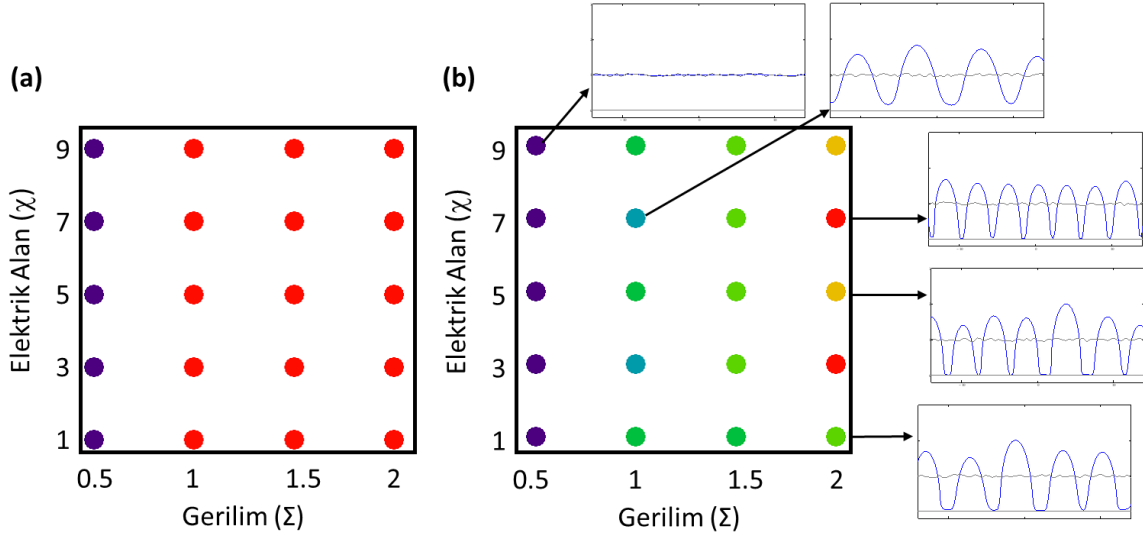


Şekil 85. YMK (110) düzlemi için, gerilim ve farklı elektrik alan ve anizotropi şiddetleri altında filmin zamanla aldığı denge şekilleri (gri → mavi) Bu simülasyonda başlangıç yüzey pürüzlülüğü $A=0.4$ alınmıştır, $\phi=90^\circ$.

Şekil 85 incelendiğinde kristal yönündeki değişimin film kararlılığı ve yüzeyde oluşan kuantum noktaları ile bu noktaların morfolojik özellikleri ve noktalar arasındaki iletme katmanının özelliklerinin değiştiği gözlenmiştir. Bu sistem kararsız bir yapı gösterip film yerine kuantum nokta adacıkları oluşturmaktadır. Adacıkların yapıları anizotropi şiddeti ve elektrik alanla kontrol edilebilmektedir. Örneğin düşük anizotropi şiddeti altında elektrik alan uygulanmadığı durumlarda birbirinden ayrık aralarında çok iyi tanımlanmış iletme katmanı oluşan adacıklar elde edilmektedir. Bu durumdaki adacıkların en-boy oranları ve tepe eğrilikleri düşük olmaktadır. Tepe eğrilikleri anizotropi şiddetinin artması ile birlikte artmakta aynı zamanda birim uzunluktaki (alandaki) kuantum nokta sayısı da artmaktadır. Elektrik alan bu sistem için adacıkları tekdüzeliğe (uniform) çıkararak yüzeyde daha karmaşık adacıklar dizileri oluşmasını sağlamaktadır.

Bu sistemlerin her biri teknolojik olarak farklı kullanım alanlarına sahiptir. Örneğin adacıkların tekdüze (uniform) olması kuantum nokta tabanlı elektronik, fotonik ve manyetik birçok yeni cihazın gelişimi için uygunken tek düze olmayan (nonuniform) kuantum noktalar ara enerji bant yapılarına sahip fotovoltaik (intermediate bandgap photovoltaics) güneş pillerinin üretilebilmesi için önemlidir.

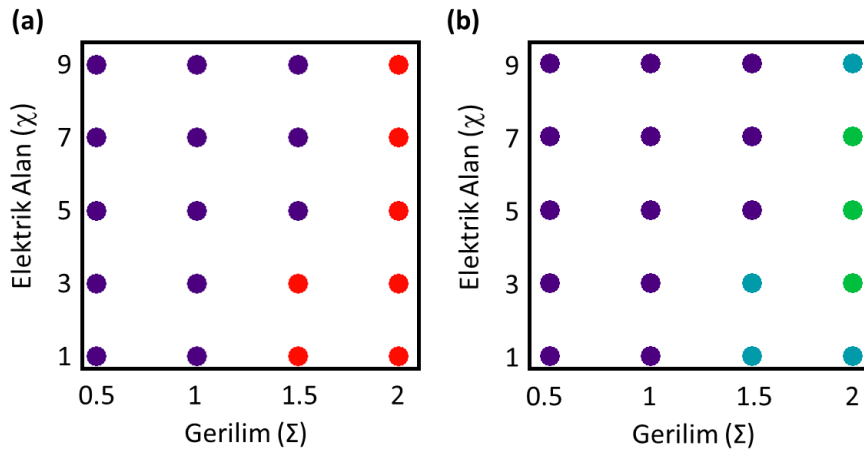
Bu deneylerden elde edilen veriler YMK (110) düzleminde farklı yüzey katılığı değerleri için derlenerek gerilim – elektrik alan – film kararlılığı diyagramları olarak aşağıda verilmiştir.



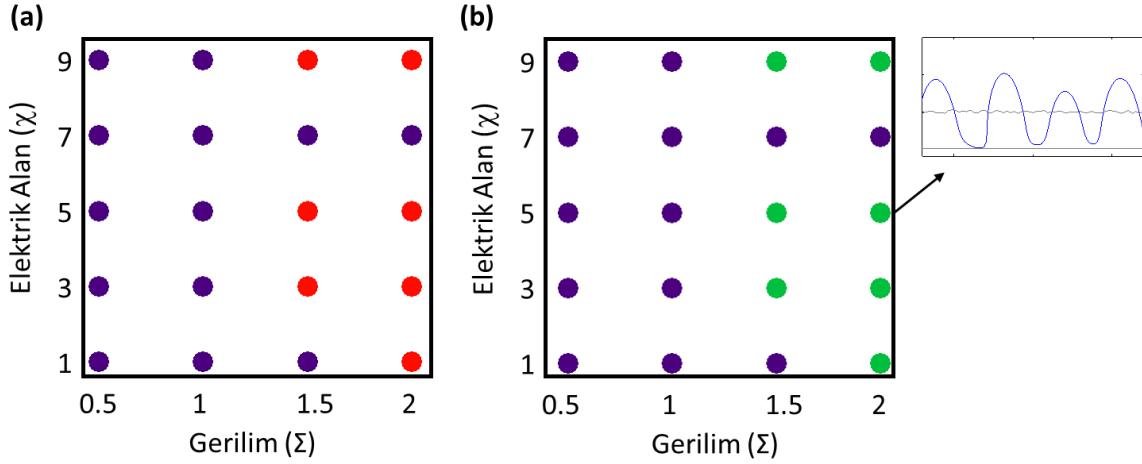
Şekil 4.86 Gerilim – elektrik alan – film kararlılığı diyagramları. (a) film adacık geçişleri (b) oluşan adacık yoğunlukları $m=1$, $\phi=0$ ve $B=0.2$.

Şekil 4.86 incelendiğinde düşük yüzey katılığı değerleri için düşük gerilim değerlerinde elektrik alanın şiddetinden bağımsız olarak kararlı ince filmler oluşurken gerilim değerinin artması ile adacık oluşumları gözlenmeye başlamıştır. Hem gerilim değeri hem de belli bir gerilimde elektrik alanın artması ile daha yoğun adacık oluşumları gözlenmiştir.

Benzer diyagramlar orta (Şekil 4.87) ve yüksek (Şekil 4.88) yüzey katılığı değerleri için de çıkarılmıştır.



Şekil 4.87 Gerilim – elektrik alan – film kararlılığı diyagramları. (a) film adacık geçişleri (b) oluşan adacık yoğunlukları $m=1$, $\phi=0$ ve $B=0.5$.



Şekil 4.88 Gerilim – elektrik alan – film kararlılığı diyagramları. (a) film adacık geçişleri (b) oluşan adacık yoğunlukları $m=1$, $\phi=0$ ve $B=0.8$.

Şekil 4.86, 4.87 ve 4.88 beraber incelendiğinde sistemin film KN geçişlerinin hem de oluşan KN'lerin yoğunluğu en-boy oranları ve tepe eğriliklerinin gerilim, elektrik alan malzeme özelliği olan yüzey katılığı ile kontrol edilebileceği görülmektedir.

4.3 Farklı İslatma Potansiyellerinin Etkilerinin İncelenmesi

Literatürde sistemdeki ıslatma katmanını anlamak için geliştirilen çeşitli potansiyeller bulunmaktadır. Bu ıslatma potansiyelleri incelendiğinde ıslatma potansiyelinin film kalınlığı ile olan ilişkisinin nasıl tanımlanması gerektiği konusunda bazı fikir ayrılıkları olduğu gözlenmektedir (Tekalign ve Spencer 2004; Gao, 1994).

İslatma potansiyeli $\bar{\omega}(\bar{y})$ sisteme Helmholtz serbest enerji yoğunluğu, $\bar{f}_{d/s}(\bar{y})$, nun film kalınlığına göre türevi olarak etki etmektedir. Helmholtz serbest enerji yoğunluğu Tekalign ve Spencer (2004) ile Gao (1994) tarafından aşağıdaki denklemler ile tanımlanmıştır.

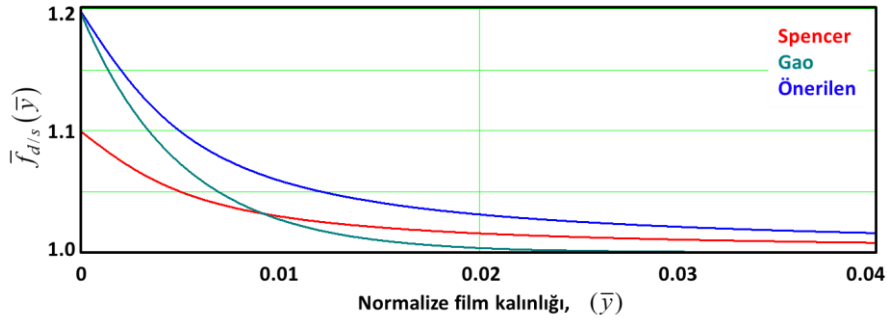
$$\bar{f}_{d/s}(\bar{y}) = \frac{f_s + f_d}{2f_d} - \frac{f_s - f_d}{f_d} \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\bar{y}}{\delta}\right) \quad \text{Spencer} \quad (4.1)$$

$$\bar{f}_{d/s}(\bar{y}) = 1 + \frac{f_s - f_d - f_{sd}}{f_d} \exp\left(-\frac{\bar{y}}{\delta}\right) \quad \text{Gao} \quad (4.2)$$

Bu çalışmada, Spencer potansiyelinin (Tekalign ve Spencer; 2004) sığ etkisi ile Gao potansiyelin (Gao, 1994) film kalınlığı \bar{h} azaldıkça üstsel (exponential) artışını dengeleyen üçüncü bir potansiyel önerilerek farklı potansiyel kullanımının etkileri incelenmiştir.

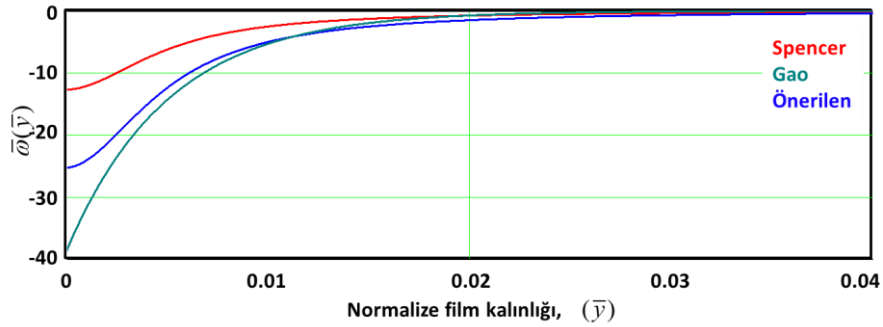
$$\bar{f}_{d/s}(\bar{y}) = \frac{f_s - f_{sd}}{f_d} - \frac{f_s - f_d - f_{sd}}{f_d} \frac{2}{\pi} \arctan\left(\frac{\bar{y}}{\delta}\right) \quad \text{Önerilen (BNT)} \quad (4.3)$$

Şekil 4.89'da, Helmholtz serbest enerji yoğunluğunun farklı formülasyonlardaki davranışı verilmiştir.



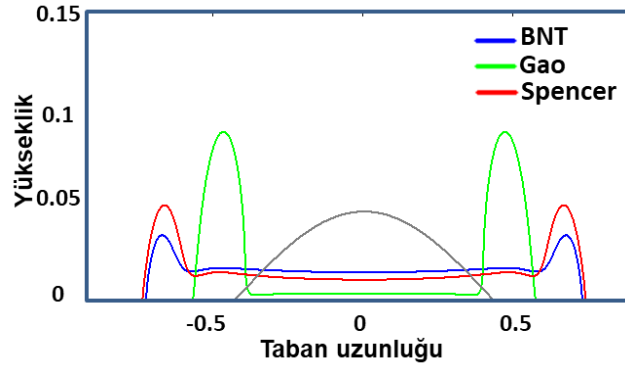
Şekil 4.89 Farklı Helmholtz serbest enerji yoğunluklarının karşılaştırılması.

Şekil 4.90'da ise Helmholtz serbest enerji yoğunluklarının türevinden elde edilen ıslatma potansiyelleri karşılaştırılmıştır.



Şekil 4.90 Farklı ıslatma potansiyellerinin karşılaştırılması.

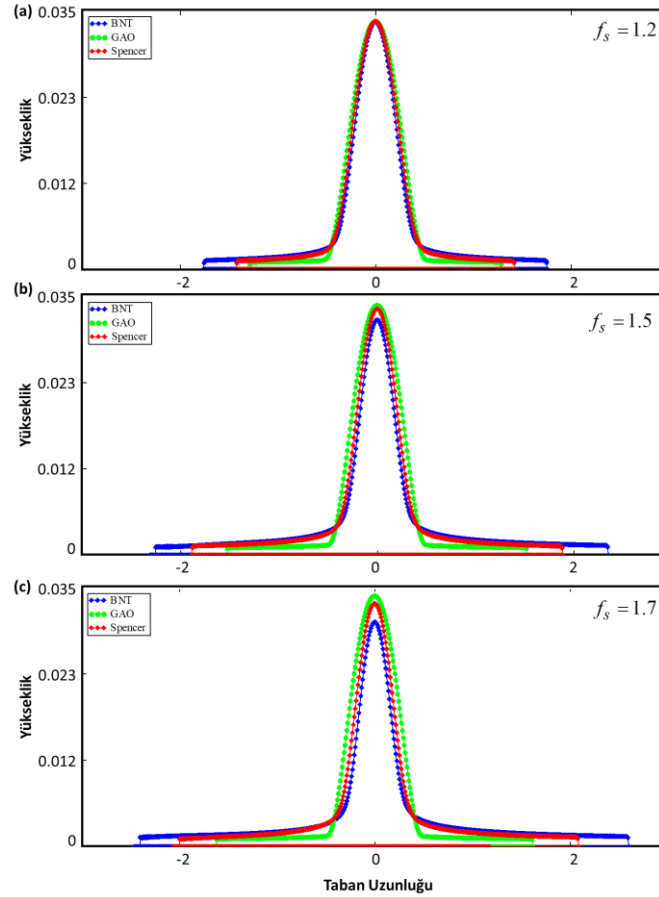
Bu bölümde, sistemin bu farklı potansiyeller altındaki davranışları incelenmiş ve bulgular aşağıda tartışılmıştır.



Şekil 4.91 Farklı ıslatma potansiyelleri kullanılarak yapılan simülasyonlar.

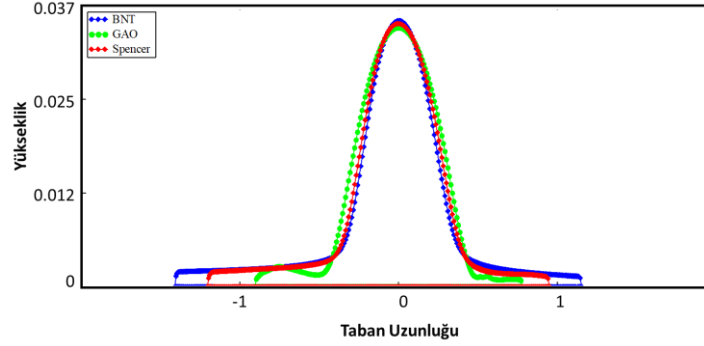
Şekil 4.91 incelendiğinde kullanılan potansiyelin, kuantum noktaların oluşum dinamiklerini etkilediği özellikle de kuantum noktalar arasında oluşan ıslatma katmanının kalınlığı, genişliği ile kuantum noktaların boyutlarının değiştiği gözlenmiştir.

Şekil 4.92'de stress ve elektrik alan uygulanmayan bir sitemde kullanılan ıslatma potansiyelinin sonuçlara etkisi gösterilmiştir.



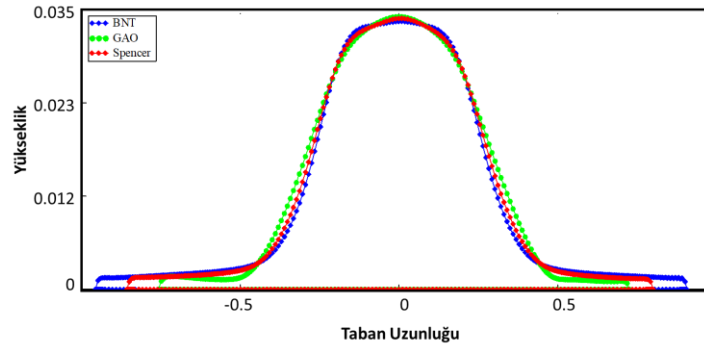
Şekil 4.92 Farklı ıslatma potansiyelleri kullanılarak yapılan simülasyonlar. $\chi = 0$, $\Sigma = 0$, $f_d = 1$ ve $f_{sd} = 0.001$.

Şekil 4.92 incelendiği zaman kullanılan potansiyelin özellikle altlık yüzey enerjisinin yüksek değerlerinde KN en-boy oranları ve tepe eğriliğini etkilediği gözlenmiştir. Benzer bir karşılaştırma sisteme elektrik alanı uygulanarak yapılmıştır (Şekil 4.93). Burada da KN en-boy oranları ve tepe eğriliğini etkilediği gözlenmiş ek olarak ıslatma katmanı (uzunluk ve kalınlık) oluşum dinamiği üzerinde de etkileri olduğu görülmüştür.



Şekil 4.93 Farklı ıslatma potansiyelleri kullanılarak yapılan simülasyonlar. $\chi = 1$, $\Sigma = 0$, $f_s = 1.7$, $f_d = 1$ ve $f_{sd} = 0.001$.

Son olarak aynı deney hem gerilim hem elektrik alan altında tekrar edilmiş ve sonuçlar Şekil 4.94'te verilmiştir. Diğer etkilere ek olarak gerilim altında faset oluşum kinetiğini etkilediği de gözlenmiştir.



Şekil 4.94 Farklı ıslatma potansiyelleri kullanılarak yapılan simülasyonlar. $\chi = 1$, $\Sigma = 0.65$, $f_s = 1.7$, $f_d = 1$ ve $f_{sd} = 0.001$.

Bu nedenlerle doğru potansiyellerin kullanılması çok önemli olup, bu konunun koordineli deneysel ve modelleme çalışmaları ile irdelenmesi gerekmektedir.

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR

Bu çalışmada, kuantum nokta ve dizilerinin heteroepitaksiyel ortamlarda oluşum dinamikleri, evrimi ve kararlılığı gerinim ve elektrik alanları altında eş zamanlı olarak ilk kez modellenerek incelenmiştir. Bu çalışmada, Ogurtanı vd. (2001; 2005; 2010a; 2010b; 2014), tarafından geliştirilen geri dönüşümsüz (irreversible) termodinamiğin mikroayrık formülasyonu temel olarak alınmış ve kapsamı elektrik alan etkilerini de göz önünde bulunduracak şekilde genişletilerek, epitaksiyel ince filmlerin şekil değiştirme süreçlerini ve Stranski-Krastanow adacıklarının oluşumlarını kontrol eden diferansiyel denklem sistemleri ortaya çıkarılmıştır (*Proje Amaç ve Hedefleri 1*).

Geliştirilen bu kısmi diferansiyel denklemlerin, 2-boyutlu sistemler için sayısal çözümlenmesi yapılarak ortaya çıkarılan yazılım (C++ kodu) ile başlangıç geometrisi ve malzeme özellikleri verilerek sistemin morfolojik gelişiminin modellenmesi yapılabilmektedir (*Proje Amaç ve Hedefleri 2 ve 3*).

Epitaksiyel ince filmlerin şekil değiştirme süreçlerinin ve Stranski-Krastanow adacıklarının (kuantum noktaların) oluşumlarının anlaşılması bu tip adacıkların morfolojisinin dolayısı ile enerji bandı gibi optoelektronik özelliklerinin kontrolünü sağlayabilir ve bu nedenle kuantum noktaların teknolojik kullanımı açısından çok büyük öneme sahiptir. Yapılan simülasyonlar sonucunda kristal yapı/yerleşim, difüzyon ve yüzey katılığı şiddeti ve anizotropisi, yüzey enerjileri gibi malzeme özellikleri ile uygulanan dışsal elektrik ve gerinim alanlarının etkileri eş zamanlı olarak incelenmiştir (*Proje Amaç ve Hedefleri 4*).

Grubumuzca geliştirilen program ile simülasyonlar gerekli testlerden geçirilerek güvenilirliği kontrol edilmiş ve farklı malzeme özelliklerinin etkilerinin anlaşılabilmesi için gereken simülasyon deneyleri yapılmıştır. Deneyler sonucunda aşağıdaki sonuçlara ulaşılmıştır (*Proje Amaç ve Hedefleri 5*):

Yön bağımsız izotropik sistemlerde, oluşan kararlı KN yapılarının hem en-boy oranları (aspect ratio), hem de tepe eğriliklerinin (curvature) sisteme uygulanan gerinim kuvvetleriyle kontrol edilebilmektedir: Gerinim kuvveti belirli bir değere kadar hem en-boy oranlarını hem de tepe eğriliklerini arttırmakta olup, belirli bir kritik eşik değerinden sonra ise KN'lerde bölünmeye (fragmentation) neden olarak en-boy oranlarını düşürmektedir. KN'lerin fragmentasyonu, farklı denge açılarına sahip sistemlerde araştırılmış ve KN'lerin fragmente oldukları kritik gerinim değerlerinin denge ıslatma açılarıyla değiştiği belirlenmiştir. Sistemin denge açısı arttıkça en-boy oranları ve tepe eğrilikleri de artmaktadır. Denge ıslatma açıları

ve gerinim kuvveti aynı zamanda KN fragmentasyonunu kontrol ederek birim alandaki adacık sayısını da belirlemektedir. Bu deneylerin sonuçları, en-boy oranlarını ve birim alandaki adacık sayılarını gösteren denge ıslatma açısı-gerinim diyagramları haline getirilmiştir. Bu diyagramlar ile, istenen en-boy oranlarına, tepe eğriliklerine ve/veya adacık sayılarına sahip sistemlerin elde edilmesi için gerekli malzeme ve üretim koşulları belirlenebilmektedir.

Nano yapıya sahip malzemelerde en-boy oranları ve yüzey eğrilikleri, enerji seviyelerinde değişikliklere sebep olarak optik, elektronik ve manyetik özellikleri etkilemektedir. Bu sebeple oluşan KN'lerin tepe eğriliklerinin kontrol edilebilmesi, KN'lerin optoelektronik özelliklerini kontrol edeceğinden önem taşımaktadır ve bu bilgiler KN tabanlı cihaz tasarımları için çok önemlidir.

İzotropik sistemlerde elektrik alan etkileri, sistemin hem gerinimsiz hem de gerinim altında olduğu durumlarda incelenmiştir. Gerinimsiz ortamda, uygulanan elektrik alan ile KN'lerin en-boy oranlarının azaldığı yönelimlerinin değiştiği ve belirli bir eşik elektrik alan değerinin üzerinde, ince film oluşturdukları görülmüştür. İnce filme geçilmeden önce artan elektrik alan şiddeti ile KN yapılarında meydana gelen değişimler analiz edildiğinde, KN en-boy oranlarının ve tepe eğriliklerinin uygulanan elektrik alan ile azaldığı görülmüştür. Oluşan ince filmler incelendiğinde, uygulanan elektrik alan şiddeti arttıkça, oluşan ince filmin, uzunluğu artmakta ve kalınlığı azalmaktadır. Bu sonuç, 2017 yılında Du ve Maroudas (2017) tarafından dışarıdan uygulanan elektrik alanın yüzey pürüzlülüğünü azaltabileceği gözlemi ile uyumludur.

Benzer etkiler farklı denge açılarına sahip sistemlerde de incelenmiş ve yüksek denge ıslatma açısına sahip sistemlerde en-boy oranı yüksek KN'ler elde edilebildiği gösterilmiştir. Sisteme uygulanan elektrik alan şiddeti arttıkça düşük denge açılarında KN'lerden ince filme geçiş daha kolay sağlanmaktadır. Daha yüksek denge açılarında KN'lerin yönelimleri daha fazla değişmekte ve yükseklikleri azalmaktadır. Bu bilgiler farklı ıslatma denge açılarındaki sistemlerde ve elektrik alan şiddetlerinde ne tür morfolojik fazlar (KN, film ve geçiş fazları) oluşacağını gösteren bir diyagram haline getirilmiştir. Bu bilgilerin, mikro ve nano cihazların üretimlerinde yüzey pürüzlülüğünün giderilmesi ve KN tabanlı cihaz tasarımlarında KN'lerin özelliklerinin hem gerinim hem de elektrik alan ile kontrol edilmesinde kullanılması beklenmektedir.

Bu proje kapsamında, KN oluşum dinamiği daha gerçekçi bir şekilde malzemenin kristal yapısı modellenerek ayrıca incelenmiştir. Kristal yapılar göz önüne alındığında, kristal yapı/yönelim, difüzyon anizotropisi ve yüzey katılığındaki anizotropi yeni sisteme etki eden yeni parametreler olarak ortaya çıkmaktadır. Bu parametrelerin etkileri sistemde bulunan uyumsuzluk gerinimleri ve sisteme uygulanan elektrik ve/veya gerilim alanları altında yüzey

merkezli kübik yapılar için incelenmiştir: Yapılan deneyler, kristal düzlemine (sistemdeki simetri derecesine) ve yönelimine (kristal eğim açısı) bağlı olarak çok zengin KN morfolojileri oluşturulabildiğini göstermiştir. Özellikle kristal düzlemi ile uygulanan elektrik alan arasındaki eğim açısı ve kristalin yüzey katılığı önemli birer kontrol parametresi olarak ortaya çıkmıştır. Kristal eğim açısının $\phi = 0^\circ$ olduğu durumlarda KN en-boy oranları ve tepe eğrilikleri her üç kristalografik düzlem $\{110\}$, $\{110\}$ ve $\{110\}$ için de yüzey katılığının artışıyla azalmıştır. Buna ek olarak kristal eğim açısının simetri derecesinin yarısına denk geldiği durumlarda (sırasıyla $\{110\}$ için $\phi = 90^\circ$, $\{110\}$ için $\phi = 45^\circ$ ve $\{110\}$ için $\phi = 30^\circ$) ise en yüksek en-boy oranlarına ve tepe eğriliklerine sahip KN'ler elde edilmiştir. Bu değerlerde, yüzey katılığının artırılması ile KN en-boy oranlarını ve tepe eğriliklerini ayrıca artmaktadır. Bu sonuçlar, KN en-boy oranlarının ve tepe eğriliklerinin seçilen malzemenin anizotropi şiddetine bağlı olarak, malzeme biriktmesi sırasında ayarlanabilecek kristal eğim açısı ile kontrol edilebilirliğini göstermektedir.

Yüzey katılığı ve kristal eğim açılarının etkilerinin araştırıldığı sistemde gerinim kuvvetlerinin de etkileri incelenmiş ve $\{110\}$, $\{110\}$ ve $\{110\}$ düzlemleri için gerinim-yüzey katılığı diyagramları farklı kristal eğim açı değerleri için oluşturulmuştur. Bu diyagramlarda hem kristal eğim açısı sebebiyle sistemde oluşan farklı etkiler, hem de yüzey katılığı ve gerinim kuvvetlerinin etkisiyle oluşabilecek farklı tipte KN morfolojileri gözlenmiştir. Örneğin, $\{110\}$ düzleminde, kristal eğim açısının $\phi = 0^\circ$ olduğu, yüzey katılığının maksimum ($B = 0.98$) ve gerinim kuvvetlerinin $\Sigma = 0.1$ değerinde, lens tipi KN'ler oluşurken, $\phi = 90^\circ$ olduğu durumda ise çan tipinde (en-boy oranı ve tepe eğriliği görece yüksek) KN'ler elde edilmiştir. Kristal düzlemin değişimi ile ise fasetli yüzeylere sahip tepe eğriliği küçük olan kubbe tipi veya piramit şeklinde (en-boy oranı ve tepe eğriliği görece yüksek) KN'ler elde edilebilmiştir. Gerinim kuvvetleri, yüzey katılığı ve kristal eğim açısının seçimi ile istenen özelliklere sahip çok farklı şekillerde KN'lerin elde edilebileceği gösterilmiştir. Bu bilgilerin, literatürde rapor edilen deneylerde karşılan çok farklı KN yapılarının oluşum nedenlerinin anlaşılmasına yardımcı olması beklenmektedir.

Kristalografik yönlere, kristal eğim açılarına ve yüzey katılığı değerlerine göre elektrik alan ile uzunlukları, kalınlıkları ve şekilsel özellikleri kontrol edilebilen kararlı film yapılar elde edilebildiği gibi yönelimleri, yükseklikleri, tepe eğrilikleri kontrol edilebilen KN'lerin de elde edilmesinin mümkün olduğu gösterilmiştir. Bu yapılar için elde edilen elektrik alan, gerilim ve yüzey katılığı ile film veya adacık oluşumu (adacık yoğunluğu) faz diyagramları elde edilmiştir.

Bu deneyler kapsamında öncelikle literatürde en fazla kullanılan Spencer (Tekalign ve Spencer; 2004) ıslatma potansiyeli kullanılmıştır. Son bölümde ise Spencer potansiyelinin (Tekalign ve Spencer; 2004) sığ etkisi, Gao potansiyelin (Gao, 1994) film kalınlığı \bar{h} azaldıkça üstsel (exponential) artışı ve bu etkileri dengeleyen üçüncü bir potansiyel kullanımının etkileri incelenmiştir. Deneyler, kontrol edilmek istenilen morfoloji, en-boy oranı, tepe eğriliği ve KN yoğunluğu gibi parametrelerin kullanılan potansiyel ile değişebileceğini göstermiştir. Bu nedenle, daha doğru simülasyonlar yapılabilmesi için kullanılacak potansiyellerin önemli olduğu anlaşılmış ve hem deneysel hem simülasyon çalışmaları ile daha gerçekçi ıslatma potansiyellerinin elde edilmesi gerekliliği ortaya çıkarılmıştır.

Sonuç olarak bu proje kapsamında kuantum nokta ve dizilerinin heteroepitaksiyel ortamlarda oluşum dinamikleri, evrimi ve kararlılığı gerinim ve elektrik alanları altında eş zamanlı olarak modellenmiş ve yapılan simülasyonlar ile incelenmiştir. Yapılan simülasyonlar sonucunda kristal yapı/yerleşim, difüzyon ve yüzey katılığı şiddeti ve anizotropisi, yüzey enerjileri gibi malzeme özellikleri ile uygulanan dışsal elektrik ve gerinim alanlarının etkileri ortaya çıkarılmış ve faz diyagramları şeklinde sunulmuştur. Malzeme özellikleri ve uygulanan dışsal kuvvetlerin (gerilim ve elektrik alan) etkileri altında KN morfolojilerinin kontrol edilebilirliğinin ortaya konmuş olması, kuantum noktaların yeni fabrikasyon tekniklerinin gelişimi için gerekli bilimsel altyapının sağlanması açısından önemlidir.

5.1 Gelecek İçin Önerilen Çalışmalar

Bu proje kapsamında yapılan deneyler ortaya ince film sistemlerinin gerilim ve elektrik alanlar altında davranışı ve kuantum noktaların oluşum mekanizmaları hakkında bilgiler vermekle birlikte hangi noktalarda eksiklikler olduğu ve gelecekte ne tür araştırmaların yapılması gerektiği hakkında da fikirler vermiştir.

Örneğin, bu projede geliştirilen 2-boyutlu simülasyon modellerinin 3-boyutlu sistemlere uygulanacak şekilde geliştirilmesi daha gerçekçi simülasyonlar yapılmasını sağlayacaktır. Bu problem ciddi bir çaba gerektirmekle birlikte nanoyapıların gerçek dünyadaki davranışlarının anlaşılması için çok önemlidir. 3-boyutlu denge sistemlerinde, şekil, boyut, içsel gerilim dağılımlarının elde edilmesi durumunda, bu bilgi KN'lerin optoelektronik özelliklerinin hesaplanması için de kullanılabilir. 3-boyutlu morfolojileri belirlenen KN ve KN dizilerinin enerji seviyeleri, dalga fonksiyonları (wave functions) ve optik dipol matris elemanları (optical dipole matrix elements) gibi elektriksel taşıyım özellikleri hesaplanarak, ışık-uyarım taşıyıcıların (photo excited carriers) taşıyım özellikleri modellenebilir.

TEŐEKKÖRLER

Proje yűrűtűcűsű ve bursiyerleri projenin her aŐamasında, (teorinin geliŐtirilmesi, sayısal özűmlerlerin gerekleŐtirilmesi ve deneylerin yorumlanması) vermiŐ olduĐu destek ve katkılardan dolayı proje danıŐmanı Prof. Dr. Tarık Őmer OĐurtanı'na sonsuz teŐekkűr ederler.

KAYNAKLAR

- AKYILDIZ O., Oren E.E., Ogurtani T.O., "Grain boundary grooving in bi-crystal thin films induced by surface drift-diffusion driven by capillary forces and applied uniaxial-tensile stresses" *Philosophical Magazine*, **92**, 804-829 (2012).
- ALCHALABI K., Zimin D., Kistorz G., Zogg H. "Self-assembled semiconductor quantum dots with nearly uniform sizes" *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 026104 (2003).
- AROUTIOUNIAN V., Petrosyan S., Khachatryan A. "Quantum dot solar cells", *Journal of Applied Physics*, **89**, 4, 2268-2271 (2000).
- ASARO R.J., Tiller W.A. "Interface morphology development during stress corrosion cracking: Part I. via surface diffusion", *Metallurgical Transactions*, **3**, 1789-1792 (1972).
- AUSTING D.G., Tamura H., Tokura Y. "Single dot and strongly coupled double dots at high magnetic fields, *Physica E*, **10**, 112–116 (2001).
- BADAWI A. "Tuning the energy band gap of ternary alloyed Cd_{1-x}Pb_xS quantum dots for photovoltaic application", *Superlattices and microstructures*, **90**, 124-131 (2016).
- BAO W., Jiang W., Wang Y., Zhao Q. "A parametric finite element method for solid-state dewetting problems with anisotropic surface energies", *Journal of Computational Physics* **330**, 380–400 (2017).
- BARIBEAU J.M., Wu X., Rowell N.L., Lockwood D.J., "Ge dots and nanostructures grown epitaxially on Si", *Journal of Physics: Condensed Matter*, **18** (8), R139–R174 (2006).
- BARTH J.V., Costantini G.C., Kern K. "Engineering atomic and molecular nanostructures at surfaces", *Nature*, **437**, 671-679 (2005).
- BEER G., Smith I., Duenser C. "The boundary element method with programming: for engineers and scientists", Springer pp. 500 (2008).
- BERBEZIER I., Ronda A., Portavoce A. "SiGe nanostructures: new insights into growth processes, *Journal of Physics*, 8283, 47-98 (2002).
- BERREHAR J., Caroli C., Lapersonne-Meyer C., Schott M. "Surface patterns on single-crystal films under uniaxial stress: experimental evidence for the Grinfeld instability", *Physical Review B*, **46** (20), 487-495 (1992).
- BIMBERG D., Pohl U.W. "Quantum dots: promises and accomplishments, *Materials Today*, **14** (9), 388-397 (2011).
- BREBBIA C.A., Dominguez J., "Boundary elements an introductory course", (McGraw Hill, New York, USA), p. 160 (1992).
- BUALEV D.V., Geyler V.A., Margulis V.A. "Magnetic response for an ellipsoid of revolution in a magnetic field", *Physical Review B*, **62**, 17 (2000).
- BUALEV D.V., Geyler V.A., Margulis V.A. "Effect of the surface curvature on the magnetic moment and persistent currents in two-dimensional quantum rings and dots", *Physical Review B*, **69**, 195313 (2004).
- CHANG L.L. "Resonant tunneling in semiconductor double barriers", *Applied Physics Letters*, **24** (12), 593-595 (1974).
- CHENG C-C., Meneou K., Cheng K.Y. "Effects of nano-pattern size on the property of InAs site-controlled quantum dots", *J. Crystal Growth*, **323**, 180-182 (2011).
- CHIU C-H. "Stable and uniform arrays of self-assembled nanocrystalline islands", *Phys. Rev. B*, **69**, 165413 (2004).
- CHIU C-H., Gao H. "Stress singularities along a cycloid rough surface", *Int. J. Solids Struct.*, **30**, 2981-3012 (1993).
- DASGUPTA D., Sfyris G.I., Gungor M.R., Maroudas D. "Surface morphological stabilization of stressed crystalline solids by simultaneous action of applied electric and thermal fields", *Applied Physics Letters*, **100** (14), 141902 (2012).
- DINGLE R., Henry, C. H., *US Patent*, 3, 982, 207 (1976).
- DIXIT G.K., Ranganathan M. "Modeling elastic anisotropy in strained heteroepitaxy", *J. Phys.: Condens. Matter*, **29**, 375001 (2017).

- DU L., Maroudas D. "Current-induced surface roughness reduction in conducting thin films", *Applied Physics Letters*, **110**, 103103 (2017).
- EAGLESHAM D.J., Cerullo M., "Dislocation-free Stranski-Krastanow Growth of Ge on Si(100)", *Phys. Rev. Lett.*, **64** (16), 1943-1946 (1990).
- EISENBERG H.R., Kandel D. "Formation, ripening, and stability of epitaxially strained island arrays", *Phys. Rev. B*, **71**, 115423 (2005).
- ENTIN M.V., Magaril L.I. "Spin-orbit interaction of electrons on a curved surface", *Phys. Rev. B* **64**, 085330 (2001).
- FLORO J., Chason E., Twesten R., Hwang R., Freund L. "SiGe coherent islanding and stress relaxation in the high mobility regime", *Physical Review Letters*, **79** (20), 3946–3949 (1997).
- GAILLARD P., Aqua J.N., Frisch T. "Kinetic Monte Carlo simulations of the growth of silicon germanium pyramids", *Physical Review B*, **87**, 125310, 1-6 (2013).
- GAMAGE C.G., Huang Z.F. "Nonlinear dynamics of island coarsening and stabilization during strained film heteroepitaxy", *Physical Review E*, **87**, 022408, 1-6 (2013).
- GARCIA J.M., Silveira J.P., Briones F. "Strain relaxation and segregation effects during self-assembled InAs quantum dots formation on GaAs (001)", *Applied Physics Letters*, **77**, 409 (2000).
- GELLER M, Marenta A, Nowozina T, Feisea D, Pötschke K., Akçayab N., Öncana N., Bimberg D. "Towards an universal memory based on self-organized quantum dots", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **40** (6), p 1811-1814 (2008).
- GOLOVIN A., Levine M., Savina T., Davis S. "Faceting instability in the presence of wetting interactions: A mechanism for the formation of quantum dots", *Physical Review B*, **70** (23), 235342, 1-11 (2004).
- GRINFEL'D M.A. "Instability of the separation boundary between a nonhydrostatically stressed elastic body via melt", *Soviet Physics Doklady*, **831**, 1-8 (1986).
- GRINFEL'D M.A., "The stress driven instability in elastic crystals: Mathematical models and physical manifestations", *Journal of Nonlinear Science*, **3**, 35–83 (1993).
- HAN P., Mihi A., Ferre-borruel J., Pallarés J., Marsal F.L. "Interplay between morphology, optical properties and electronic structure of solution processed Bi₂S₃ colloidal nanocrystals", *The Journal of Physical Chemistry C*, **119**, 10693-10699 (2015).
- HERNÁNDEZ-SAZ J., Herrera M., Duguay S., Molina S.I. "Strain analysis for the prediction of the preferential nucleation sites of stacked quantum dots by combination of FEM and APT", *Nanoscale Research Letters*, **8** (1), 513, 1-6 (2013).
- HU H., Gao H., Liu F. "Quantitative model of heterogeneous nucleation and growth of SiGe quantum dot molecules", *Physical Review Letters*, **109** (10), 106103, 1-5 (2012).
- HU W.W., Sarveswaran K., Lieberman M., Bernstein G.H. "Sub-10 nm electron beam lithography using cold development of poly(methylmethacrylate)", *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* **22** (4), 1711-1716 (2004).
- HULL R., Gray J.L., Kammler M., Vandervelde T., Kobayashi T., Kumar P., Pernell T., Bean J.C., Floro J.A., Ross F.M. "Precision placement of heteroepitaxial semiconductor quantum dots", *Materials Science ve Engineering B*, **101** (1-3), 1–8 (2003).
- JBARA S.A., Othaman Z., Saeed M.A. "Effect of size and indium-composition on linear and non-linear optical absorption of InGaN/GaN lens-shaped quantum dot", *Chinese Physics B*, **25**, 5,057801 (2016).
- JESSON D.E., Chen K.M., Pennycook S.J. "Mechanisms of strain induced roughening and dislocation multiplication in SiGe thin films", *Journal of Electronic*, **26** (9), 1039-1047 (1997).
- KHENNER M., "Height transitions, shape evolution, and coarsening of equilibrating quantum nanoislands", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **25**, 8, 085003 (2017).
- KIENZLE O., Ernst F., Rühle M., Schmidt O.G., Eberl K., "Germanium 'quantum dots' embedded in silicon: quantitative study of self-alignment and coarsening", *Applied Physics Letters*, **74** (2), 269-274 (1999).

- KIRSTAEDTER N., Schmidt O.G., Ledentsov N.N., Bimberg D., Ustinov V.M., Egorov A.Y., Zhukov A.E., Maximov M.V., Kopev P.S., Alferov Z.I. "Gain and differential gain of single layer InAs/GaAs quantum dot injection lasers", *Applied Physics Letters*, **69**, 9, 1226-1228 (1996).
- KUKTA R.V., Freund L.B. "Minimum energy configuration of epitaxial material clusters on a lattice-mismatched substrate", *Journal of the Mechanics ve Physics of Solids*, **45** (11-12), 1835–1860 (1997).
- KUMAR O., Kaur M. "Single electron transistors: applications & problems, *Int. J. VLSI Design & Communication Systems*, **1**, 24-29 (2010).
- KUMAR A., Dasgupta D., Maroudas D. "Surface nanopattern formation due to current-induced homoepitaxial nanowire edge instability", *Applied Physics Letters*, **109**, 113106 (2016a).
- KUMAR A. Dasgupta D., Dimitrakopoulos C., Maroudas D. "Current-driven nanowire formation on surfaces of crystalline conducting substrates", *Applied Physics Letters*, **108**, 193109 (2016b).
- KONGKANAND A., Tvrđy K., Takechi K., Kuno M.K., Kamat P.V. "Quantum dot solar cells: tuning photoresponse through size and shape control of CdSe-TiO₂ Architecture", *Journal of the American Chemical Society*, **130**, 4007–4015 (2008).
- KURYLIUK V.V., Korotchenkov O.A. "Features of the stress-strain state of Si/SiO₂/Ge heterostructures with germanium nanoislands of a limited density", *Semiconductors*, **47** (8), 1031–1036 (2013).
- KORZEC M.D., Muench A., Wagner B. "Anisotropic surface energy formulations and their effect on stability of a growing thin film", *Interfaces and Free Boundaries*, **14** (4), 545-567 (2012).
- KRISHNAMURTHY R., Srolovitz D.J. "Film/substrate interface stability in thin films" *J. Appl. Phys.*, **99**, 043504 (2006).
- KROUTVAR M., Zrenner A., Ducommun Y., Finley J.J., Abstreiter G. "Wavelength selective data storage in InGaAs–GaAs quantum dots", *Physica Status Solidi (b)*, **238**, 2, 345– 348 (2003).
- LEDENTSOV N.N., Grundmann M., Kirstaedter N. "Luminescence and structural properties of (In,Ga)As/GaAs quantum dots." *Proc. 22nd Int. Conf. Phys.*, 1855, (1994).
- LEE S., Wang L., Lu W. "Formation of ordered nanodroplet chains on a solid surface by enhanced surface diffusion and shadow effect", *Surface Science*, **606** (5-6), 659–663 (2012).
- LEONARD D., Pond K., Petroff P.M., P.M. "Critical layer thickness for self-assembled InAs islands on GaAs, *Physical Review B*, **50** (16), 1-9 (1994).
- LEONARD D., Krishnamurthy M., Reaves C.M., Denbaars S.P., Petroff P.M., "Direct formation of quantum-sized dots from uniform coherent islands of InGaAs on GaAs surfaces", *Appl. Phys. Lett.*, **63** (23), 3203-3205 (1993).
- LEVINE M.S., Golovin A.A., Davis S.H., Voorhees P.W. "Self-assembly of quantum dots in a thin epitaxial film wetting an elastic substrate" *Phys. Rev. B*, **75**, 205312 (2007).
- LIAO X., Xiao J., Ni Y., Li C., Chen X. "Self-assembly of islands on spherical substrates by surface instability", *American Chemical Society Nano*, **11**, 2611–2617 (2017).
- LIU P., Zhang Y.W., Lu C. "Coarsening kinetics of heteroepitaxial islands in nucleationless Stranski-Krastanov growth" *Phys. Rev. B*, **6**, 035402 (2003).
- LOZOVY K., Alexander V.V, Andrey P.K, Vadim G.S., "Comparative Analysis of Pyramidal ve Wedge-Like Quantum Dots Formation Kinetics in Ge/Si(001) System." *Surface Science*, **619**, 1–4 (2014).
- LU W., Rimberg J., Maranowski K.D., Gossard C., "Single-electron transistor strongly coupled to an electrostatically defined quantum dot, *Applied Physics Letters*, **77** (17), 2746-2751 (2000).
- LUQUE A. "Will we exceed 50% efficiency in photovoltaics?" *J. Applied Physics*, **110**, 031301 (2011).
- MATHEWS J.H., *Numerical Methods for Mathematics, Science and Engineering* (Prentice-Hall International Edition, New Jersey, USA), p. 148 (1992).

- MEDHEKAR N.V., Shenoy V.B. "Shape dynamics in anisotropically strained two-dimensional self-assembling systems", *J. Appl. Phys.*, **103**, 063523 (2008).
- MO Y.W., Savage D.E., Swartzentruber B.S., Lagally M.G. "Kinetic pathway in Stranski-Krastanov growth of Ge on Si (001)", *Physical Review Letters*, **65** (8), 1020-1023 (1990).
- MONTALENTI F., Raiteri P., Migas D., Känel von H., Rastelli A., Manzano C., Costantini G., "Atomic-scale pathway of the pyramid-to-dome transition during Ge growth on Si(001)." *Physical Review Letters*, **93** (21), 216102, 1-4 (2004).
- NISHIGUCHI T., Mitsuhiro N., Koji N., Toshiyuki I., Shigehiro N. "Heteroepitaxial growth of (111) 3C-SiC on well-lattice-matched (110) Si substrates by chemical vapor deposition", *Applied Physics Letters*, **84** (16), 3082, 1-5 (2004).
- NORRIS D.J., Bawendi M.G., "Measurement and assignment of size-dependent optical spectrum in CdSe quantum dots", *Physical Review B*, **53**, 24 (1995).
- OGURTANI T.O., Oren E.E. "Computer simulation of void growth dynamics under the action of electromigration and capillary forces in narrow thin interconnects" *Journal of Applied Physics*, **90** (3), 1564-1572 (2001).
- OGURTANI T.O., Oren E.E. "Irreversible thermodynamics of triple junctions during the intergranular void motion under the electromigration forces, *International Journal of Solids ve Structures*, **42** (13) (June), 3918–3952 (2005).
- OGURTANI T.O. "Mesoscopic nonequilibrium thermodynamics of solid surfaces & interfaces with triple junction singularities under the capillary and electromigration forces in anisotropic 3-D space", *The Journal of Chemical Phys.*, **124** (14), 144706, 1-12 (2006).
- OGURTANI T.O., Celik A., Oren E.E. "Morphological evolution in a strained-heteroepitaxial solid droplet on a rigid substrate: dynamical simulations", *Journal of Applied Physics*, **108** (6), 063527, 1-16 (2010a).
- OGURTANI T.O., Celik A., Oren E.E. "Generic role of the anisotropic surface free energy on the morphological evolution in a strained-heteroepitaxial solid droplet on a rigid substrate", *Journal of Applied Physics*, **108** (6), 103516, 1-14 (2010b).
- OZKAN C.S., Nix W.D., Gao H.J. "Strain relaxation and defect formation in heteroepitaxial Si_{1-x}Ge_x films via surface roughening induced by controlled annealing experiments", *Applied Physics Letters*, **70**, 17, 2247-2249 (1997).
- PARIS F., Canas J., (2001) , "Boundary Element Method : Fundamentals and Applications"
- PATELLA F., Arciprete F., Fanfoni M., Balzarotti A., Placidi E. "Apparent critical thickness vs temperature for InAs quantum dot growth on GaAs(001), *Applied Physics Letters*, **88** (16), 161903, 1-3 (2006).
- PETROFF P.M. "Toward quantum well wires: fabrication and optical properties." *Applied Physics Letters*, **41** (7), 635-638 (1982).
- PLASS R.A., Bartelt N.C., Kellogg G.L. "Self assembly in the Pb on Cu(111) surface system", *The American Chemical Society*, **222**, U22-U22, 2 (2001).
- POHL K., Figuera J., Bartelt J.H., Hwang R.Q., Thermal vibrations of a two-dimensional vacancy island crystal in a strained metal film", *Surface Science*, **433**, 506-511 (1999).
- POLITI P., Grenet G., Marty A., Ponchet A., Villain J. "Instabilities in crystal growth by atomic or molecular beams", *Physics Reports*, **324**, 271-404 (2000).
- POPESCU V., Bester G., Hanna M.C., Norman A.G., Zunger A. "Theoretical and experimental examination of the intermediate-band concept for strain-balanced (In,Ga)As/Ga(As,P) quantum dot solar cells", *Physical Review B*, **78**, 205321 (2008).
- RAFFAELLE R.P., Sinharoy S., Andersen J., Wilt D., Bailey S.G. "Multi-junction solar cell spectral tuning with quantum dots", *Proceedings of the IEEE World Conference on Photovoltaic Energy Conversion*, New York, 1, 162–166 (2006).
- RAVISWARAN A., Chuan-Pu L., Kim J., Cahill D., Gibson J. "Evolution of coherent islands during strained-layer Volmer-Weber growth of Si on Ge(111)", *Physical Review B*, **63** (12), 125314, 1-5 (2001).

- REED M.A., Randall J.N., Aggarwal R.J., Matyi R.J. Moore T.M., Wetsel A.E. "Observation of discrete electronic states in zero-dimensional semiconductor nanostructure", *Physical Review Letters*, **60** (6), 535-537 (1988).
- ROSS F.M., Tersoff J., Tromp R.M. "Coarsening of self-assembled Ge quantum dots on Si(001)" *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 984-987 (1998).
- SCALARI G, Walther, C., Fischer, M., Terazzi, R., Beere, H., Ritchie, D., Faist, J., "THz and sub-THz quantum cascade lasers", *Laser & Photonics Reviews*, **3** (1-2) 45-66 (2009).
- SCHALLER R.D., Klimov, V.I., "High efficiency carrier multiplication in PbSe nanocrystals: implications for solar energy conversion, *Physical Review Letters*, **92**, 186601 (2004).
- SFYRIS G.I., Gungor M.R., Maroudas D. "The effect of a compliant substrate on the electromigration-driven surface morphological stabilization of an epitaxial thin film, *Journal of Applied Physics*, **111**, 2 (2012).
- SHALEEV M.V., Novikov A.V., Yurasov D.V. "Transition from the two-to three-dimensional growth of Ge films upon deposition onto relaxed SiGe/Si (001) buffer layers, *Semiconductors*, **47** (3), 427-432 (2013).
- SHKLYAEV A.A., Budazhapova A.E. "Critical conditions for SiGe island formation during Ge deposition on Si(100) at high temperatures", *Materials Science in Semiconductor Processing*, **57** 18-23 (2017).
- SITNIKOV S.V., Kosolobov S.S., Latyshev, A.V. "Nucleation of two-dimensional islands on Si (111) during high-temperature epitaxial growth", *Semiconductors*, **51** (2), 203–206 (2017).
- SNYDER C.W., Orr B.G., Kessler D., Sander L.M. "Effect of strain on surface morphology in highly strained InGaAs films", *Phys. Rev. Lett.*, **66** (23), 3032-3035 (1991).
- SPENCER B.J. "Asymptotic derivation of the glued-wetting-layer model and contact-angle condition for Stranski-Krastanow islands" *Phys. Rev. B*, **59** (3), 2011-2017 (1999).
- SPENCER B.J., Tersoff J. "Symmetry breaking in shape transitions of epitaxial quantum dots", *Physical Review B*, **87** (16), 161301, 1-5 (2013).
- SROLOVITZ D.J. "On the stability of surfaces of stressed solids", *Acta Metallurgica*, **37** (2), 621–625 (1989).
- STANGL J., Holy V., Bauer G. "Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures", *Reviews of Modern Physics*, **76**, 725-783 (2004).
- SURRENTE A., Carron R., Gallo P., Rudra A., Dwir B., Kapon E. "Self-formation of hexagonal nanotemplates for growth of pyramidal quantum dots by metalorganic vapor phase epitaxy on patterned substrates", *Nano Research*, **9** (11): 3279–3290 (2016).
- SZWEDA R., "Trends in the market for diode laser substrates", *The Advanced Semiconductor Magazine*, **14**, 9 (2001).
- TANG M.C., Chen S.M., Wu J., Jiang Q., Kennedy K., Jurczak P., Liao M.Y., Beanland R., Seeds A., Liu H.Y. "Optimizations of defect filter layers for 1.3- μ m InAs/GaAs quantum-dot lasers monolithically grown on Si substrates, *IEEE Journal Of Selected Topics In Quantum Electronics*, **22**, 6 (2016).
- TEKALIGN W.T., Spencer B.J. "Evolution equation for a thin epitaxial film on a deformable substrate", *Journal of Applied Physics*, **96** (10), 5505-5512 (2004).
- TEKALIGN W.T., Spencer B.J. "Thin-film evolution equation for a strained solid film on a deformable substrate: Numerical steady states, *Journal of Applied Physics*, **102** (7), 073503, 1-7 (2007).
- TERSOFF J., LeGoues F.K. "Competing relaxation mechanism in strained layers", *Physical Review Letters*, **72** (22), 3570–3574 (1994).
- TOKAR V.I., Dreyssé H. "Nucleation of size calibrated three-dimensional nanodots in atomistic model of strained epitaxy: a Monte Carlo study", *Journal of Physics: Condensed Matter*, **25**, 045001, 1-10 (2013).
- TOMITORI M., Watanabe K., Kobayashi M. "Layered heteroepitaxial growth of germanium on Si (015) observed by scanning tunneling microscopy", *Surface Science*, **602B** (113), 214-222 (1994).
- TOMIC S., Quantum Dot solar Cells, *Springer* (2014).
- TÓTH G., Craig S.L. "Quantum computing with quantum-dot cellular automata, *Physical Review A*, **63** (5), 052315, 1-4 (2001).

- TROMP R.M., Ross F.M., Reuter M.C. "Instability-driven SiGe island growth, *Physical Review Letters*, **84**, 4641-4644, (2000).
- VASTOLA G., Zhang Y.W., Shenoy B.J. "Experiments and modeling of alloying in self-assembled quantum dots", *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, **16** (2) (April), 64–70 (2012).
- VOSSMEYER T., Katsikas L., Giersig M., Popovich G., Diesner K., Chemseddine A., Eychmüller A., Weller H. "CdS nanoclusters: synthesis, characterization, size dependant oscillator strength, temperature shift of the excitonic transition energy and reversible absorbance shift", *The Journal of Physical Chemistry*, **98**, 7665-7673 (1994).
- WANG G., Fafard S., Leonard D., Bowers J.E., Merz J.L., Petroff P.M. "Time resolved optical characterization of InGaAs/GaAs quantum dots, *Appl. Phys. Lett.*, **64** (21), 2815-2817 (1994).
- WEI C., Spencer B.J. "Asymmetric shape transitions of epitaxial quantum dots" *Proceedings of the Royal Society A* **472**, 20160262 (2016).
- WIEBACH T., Schmidbauer M., Hanke M., "Strain and composition in SiGe nanoscale islands studied by x-ray scattering", *Physical Review B*, **61** (8), 5571–5578 (2000).
- XU X., Aqua J.N., Frisch T., "Growth of a strained epitaxial film on a patterned substrate", *Comptes Rendus Physique*, **14**, 199-207 (2013).
- XU X., Aqua J.N., "Quantum dot growth on a stripe-pattern", *Thin Solid Films*, **543**, 7–10 (2013).
- YIN Y., Alivisatos A.P., "Colloidal nanocrystal synthesis and the organic-inorganic interface", *Nature*, **437**, 664-670 (2005).
- YOUNG T. "An essay on the cohesion of fluids", *Philos. Trans. R. Soc. London*, **95**, 65-87 (1805).
- ZELA V, Pietzonka I., Sass T., Thelander C., Jeppesen S., Seifert W. "Unimodal dome-shaped island population of Ge/Si by step-wise growth in UHV-CVD", *Physica E: Low-Dimensional Systems ve Nanostructures*, **13** (2-4), 1013–1017 (2002).
- ZHANG Y.W., Bower F., "Three-dimensional analysis of shape transitions in strained-heteroepitaxial islands", *Applied Physics Letters*, **78** (18), 2706-2713 (2001).
- ZHANG Y.W., Bower F., "Numerical simulations of island formation in a coherent strained epitaxial thin film system", *Journal of the Mechanics ve Physics of Solids*, **47**, 2273–2297 (1999).
- ZHOU P., Wise S., Li X., Lowengrub J., "Coarsening of elastically stressed, strongly anisotropic driven thin films, *Physical Review E*, **85** (6), 061605, 1-17 (2012).

PROJE ÇIKTILARI

Proje kapsamında yapılan veya hazırlık aşamasında olan yayın ve sunumlar aşağıda belirtilmiştir. Yapılan yayınlarda TÜBİTAK katkısı belirtilmiş olup yapılacak yayınlarda da aynı şekilde TÜBİTAK katkısı belirtilecektir.

1. Aydın, N.S., Oren, E.E., Theory and simulation of quantum dot formation in heteroepitaxially grown thin films under external forces, 2017 TMS 146th Annual Meeting & Exhibition, Symp: *Computational Thermodynamics and Kinetics*, 26 Şubat-02 Mart 2017, San Diego, CA, ABD.

2. Aydın, N.S., Oren, E.E., Design of heteroepitaxially grown quantum dots under external force fields, 2017 TMS 146th Annual Meeting & Exhibition, Symp: *Computational Approaches to Materials for Energy Applications*, 26 Şubat-02 Mart 2017, San Diego, CA, ABD.

3. Aydın, N.S. "Kuantum noktaların elektrik ve gerinim alanları etkisi altında modellenmesi ve tasarımı", (Yüksek Lisans Tezi), TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi Mikro ve Nanoteknoloji Enstitüsü, Aralık 2017.

4. Aydın N.S., Sahin M., Celik A., Ogurtanı T.O., Oren E.E. "Design of heteroepitaxially grown quantum dots under electric field" *Dergi Makalesi*, Hazırlanmaktadır.

5. Aydın N.S., Sahin M., Celik A., Ogurtanı T.O., Oren E.E. "Effect of electric field on the aspect ratio and curvature of crystalline quantum dots" *Dergi Makalesi*, Hazırlanmaktadır.

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje Yürütücüsü:	Yrd. Doç. Dr. ERSİN EMRE ÖREN
Proje No:	315M222
Proje Başlığı:	Kristalli Katı Yüzeylerde Kuantum Nokta Oluşumlarının Elektrik Ve Gerinim Alanları Altında Modellenmesi Ve Tasarımı
Proje Türü:	1001 - Araştırma
Proje Süresi:	24
Araştırmacılar:	AYTAÇ ÇELİK
Danışmanlar:	ÖMER TARIK OĞURTANI
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	TOBB EKONOMİ VE TEKNOLOJİ Ü. MÜHENDİSLİK F. BİYOMEDİKAL MÜHENDİSLİĞİ B.
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	01/05/2016 - 01/05/2018
Onaylanan Bütçe:	300600.0
Harcanan Bütçe:	232957.79
Öz:	<p>Nanoboyutlu aygıtların yapılarında meydana gelen küçük değişiklikler bu aygıtların mekanik, optik ve elektronik özelliklerini değiştirebilmektedir. Bu nedenle, kuantum noktalar gibi nanoyapıların üretilmesi bu tip yapılardaki yüzey ve arayüzeyleri kontrol edebilmemize yani bu yüzey ve arayüzeylerde meydana gelen değişikliklerin mekanizmalarını anlamamıza bağlıdır. Bu çalışma kapsamında, heteroepitaksiyel gerginliğe ve yön bağımlı özelliklere sahip ince filmlerde film/altlık arayüzey denge(sizlik) durumlarını ve kuantum noktaların oluşma ve evrilme kinetiklerini yöneten bir diferansiyel denklemlere elektrik alan eklenerek geliştirilmiştir. Geliştirilen bu denklem sayısal olarak çözümlenmiş ve kapsamlı bir simülasyon programı ortaya çıkarılmıştır. Hazırlanan bu program ile simülasyonlar yapılarak, sistemdeki gerilim değerlerinin ve uygulanan elektrik alanın QD oluşumuna etkileri ortaya çıkarılmıştır. Simülasyonlardan elde edilen veriler sonucunda, malzeme özelliklerine göre hangi dışsal kuvvet alanlarının uygulanması durumunda ne tür kararlı nanoyapılar elde edileceği hakkında bilgiler elde edilmiş ve bu bilgiler faz diyagramları şeklinde sunulmuştur. Bu proje sonucunda elde edilen bilgilerin, istenilen kullanım alanları için gerekli optimum özelliklere sahip kuantum nokta nanoyapıların tasarımına yardımcı olması beklenmektedir.</p>
Anahtar Kelimeler:	Kuantum noktalar, ince filmler, yüzeyler arayüzeyler, yayılım, yönsellik, elektrik alan, modelleme
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır
Projeden Yapılan Yayınlar:	1- Theory and Simulation of Quantum Dot Formation in Heteroepitaxially Grown Thin Films under External Forces (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum), 2- Design of Heteroepitaxially Grown Quantum Dots Under External Force Fields (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum), 3- Kuantum noktaların elektrik ve gerinim alanları etkisi altında modellenmesi ve tasarımı (Tez (Araştırmacı Yetiştirilmesi) - Yüksek Lisans Tezi),