

**YÖN BAĞIMLI YÜZEY ÖZELLİKLERİNİN ETKİSİ ALTINDA
HETEROEPİTAKSİYEL GERGINLIĞE SAHİP KUANTUM
NOKTALARIN OLUŞUMUNUN BİLGİSAYAR MODELLEMESİ**

MERT YİĞİT ŞENGÜL

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
MİKRO VE NANOTEKNOLOJİ**

**TOBB EKONOMİ VE TEKNOLOJİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

TEMMUZ 2014

ANKARA

Fen Bilimleri Enstitü onayı

Prof. Dr. Osman EROĞUL

Müdür

Bu tezin Yüksek Lisans derecesinin tüm gereksinimlerini sağladığını onaylarım.

Prof. Dr. Turgut BAŞTUĞ

Anabilim Dalı Başkanı

Mert Yiğit Şengül tarafından hazırlanan YÖN BAĞIMLI YÜZEY ÖZELLİKLERİNİN ETKİSİ ALTINDA HETEROEPİTAKSİYEL GERGİNLİĞE SAHİP KUANTUM NOKTALARIN OLUŞUMUNUN BİLGİSAYAR MODELLEMESİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Yrd. Doç. Dr. Ersin Emre Ören

Tez Danışmanı

Tez Jüri Üyeleri

Başkan: Prof. Dr. Turgut BAŞTUĞ _____

Üye: Yrd. Doç. Dr. Ersin Emre ÖREN _____

Üye: Yrd. Doç. Dr. Cihan TEKOĞLU _____

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Mert Yiğit Şengül

Üniversitesi : TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi
Enstitüsü : Fen Bilimleri
Anabilim Dalı : Mikro ve Nano Teknoloji Anabilim Dalı
Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Ersin Emre ÖREN
Tez Türü ve Tarihi : Yüksek Lisans – Temmuz 2014

Mert Yiğit ŞENGÜL

**YÖN BAĞIMLI YÜZEY ÖZELLİKLERİNİN ETKİSİ ALTINDA
HETEROEPİTAKSİYEL GERGİNLİĞE SAHİP KUANTUM NOKTALARIN
OLUŞUMUNUN BİLGİSAYAR MODELLEMESİ**

ÖZET

Kuantum Noktalar (KN) boyutları 2-20 nanometre arasında değişen metalik veya yarıiletken parçacıklardır. KN'lerde, boyutların nano ölçekte olması sonucu, ayrık enerji spektrumları oluşur. Bu enerji spektrumu, KN'lerin kompozisyonuna, yoğunluğuna, boyutuna, morfolojisine ve kristal uyumsuzluğundan kaynaklanan gerinimlere bağlı olarak geniş bir aralıkta ayarlanabilir. Bu özelliklere ek olarak, yeni ince film büyütme teknikleri (Stranski-Krastanow) ile KN'ler dislokasyon gibi kusurları içermeyen üretilmektedirler. Bu teknik, aynı zamanda KN'lerin ince bir ıslatma katmanı ile birbirine bağlanmasını ve dolayısıyla oluşturulan foto-elektronların bu katman aracılığı ile taşınabilmesini sağlamaktadır. Tüm bu özellikleri KN'leri özgün elektronik, manyetik ve fotonik cihazların üretimi konusunda çok önemli ve dikkat çeken nanomalzemeler haline getirmiştir.

Malzemelerin elektrostatik ve termomekanik kuvvetler altında zamanla bozunumu teknolojik gelişimin hızını belirleyen en önemli etkidir. Bu çalışmada, anizotropik malzeme özelliklerinin (kristal düzlem yönü, yüzey Gibbs serbest enerjisi, difüzyon) ve gerinim gevşemesinin KN'lerin morfolojik evrilmesine ve ıslatma katmanı oluşumuna etkisi incelenmiştir. Çalışma sabit alt tabaka üzerinde bulunan ve katı malzemeden oluşan damlacığın kendiliğinden evrilmesinin sürekli ortam dinamiği simülasyonları ile incelenmesine dayanmaktadır. Bu çalışmada, yüzey kristali ve yönelimi gerilim altında değişik kombinasyonlarda incelenmiştir. Simülasyonlar sonucunda, izole adacıkların oluşması için belirli bir gerilim değeri olduğu ve bu değer üstüne çıktığında adacık oluşumu gözlenmiştir. Ayrıca yüksek gerilim değerlerinde, ince bir ıslatma katmanı ile birbirine bağlı Stranski-Krastanow tipi adalar oluştuğu gözlemlenmiştir. Bunun yanı sıra, depozit edilen filmin kristalografik yöneliminin kontrol edilmesi ile, kubbe tipinden piramit tipi nano yapılara kadar farklı şekil ve boyutlarda kuantum noktaların oluşturulabileceği gösterilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Kuantum noktaları, ince filmler, epitaksiyel katmanlar, ıslatma, bilgisayar modellemesi.

University : TOBB Economics and Technology University
Institute : Institute of Natural and Applied Sciences
Science Programme : Department of Micro and Nano Technology
Supervisor : Assistant Professor Dr. Ersin Emre OREN
Degree Awarded and Date : M.Sc. – July 2014

Mert Yigit ŞENGÜL

**COMPUTER SIMULATION OF FILM/SUBSTRATE INTERFACE
(IN)STABILITIES AND DEVELOPMENT OF QUANTUM DOTS FROM
HETEROEPITAXIALLY STRAINED ANISOTROPIC THIN FILMS ON
RIGID SUBSTRATES.**

ABSTRACT

Quantum dots (QDs) are metallic or semiconductor nanocrystals that can be as small as 2 to 20 nm. Quantum dots have discrete energy levels that can be engineered by tuning their composition, density, size, morphology and misfit strain. In addition to these properties, it is possible to produce dislocation-free QDs, interconnected with a thin flat wetting layer, by using modern thin film growth techniques (Stranski-Krastanow) and thus photogenerated electrons/holes can be transferred and harvested through the wetting layer. These features make quantum dots attractive for the design and fabrication of novel electronic, magnetic and photonic devices.

Failure of materials under electrostatic and thermo kinetic forces is a key factor which controls the technological growth rate. In this work, the effect of anisotropic material properties (crystal plane orientation, surface Gibbs free energy, diffusion) and strain relaxation to morphological evolution of QDs was studied. We based our study on continuum level dynamical simulations for the spontaneous evolution of an isolated thin solid droplet on a rigid substrate. Different combinations of surface crystal and its orientations were studied. The simulations showed that there is a threshold value for the stress level under which the formation of isolated islands observed; whereas at higher stress levels we observed the formation of SK-type islands connected with a very thin wetting layer. Besides, by controlling the crystallographic orientation of the deposited crystal, it is possible to control the shape and size of QDs.

Keywords: Quantum dots, thin films, epitaxial layers, wetting, computer simulation.

TEŐEKKÜR

Çalıőmalarım boyunca deęerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren Yrd. Doç. Dr. Ersin Emre ÖREN'e ve kıymetli tecrübelerinden faydalandığım Prof. Dr. Ömer Tarık OĖURTANI'ya teőekkürü bir borç bilirim.

Ayrıca bu çalıőmaların yapılması için sağladıkları desteklerden dolayı TÜBİTAK (111T343 projesi) ve TÜBA'ya (Yrd. Doç. Dr. Ersin Emre Ören'in TÜBA GEBİP projesi) teőekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	iii
ABSTRACT.....	iv
TEŞEKKÜR.....	v
İÇİNDEKİLER	vi
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	viii
KISALTMALAR	xiv
SEMBOL LİSTESİ.....	xv
1. GİRİŞ	1
1.1. Motivasyon.....	2
1.2. Kuantum Hapis Etkisi	4
1.3. Kuantum Noktaları	5
1.4. Kuantum Nokta Üretim Teknikleri	5
1.4.1 Kimyasal Sentezleme	5
1.4.2 Litografi Teknikleri.....	6
1.4.3 Epitaksiyel Büyüme	6
1.4.3.1 Stranski-Krastanow Büyüme Modu.....	10
1.5. Yarıiletken Heteroepitaksiyel Kuantum Nokta Uygulamaları	12
1.5.1 Optoelektronik Kuantum Nokta Cihazlar	12
1.5.2 Elektronik Kuantum Nokta Cihazlar.....	13
1.6. Literatür Özeti	14
1.6.1 Deneysel Çalışmalar.....	14
1.6.2 Teorik Çalışmalar.....	19
2. MATEMATİKSEL MODEL VE SAYISAL PROSEDÜR.....	26
2.1 Yüzey Sürüklenme Difüzyonu ve Büyümesinin Formülasyonu	27

2.2	Matematiksel Model ve Sayısal Prosedür	31
2.2.1	Başlangıç Sisteminin Oluşturulması	31
2.2.2	Dönme açılarının hesaplanması:	32
2.2.3	Düğüm noktası eğriliklerinin hesaplanması:	33
2.2.4	Bölgesel normal vektörlerin hesaplanması	34
2.2.5	Yön-bağımlı (Anizotropik) Yüzey Difüzyonu.....	35
2.2.6	Yön-bağımlı (Anizotropik) Yüzey Sertliği	36
2.2.7	Islatma potansiyeli	39
2.2.8	Çember Gerilimlerinin Hesabı	39
2.2.9	Euler Yöntemi	43
2.2.10	Sistemin Yeniden Yapılandırılması	44
3.	SONUÇLAR ve TARTIŞMALAR.....	47
3.1	Sayısal Parametrelerin Programın Çalışması Üzerine Etkileri.....	48
3.2	İzotropik Sistemlerde Damlacık Simülasyonları.....	50
3.2.1	Gerilimsiz İzotropik Sistemler	50
3.2.2	İçsel Gerilimlere Sahip İzotropik Sistemler.....	52
3.3	Anizotropik Sistemler.....	58
3.3.1	Yüzey Difüzyonun Kristal Yönüne Bağlılığı.....	59
3.3.2	Yüzey Serbest Enerjisinin Kristal Yönüne Bağlılığı	59
3.3.3	Damlacık Simülasyonları	61
3.3.3.1	Gerilimsiz Anizotropik Sistemler	62
3.3.3.2	İçsel Gerilimlere Sahip Anizotropik Sistemler	72
3.4	Sistemde Büyümenin Etkileri.....	80
4.	YORUM VE ÖNERİLER.....	84
	KAYNAKLAR	88
	ÖZGEÇMİŞ	96

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

- Şekil 1.1. Kuantum hapis etkisi görülen parçacıklarda yük taşıyıcı hareketinin şematik olarak gösterimi. (a) Kuantum hapis etkisi görülmeyen malzeme. (b) Kuantum kuyusu (Tek yönde kısıtlama). (c) Kuantum teli (İki yönde kısıtlama). (d) Kuantum Noktası (Üç yönde kısıtlama)..... 4
- Şekil 1.2. Büyüme sırasında gerçekleşen temel işlemlerin şematik olarak gösterimi . 7
- Şekil 1.3. Üç heteroepitaksiyel büyüme modunun kesitsel görüntüsü (a) Frank Van der Merwe (FM), (b) Volmer-Weber (VW), (c) Stranski-Krastanow (SK)..... 9
- Şekil 1.4. Şekil 1.3te gösterilen üç heteroepitaksiyel büyüme moduna örnek kesitsel TEM görüntüleri (a) Frank Van der Merwe (FM) [16], (b) Volmer-Weber (VW) [14], (c) Stranski-Krastanow (SK) [15]. 9
- Şekil 1.5. 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 11
- Şekil 1.6. Dört kuantum noktalı temel hücre (0 ve 1 konumlarında)..... 13
- Şekil 1.7. Kuantum noktaları hücrelerden oluşan basit mantık elemanları. Soldaki ikili tel, sağdaki dönüştürücü. 14
- Şekil 1.8. $Si_{0.75}Ge_{0.25}/Si(001)$ tabakasının SEM görüntüsü..... 15
- Şekil 1.9. (a) $Si_{0.6}Ge_{0.4}$ için yuvarlak şekilli kubbe tipi ve kare tabanlı kulübe tipi adacık dağılımının AFM görüntüsü. (b) Kulübe ve (c) kubbe tipi adaların TEM görüntüsü. (d), (c)'de görülen kubbe tipi adalarda (113) ve (111) düzgün yüzeylerinin varlığının gösterimi için büyütülmüş hali [30]. 15
- Şekil 1.10. (a) Piramit ve kubbe şeklindeki Ge/Si ada dağılımının HRAFM görüntüsü. (b) Ge/Si(001) adaların [100] kesit alanından TEM görüntüsü 16
- Şekil 1.11. Sol tarafta kubbe tipi ve sağ tarafta piramit şeklinde kuantum noktaları. (650°C sıcaklıkta 6ML Ge/Si(001) depozit edilmiştir.)..... 18
- Şekil 1.12. Sol tarafta kubbe tipi ve sağ tarafta piramit şekilli kuantum noktalarının iki ışıklı koşulda TEM kesit alan görüntüleri 18
- Şekil 2.1. Altlık ile sistem üzerindeki adacık oluşumunun şematik gösterimi 27

Şekil 2.2. Düğüm noktası i 'deki elemanın dönme açısı θ_i 'nin şematik gösterimi....	32
Şekil 2.3. Yüzeydeki üç düğüm noktasından geçen bir dairenin şematik gösterimi. O noktası çemberin orta noktasıdır. $s_i = [DN]$, $s_{i+1} = [CN]$, $[OB] \perp [DN]$, $[OA] \perp [CN]$ ve $[AB] \parallel [CD] \perp n^{(i)}$	33
Şekil 2.4. Difüzyon anizotropisi: a) $\{110\}$ düzleminde, $D_\sigma^0 = 1$, $A = 5$, $m = 1$, $\theta = 3.93\pi/10$ değerleri için kübik yapıda iki katlı dönme simetrisi. b) $\{100\}$ düzleminde, $D_\sigma^0 = 1$, $A = 7$, $m = 2$, $\theta = \pi/4$ değerleri için kübik yapıda dört katlı dönme simetrisi. c) $\{111\}$ düzleminde, $D_\sigma^0 = 1$, $A = 3$, $m = 3$, $\theta = \pi/6$ değerleri için kübik yapıda altı katlı dönme simetrisi.	36
Şekil 2.5. Yüzey Helmholtz serbest enerjisi (mavi) ve yüzey sertliğinin (kırmızı), yüzey merkezli kübik (YMK) kristal yapısında ince film yüzeyine normal $[001]$ eksenine sahip dört katlı simetri düzlemleri için davranışı verilmiştir. Anizotropi sabiti $B=0.2$. Yüzey sertliğinin eksi değere sahip ani artış değerleri yönü boyunca açıkça görülmektedir ve kararsızlık anlamına gelir.	38
Şekil 2.6. İki boyutlu Kelvin çözümü şematik gösterimi.	42
Şekil 2.7. Yeniden bölümlendirme. a) Eleman uzunluğu maksimum kritik değer üstünde. b) Eleman uzunluğu minimum kritik değer altında.....	45
Şekil 2.8. Program akış şeması.	46
Şekil 3.1. Beyaz gürültü deneylerinin şematik gösterimi.	47
Şekil 3.2. Tek damlacık deneylerinin şematik gösterimi.	47
Şekil 3.3. Farklı (a) sistem düğüm sayılarının ve (b) zaman adımları kullanımının sistemin gelişimi üzerindeki etkileri.	49
Şekil 3.4. Farklı ıslatma parametresi (λ_g) değerleri için ıslatma açısının (Θ) dengeye geliş dinamiği. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $\beta = 28$, $M_g = 1$, $\nu = 0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$	51
Şekil 3.5. Islatma parametresinin denge morfolojisi üzerindeki etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $\beta = 28$, $M_g = 1$, $\nu = 0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$	52

Şekil 3.6. Uygulanan gerilimlerin denge morfolojisi üzerindeki etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\beta=28$, $\Theta=75^\circ$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$	53
Şekil 3.7. Uygulanan gerilimlerin tepe yüksekliği ve damlacık denge morfolojisi tepe yüksekliği ve en/boy oranı üzerindeki etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\beta=28$, $\Theta=75^\circ$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$	54
Şekil 3.8. Uygulanan gerilimler altında tepe yüksekliğinin zamanla değişimi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\beta=28$, $\Theta=75^\circ$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$	55
Şekil 3.9. Belirli bir ıslatma açısı altında damlacık en/boy oranının final morfolojiye etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma=0.01$, $\lambda_g=1$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$	56
Şekil 3.10. Belirli bir en/boy oranına sahip damlacıkların farklı ıslatma açıları altında final morfolojileri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma=0.01$, $\beta=15$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$	57
Şekil 3.11. Farklı en/boy oranına sahip damlacıkların gerilim altında morfolojik evrimi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma=1.5$, $\beta=15$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$	58
Şekil 3.12. Farklı ıslatma potansiyellerinin karşılaştırılması.	61
Şekil 3.13. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\{110\}$ kristal düzlemi, $m=1$, $\phi=0$, $\Sigma=0$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$	63
Şekil 3.14. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\{100\}$ kristal düzlemi, $m=2$, $\phi=0$, $\Sigma=0$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$	63
Şekil 3.15. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\{111\}$ kristal düzlemi, $m=3$, $\phi=0$, $\Sigma=0$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$	64
Şekil 3.16. Yüzey sertliği oranının damlacık tepesi ve damlacık ile altlık arasındaki denge ıslatma açısına etkileri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\phi=0$, $\Sigma=0$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$	65

- Şekil 3.17. $\{110\}$ kristal düzleminde ($m=1$) kristal eğiminin KN final morfolojisine etkileri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $B = 0.7$, $\beta = 28$, $M_g = 2$, $\nu = 0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$ 66
- Şekil 3.18. $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) kristal eğiminin KN final morfolojisine etkileri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $B = 0.14$, $\beta = 28$, $M_g = 2$, $\nu = 0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$ 67
- Şekil 3.19. $\{111\}$ kristal düzleminde ($m=3$) kristal eğiminin KN final morfolojisine etkileri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $B = 0.05$, $\beta = 28$, $M_g = 2$, $\nu = 0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$ 67
- Şekil 3.20. $\{110\}$ kristal düzleminde ($m=1$) $\phi = 30^\circ$ kristal eğimi için KN'nin yüzey ile yaptığı ıslatma açılarının evrimi..... 68
- Şekil 3.21. $\{110\}$ kristal düzleminde ($m=1$) $\phi = 90^\circ$ (sol üst) ve $\phi = 0^\circ$ (sağ üst) kristal eğimi için KN'lerin final morfolojilerinin farklı yüzey sertlikleri için en/boy oranları. Altta ise KN'ler için denge morfolojisi örnekleri verilmiştir. 69
- Şekil 3.22. $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi = 45^\circ$ (sol üst) ve $\phi = 0^\circ$ (sağ üst) kristal eğimi için KN'lerin final morfolojilerinin farklı yüzey sertlikleri için en/boy oranları. Altta ise KN'ler için denge morfolojisi örnekleri verilmiştir. 70
- Şekil 3.23. $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi = 45^\circ$ kristal eğimi için yüzey sertliği parametresi, $B=0.14$ olarak seçildiğinde, tek damlacığın piramit şekilli KN'ye evrimi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $\beta = 28$, $M_g = 0.1$, $\nu = 0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$ 71
- Şekil 3.24. Difüzyon yönsellik şiddetini belirleyen A parametresinin adacık morfolojik değişimine etkileri..... 72
- Şekil 3.25. $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi = 45^\circ$ eğimine sahip kristal sisteminde gerilime bağlı adacık gelişimleri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Theta = 60^\circ$, $B=0.1$, $A=2$, $\beta=28$, $M_g=0.1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$ 73
- Şekil 3.26. $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi = 45^\circ$ eğimine sahip kristal sisteminde gerilime bağlı adacık gelişimleri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Theta = 15^\circ$, $B=0.1$, $A=2$, $\beta=28$, $M_g=0.1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$ 73
- Şekil 3.27. Gerilim altında yönsel sistemlerde kuantum nokta oluşumları. Bu simülasyonlarda kullanılan deney parametreleri: $\beta=28$, $M_g=0.1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$ ve $f_d = 1$; (a): $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi = 0^\circ$ eğimine, $\Sigma = 1$, $B=0.01$,

A=2 (b): {110} kristal düzleminde (m=2) $\phi=0^\circ$ eğimine $\Sigma=1$, $B=0.1$, $A=2$ (c): {111} kristal düzleminde (m=2) $\phi=0^\circ$ eğimine $\Sigma=1$, $B=0.05$, $A=2$ (d): {100} kristal düzleminde (m=2) $\phi=0^\circ$ eğimine $\Sigma=1$, $B=0.1$ $A=2$ 74

Şekil 3.28. {111} kristal düzleminde (m=3) $\phi=0^\circ$ kristal eğimi için KN'lerin final morfolojilerinin farklı yüzey sertlikleri altında gelişimi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma=0.5$, $\beta=28$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $\lambda_g=0.259$, $A=0$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$ 75

Şekil 3.29. {101}, {100} ve {111} kristal düzlemlerinde (m=1, 2 ve 3) $\phi=0^\circ$ kristal eğimi için KN'lerin final morfolojileri. 76

Şekil 3.30. {100} kristal düzlemlerinde (m=2) farklı gerilim değerlerinin KN'lerin final morfolojilerine ve oluşan ada sayısına etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\beta=28$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $\lambda_g=0.259$, $A=10$, $B=0.05$, $\phi=0$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$ 77

Şekil 3.31. {100} kristal düzlemlerinde (m=2) farklı gerilim değerlerinde oluşan ada sayıları için faz diyagramı. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $\lambda_g=0.5$, $A=2$, $B=0.1$, $\phi=45$, $f_s=1.2$ ve $f_d=1$ 78

Şekil 3.32. {111} kristal düzlemlerinde (m=3) farklı ıslatma potansiyeli değerlerinin KN'lerin ıslatma katmanı oluşumuna ve kalınlığına etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma=0.4$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\lambda_g=1.1375$, $A=0$, $B=0.05$, $\phi=30$, $f_s=1.2$ ve $f_d=1$ 79

Şekil 3.33. {111} kristal düzlemlerinde (m=3) farklı ıslatma potansiyeli formülasyonlarının ıslatma katmanına olan etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma=0.4$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $\lambda_g=1.1375$, $A=0$, $B=0.05$, $\phi=30$, $f_s=1.2$ ve $f_d=1$ 80

Şekil 3.34. {111} kristal düzleminde (m=3) KN'lerin final morfolojilerinin farklı depozisyon parametreleri için en/boy oranları. Bu simülasyonda kullanılan ortak deney parametreleri: $\Sigma=0.1$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $\lambda_g=1.1375$, $A=0$, $B=0.14$, $\phi=0$, $f_s=1.2$ ve $f_d=1$ 81

Şekil 3.35. Büyüme altında {101}, {100} ve {111} kristal düzlemlerinde (m=1, 2 ve 3) $\phi=0^\circ$ kristal eğimi için KN'lerin final morfolojileri. Bu simülasyonda kullanılan ortak deney parametreleri: $M_b=0.1$, $\Sigma=0.4$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $\lambda_g=1.1375$, $A=0$, $B=0.14$, $\phi=0$, $f_s=1.2$ ve $f_d=1$ 82

KISALTMALAR

Kısaltmalar	Açıklama
AFM	Atomik Kuvvet Mikroskobu
APT	Atom Prob Tomografi
ATG	Asaro Tiller Grinfeld
As	Arsenik
BEM	Sınır Eleman Yöntemi
ESED	Elastik Gerinim Enerji Yoğunluğu
FM	Frank-van-der-Merwe
FEM	Sonlu Elemanlar Yöntemi
Ga	Galyum
Ge	Germanyum
GFET	Gibbs serbest enerji transformasyonu
KN	Kuantum Noktası
IBEM	Dolaylı sınır elemanları yöntemi
IEP	İçsel Entropi Üretimi
In	İndiyum
LED	Işık Yayan Diyod
MBE	Moleküler Işın Epitaksi
QD	Quantum Dot
REF	Entropi Değişim Oranı
Si	Silisyum
SK	Stranski-Krastanow
TEM	Tünellemeli Elektron Mikroskobu
VW	Volmer-Weber

SEMBOL LİSTESİ

Simgeler	Açıklama
a	Kafes parametresi
A	Anizotropik sabit
B	Yüzey sertliği anizotropi sabiti
D	Yüzey difüzyon katsayısı
D	Boyut
$d\xi$	Kimyasal tepkimenin boyutu
ΔA	Kimyasal reaksiyonun afinitesi
$d\Delta S_{ex}$	Entropi akısı
δq	Sistemin çevreden aldığı ısı
$\delta\Delta\Phi$	Sistem tarafından alınan enerji
$d\Delta U$	İçsel enerji değişimi
$\delta\Delta\omega$	Dışardan sisteme yapılan tersinir iş
E_{el}	Elastik gerinim enerjisi
ε_0	Gerinim
$f_{F/s}$	Helmholtz serbest enerji yoğunluğu
ϕ	Kristal düzlem eğim açısı
G	Kayma Modülü
γ	Yüzey Enerjisi
γ	Yüzey sertliği
γ_0	Yüzey Gibbs serbest enerji yoğunluğu
g	Volumetrik Gibbs serbest enerji yoğunluğu
g	Öz Gibbs serbest enerjisi
Γ	Özgül ortalama atomik yoğunluk
\bar{h}	Yüzey ve Altlık arası mesafe
h	Film kalınlığı
J	Atomik akı yoğunluğu
J	Yüzey akısı
\bar{k}	Normalize Yüzey eğriliği
$\bar{\ell}$	İki boyutlu yüzeyde eğrisel koordinat
\bar{M}_{dv}	Normalize büyüme hareketliliği
\bar{M}_{edge}	Üçlü kavşak noktalarında normalize yüzey hareketliliği

μ	Kimyasal potansiyel
\hat{n}	Yüzey normal vektörü
ρ	Poisson Oranı
$\bar{\omega}$	Normalize edilmiş ıslatma potansiyeli
$\bar{\Omega}$	Yüzeyde bulunan kimyasal türlerinin ortalama hacimleri
\vec{r}_c	Kütle merkezi pozisyon vektörü
ρ_i	Daire yarıçapı
s	Yüzey eleman uzunlukları
S_σ	Entropi
$\bar{\sigma}$	Normalize çember gerilimi
Σ	Elastik Gerinim Enerji Yoğunluğu (ESED)
\vec{t}_1	Traksiyon vektörü
θ	Yüzey elemanlarının dönme açısı
\bar{V}_{ord}	Yüzey normaline doğrultusundaki normalize hız vektörü
\bar{V}_{edge}	Üçlü kavşak noktasındaki normalize hız vektörü
w_0	Elastik gerinim enerjisi yoğunluğu
E_d	Young Modülü
f_s	Altlığın Helmholtz yüzey serbest enerjisi
f_d	Filmin Helmholtz yüzey serbest enerjisi
f_{ds}	Damlacık ile altlık arayüzeyinin serbest enerjisi

1. GİRİŞ

Kuantum noktalar (KN) 2-20 nanometre çapında metalik veya yarıiletken parçacıklardır. KN'ler içerisindeki eksitonlar (excitons) yani elektron-boşluk çiftleri boyutsal olarak sınırlandırılmıştır ve bu nedenle, yığın (bulk) malzemelerin aksine, yük taşıyıcıları sıcaklık artışı ile dağılımlarını değiştirmezler [1, 2]. Sonuç olarak, quantum noktalar çok küçük boyutlara sahip olmaları nedeni ile enerji düzeyleri kuantize olarak yapay bir atom gibi davranırlar. KN'lerin enerji spektrumları optik ve elektronik birçok fiziksel özelliklerini kontrol ederken aynı zamanda malzemenin kompozisyonu, yoğunluğu, boyutları, latis gerinimleri ve morfolojisi ile ayarlanabilmektedir [3-5].

Bu karakteristikleri ve elektronik özelliklerinin kontrol edilebilmesi ile, QD'ler elektronik, fotonik, ve manyetik birçok yeni cihazın geliştirilmesi için çok önemli bir aday haline gelmiştir. Bu cihazların uygulama alanlarına; güneş ışığını elektrik enerjisine çeviren fotovoltaikler [6, 7], kuantum bilgisayarlar [8], tek elektron transistörler [9], lazer üretimi ve tıbbi görüntüleme gibi birçok ileri teknoloji uygulama alanları [2] örnek olarak verilebilir.

Kuantum noktalar genellikle iki ana üretim tekniği ile hazırlanırlar: koloidal nanokristal olarak [10] veya yüzeyler ile desteklenen adacıklar olarak [11, 12] İkinci 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 gerilimlerin büyüklüğüne bağlı olarak üç tip ince film büyüme modu olduğu gözlenmektedir [13]. Kuantum noktaların oluşumu için gereken büyüme tipine örnek olarak Stranski-Krastanow (SK) tipi büyüme morfolojileri gösterilebilir ve deneysel olarak, $[In_xGa_{1-x}As/GaAs]$ (Leonard ve ark, 1993) ve $[Ge/Si]$ [14] gibi epitaksiyel gerginliğe sahip ince filmlerde gözlenmektedir. SK büyüme modu ile QD oluşumu, bu QD'lerin içlerinde elektronik performanslarını kötü etkileyebilecek dislokasyon gibi herhangi bir kusur oluşmaması ve ıslatma katmanı sayesinde QD'ler

arası iletişimin sağlanabilmesi nedenleriyle, büyük dikkat çekmiştir [14, 15]. SK büyüme modu tabanlı fabrikasyon teknikleri yüksek yoğunlukta QD yapılar oluşturabilmekte ve bu teknik yarıiletken teknolojileri ile uyum içerisinde seri üretime ve yüksek oranda entegrasyona uygunluk göstermektedir [13]. Tüm bu ilgiye rağmen, bu yarıiletken adacıkların yapı ve dağılımları ile morfolojik evrimleri halen tam olarak anlayamamıştır [5, 16-18]. Bu nedenle, SK büyüme modu ile, kendi kendine organize olabilen (self-organized) QD'ler oluşturabilmek için, farklı kuvvet alanları (gerilim, elektrik) altında QD çekirdeklenmesi, büyümesi ve morfoloji değişimleri hakkında detaylı bilimsel bilgi birikimine ihtiyaç vardır. Bu bilgi, nanoyapılı kuantum noktaların özelliklerinin hassas bir şekilde kontrol edilebilmesini sağlayacaktır. QD-tabanlı cihazların verimliliği, QD'lerin konumlandırma, yoğunluk ve boyutlarına son derece duyarlı olduğundan, büyüme modu dinamikleri ve oluşan QD'lerin elektronik taşıma özelliklerinin anlaşılması QD cihazı uygulamaların başarısı için çok önemlidir. Bu mekanizmaların anlaşılması ile yeni QD fabrikasyon tekniklerinin geliştirilmesi ve yeni QD-tabanlı cihazların tasarlanması beklenmektedir.

1.1. Motivasyon

Son yirmi yıldır kuantum hapis etkisi görülen yapılara ilgi artmıştır ve bu konuda birçok bilimsel araştırma yapılmaktadır. Kuantum hapis etkisi görülen nano boyutlu parçacıklardan biri de kuantum noktalarıdır. Bu nano parçacıklar 3-boyutta limitli sayıda (bir kaç yüzün altında) yük taşıyıcı hareketini kısıtlarlar ve kesikli enerji düzeyleri oluşmasını sağlarlar. Bu özelliklerinden dolayı literatürde suni atomlar olarak anılmaktadırlar. Yarıiletken endüstrisine baktığımızda gün geçtikçe yarıiletken cihazların boyutlarının düştüğünü görmekteyiz. Yarıiletken kuantum noktaları teorik olarak yapılan çalışmalara [19] göre gelecekte yarıiletken teknolojisinde kuantum teorisi ilkelerinden faydalanmak için kullanılacaktır. Ayrıca kuantum noktalarının en önemli özelliklerinden biri, 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 yaratması beklenmektedir.

Teknoloji ilerledikçe cihazlarda kullanılan yapıların küçülmesi aynı zamanda yapıların morfolojisinde oluşan en küçük değişime karşı hassasiyeti arttırmaktadır ve bu değişim yapının mekanik, optik ve elektronik özelliklerini değiştirebilmektedir. Bu nedenle nano cihazların üretilebilmesi bu yapılardaki yüzey ve ara yüzeyleri kontrol edebilme yeteneğimize bağlıdır.

Temel olarak epitaksiyel büyüme [20], litografik teknikler [21, 22] ve kimyasal sentezleme [23] olmak üzere üç kuantum nokta üretme yöntemi vardır. Kimyasal sentezleme yöntemi ile üretilen kuantum noktalar küreseldir ve istenen boyutlarda üretilebilir fakat kuantum noktalar arası elektron iletimi sağlamadığı için elektronik uygulamalarda kullanılamazlar. 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 yapı çok hasar görür ve bu yöntem pahalıdır. Epitaksiyel yöntemler litografik tekniklere göre daha az kompleks ve ucuzdur. Üç tip epitaksiyel büyümeden Stranski-Krastanow tipi büyümeye uygun oluşturulan kuantum noktalar aralarındaki ıslatma katmanı ile birbirlerine elektron iletimi sağlayacak şekilde bağlıdır ve elektronik cihaz uygulamalarına elverişlidirler. Fakat bu tip büyümenin mekanizması henüz anlaşılmadığı için kuantum noktaların boyutları ve dizilimleri kontrol edilememektedir.

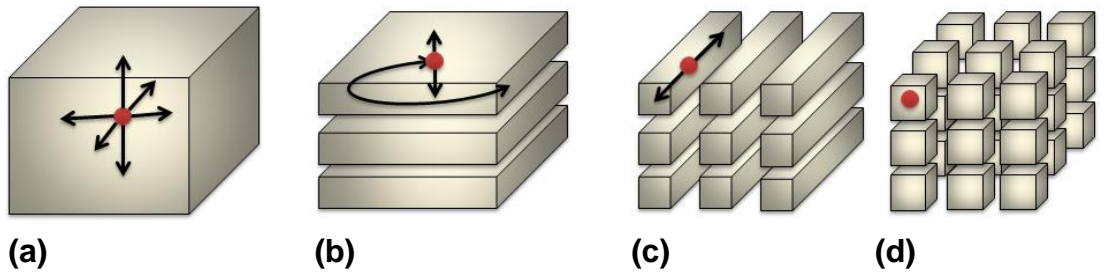
Epitaksiyel büyüme yukarıda anlatılan kısıtlamalara rağmen gelecek vadeden bir yöntemdir. Bu yöntemde alt tabaka ve üstüne kaplanan malzemenin farklı olması durumunda (heteroepitaksi), örgü parametrelerindeki farklılıktan kaynaklı oluşan gerinim alanı sebebiyle kuantum noktalarının kendinden oluştuğu görülmüştür. Bu kendinden oluşma mekanizmasını kullanarak aynı zamanda oluşan kuantum noktaların dizilimini ve şeklini kontrol etmenin bir yolu moleküler-ışın epitaksi (MBE) ile üretimdir. Bu yöntem ile alt tabaka üzerine konan damlacıklar,

heteroepitaksiyel gerginlik nedeniyle kendinden oluşum gösterecektir ve bu yöntem ile kuantum noktaların dizilimi istenen şekilde ayarlanabilmektedir.

Bu çalışmanın amacı MBE yöntemi ile alt tabaka üzerine yerleştirilen damlacıkların şekilsel evrilme kinetiklerinin ve heteroepitaksiyel gerginliğe ve yön bağımlı özelliklere sahip film/alt tabaka ara yüzeyi denge(sizlik) durumlarının bilgisayar simülasyonları ile araştırılmasıdır.

1.2. Kuantum Hapis Etkisi

Malzemelerin elektriksel özelliklerinin, yapının boyutunu düşürdükçe nasıl etkilendiği yıllardır çalışılmaktadır. Elektronun (veya boşluğun) hareketinin kısıtlanacağı kadar küçük boyutlara sahip yapılarda kuantum hapis etkisi görüldüğü bulunmuştur. Kuantum hapis etkisi, yük taşıyıcının etrafındaki potansiyelden dolayı hareketinin kısıtlanmasıdır. Bu potansiyeller parçacığın kısıtlandığı boyutların sayısını belirler ve parçacıklar kısıtlandıkları boyutların sayısına bağlı olarak farklı adlandırılırlar. Şekil 1.1’de görüldüğü gibi bir yönde kısıtlanan parçacıklara kuantum tabakası, iki yönde kısıtlanan parçacıklara kuantum teli ve üç boyutta kısıtlanan parçacıklara ise kuantum noktası denir.



Şekil 1.1. Kuantum hapis etkisi görülen parçacıklarda yük taşıyıcı hareketinin şematik olarak gösterimi. (a) Kuantum hapis etkisi görülmeyen malzeme. (b) Kuantum tabakası (Tek yönde kısıtlama). (c) Kuantum teli (İki yönde kısıtlama). (d) Kuantum Noktası (Üç yönde kısıtlama).

Bazı malzemeler üstünde yapılan çalışmalar sonucunda bu düşük boyutlu yapılar bulunmaya başlanmıştır. Bunlar, 1970'lerde kuantum kuyuları [24], 1980'lerde kuantum telleri [25] ve 1980 ve 1990'larda kuantum noktalarıdır.

1.3. Kuantum Noktaları

Kuantum noktalar, boyutları 2-20 nanometre arasında değişen metalik veya yarıiletken parçacıklardır. Bu parçacıkların en temel özellikleri, içerisindeki elektron-boşluk çiftlerinin boyutsal olarak sınırlandırılmış olmasından dolayı kuantum hapis etkisinin görülmesidir. 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 düzeyleri kuantize olarak yapay bir atom gibi davranırlar. Kuantum noktaların enerji spektrumları, parçacık boyutu ile değişim gösterir ve bu değişim parçacığın optik ve elektronik özelliklerini etkilemektedir. Bu özelliği kuantum noktalarının boyutlarını kontrol edebilmemiz durumunda optik ve elektronik özelliklerini de kontrol edebilmemizi sağlamaktadır. Bu sebepten kuantum noktalar fotonik ve elektronik cihaz uygulamalarında çok önemli bir yer edinmiştir. Kuantum noktaların özellikleri ve dolaylı olarak uygulama alanları üretim tekniklerine göre değişmektedir. Yarıiletken kuantum noktalar, genellikle üç ana üretim tekniği ile hazırlanırlar. Bunlar; kimyasal sentezleme, litografik teknikler ve epitaksiyel büyümedir.

1.4. Kuantum Nokta Üretim Teknikleri

1.4.1 Kimyasal Sentezleme

Yarıiletken kuantum noktalar sıvı çözücüler içinde, kimyasal yöntemler ile homojen boyutlarda ve şekillerde üretilebilir [26]. Bu yarıiletken kuantum noktalar genelde II-VI grubu bileşiklerdir ve üretilen parçacık boyutu ortalama 1,2 ile 11,5 nm arasında değişmektedir. Üretim sırasında uygulanan prosedür genelde oda sıcaklığında çöktürme kullanan yöntemler ve organometalik ve polimer kimyasından malzemeleri

içermektedir. Bu yöntem ile kuantum noktaların büyüme sonrası kümelenmesini gözlemlemek mümkündür ve kümelenme sonucu oluşan kuantum nokta kristallerinin önemli manyetik ve fotonik özellikleri vardır [27].

1.4.2 Litografi Teknikleri

Kuantum kuyularından oluşan bir kalıp kullanılarak yapılan kuantum nokta üretimi en anlaşılır üretim tekniğidir ve birçok avantajı vardır. Kullanılan litografi tekniğinin çözünürlüğüne bağlı olarak istenen boyutta, şekilde ve dizilimde kuantum noktalar elde edilebilir. Ayrıca bu teknikler sürekli geliştirilmektedir ve gün geçtikçe daha küçük boyutlarda mikro elektronik cihaz yapımına olanak sağlamaktadır. Litografi tekniklerinde kullanılacak olan kalıp için optik litografi [28], x-ışını litografisi [29], elektron demeti litografisi [30] ve odaklı iyon ışını litografisi [31] gibi birçok teknik bulunmaktadır. Litografinin çözünürlüğü kullanılan dalga boyu ile orantılı olup bugüne kadar en yüksek çözünürlük elektron demeti litografisi ile yaklaşık 10 nm olarak elde edilmiştir.

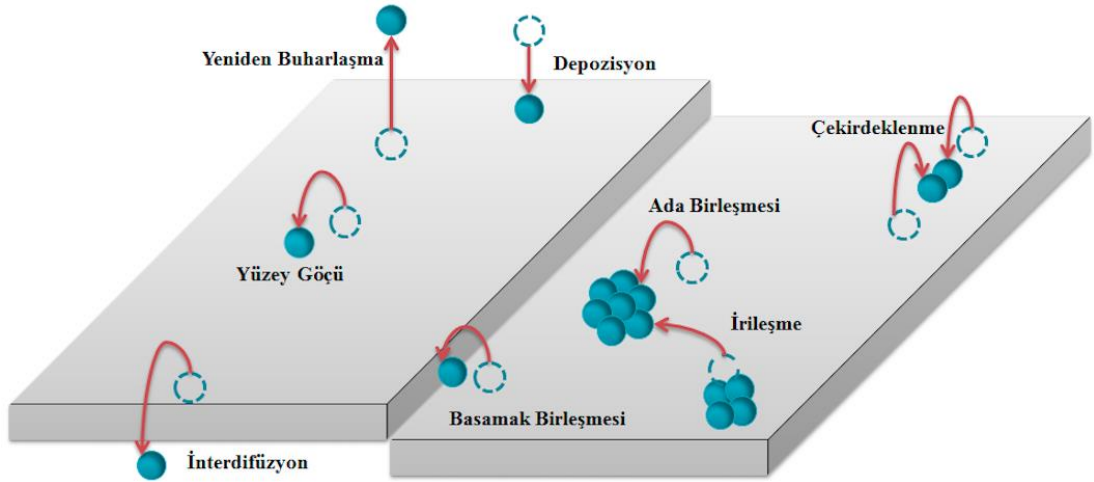
Bu avantajlara rağmen litografi yöntemleri üretim sırasında uygulanan adımlar açısından çok karmaşık, pahalı ve zaman alıcıdır. Ayrıca aşındırma (etching) sırasında yapıya önemli ölçüde zarar verilmektedir ve bu zarar üretilen cihazın optoelektronik verimliliğini düşürür. Bu sebepten epitaksiyel kendinden büyüme yöntemleri kolaylığı ve ucuzluğu açısından önemlidir ve son yıllarda büyük ilgi görmektedir.

1.4.3 Epitaksiyel Büyüme

Epitaksiyel büyüme, bir yüzey üstüne kristal yapısı uygun bir malzeme depozit edilerek kristal büyütme işlemidir. Bu yöntem ile ilgili ilk çalışma 150 yıl önce yapılmıştır fakat epitaksiyel büyümenin sistematığı 1920 yılında Louis Royer tarafından yapılan bir çalışma ile aydınlatılmıştır. Royer, epitaksi kelimesini büyütülen kristalin yöneliminin yüzeydeki kristal tarafından belirlendiğini anlatmak için ve bu büyüme

yöntemini kristal olmayan ve amorf büyümelerden ayırmak için kullanmıştır. Epitaksiyel büyümede oluşan filmin şekli: yüzeye depozit edilme oranı, yüzey sıcaklığı ve kristalografik yönelime bağlıdır.

Epitaksiyel büyümenin mikroskobik yapısı şematik olarak Şekil 1.2’de verilmiştir. Şekilden de anlaşılacağı gibi temel işlemler büyüme sırasında oluşmaktadır. Depozit edilen malzemenin atomları buhar kaynağından yüzeye varırlar. Bu atomlar, büyüyen yüzeye tutunan atomlardır ve bu işleme depozit etme denir. Bu yüzeye tutunan atomlar, yüzey üzerinde hareket edebilirler (Yüzey Göçü), yüzey basamakları ile karşılaşabilir ve onlara tutunabilirler (Basamak Birleşmesi), diğer tutunan atomlar ile karşılaşarak dengeli adalar oluşturabilirler (Çekirdeklenme), daha önce oluşmuş adalar ile karşılaşabilir ve onlara tutunabilirler (Ada Birleşmesi), bir adayı terk edip diğer bir adaya tutunabilirler (İrileşme), yüzey kristalindeki atomlar ile yer değiştirebilirler (İnterdifüzyon) veya yüzeyi terk edebilirler (Yeniden Buharlaşma). Depozit edilen atomlar bu davranışlardan bir tanesini veya birkaç tanesini gösterebilirler.

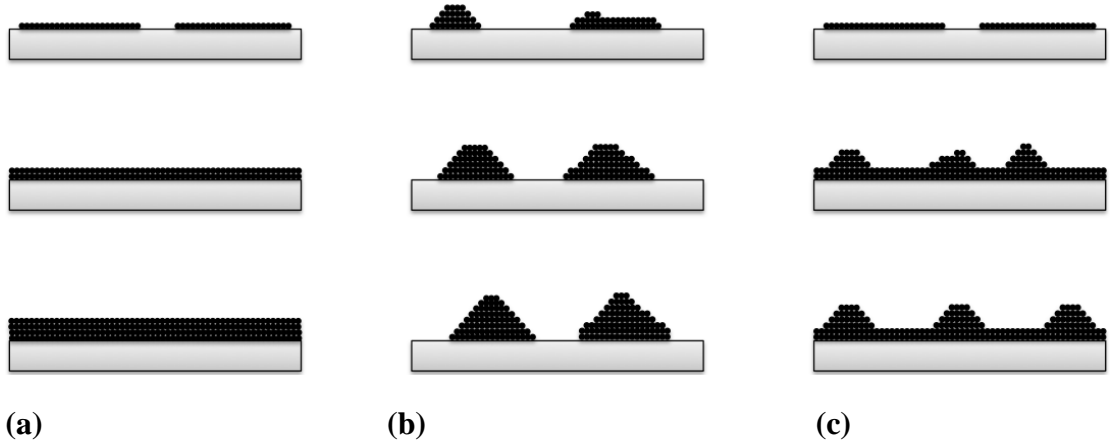


Şekil 1.2. Büyüme sırasında depozit edilen malzeme atomlarının (yeşil küreler) muhtemel hareketinin şematik olarak gösterimi

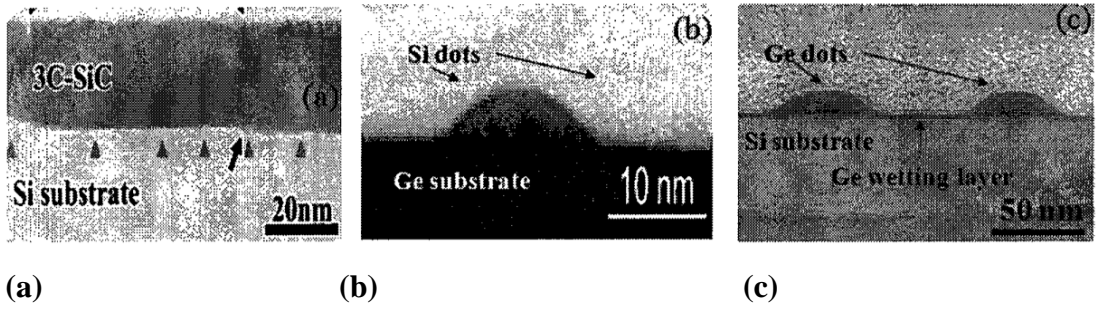
Epitaksiyel büyüme iki kategoriye ayrılabilir: homoepitaksiyel büyüme ve heteroepitaksiyel büyüme. Homoepitaksiyel büyüme, kristalin yüzeyi üstünde aynı malzemeyi, heteroepitaksiyel büyüme ise farklı bir malzemeyi büyütmeektir. Homoepitaksiyel büyüme daha az karmaşık bir sistemdir ve daha iyi anlaşılmasıdır. Bu sebepten, bilimsel araştırmalarda genel olarak heteroepitaksiyel büyümeye odaklanılmıştır.

Heteroepitaksiyel büyümei kompleks yapan en önemli faktör, depozit edilen malzeme ve yüzey malzemesi arasındaki kafes parametresi uyumsuzluğudur. Bu iki malzemenin farklı kafes parametreleri olması ve bunların eşleşmesi sonucu yüzey üzerinde gerinim etkisi altında epitaksiyel bir ince film oluşur. Heteroepitaksiyel büyüme olan sistemlerde gerinim enerjisinin rahatlaması önemli ve göz ardı edilemez bir etkendir.

Heteroepitaksiyel büyümede Şekil 1.3'te görüldüğü gibi üç tane termodinamik denge durumunda büyüme modu bulunur: Volmer-Weber (VW) büyüme modu [32], Stranski-Krastanow (SK) büyüme modu [33] ve Frank-van-der-Merwe (FM) büyüme modu [34]. 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 [34]. Depozit edilen malzemenin direkt olarak üç boyutlu adalar oluşturduğu ve ara yüzey enerjileri yüksek olan büyüme modu VW büyümesidir. Bu büyüme çeşidi epitaksiyel yüzeyler ile yüzey kristali çok farklı kafes parametrelerine sahip olduğunda görülür [32]. Bu iki ekstrem büyüme arasında SK büyümesi ise başlangıçta FM 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 ıslanma tabakası denir.



Şekil 1.3. Üç heteroepitaksiyel büyüme modunun kesitsel görüntüsü (a) Frank Van der Merwe (FM), (b) Volmer-Weber (VW), (c) Stranski-Krastanow (SK).



Şekil 1.4. Şekil 1.3te gösterilen üç heteroepitaksiyel büyüme moduna örnek kesitsel TEM görüntüleri (a) Frank Van der Merwe (FM) [34], (b) Volmer-Weber (VW) [32], (c) Stranski-Krastanow (SK) [33].

Yüzey ve ara yüzey enerjilerinin hangi büyüme modunu nasıl belirlediğini ayrıntılı incelemek için depozit edilen malzemeye A ve yüzeydeki malzemeye B diyelim. Yüzeydeki malzemenin yüzey enerjisi γ_s , filmin yüzey enerjisi γ_f ve ara yüzey enerjisi γ_{fs} olsun. Ara yüzey enerjisi (γ_{fs}), iki farklı malzeme arasındaki başlangıç ara yüzeyini oluşturmak için gerekli enerji ve film ve üstüne depozit edilen yüzey arasında kafes parametresi uyumsuzluğundan kaynaklı gerinim enerjisinin toplamıdır. FM büyüme modu için $\gamma_f + \gamma_{fs} \leq \gamma_s$ denklemi geçerlidir ve bu durumda

depozit edilen malzeme yüzeyi ıslatmak ister. Eğer bu koşul korunmaya devam ederse tabaka tabaka büyüme görülür. Tam tersi yani $\gamma_f + \gamma_{fs} > \gamma_s$ denklemi VM büyüme modu için geçerlidir. Bu koşulda ara yüzey enerjisi depozit edilen malzemenin yüzeyi ıslatması için çok fazladır ve büyüme başladığı gibi adalar oluşur. Bu iki büyüme modunun sistematığı iyi anlaşılmıştır fakat SK büyüme modu tam olarak anlaşılamamıştır.

1.4.3.1 Stranski-Krastanow Büyüme Modu

Stranski-Krastanow büyüme modu Ge/Si ve InAs/GaAs gibi heteroepitaksiyel sistemlerde gözlemlenmiştir. Bu sistemlerde depozit edilen malzeme miktarı belirli bir kalınlığa ulaşana 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.

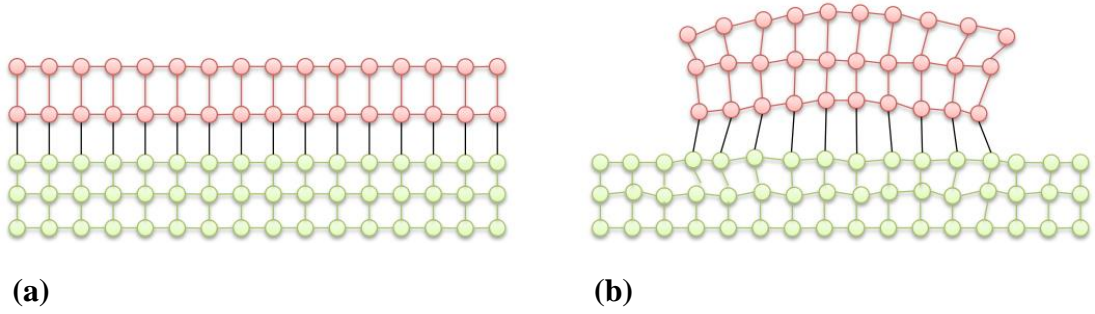
Yüzeydeki kristal ve üzerine depozit edilen malzeme arasındaki kafes parametresi uyumsuzluğu gerinim enerjisi birikmesine neden olur. Gerinim altında bulunan düzlemsel filmlerde heteroepitaksiyel büyümenin görülmesi Asaro Tiller Grinfeld (ATG) kararsızlığı ile anlaşılmıştır [35,36]. Teoriye göre depozit 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 Denklem 1.1 ile verilebilir.

$$E_{el} = 2G\varepsilon_0^2(1+\mathcal{G})h/(1-\mathcal{G}) \quad (1.1)$$

Burada \mathcal{G} filmin Poisson oranı, G filmin kayma modülü, h film kalınlığı ve ε_0 gerinim olarak verilmiştir. Ayrıca gerinim iki malzemenin kafes parametreleri kullanılarak Denklem 1.2'de görüldüğü gibi hesaplanabilir.

$$\varepsilon_0 = \frac{a_l - a_s}{a_s} \quad (1.2)$$

Biriken bu gerinim enerjisi dislokasyonlar veya ada oluşumu ile harcanabilir. Filmin kalınlığı kritik kalınlığa ulaştıktan sonra gerinim enerjisi harcanarak ada oluşumu görülür (Şekil 1.5) [37].



Şekil 1.5. 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 [37–39]. 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 (facet) daha fazla büyür ve adalar kubbe benzeri bir şekil alırlar [40].

Ge/Si ve InAs/GaAs sistemleri ile yapılan deneysel çalışmalar kritik kalınlığın 3 tek katman ile 18 tek katman arasında değiştiğini göstermiştir [41,42]. Patella ve diğerleri [43] yaptığı çalışmalarda InAs/GaAs sistemlerde geçiş için kritik kalınlığın sıcaklığa bağlılığını göstermiştir fakat ıslatma katmanı ile kritik kalınlık arasındaki bağlantı henüz açıklanamamıştır.

SK büyümesinde oluşan adacıkların arasının ince bir ıslanma 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.

1.5. Yarıiletken Heteroepitaksiyel Kuantum Nokta Uygulamaları

1.5.1 Optoelektronik Kuantum Nokta Cihazlar

Yapının durum yoğunluğundaki boyutsal azalma optoelektronikte cihaz performansında artmaya neden olmaktadır. Kuantum noktaların boyutları oda sıcaklığı uygulamalarına izin verecek kadar düşürülürse ve tekdüze parçacık boyutu sağlanabilirse LED'lerin verimi artırılabilir. Bu boyutlara inilebilen ve ucuz bir üretim tekniği olan heteroepitaksiyel SK büyüme yöntemi gelecek vaat etmektedir.

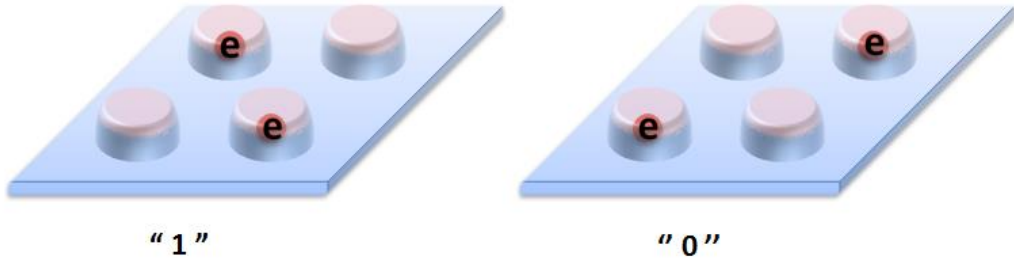
Yarıiletken lazerler; CD oynatıcılar, lazer yazıcılar ve optik iletişim gibi birçok önemli alanda uygulama alanına sahiptirler. Lazerin temeli elektron ve boşluk çiftleri yaratılması ve bunların ışınmasına dayanmaktadır. Bu sebepten kuantum noktaları kullanılarak hapis etkisinden dolayı verimin artırılacağı düşünülmüş ve 1994 yılında ilk yüksek verimlilikte çalışan kuantum nokta lazer sunulmuştur [44]. Özellikle heteroepitaksiyel olarak büyüyen kuantum noktaların boyutlarının tekdüze olmasının ve kuantum noktaların birbirine çok yakın olmasının lazer performansını arttıracığı düşünülmektedir.

Kuantum noktalarının yaptığı ışımanın dalga boyu, kuantum noktasının boyutuna göre değişmektedir. Bu özellikten faydalanılarak orta kızılötesi bölgede geniş dalga boyu aralıklı koherent kaynaklar yapılması mümkün olabilir. Orta kızılötesi bölge gazlar için karakteristik absorpsiyon bölgesi olduğu için bu kaynak, hava kirliliği tespiti ve endüstriyel işlem görüntüleme gibi alanlarda kullanılabilir.

1.5.2 Elektronik Kuantum Nokta Cihazlar

Kuantum noktalarda hapsedilen yük taşıyıcıların noktalar arası tünelleme yapması tek elektronlu transistor fikrini oluşturmuştur. Yük taşıyıcının transferi içinde hapsedildiği kuantum noktanın yapısına yani boyutlarına ve uygulanan kapı voltajına bağlıdır. Tek elektronlu transistorun avantajı teorik hesaplamalara göre az güç tüketmesidir. Kontrollü elektron transferi fikri kullanılarak başka cihazlar da üretilebilir [45].

Elektron transferi temeline dayanan uygulamalardan biri hücresel otomasyondur. Hücresel otomasyon, kuantum noktalardaki yük konfigürasyonuna dayanan ikili enformasyon ile hesaplama yapılmasını öneren bir yaklaşımdır [1]. Şekil 1.6'da görüldüğü gibi sistemde iki tane mobil elektron bulunur ve 1 ve 0 değerleri hücrelerdeki yük konfigürasyonuna bağlı olarak değişir.



Şekil 1.6. Dört kuantum noktalı temel hücre (0 ve 1 konumlarında)

Bu mantıkla çalışan hücreler kullanılarak mantıksal elemanlar (Şekil 1.7) ve bu elemanlar birleştirilerek mantık devreleri tasarlanabilir. Hücreler arasındaki etkileşim Kulombik olup hiç güç aktarımı yoktur. Bu sebepten devrede güç tasarrufu sağlar ve ısınma problemi yoktur.



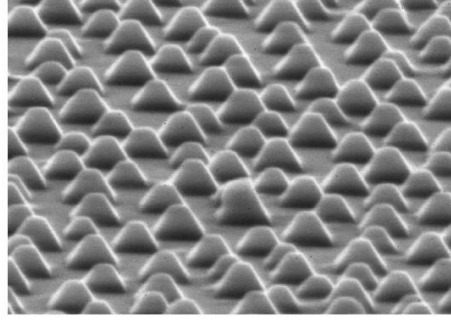
Şekil 1.7. Kuantum noktaları hücrelerden oluşan basit mantık elemanları. Soldaki ikili tel, sağdaki dönüştürücü.

1.6. Literatür Özeti

Stranski-Krastanow tipi kuantum noktaları ilk olarak 1970'lerde çalışılmaya başlanmıştır ve 1990 yılında ilk SiGe entegre devrenin üretilmesi ile uygulama alanları ile ilgili farkındalık artmıştır. Gün geçtikçe elektronik ve optoelektronik teknolojisinde bazı uygulama alanları bulan ve teorik olarak daha fazla bulacağı kanıtlanan SK tipi kuantum noktaları ile ilgili yapılan çalışmalar artmaya başlamıştır.

1.6.1 Deneysel Çalışmalar

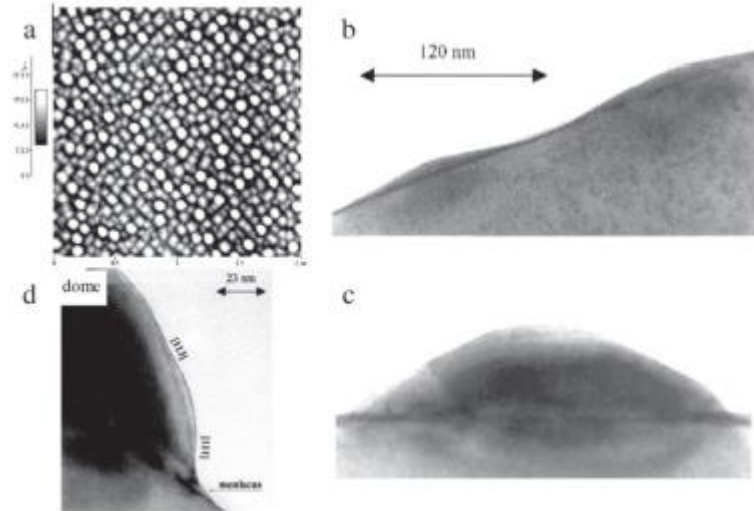
Politi ve diğerleri (2000) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sisteminde, literatürde Stranski ve Krastanow tarafından ilk olarak bildirilen, yüzey pürüzlenmesi ile başlayan ve ada oluşumu ile devam eden klasik SK tipi kuantum noktalarını gözlemlemişlerdir [46]. Wiebach ve diğerleri (2000) $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}/\text{Si}(001)$ sisteminde Şekil 1.8'de görüldüğü gibi 135 nm taban genişliği ve 80 nm yüksekliği olan piramit şeklinde kuantum noktalar gözlemlemişlerdir. Bu piramit adalarda {111} düzgün yüzeyi (facet) görülmüştür. Ayrıca adaların şeklinin Ge konsantrasyonu ile değişimini gözlemlemişler ve Ge konsantrasyonunun adalardaki dağılımını çıkarmışlardır [47].



200 nm

Şekil 1.8. $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}/\text{Si}(001)$ tabakasının SEM görüntüsü.

Berbezier ve diğerleri Şekil 1.9’da görüldüğü gibi 2002 yılında $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ adacıklarının gözlemlemişlerdir. Çalışmalarında, dislokasyon oluşan kritik kalınlıktan düşük ve teorik kalınlıktan yüksek kalınlıkta malzeme depozit etmişlerdir.

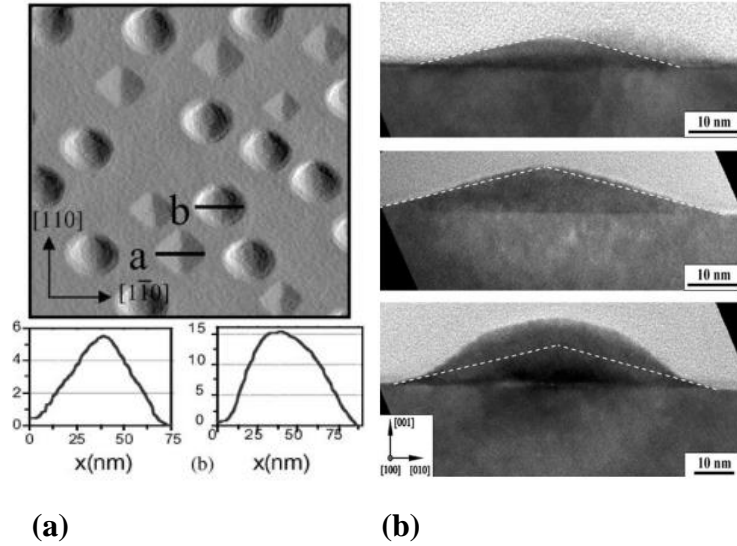


Şekil 1.9. (a) $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ için yuvarlak şekilli kubbe tipi ve kare tabanlı kulübe tipi adacık dağılımının AFM görüntüsü. (b) Kulübe ve (c) kubbe tipi adaların TEM görüntüsü. (d), (c)’de görülen kubbe tipi adalarda (113) ve (111) düzgün yüzeylerinin varlığının gösterimi için büyütülmüş hali [48].

Ayrıca üzerine malzeme depozit edilen alt tabakanın kristal yöneliminin, oluşan adacıkların evrilme kinetiğini değiştirdiği gözlemlenmiştir. Bu çalışmaya göre ada oluşumunun başlaması için belirli bir kalınlık [49, 50] ve kristal yönelimi vardır [48].

Zela ve diğerleri 2002 yılında Ge/Si(001) sisteminde yaptıkları deneysel çalışmada iki kademeli Ge depozit ederek kubbe biçimli kuantum noktaları elde etmişlerdir (Şekil 1.10.a).

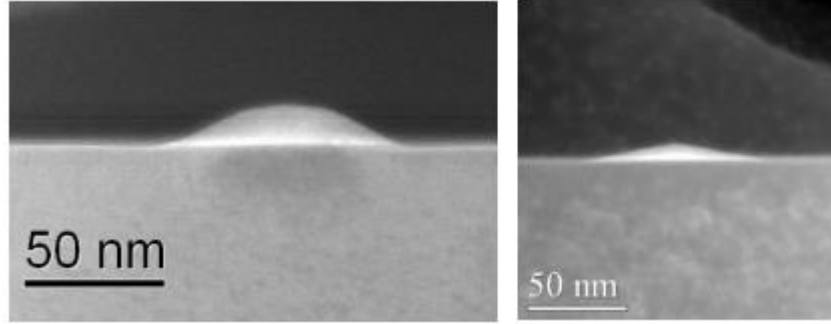
Şekil 1.10.b'de görüldüğü gibi ilk depozit sonrası $\{105\}$ düzgün yüzeyli piramit şeklindeki adalar oluşmuş ve belirli bir kritik boyuta kadar büyümüşlerdir. Basıncı düşürerek ikinci kez Ge depozit edildiğinde kubbe biçimli adalara dönüşmüşlerdir. Piramitten kubbe tipi adaya geçiş, gerinim gevşemesini en çok olduğu tepe yüzeyine en yakın $\{105\}$ düzgün yüzeyinden başlamıştır. Ayrıca ikinci depozit sırasında çekirdeklenmeler sonucu yeni piramit adalar oluşmuştur [51].



Şekil 1.10. (a) Piramit ve kubbe şeklindeki Ge/Si ada dağılımının HRAFM görüntüsü. (b) Ge/Si(001) adaların $[100]$ kesit alanından TEM görüntüsü

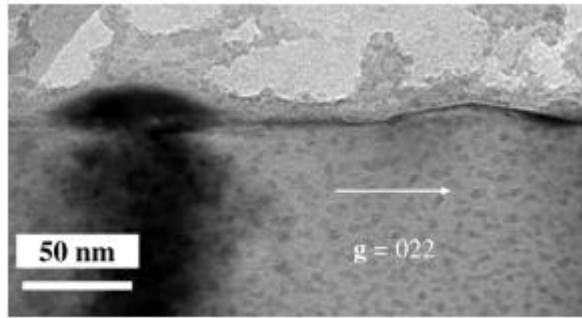
Bu piramit-kubbe tipi arası ada geçişi 2004 yılında Montalenti ve arkadaşları tarafından da gözlemlenmiştir [52].

Bariberau ve diđerleri [53] 1987 yılında $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}(001)$ sisteminde MBE ile yaptıkları deneylerde kubbe tipi ve piramit şeklinde kuantum adaları gözlemlemişlerdir (Şekil 1.11).



Şekil 1.11. Sol tarafta kubbe tipi ve sağ tarafta piramit şeklinde kuantum noktaları. (650°C sıcaklıkta 6ML Ge/Si(001) depozit edilmiştir.)

Bu ada şekillerindeki farklılığın gerinim gevşemesinden dolayı olduğunu ileri sürmüşler ve 2006 yılında yaptıkları bir çalışma ile TEM görüntülerinden piramit ve kubbe şekilli kuantum noktaları ile alt tabaka arasındaki gerinim farkını (Şekil 1.12) göstermişlerdir.



Şekil 1.12. Sol tarafta kubbe tipi ve sağ tarafta piramit şekilli kuantum noktalarının iki ışınli koşulda TEM kesit alan görüntüleri.

Easlasham ve Cerullo, Ge/Si(100) sisteminde dislokasyon olmadığı durumda kuantum nokta oluşumunu gözlemlemiştir ve ada oluşumunun başlaması için gerekli tabaka kalınlığı için değer bulmuşlardır [54]. Bu çalışmada Ge/Si(100) sistemi için film ve altlık arasındaki kafes parametresi uyumsuzluğundan dolayı oluşan gerininin, dislokasyon oluşturmadan gevşemesi için alt tabakada bulunan malzemede elastik deformasyon oluşması gerektiği ve böylece ada oluşumu ile

filmin gerinim enerjisini boşalttığı söylenmiştir. Hull ve diğerleri (2003) $Ge_xSi_{1-x}/Si(100)$ sisteminde dislokasyon oluşumundan kaynaklı gerilimin ortadan kalkması sonucu adaların oluşmadığı gözlemlenmiştir. Ayrıca yaptıkları deneylerde kararlı yapının elde edilmesi için belirli sıcaklık ve büyüme hızı olduğunu göstermişlerdir [55].

Shaleev ve diğerleri, Si(001) üstüne $Si_{1-x}Ge_x$ film büyümesini farklı Ge yüzdelerinde incelemişlerdir [56]. İncelemeler sonucunda depozit edilen malzemedeki 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. Depozit edilen malzemenin alt tabakada çekirdeklenmesi ile oluşum ve büyüme bu mekanizmalardan biridir. Büyüme sırasında kuantum noktanın şeklinde deneysel çalışmalardan da görüldüğü gibi geçişler olmaktadır. Ayrıca çekirdeklenme olmadan sadece epitaksiyel gerilim nedeniyle film yüzeyinin pürüzlenmesi [57] ve sonrasında kuantum nokta oluşumu diğer bir mekanizmadır. Bu mekanizmada oluşumu etkileyen faktörler deneysel olarak gözlemlenmiş ve teorik olarak modeller çıkartılmaya başlanmıştır.

1.6.2 Teorik Çalışmalar

Asaro ve Tiller 1972 yılında gergin yüzeylerde, yüzey difüzyonu etkisinde meydana gelen şekilsel değişimi ilk çalışanlardır [25]. Denge termodinamiğine dayalı bu çalışmada elastik şekil değiştirme enerjisi, genelleştirilmiş bir yüzey kimyasal potansiyeline doğrudan dahil edilmiştir. Bu doğrusal model elastik bir gerilme altında bulunan düz yüzeylerin kararlı olmadıklarını, yüzey difüzyonu ile dalgalanarak bozulabileceklerini ve bozulmaların yüzeyde çatlak oluşumuna kadar gidebileceğini göstermiştir. Daha sonra Grinfel'd [58] ve Srolovitz [59] tarafından yapılan çalışmalar düz bir yüzeyde meydana gelen pertürbasyonların, tüm yüzeyi

kararsız hale geçirebilmesi için kritik bir dalga boyuna ulaşmaları gerektiğini göstermiştir. Literatürde ATG kararsızlığı olarak da adlandırılan bu olay bir başka ifade ile yüzey alanını (dolayısı ile yüzey enerjisini) azaltmaya çalışan kapiler kuvvetler ile yüzey alanını arttırarak elastik şekil değiştirme enerjisini azaltmaya çalışan elastostatik kuvvetler arasındaki rekabetten kaynaklanmaktadır.

Filmin yeteri kadar ince olması durumunda deneysel literatürde gözlemlenen Stranski – Krastanow (SK) tip adaların oluşumunu açıklamak için ATG teorisinin, yüzeyde oluşan dalgalar yoluyla film ve altlık arasındaki enerjik etkileşimi hesaba katacak şekilde genişletilmesi gerekir. Bu, film kalınlığına bağlı yüzey serbest enerjisi ile ilişkilendirilen çeşitli tip ıslanma potansiyelleri tertiplenerek yapılabilir.

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. Periyodik adaların oluşması için belirli bir kritik yüzey pürüzlenme dalga boyu olduğunu [58,59] ve başlangıçtaki pürüzlenmenin ileride oluşacak kuantum nokta dizilimini etkilediğini söylemişlerdir. Ayrıca ada oluşumundan sonra yüzey difüzyonunun devam etmesi durumunda adaların birleşerek büyüdüklerini söylemişlerdir [60]. 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 göstermişlerdir [61].

Golovin ve diğerleri 2004 yılında yaptıkları çalışmada gerinim olmayan durumda ince film üzerinde adaların oluşumuna film ve alt tabaka arasındaki ıslanma etkileşimlerinin ve yüzey enerjisinin anizotropisinden kaynaklı filmdeki dengesizliklerin etkisini incelemişlerdir. Yaptıkları çalışmalar sonucunda ıslanma etkileşimlerinin olmadığı durumda denge durumunun bulunmadığı, ıslanma

etkileşiminin yüzeydeki anizotropiden kaynaklı dengesizliği bastırarak kuantum nokta dizilerinin oluşumunu tetiklediğini göstermişlerdir [62].

Tekalign ve Spencer (2004) yaptıkları çalışmalarda [63] film ve alt tabaka elastik sabitleri, izotropik yüzey enerjisi parametreleri ve ıslanma enerjisi parametreleri içeren doğrusal olmayan bir evrilme denklemi türetmişler ve 2 boyutlu sistemde yaptıkları sayısal analizler sonucu denge durumunda bir film elde etmek için kritik film kalınlığı [49,50] ve yüzey dalga boyu [58–60] olduğunu bulmuşlardır. 2007 yılında yaptıkları başka bir çalışmada ise filmin doğrusal olmayan yüzey evrilmesini 3 boyutlu olarak analiz etmişlerdir. Yüzey evrilmesisöz konusu olduğu için bu problemi çözmek için dinamik modeli gerekmektedir fakat elastik sabitler problemin büyük diziler halinde olan kuantum noktaları için çözülmesini bilgisayar gücü ve zaman anlamında engellemektedir. Bu yüzden bu çalışmalarında elastikiyet probleminde yaklaşık bir sonuç bularak modeli basitleştirmişler ve 3-boyutlu sistemi çok sayıda kuantum noktası için çalışabilmişlerdir [64].

Zhou ve diğerleri, 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 [49].

Hao Hu ve diğerleri, kuantum noktalarının alt yüzey üzerinde çekirdeklenme ve büyüme mekanizmalarını incelemek için sürekli ortam 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 değiştiğini

söylemişlerdir. 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 [65].

Vastola ve diğerleri, 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 [66].

Gamage ve diğerleri, üç boyutlu kuantum noktalarının doğrusal olmayan büyümesini, doğrusal olmayan dinamik denklemlerinin çözümü ve elastikiyet modeli kullanarak sayısal simülasyonlar yardımı ile incelemişlerdir [67]. Simülasyonlar sonucu, ince film ve alt tabaka arasındaki ıslanma etkileşimlerinin difüzyonu etkilediğini ve dolaylı olarak ada yüksekliğini kontrol ettiğini bulmuşlardır. Ayrıca, ada dizilerinin ileriki büyüme aşamalarında düşük uyumsuzluk gerilimleri için stabil olduklarını gözlemlemişler ve bu bulguları deneysel ve teorik çalışmalar ile desteklemişlerdir.

Gaillar ve diğerleri, anizotropi ve gerilim altındaki kuantum noktalarının heteroepitaksiyel oluşumunu ve büyümesini kinetik Monte Carlo simülasyonları ile incelemişlerdir [68]. 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 ve diğerleri, desenli alt tabaka üzerine kaplanan Asaro-Tiller-Grinfeld'd (ATG) karasızlığı olan ince filmin büyüme kinetiğini simülasyonlar yardımı ile

incelemişlerdir [69]. Simülasyonlarında, yüzey enerjisi, elastik rahatlama ve ıslanma 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 diğerleri, eş fazlı epitaksiyel nano adaların gerilim altında büyümesini Monte Carlo simülasyonu ile incelemişlerdir [70]. 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 diğerleri, kendinden oluşan kuantum noktalarının heteroepitaksiyel büyüme sırasında şekil geçişlerini incelemişlerdir [71]. Şekil geçişleri sırasında oluşan simetri bozulmaları için hesaplamalar yapmışlar ve sonuçların literatürde görülen sonuçlar ile uyumlu olduğunu göstermişlerdir.

Lozovoy ve diğerleri, Ge/Si(001) sisteminde farklı tabanlara sahip piramit şeklindeki kuantum noktalarının evrilmesi ve evrilme sırasında şekil değişimlerinin yüzey enerjisine ve elastik gerinim gevşemesine olan bağlılığını gözlemlemek için bir teori geliştirmişlerdir [72]. 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, gerinimli filmlerde tavlama sırasında oluşan kuantum noktaların dizilimini incelemek için sürekli ortam dinamiği kullanarak simülasyonlar yapmışlardır [73]. Çalışmalarının amacı kuantum nokta dizilimlerinin alt tabakada başlangıçta bulunan pürüzlerin dalga boyuna ve alt tabakanın kalınlığına olan bağımlılığını incelemektir. Çalışmaları sonucunda bu tip büyümede oluşan kuantum

nokta diziliminin farklı dalga boyların deęiřtięini fakat uzun süreli deneylerde büyük adacıkların küçükler ile birleřtięini gözlemlemişlerdir.

Herandez-Saz ve dięerleri, yarıiletken kuantum noktaların büyümesinin görüldüęü bölgeleri tahmin edebilmek için Sonlu Elemanlar Yöntemi (FEM) kullanarak ince filmlerde gerilim-gerinim incelemeleri yapmışlardır [74]. Bilgisayar tabanlı modellerini Atom Prob Tomografi (APT) kullanarak deneysel çalışmalar ile güçlendirmişlerdir. Çalışmaları sonucunda bu tip sistemlerde Sonlu Elemanlar Yöntemi ve APT cihazının uyum içinde çalıştıęını ve gerilim-gerinim incelemelerine imkan sağladığına söylemişlerdir.

Kuryliuk ve Korotchenkov, SiGe sistemleri için elastik sürekli ortam dinamięi ve Sonlu Elemanlar Yöntemi kullanarak bir model geliřtirmişlerdir [75]. Bu çalışmanın amacı kuantum noktasında bulunan Ge miktarının morfolojiye ve dağılıma etkisini incelemektir. Simülasyonlar sonucunda, Ge miktarının kuantum nokta dağılımını ve sistemdeki gerinim durumunu deęiřtirdięini gözlemlemişlerdir.

Literatürdeki teorik çalışmalara bakıldığında modellerin genel olarak ince film morfoloji deęiřimi esnasında ada oluşumunu etkileyen faktörleri ve kritik deęerlerini bulmak amacıyla yapıldığı görülmektedir. Ayrıca genel modeller denge termodinamięine dayalı olup, sistem hareketsiz periyodik sınır kořulları kullanılarak ifade edilmiştir. Bu tip modeller ince film ve alt tabakanın birleřtięi sınırdaki köşelerin yani üçlü kavşakların hareketini kısıtlandırır ve film yüzeyinin zaman içinde kabulleneceęi olası kararlı hallerin ortaya çıkışını kısmen engeller [4,5]. Bu kısıtlamanın, Oęurtanı ve Ören [76,77] tarafından önerilen iç entropi üretimi hipotezine dayalı dönüşümsüz termodinamik model kullanılarak kaldırılabileceęi gösterilmiştir.

Kukta ve Freund (1997) yaptığı çalışmada ince film morfolojisinde yüzey enerjileri, gerinim, kimyasal potansiyel ve dislokasyonların etkisini incelemişlerdir [78]. SK tipi kuantum noktaların oluşturmanın başka bir yolu da bu çalışmada önerildięi gibi başlangıçta dengede olduęu düşünölen pürüzsüz damlacıkların şekilsel evrimini takip

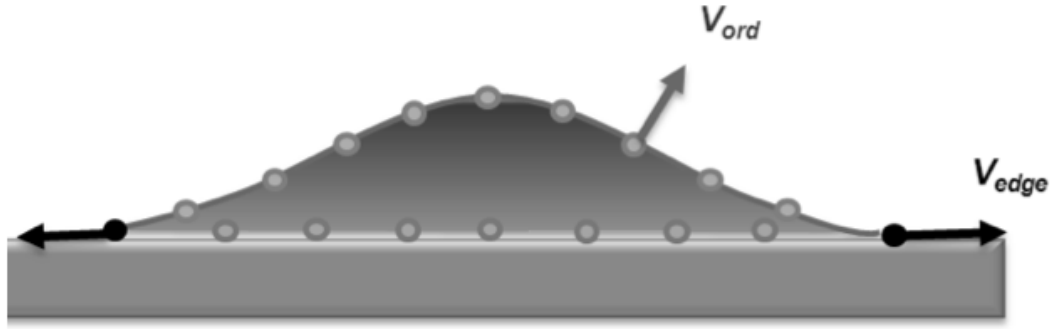
etmektedir. Oğurtanı, Çelik ve Ören [4, 5] başlangıçta farklı şekillere fakat aynı büyüklüklere, sahip adacıkların zamanla aynı şekle ve büyüklüğe sahip S–K tipi adalara dönüştüğünü, aradaki yegane farkın ıslanma katmanının derinliğinde ortaya çıktığını göstermişlerdir. Küçük en boy oranlarında, büyük en boy oranlı adacıklara göre, daha sığ ıslanma katmanı oluştuğu gözlemlenmiştir.

2. MATEMATİKSEL MODEL VE SAYISAL PROSEDÜR

Giriş bölümünde detaylı bir şekilde anlatıldığı üzere, kuantum noktaların morfolojik evriminin ve bu evrimi kontrol eden malzeme özellikleri ile dış faktörlerin anlaşılması, istenilen optoelektronik özelliklere sahip KN'lerin ve dolayısıyla KN tabanlı cihazların üretimi için son derece önemlidir. KN oluşumu ile ilgili teorik çalışmalara bakıldığında modellerin genel olarak ince film morfoloji değişimi esnasında ada oluşumunu etkileyen faktörleri ve kritik değerlerini bulmak amacıyla yapıldığı görülmektedir. Ayrıca katı malzemelerde kapiler etkiler altında şekil ve mikro yapı gelişimi ile ilgili üretilen modellerin geneli denge termodinamiğine dayalı olup, sistem hareketsiz periyodik sınır koşulları kullanılarak ifade edilmiştir. Gerçek sistemlerde ise katı yüzey ve ara yüzeylerin 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 kabulleneceği olası kararlı hallerin ortaya çıkışını kısmen engeller [4, 5]. Bu kısıtlamanın, Ogurtani ve Oren [77, 79, 80] tarafından önerilen iç entropi üretimi hipotezine dayalı geri dönüşümsüz termodinamik model kullanılarak kaldırılabilceği gösterilmiştir.

Ogurtani ve Oren [77, 79], içlerinde üçlü kavşakları da bulunduran yüzey ve ara yüzeyler için, geri dönüşümsüz (irreversible) termodinamiğin mikro ayrık formülasyonunu temel alarak, sürekli ortam teorisini geliştirmiştir. Bu teori, yüzey ve ara yüzeyler içeren elektro göç ve tane sınırı oluk oluşumu [81] gibi farklı malzeme problemlerine başarı ile uygulanmıştır. Geri dönüşümsüz termodinamiğin mikro ayrık formülasyonu, kapsamı ince film kalınlığını ve anizotropik Helmholtz serbest enerjisini de göz önünde bulunduracak şekilde Ogurtani, Çelik ve Ören [4, 5] tarafından genişletilmiştir. Genişletilen bu formülasyon, bu tez kapsamında epitaksiyel ince filmlerin şekil değiştirme süreçlerinin ve Stranski-Krastanow adacıklarının oluşumlarının bilgisayar modellemesi aracılığıyla araştırılması için kullanılmıştır.

Bu bölümde, tezin bütünlüğünü sağlamak için öncelikle Oğurtanı ve arkadaşları tarafından geliştirilen yönetici denklemler [4, 5] Şekil 2.1'in yardımı ile tanıtılacak, daha sonra yapılan kabullenmeler sonucu, bu diferansiyel denklemlerde yapılan basitleştirmeler anlatılacak ve son olarak ise basitleştirilen bu diferansiyel denklem takımlarının sayısal çözümlenmesi [4, 5, 77, 79, 80] detaylı bir şekilde anlatılacaktır.



Şekil 2.1. Altlık ile sistem üzerindeki adacık oluşumunun şematik gösterimi

2.1 Yüzey Sürüklenme Difüzyonu ve Büyümesinin Formülasyonu

İzokorik bir ara yüzeyin şekilsel değişim kinetiği yüzey normali doğrultusundaki normalize ve orantılanmış hız vektörü \bar{V}_{ord} (Denklem 2.1) ile altlık ile damlacığın oluşturduğu uçların (üçlü kavşak noktaları, (triple junction)) hız vektörü ise \bar{V}_{edge} (Denklem 2.2) ile ifade edilebilirler [4, 5]. Bu çalışmada seçilen işaret düzenine göre \bar{V}_{ord} 'un pozitif değerleri ince filmin lokal genişleme ve/veya büyümesini verir. Bu durumda yüzey difüzyonu ve ıslatma (wetting) potansiyelinin [59, 61, 63] anizotropik olduğunu da göz önüne alarak aşağıdaki ifadeler yazılabilir [4, 5]:

$$\bar{V}_{ord} = \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \left[\bar{D}(\theta, \phi, m) \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \left(\Delta \bar{f}_{dv}^o - \Sigma(\bar{\sigma}_h)^2 + \bar{f}_{d/s}(\bar{h}) \hat{f}(\theta, \phi, m) \bar{\kappa} + \bar{\omega}(\bar{h}, \theta) \right) \right] - \bar{M}_{dv} \left(\Delta \bar{f}_{dv}^o - \Sigma(\bar{\sigma}_h)^2 + \bar{f}_{d/s}(\bar{h}) \hat{f}(\theta, \phi, m) \bar{\kappa} + \bar{\omega}(\bar{h}, \theta) \right) \quad (2.1)$$

ve

$$\bar{V}_{edge} = -\frac{\bar{M}_{edge}}{kT} \left[(f_s - f_{sf}) - (f(\bar{h}, \theta) \cos(\theta) - \partial_{\theta} f(\bar{h}, \theta) \sin(\theta)) \right] \quad (2.2)$$

Yukarıdaki denklem takımlarında $\bar{\ell}$, 2 boyutlu yüzey boyunca alınan eğrisel koordinatı belirtir ve bu değer sistem içerisinde seçilebilecek bir ℓ_o değeri ile normalize edilebilmektedir. Bu durumda, ℓ_o değeri damlacığın tepe yüksekliği olarak seçilebileceği gibi filmin yüzey Helmholtz serbest enerjisinin elastik gerinim enerjisi yoğunluğuna oranı olarak da seçilebilir [17]. Bu formüllerde $\bar{\kappa}$ normalize olmuş yüzey eğriliğini verir, yüzey eğriliği değerleri içbükey yüzeylerde pozitif değer verecek şekilde tanımlanmıştır. Bu durumda, yüzey hareketinin yönü ve yüzey normal vektörünün \hat{n} pozitif değerleri, gaz fazı yönünde olur. Sistemdeki normalize çember gerilimi (hoop stress) $\bar{\sigma}_h \equiv Tr\bar{\sigma}$ ile ifade edilir, burada boyutsuz gerilim şiddeti parametresi Σ elastik gerinim enerji yoğunluğunun (ESED) gerilim nedenli yüzey sürüklenme difüzyonuna katkısını ifade eder.

Denklem 2.1'de birinci gruptaki terimler (ilk satır) yüzey sürüklenme difüzyonunu ifade eder. Bu yüzey sürüklenme difüzyonu, başlıca ESED $\Sigma(\bar{\sigma}_h)^2$, kapiler potansiyel $\bar{f}_{d/s}(\bar{h})\hat{f}(\theta, \phi, m)\bar{\kappa}$ ve ıslatma potansiyellerindeki $\bar{\omega}(\bar{h}, \theta)$ gradient sonucu ortaya çıkmaktadır. Bu denklemdeki $\bar{D}(\theta, \phi, m)$ ise anizotropik yüzey difüzyonunun şiddetini belirler ve θ , ϕ ve m parametreleri kristal sistemini ve kristalin altlığa göre yerleşim şeklini belirler. Bu parametreler ve etkileri tez kapsamındaki önemi nedeniyle 2.2.5 ve 2.2.6'da detaylı bir şekilde anlatılmıştır.

$\Delta\hat{f}_{dv}^o = (\hat{f}_v^o - \hat{f}_d^o)$ 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 başka bir deyişle damlacığın

büyümesi anlamına gelmektedir. Bu sistemde \hat{f}_v^o ve \hat{f}_d^o sırası ile gaz ve katı fazların hacimsel Helmholtz serbest enerji yoğunluklarına karşılık gelmektedir.

Denklem 2.1'deki ikinci terim (alt satır) ise büyüme ya da faz değişimi (yoğuşma ve buharlaşma) kinetiğini ifade eder. \bar{M}_{dv} sıcaklık ve yüzey gerilimlerine bağlı olan normalize büyüme hareketliliğidir.

Denklem 2.2'deki \bar{M}_{edge} ise üçlü kavşak noktalarındaki normalize yüzey hareketliliğini belirtmektedir.

Burada sunulan problemin formülasyonunda değişkenlerin üzerlerindeki çizgiler o değişkenin normalize olduğu anlamına gelmektedir. Bu normalizasyon işlemi referans 5'te detaylı bir şekilde anlatılmış olup burada kısaca şu şekilde özetlenebilir:

$$\bar{t} = t / \tau_o, \quad \bar{\ell} = \ell / \ell_o, \quad \bar{\kappa} = \kappa \ell_o, \quad \bar{L} = L / \ell_o, \quad \Delta \bar{f}_{dv}^o = \frac{\Delta \hat{f}_{dv}^o}{f_d} \ell_o, \quad \bar{\sigma}_h = \frac{\sigma_h}{\sigma_o} \quad (2.3)$$

$$w_o = \frac{(1 - \nu_d^2)}{2E_d} \sigma_o^2, \quad \sigma_o = \frac{E_d}{(1 - \nu_d)} \varepsilon_o, \quad \Sigma = \frac{(1 - \nu_d^2) \ell_o}{2E_d f_d} (\sigma_o)^2 \quad (2.4)$$

Bu çalışmada, Helmholtz serbest enerji yoğunluğunun $f_{d/s}(\bar{h})$ izokorik sistemlerde yüzey ile altlık arasındaki mesafeye, \bar{h} , bağlı olduğu varsayılmıştır. Normalize edilmiş ıslatma potansiyeli ise $\bar{\omega}(\bar{h}, \theta) = \Omega(\omega_{iso} + \omega_{aniso})$ formülü ile ifade edilmiştir ve hem izotropik hem de anizotropik ıslatma potansiyellerini içerir [5].

$$\begin{aligned}\bar{\omega}(\bar{h}, \theta) &= \Omega(\omega_{iso} + \omega_{aniso}) \\ &= \Omega \left(\begin{array}{l} -\cos(\theta) \hat{f}(\theta, \phi, m) \cdot \frac{f_s - f_f}{f_f} \frac{\delta}{\pi(\delta^2 + h^2)} \\ + \sin(\theta) \partial_\theta \hat{f}(\theta, \phi, m) \cdot \frac{f_s - f_f}{f_f} \frac{\delta}{\pi(\delta^2 + h^2)} \end{array} \right)\end{aligned}\quad (2.5)$$

Islatma potansiyelinin film kalınlığı ile olan etkileşimi Tekalın ve Spencer [82] tarafından önerilmiştir:

$$\bar{f}_{d/s}(y) = \frac{(f_d + f_s)}{2f_d} + \left(\frac{(f_d - f_s)}{f_d} \right) \frac{1}{\pi} \arctan(y / \delta) \quad (2.6)$$

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 ara yüzeyindeki serbest enerjiyi tanımlamaktadır. Burada, $\bar{\Omega}$ yüzey tabakasında bulunan kimyasal türlerin ortalama hacimlerini belirtirken δ değeri ise arayüzeyin denge kalınlığını belirtmektedir.

Bu tez kapsamında, sayısal çözümlerinin basitleştirilebilmesi için şu kabullenmeler yapılmıştır. Öncelikle, simülasyonun yapıldığı fiziksel model iki boyutlu olarak ele alınmıştır. Film ile altlık arasındaki arayüzey düz ve sabit (rigid) olarak alınmıştır. Bu sayede başlangıçta uyumsuzluk gerinimi ε_o ile tanımlanan uzanımların (displacement) arayüzeyde zaman içerisinde sabit kalması sağlanmıştır (Dirichlet sınır koşulu). Ayrıca sistemdeki malzemelerin çevresindeki gaz fazı içerisindeki buhar basıncının çok küçük olduğu varsayılmıştır $\Delta \hat{f}_{dv}^o = 0$. Son olarakta damlacığın çevresi ile malzeme alışverişinin olmadığı yani damlacık hacminin zamanla sabit kaldığı $\bar{M}_{dv} = 0$ kabul edilmiştir. Bu kabullenmeler sonucunda denklem (2.1) aşağıdaki şekilde basitleştirilmiştir.

$$\bar{V}_{ord} = \frac{\partial}{\partial \ell} \left[\bar{D}(\theta, \phi, m) \frac{\partial}{\partial \ell} \left(-\Sigma(\bar{\sigma}_h)^2 + \bar{f}_{d/s}(\bar{h}) \hat{f}(\theta, \phi, m) \bar{\kappa} + \bar{\omega}(\bar{h}, \theta) \right) \right] \quad (2.7)$$

2.2 Matematiksel Model ve Sayısal Prosedür

Başlangıçta belirli uzunlukta çubuk elemanları kullanılarak sonlu sayıda düğüm noktası ile tanımlanan bir film yüzeyi vardır (Şekil 2.1). Sistemin evrilmesi, yüzeydeki düğüm noktalarının yer değiştirmeleri sonucu konum koordinatlarının yenilenmesi ile sağlanmaktadır. Bu noktaların yer değiştirmesini kontrol eden denklemler (Denklem 2.7 ve Denklem 2.2) sayısal olarak aşağıda anlatıldığı şekilde çözülmüştür.

2.2.1 Başlangıç Sisteminin Oluşturulması

Kullanılan fiziksel model iki boyutlu olmasına rağmen vektör cebirinin avantajlarından faydalanmak için sistem düğüm noktalarının (Şekil 2.1) Kartezyen koordinatları aşağıda belirtildiği gibi üç boyutlu vektörler olarak tanımlanmıştır.

$$\vec{r}^{(i)} = \begin{vmatrix} x \\ y \\ 0 \end{vmatrix} \quad (2.8)$$

Noktaların pozisyon vektörlerini bildikten sonra, elemanların uzunlukları (s) ve elemanların orta noktalarının konumları (kütle merkezi pozisyon vektörleri, \vec{r}_c) aşağıda verildiği gibi hesaplanır.

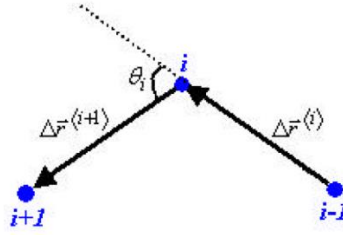
$$s^{(i)} = \left| \Delta \vec{r}^{(i)} \right| \text{ ve } \Delta \vec{r}^{(i)} = \vec{r}^{(i+1)} - \vec{r}^{(i)} \quad (2.9)$$

$$\vec{r}_c^{(i)} = \frac{\vec{r}^{(i+1)} + \vec{r}^{(i)}}{2} \quad (2.10)$$

Bazı önemli sistem parametrelerinin hesaplanması için kullanılan yöntemler aşağıda açıklanmıştır.

2.2.2 Dönme açılarının hesaplanması:

Düğüm noktalarındaki dönme açıları Şekil 2.2'de şematik olarak gösterildiği gibi uzunluk vektörleri ve bu vektörlerin nokta çarpımları kullanılarak aşağıdaki gibi hesaplanır.



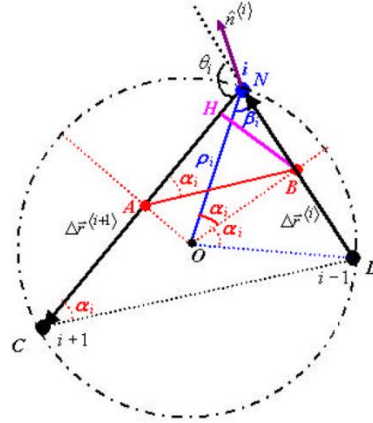
Şekil 2.2. Düğüm noktası i'deki elemanın dönme açısı θ_i 'nin şematik gösterimi

$$\theta_i = \left\{ \begin{array}{ll} \arcsin \left(\frac{\Delta \vec{r}^{(i)} \times \Delta \vec{r}^{(i+1)}}{\left| \Delta \vec{r}^{(i)} \right| \left| \Delta \vec{r}^{(i+1)} \right|} \right) & \text{if } \Delta \vec{r}^{(i)} \cdot \Delta \vec{r}^{(i+1)} \geq 0 \\ \pi - \arcsin \left(\frac{\Delta \vec{r}^{(i)} \times \Delta \vec{r}^{(i+1)}}{\left| \Delta \vec{r}^{(i)} \right| \left| \Delta \vec{r}^{(i+1)} \right|} \right) & \text{if } \Delta \vec{r}^{(i)} \cdot \Delta \vec{r}^{(i+1)} < 0 \end{array} \right. \quad (2.11)$$

2.2.3 Dügüm noktası eğriliklerinin hesaplanması:

Eğrilik yarıçapının ve normal vektörü ile bağlantılı kesikli uzay geometrisi kullanılarak her bir düğüm noktasının eğrilikleri hesaplanır. Bu geometrik bağlantıları açıklamamız gerekirse; yarıçapı ρ_i olan bir dairenin eğriliği $\frac{1}{\rho_i}$ olarak verilir. Bir

düzlemde tanımlanan üç noktadan geçen bir çember ile bir daire tanımlanabilir. Şekil 2.3'te $i-1$, i ve $i+1$ düğüm noktalarından geçen bir dairenin şematik gösterimi verilmiştir. Çubuk elemanların uzunlukları $i-1$ ve i düğüm noktaları ile tanımlandığı durumda s_i olarak, i ve $i+1$ arasında tanımlandığı durumda s_{i+1} olarak verilmiştir. Ayrıca $i+1$ ve i elemanlarının birbiri ile yaptığı açı, dönme açısı, θ_i olarak verilmektedir. Bu tanımlanan nicelikler kullanılarak aşağıdaki geometrik formülasyonlar elde edilebilir.



Şekil 2.3. Yüzeydeki üç düğüm noktasından geçen bir dairenin şematik gösterimi. O noktası çemberin orta noktasıdır [90]. $s_i = [DN]$, $s_{i+1} = [CN]$, $[OB] \perp [DN]$, $[OA] \perp [CN]$ ve

$$[AB] \parallel [CD] \perp n^{(i)}$$

$$\rho_i = \frac{s_i}{2 \sin(\alpha_i)} \quad (2.12)$$

ve

$$\kappa_i = \frac{1}{\rho_i} = \frac{2 \sin(\alpha_i)}{s_i} \quad (2.13)$$

α_i açısının tanjantı aşağıdaki gibi formüle edilebilir:

$$\begin{aligned} \tan(\alpha_i) &= \frac{|BH|}{|AH|} = \frac{|BH|}{|AN| - |HN|} = \frac{|BN| \sin(\pi - \theta_i)}{|AN| - |BN| \cos(\pi - \theta_i)} \\ &= \frac{|BN| \sin(\theta_i)}{|AN| + |BN| \cos(\theta_i)} = \frac{\frac{1}{2} s_i \sin(\theta_i)}{\frac{1}{2} s_{i+1} + \frac{1}{2} s_i \cos(\theta_i)} = \frac{\sin(\theta_i)}{\frac{s_{i-1}}{s_i} + \cos(\theta_i)} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Denklem 2.13 ve 2.14 kullanılarak bölgesel eğrilik aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$\kappa_i = \frac{2 \sin \left(\arctan \left(\frac{\sin(\theta_i)}{\frac{s_{i-1}}{s_i} + \cos(\theta_i)} \right) \right)}{s_i} \quad (2.15)$$

2.2.4 Bölgesel normal vektörlerin hesaplanması

Yüzeydeki düğüm noktalarının normal vektörlerinin hesaplanması için *OND* açısının hesaplanması gerekmektedir. Şekil 2.3'ten açıkça görüleceği gibi $\beta_i = (\pi/2 - \alpha_i)$ olarak yazılabilir. İki düğüm noktasını birbirine bağlayan $\Delta r^{-(i)}$ vektörü saat yönünün tersine rotasyon matrisi ile çarpılarak normal vektör yönünde bir vektör elde edilir.

$$\vec{n}^{(i)} = \begin{vmatrix} \cos(\beta_i) & \sin(\beta_i) & 0 \\ \sin(\beta_i) & \cos(\beta_i) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \cdot \Delta \vec{r}^{(i)} \quad (2.16)$$

Aşağıdaki işlem yapılarak bölgesel normal vektör bulunabilir.

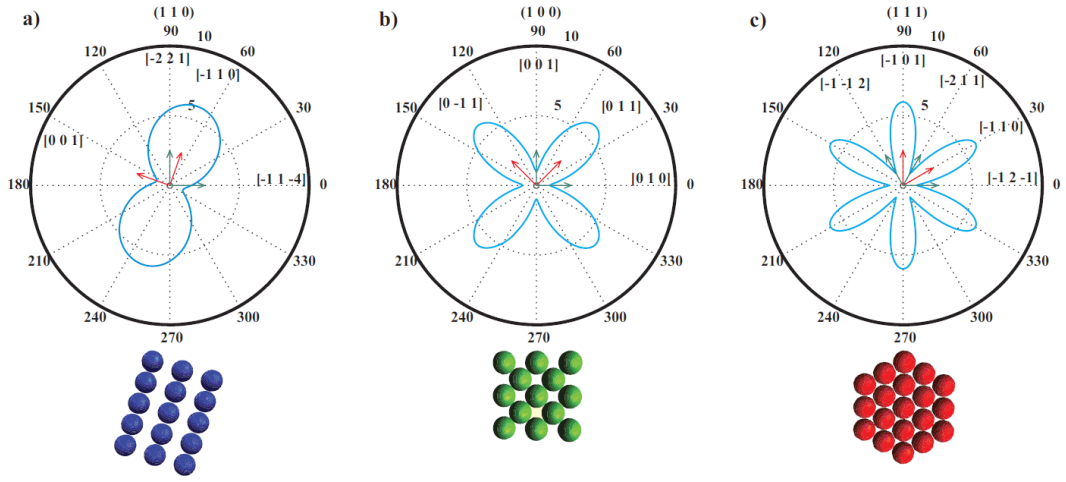
$$\vec{n}^{(i)} = \frac{\vec{n}^{(i)}}{|\vec{n}^{(i)}|} \quad (2.17)$$

2.2.5 Yön-bağımlı (Anizotropik) Yüzey Difüzyonu

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

$$\bar{D}(\theta, \phi, m) = D_{\sigma}^0 \{1 + A \cos^2 [m(\theta - \phi)]\} \quad (2.18)$$

Bu bağıntıda θ , yüzeydeki difüzyon doğrultusunun tanjant vektörü ile x eksenini arasındaki açı ve A ise anizotropik sabittir. Şekil 2.4'te difüzyonun gerçekleştiği düzlem aileleri için iki boyutlu difüzyon haritası verilmiştir. Yukarıdaki bağıntıda verilen m sabiti, $n = 2m$ yani simetri derecesi bağıntısında kullanılır ve $\frac{2\pi}{n}$ değeri hesaplanarak difüzyonun gerçekleştiği düzlem ailesinin eksenine göre rotasyonel dönme açısı bulunur.



Şekil 2.4. Difüzyon anizotropisi: a) $\{110\}$ düzleminde, $D_{\sigma}^0 = 1, A = 5, m = 1, \theta = 3.93\pi/10$ değerleri için kübik yapıda iki katlı dönme simetrisi. b) $\{100\}$ düzleminde, $D_{\sigma}^0 = 1, A = 7, m = 2, \theta = \pi/4$ değerleri için kübik yapıda dört katlı dönme simetrisi. c) $\{111\}$ düzleminde, $D_{\sigma}^0 = 1, A = 3, m = 3, \theta = \pi/6$ değerleri için kübik yapıda altı katlı dönme simetrisi[90].

Eğim açısı, ϕ , yukarıda verilen iki boyutlu difüzyon haritasının difüzyonun maksimum olduğu eksenini ile x eksenini arasındaki açıdır. Eğim açısının değerleri için aralıklar: $(0 < \phi < \pi/2m)$ ve $(\pi/2m < \phi < \pi/m)$ olarak ve bunların periyodik uzantıları olarak verilebilir.

2.2.6 Yön-bağımlı (Anizotropik) Yüzey Sertliği

Pürüzlü bir yüzeyin yüzey enerjisi aşağıdaki bağıntı ile verilebilir.

$$E_s = \int_A \gamma(\theta) \frac{dA}{\cos(\theta)} \approx \gamma(0) dA + \int_A \theta \left. \frac{\partial \gamma}{\partial \theta} \right|_0 dA + 0.5 \int_A \theta^2 \left[\left. \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \theta^2} \right|_0 \right] dA \quad (2.19)$$

Bu bağıntıyı kullanarak enerji değişimini aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\Delta E = 0.5 \left[\gamma + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \theta^2} \right]_{\theta=0} \int_A \theta^2 dA \quad (2.20)$$

Enerji deęişiminin işareti aşığıdaki baęıntının işaretine baęlıdır.

$$\gamma = \gamma + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \theta^2} \quad (2.21)$$

Denklem 2.21'e yüzey sertlięi denmektedir. Eęer $\gamma > 0$ ve $\Delta E > 0$ ise, yüzey salınımlara karşı kararlıdır, fakat $\gamma < 0$ ve $\Delta E < 0$ ise, yüzey salınımlara karşı kararsızdır. Dięer durumlarda ise yüzey enerjisini düzgün yüzler (faset) oluşturarak minimize eder.

Denklem 2.1'de bulunan $\gamma(\theta, \phi, m) = \{ \bar{\gamma}(\theta, \phi, m) + \bar{\gamma}_{\theta\theta}(\theta, \phi, m) \}$ baęıntısı yüzey sertlięinin açısıl kısmıdır ve $[\gamma(\theta, \phi, m) / \gamma^0]$ olarak verilebilir. Yüzey sertlięinin geometrik gösterimi, eęim açısının x-ekseni ile örtüşen en yakın düzlemin yüzey normali olarak tanımlanması durumunda aşığıdaki gibi yazılabilir.

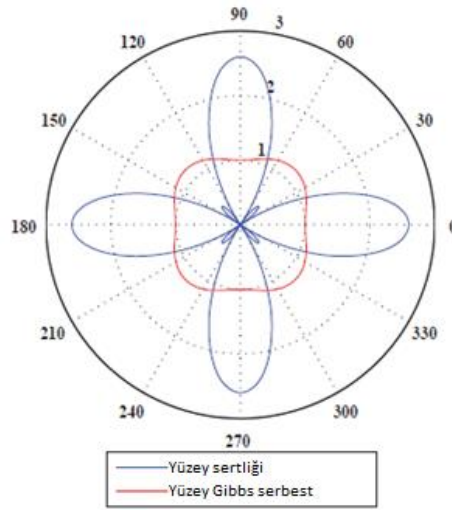
$$\bar{\gamma}(\theta, \phi, m) = \gamma(\theta, \phi, m) / \gamma_0 = \left\{ 1 + B \sin^2 [m(\theta - \phi)] \right\} \quad (2.22)$$

Bu denklemde, γ_0 yüzey Gibbs serbest enerji yoğunluęunun minimum deęeri ve $B \geq 0$ olmak üzere yüzey sertlięi anizotropisi sabitidir. Denklem 2.22 kullanılarak yüzey sertlięi formülü aşığıdaki gibi elde edilebilir.

$$\gamma(\theta, \phi, m) = \gamma_0 (1 + B/2) \left[1 - \frac{B(1-4m^2)}{B+2} \cos [2m(\theta - \phi)] \right] \quad (2.23)$$

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. Şekil 2.5’de normalize edilmiş yüzey Gibbs serbest enerjisi ($\bar{\gamma}$) ve yüzey sertliğinin açısal kısmı, (001) yapısına sahip metalik tek kristal ince film kenar düzlemleri için açısal koordinatlarda şematik olarak verilmiştir. Burada $m = 1$ olarak alınmıştır.

Denklem 2.23’e göre yüzey sertliği, yüzey Gibbs 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 verilebilir.



Şekil 2.5. Yüzey Helmholtz serbest enerjisi (mavi) ve yüzey sertliğinin (kırmızı), yüzey merkezli kübik (YMK) kristal yapısında ince film yüzeyine normal [001] eksenine sahip dört katlı simetri düzlemleri için davranışı verilmiştir. Anizotropi sabiti $B=0.2$. Yüzey sertliğinin eksi değere sahip ani artış değerleri yönü boyunca açıkça görülmektedir ve kararsızlık anlamına gelir [90].

2.2.7 Islatma potansiyeli

İnce filmin yüzey enerjisinde γ_f ile γ_s arasında ani geçiş görülür. Bu geçiş filmin kalınlığına bağlıdır.

$$\gamma_{f \leftrightarrow s}(y) = \frac{\gamma_f + \gamma_s}{2\gamma_f} + \left[\frac{\gamma_f - \gamma_s}{\gamma_f} \right] \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{y}{\delta}\right) \quad (2.24)$$

Islanma katmanını modellemek için ıslatma potansiyeli ($\omega(y)$) aşağıdaki tanımlanmıştır.

$$\omega(y) = n_y \cdot \frac{d\gamma_{f \leftrightarrow s}(y)}{dy} \quad (2.25)$$

$$\omega(y) = \frac{1}{\sqrt{1+y^2}} \frac{\gamma_f - \gamma_s}{\pi\gamma_f} \frac{\delta}{\delta^2 + y^2} \quad (2.26)$$

Burada, $n_y = -n \cdot j$ olarak verilir ve y eksenini boyunca yüzey normalinin izdüşümüdür. Bu potansiyelin uygulanması durumunda, yüzey enerjisi değişimi alt tabaka ile film arasında düzgün bir geçiş göstermektedir. Islatma potansiyelinin çıkarımı [82] tarafından yapılmıştır.

2.2.8 Çember Gerilimlerinin Hesabı

Katı mekaniğine göre malzemede oluşan gerilim ve gerinim arasında bir ilişki vardır. Bir katıda oluşan gerilim birim alandaki kuvvet olarak tanımlanmaktadır. Koordinat sisteminin eksenlerine paralel düzlemlerdeki traksiyon vektörleri aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır:

$$\vec{t}_1 = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \ddot{t}_{xy} \\ \ddot{t}_{xz} \end{bmatrix}; \vec{t}_2 = \begin{bmatrix} \ddot{t}_{yx} \\ \sigma_y \\ \ddot{t}_{yz} \end{bmatrix}; \vec{t}_3 = \begin{bmatrix} \ddot{t}_{xz} \\ \ddot{t}_{zy} \\ \sigma_z \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

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

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u_x}{\partial x}; \varepsilon_y = \frac{\partial u_y}{\partial y}; \varepsilon_z = \frac{\partial u_z}{\partial z} \quad (2.28)$$

$$\gamma_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}; \gamma_{yz} = \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y}; \gamma_{zx} = \frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \quad (2.29)$$

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

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= \frac{1}{E} [\sigma_x - \nu(\sigma_y + \sigma_z)] \\ \varepsilon_y &= \frac{1}{E} [\sigma_y - \nu(\sigma_x + \sigma_z)] \\ \varepsilon_z &= \frac{1}{E} [\sigma_z - \nu(\sigma_y + \sigma_x)] \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\gamma_{xy} = \frac{1}{G} \ddot{t}_{xy}, \gamma_{yz} = \frac{1}{G} \ddot{t}_{yz}, \gamma_{zx} = \frac{1}{G} \ddot{t}_{zx} \quad (2.31)$$

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

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (2.32)$$

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

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \ddot{\tau}_{xy}}{\partial y} + b_x = 0 \quad (2.33)$$

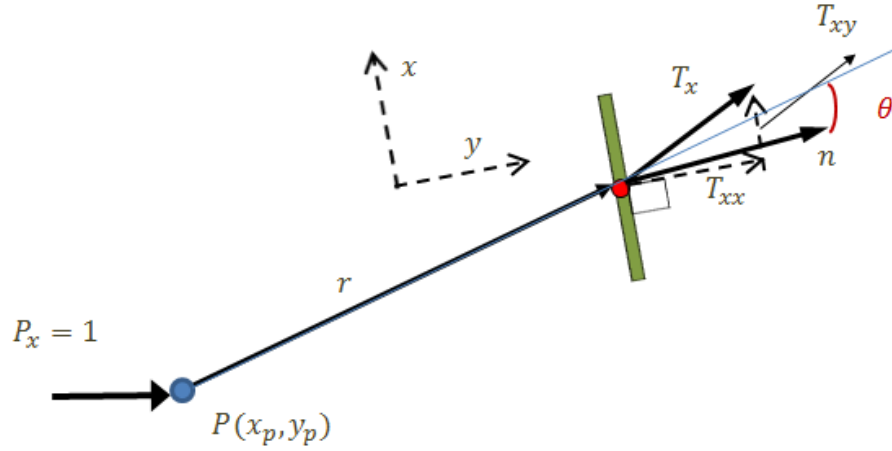
$$\frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \ddot{\tau}_{xy}}{\partial x} + b_y = 0 \quad (2.34)$$

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

$$G \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) + \left(\frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} + G \right) \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} \right) + b_x = 0 \quad (2.35)$$

$$\left(\frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} + G \right) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y \partial x} \right) + G \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \right) = 0 \quad (2.36)$$

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



Şekil 2.6. İki boyutlu Kelvin çözümü şematik gösterimi.

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

$$U_{xx}(P, Q) = C \left[C_1 \ln \left(\frac{1}{r} \right) r_x^2 \right] \quad (2.37)$$

$$U(P, Q) = C r r \quad (2.38)$$

$$C = 1 / [8\pi G(1-\nu)], \quad C_1 = 3 - 4\nu \quad (2.39)$$

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

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

$$\bar{T}_{xx}(P,Q) = \frac{C_2}{r} \left[C_3 \ln(2r_x^2) \right] \cos \theta \quad (2.40)$$

$$\bar{T}_{xy}(P,Q) = \frac{C_2}{r} \left[2r_x r_y \cos \theta + C_3 [n_y r_y - n_x r_x] \right] \quad (2.41)$$

$$C_2 = \frac{1}{4\pi(1-\nu)}, \quad C_3 = 1-2\nu, \quad \cos \theta = \frac{1}{r} r \cdot n \quad (2.42)$$

Şekil 2.6'da θ açısı tanımlanmıştır. Eğer incelenen bölgeye etkiyen bir kuvvetin olmadığını varsayarsak, bu şartlarda aşağıdaki denklemi yazabiliriz.

$$u_x(P) = \int \left[\bar{t}_x(Q) U_{xx}(P,Q) + u_y(Q) U_{xy}(P,Q) \right] dS - \int \left[u_x(P) \bar{T}_{xx}(P,Q) + u_y(P) \bar{T}_{xy}(P,Q) \right] \quad (2.43)$$

Lineer cebir kullanarak aşağıdaki çözümü elde ederiz.

$$u(P) = \int U(P,Q) \bar{t}(Q) dS - \int \bar{T}(P,Q) u(Q) dS \quad (2.44)$$

Sonuç olarak, yay gerilimleri Denklem 2.44 kullanılarak hesaplanır. Bu iki integralli denklem sisteminde, traksiyonlar, sınırdaki u yer değiştirmeleri ile doğrudan bağlantılıdır. Bu şartlarda hayali kuvvetlerin hesaplanması durumu ortadan kalkmış olur.

2.2.9 Euler Yöntemi

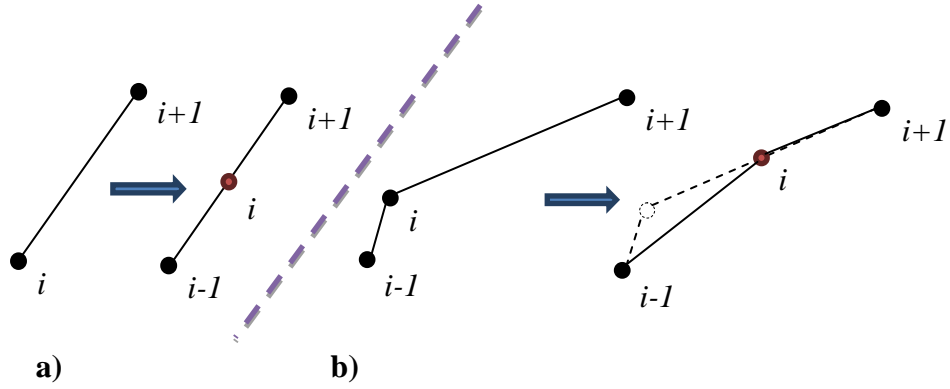
Denklem 2.1'de tanımlanan kısmi diferansiyel denklem Euler'in sonlu farklar yöntemi kullanılarak çözülmektedir. Bu yöntem yüzey düğüm noktalarının hızlarını belirleyebileceğimiz Denklem 2.1'in zamana göre integralini almak ve yüzey evrilmesini incelemek için kullanılmıştır. Zaman adımı maksimum yüzey hızı

kullanılarak hesaplanmaktadır. Böylece yüzeyin evrimi sırasında yer deęiřtirmesi zamanda atılan her adım için sabit kalmaktadır. Buna adapte olabilen zaman adımı oto kontrol mekanizması denmektedir ve bu mekanizma kendini yenileme etkisi ile birleřtirilerek, uzun süreli sayısal kararlılık saęlanmıřtır.

2.2.10 Sistemin Yeniden Yapılandırılması

Sistem řeklinin zaman içerisinde deęiřmesi sonucu ortaya çıkacak çok uzun ve çok kısa elemanlar devamlı bir řekilde kontrol edilerek sistem düęümleri gerektięi anda yeniden yapılandırılmaktadır (remeshing). Her adımda sistemdeki düęüm noktalarının normal çizgi vektörleri ile eğrilikleri yeniden hesaplanmaktadır.

Simülasyonlarda deneylerdeki sayısal hesaplamalardan kaynaklanan hatalar düęüm noktalarının sayısına ve zamanda atılacak adımlara baęlıdır. Bu hataları kabul edilebilir bir seviyede tutmak için düęüm elemanlarının uzunlukları kritik bir deęerden büyük olmamalıdır. Bu sebepten uzunluęu bu kritik deęeri geęen elemanlar ikiye bölünerek hassasiyet korunmaktadır. Bu bölümlendirme sonucu düęüm nokta sayısı artmaktadır ve düęüm noktalarının artması sayısal hesaplamaların uzamasına neden olmaktadır. Bilgisayar zamanının artmasını engellemek için uzunluęu kritik bir deęerin altına inen elemanlar bir sonraki eleman ile arasındaki düęüm noktasının silinmesi sonucu birleřtirilirler ve düęüm noktası sayısının artması engellenmiř olur. Bu yapılan işlemlere sistemin yeniden yapılandırılması (remeshing) mekanizması denmektedir. Bu mekanizma ařaęıdaki řekilde řematik olarak gösterilmiřtir (Şekil 2.7)



Şekil 2.7. Yeniden bölümlendirme. a) Eleman uzunluğu maksimum kritik değerin üstünde.
b) Eleman uzunluğu minimum kritik değerin altında

Uyarlanabilir bölümlendirme bir elemana sınır kriter değerleri aniden geçildiğinde uygulanmaktadır. Bu sebepten, hızlı evrilen yüksek enerji gradyanlı yüzeyler mümkün olan en küçük eleman uzunluğuna sahip olurken, yavaş evrilen düşük enerji gradyanlı yüzeyler mümkün olan en büyük eleman uzunluğuna sahip olurlar.

Son olarak, sistemi kontrol eden yönetici denklem takımları (Denklem 2.1 ve 2.2) yapılan tüm bu hesaplamalar sonucunda çözülerek düğüm noktalarının hızları hesaplanır ve bu hızlar kullanılarak sistemin zamanda küçük bir adım atması sonucunda ulaştığı yeni konfigürasyonu belirlenir. Bu yeni konfigürasyon üzerinde tüm hesaplar yeniden yapılarak sistem zamanda ilerlemeye devam eder.

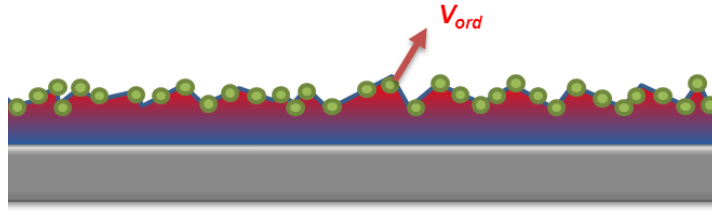
Şekil 2.8'de programın çalışma prensipleri bir akış şeması halinde özetlenmiştir.



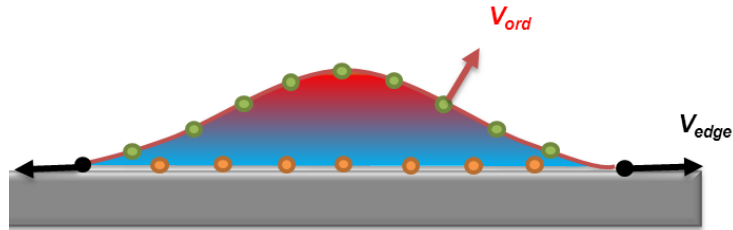
Şekil 2.8. Program akış şeması.

3. SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR

Deneysel çalışmalar göz önüne alındığında, Stranski–Krastanow adaları yolu ile kuantum nokta oluşumunun iki farklı mekanizma üzerinden başlayabildiği görülmüştür: A) çekirdeklenme olmadan epitaksiyel gerilim nedenli film istikrarsızlığı ile yüzey pürüzlenmesi sonucu (Şekil 3.1) veya B) altlık üzerinde çekirdeklenme ve büyüme sonucu (Şekil 3.2). Bu araştırmada, kendiliğinden çekirdeklenme sonucu ortaya çıktığı düşünülen pürüzsüz yüzeyli damlacıkların iç ve dış parametreler altında şekil ve morfolojik değişimleri sonucunda alacakları kararlı haller incelenmiştir.



Şekil 3.1. Beyaz gürültü deneylerinin şematik gösterimi.



Şekil 3.2. Tek damlacık deneylerinin şematik gösterimi.

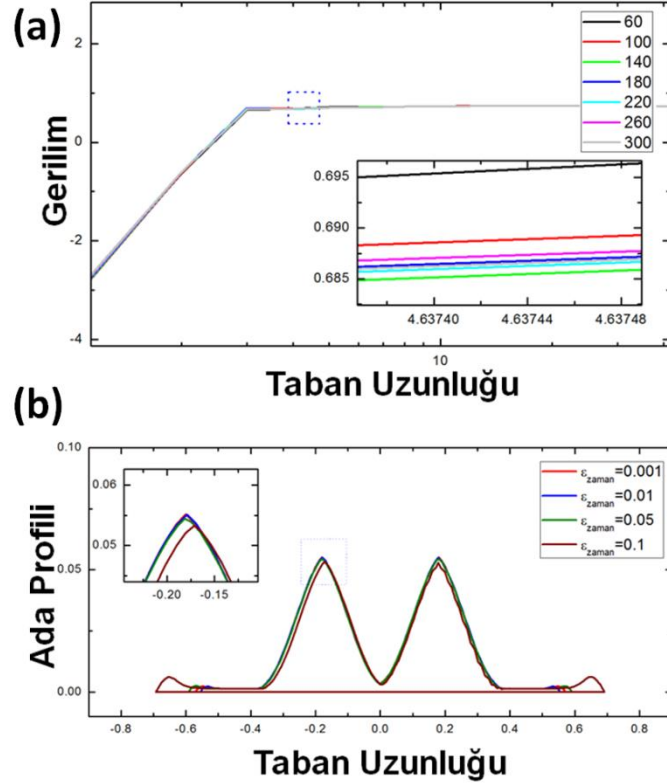
Geliştirilen kodlar ile hem malzeme özelliklerinin izotropik yani yönden bağımsız olduğu kabul edilerek sistemin davranışı incelenmiş hem de daha gerçekçi bir

yaklaşım ile sistemi kontrol eden malzeme özelliklerinin sistemin kristal yapısına bağlı olarak değiştiği yani anizotropik olduğu durumlar incelenmiştir.

3.1 Sayısal Parametrelerin Programın Çalışması Üzerine Etkileri

Grubumuzca geliştirilen program ile simülasyonlara başlamadan önce, ilk olarak programın düğüm sayıları ve zaman adımları çalışılarak geliştirilen sayısal çözümlerin güvenli olduğu bölgeler bulunmuştur. Düğüm sayılarındaki artış ve zamanda ilerlemek için kullanılan adımlardaki küçülme sistem için bulunan sonuçların daha doğru olmasına neden olmaktadır. Ancak aynı anda sistemin gelişimi için gerekli hesap zamanlarını da son derece arttırmaktadır. Düğüm sayıları ve zaman aralıklarının sisteme etkileri ile sistemin dengeye ulaşması için gereken gerçek hesaplama zamanı incelenmiştir.

Bu durum ile ilgili bir örnek Şekil 3.3'te verilmiştir. Aynı sistem için farklı zaman aralıkları kullanılması durumunda zaman aralığının belirli bir değerden fazla olması durumunda sistem davranışını değiştirerek farklı bir denge durumuna geçmektedir.



Şekil 3.3. Farklı (a) sistem düğüm sayılarının ve (b) zaman adımları kullanımının sistemin gelişimi üzerindeki etkileri.

Şekil 3.3.a'da sistemde kullanılan düğüm sayılarının artışının anlık sistem gerilimi hesaplamaları üzerindeki etkisi gösterilmiştir. Bu deneyde düğüm sayısı arttıkça hesapların özellikle de üçlü kavşaklara yaklaştıkça belirli bir değere yakınsadığı görülmektedir. Şekil 3.3.b'de ise sistemin zamandaki ilerleyişi için kullanılan zaman adımlarının sistemin denge konumuna etkisi gösterilmiştir. Her ne kadar zaman aralığının 0.1 alınması sistemi çok daha hızlı bir şekilde denge konumuna getirirse de sistem davranışında belirgin değişiklikler olmaktadır. Zaman aralıkları küçüldükçe sistemin denge konumunun da yakınsadığı gözlenmiştir.

Bu deneylerden elde edilen bulgular kullanılarak, bu proje kapsamında incelenecek deneylerde normalize zaman aralıkları (0.001-0.01) aralığında, başlangıçtaki toplam düğüm sayıları ise 180-300 aralığında olacak şekilde seçilmiştir. Bu durumda gerilimin olmadığı sistemlerin hesapları 10 dakikanın altında sürerken asıl bilgisayar

zamanının harcanıldığı gerilim hesaplamaları durumunda sistemin gelişimi 2-14 gün arasında sürmektedir. Bu süre sistemin gelişimi sırasında aldığı şekle ve şekle bağlı olarak yeniden yapılandırılma sonucu ortaya çıkan düğüm sayılarındaki artışa bağlıdır.

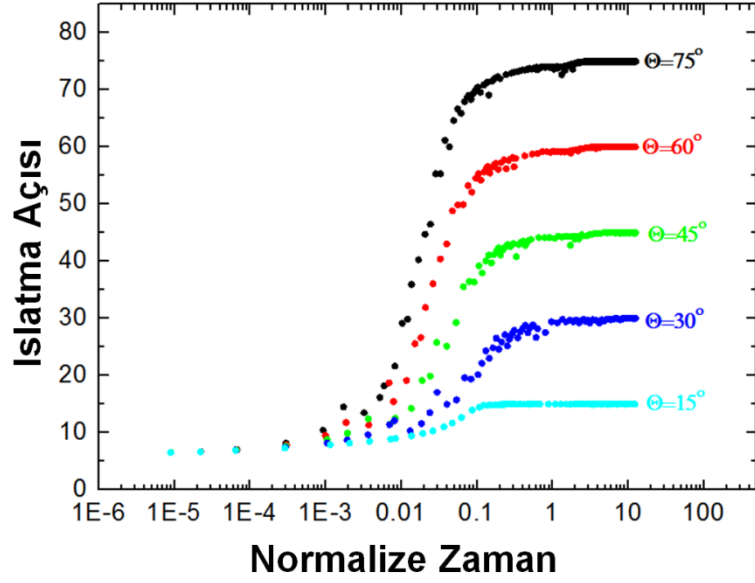
3.2 İzotropik Sistemlerde Damlacık Simülasyonları

Burada, öncelikle malzeme özelliklerinin izotropik olduğu kabul edilerek sistemin davranışı incelenmiştir.

Yukarıda daha önce bahsedildiği gibi, KN oluşumu için gözlenen bir ikinci mekanizma da altlık üzerinde çekirdeklenme ve büyüme sonucu, damlacık olarak, ortaya çıkmaktadır. Burada, tek damlacık simülasyon deneylerinde film en/boy oranı, ıslatma parametresi, ara yüzey kalınlığı, damlacık ve altlık arasındaki yüzey enerjisi farklılıklarına bağlı denge açılarının ve gerilmenin damlacığın gelişimi üzerindeki etkileri gibi farklı parametreler detaylı bir şekilde incelenmiştir.

3.2.1 Gerilimsiz İzotropik Sistemler

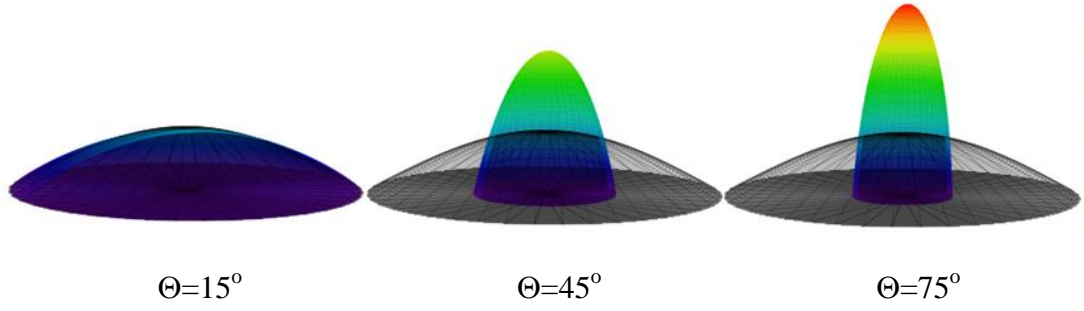
Islatma parametresinin denge morfolojisi üzerindeki etkisini görmek için farklı ıslatma parametreleri (λ_g) altında damlacığın gelişimi öncelikle gerilim değeri sıfır alınarak incelenmiştir. Burada denge açısı Θ ile λ_g ıslatma parametresi arasında şu ilişki bulunmaktadır: $\Theta = \arccos(\lambda_g)$. Şekil 3.4'te zamanla ıslatma açısının değişimi ve λ_g ıslatma parametresi ile belirlenen denge ıslatma açısına yakınsaması gösterilmiştir.



Şekil 3.4. Farklı ıslatma parametresi (λ_g) değerleri için ıslatma açısının (Θ) dengeye geliş dinamiği. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $\beta = 28$, $M_g = 1$, $\nu = 0.3$,

$$\bar{\delta} = 0.005, f_s = 1.2, \text{ ve } f_d = 1.$$

Şekil 3.5'te ise yapılan bu 5 deneyden 3 tanesi (düşük, orta ve yüksek denge ıslatma açıları) için başlangıç ve son denge morfolojileri verilmiştir. Bu grafiklerde toplam KN alanı (3 boyutlu sistemde KN hacmi) sabit kalmakta ve zamanla denge açısını sağlayacak şekilde morfolojilerini değiştirmektedirler.

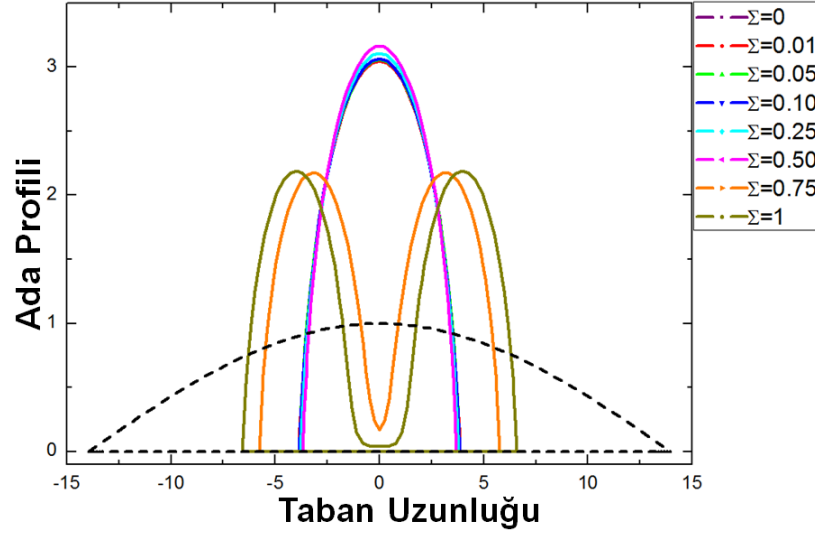


Şekil 3.5. İslatma parametresinin denge morfolojisi üzerindeki etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $\beta=28$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$.

Bu deneyler aynı zamanda geliştirdiğimiz modelin başarısı için bir tür test görevi de görmüştür. İçsel gerilim olmadığı ve sadece yüzey enerjileri ile kontrol edilen sistemlerde denge konumu (ıslatma açısı) program tarafından başarı ile simüle edilebilmektedir.

3.2.2 İçsel Gerilimlere Sahip İzotropik Sistemler

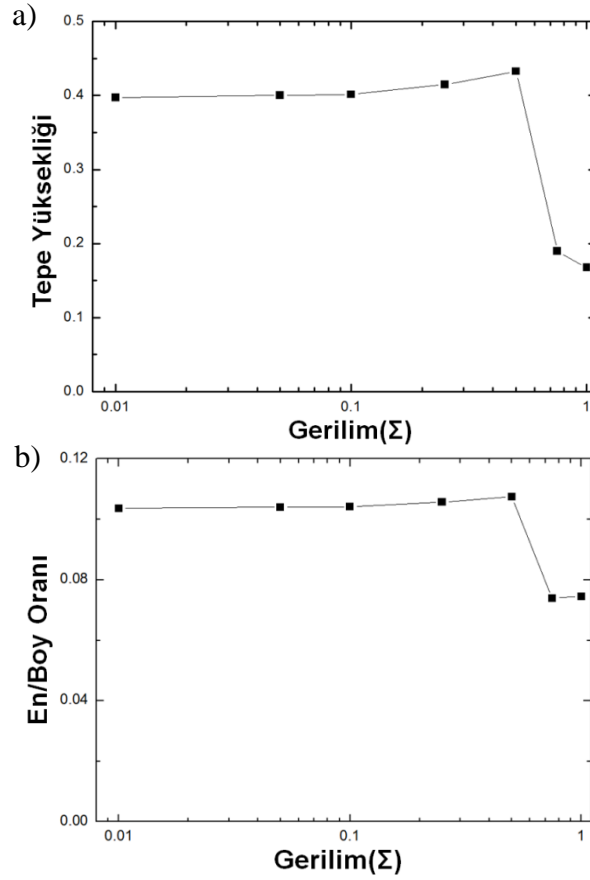
Sistemin anizotropik malzeme özelliklerine sahip olduğu varsayılarak, gerilim altında morfoloji değişimleri incelendiğinde düşük gerilim değerlerinin morfolojiye etkisinin çok kısıtlı olduğu görülmüştür (Şekil 3.6).



Şekil 3.6. Uygulanan gerilimlerin denge morfolojisi üzerindeki etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\beta=28$, $\Theta=75^\circ$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.

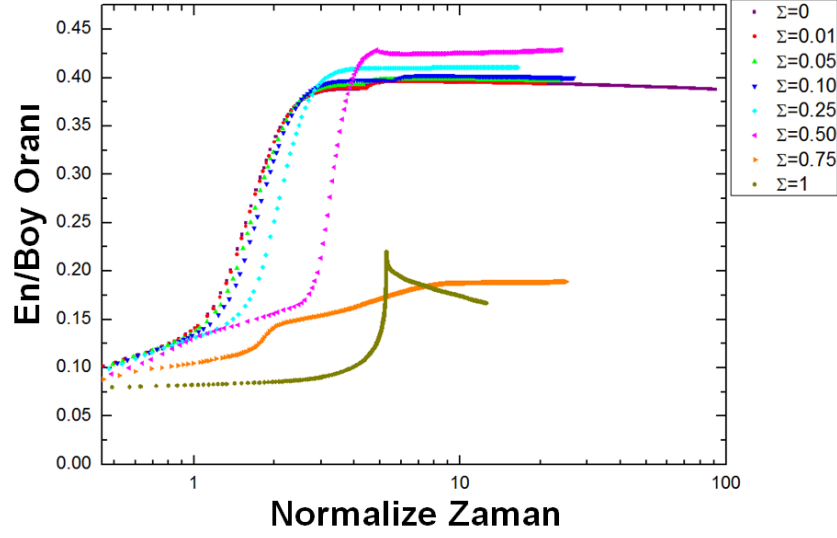
Şekil 3.6 incelendiğinde düşük gerilim değerlerinin, $\Sigma < 0.75$, sistemin final morfolojisi üzerinde en/boy oranlarında küçük bir artışa neden olduğu görülmüştür. Gerilim değeri, $\Sigma=0.75$ 'e ulaştığında ise sistemin morfolojik evriminin tamamen değişerek başlangıçtaki tek damlacığın ikiye ayrıldığı gözlenmiştir. Ayrılan bu parçaların yine gerilim değerine bağlı olan bir ıslatma katmanı ile birbirlerine bağlı olduğu gözlenmiştir. Bu da literatürde Stranski-Krastonow adıyla anılan ince film büyüme moduna karşılık gelmektedir.

Şekil 3.7'de yapılan deneyler üzerindeki analizler ile KN tepe yüksekliğinin ve en/boy oranının gerilim ile olan ilişkileri çıkarılmış ve Şekil 3.31'de verilmiştir. Damlacıkların ayrılmaya başladığı gerilim değerleri tepe yüksekliğindeki ani düşüş ile kendisini göstermektedir. En/boy oranları göz önüne alındığında gerilim ile damlacığın en/boy oranının (aspect ratio) arttığı, belirli bir gerilimden sonra oluşan ayrışma ile ani bir düşüş gösterdiği ama ilerleyen gerilim artışı ile düştüğü değerden tekrar artmaya başladığı gözlenmiştir.



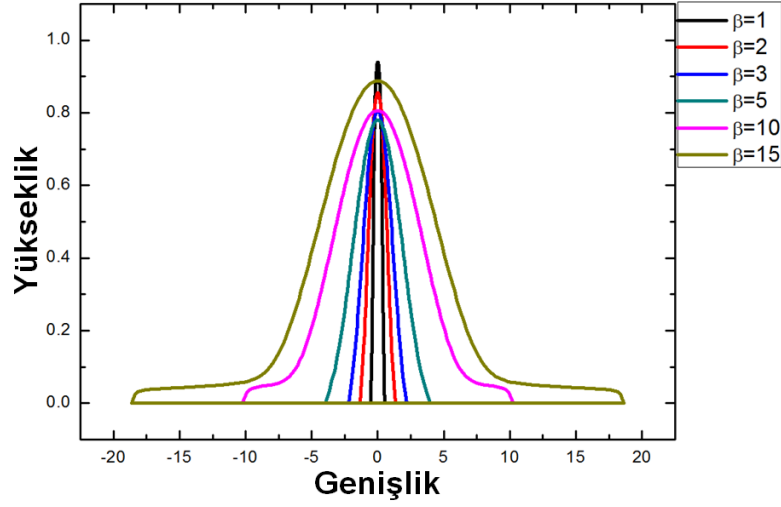
Şekil 3.7. Uygulanan gerilimlerin a) tepe yüksekliği ve damlacık denge morfolojisi b) tepe yüksekliği ve en/boy oranı üzerindeki etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\beta=28$, $\Theta=75^\circ$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.

Şekil 3.8’de ise farklı gerilim değerleri altında en/boy oranının zamanla evrimi verilmiştir. Kullanılan ıslatma denge açısı parametresi $\Theta=75^\circ$, olduğu durumda gerilim artışının sistemin morfolojik evrimini yavaşlattığı görülmektedir.



Şekil 3.8. Uygulanan gerilimler altında tepe yüksekliğinin zamanla değişimi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\beta=28$, $\Theta=75^\circ$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.

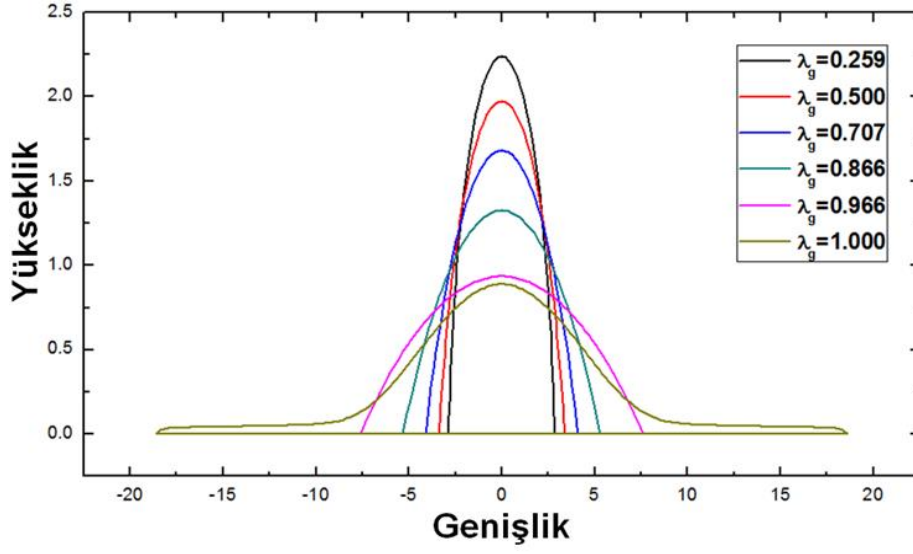
Şekil 3.9’da, gerilim altında farklı en/boy oranına sahip damlacıkların morfolojik evrimleri sonucu ulaştıkları denge şekilleri verilmiştir. En/boy oranını belirten β parametresi denge şekli üzerinde belirleyici bir etkiye sahiptir. Yüksek β parametresine sahip damlacıkların ıslatma katmanı oluştururken düşük β parametresine sahip damlacıklar kapiler etkinin baskın gelmesi sonucunda ıslatma katmanı oluşturamamaktadır.



Şekil 3.9. Belirli bir ıslatma açısı altında damlacık en/boy oranının final morfolojiye etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0.01$, $\lambda_g = 1$, $M_g = 2$, $\nu = 0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$.

Üzerinde çalışmakta olduğumuz sistemlerin gelişimleri ve denge morfolojileri oldukça karmaşık olup aynı anda, ıslatma açısı, en/boy oranı, uygulanan gerilimin büyüklüğü ve sistemin yön bağımlı özellikleri gibi birçok etkenin etkisi altındadır. Şekil 3.9'daki deney sonuçlarını göz önüne alarak ıslatma katmanının oluşmasında ıslatma açısının etkileri de incelenmiş ve sonuçlar Şekil 3.10'da verilmiştir.

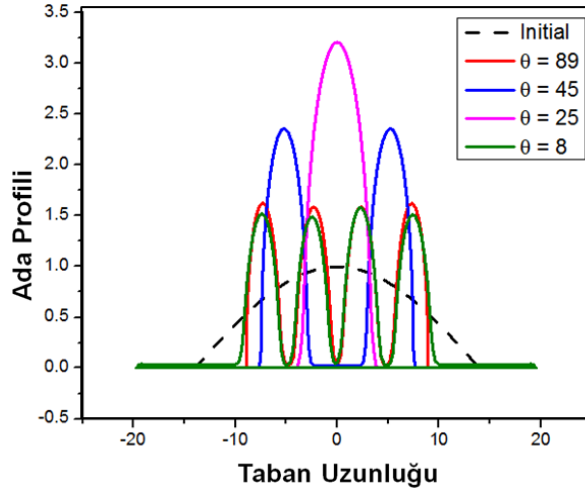
Islatma denge açısının, sistemin en/boy oranına bağlı olan, belirli bir kritik değerin altına inmesi durumunda sistemin ıslatma katmanı oluşturduğu gözlenmiştir. Örneğin aşağıdaki deney setinde başlangıç damlacığının en/boy oranı 15 olarak alınmış ve ıslatma katmanının da $\lambda_g > 0.966$ ($\Theta < 15^\circ$) koşulu ile oluştuğu gözlenmiştir. Bu değer aynı zamanda sistemin içerisindeki gerilimlerin de bir fonksiyonudur.



Şekil 3.10. Belirli bir en/boy oranına sahip damlacıkların farklı ıslatma açıları altında final morfolojileri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0.01$, $\beta = 15$, $M_g = 2$,

$$\nu = 0.3, \bar{\delta} = 0.005, f_s = 1.2, \text{ ve } f_d = 1.$$

Sistem içerisindeki gerilimler ve ıslatma parametresinin morfoloji üzerindeki etkilerini tam olarak ortaya çıkarmak için her iki değişkenin birden değiştirildiği farklı deneyler yapılmış ve sistem davranışı incelenmiştir. Bu deneyler ile ilgili bazı denge morfolojileri Şekil 3.11'de verilmiştir ve başlangıçta yüzeye yerleştirilen damlacığın sistemi kontrol eden parametrelere bağlı olarak birbirinden ince bir ıslatma tabakası ile ayrılan farklı sayıda adacıklara (kuantum noktalara) dönüştüğü gözlenmiştir.



Şekil 3.11. Farklı en/boy oranına sahip damlacıkların gerilim altında morfolojik evrimi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 1.5$, $\beta = 15$, $M_g = 1$, $\nu = 0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$.

3.3 Anizotropik Sistemler

Bu bölümde, literatür bölümünde belirtilen deneylerin ışığında, daha gerçekçi bir yaklaşım ile sistemi kontrol eden malzeme özelliklerinin sistemin kristal yapısına bağlı olarak değiştiği yani anizotropik olduğu durumlar incelenmiştir.

Anizotropik etkiler kendini üç ana noktada gösterecek şekilde irdelenmiştir: Kristal yönüne bağlı olarak gerçekleşen yüzey difüzyonu ve yüzey serbest enerjisinin kristal yönüne bağlı olarak değişmesi detaylandırılan modeller kullanılarak simülasyon programı yönsellik etkilerini göz önüne alacak şekilde geliştirilmiş ve yapılan sistematik deneyler ile etkileri incelenmiştir.

Burada öncelikle anizotropik etkiler kısaca tanıtılacak ve hemen arkasından deneyler ile sistem üzerindeki etkileri karşılaştırılacaktır.

3.3.1 Yüzey Difüzyonunun Kristal Yönüne Bağlılığı

Yüzey difüzyonunun kristal yönüne bağlılığı aşağıdaki trigonometrik eşitlik ile tanımlanır:

$$D_{\sigma} = D_{\sigma}^0 \left(1 + A \cos^2(m(\theta + \phi)) \right) \quad (3.1)$$

Burada θ ve ϕ açıları sırası ile difüzyon yönünü ve kullanılan kristalin eğim açısını (tilt angle) belirtir. D_{σ}^0 kristal yüzeyi üzerindeki en düşük difüzyon katsayısını belirtirken A değeri ise difüzyon yönsellik şiddetini vererek en yüksek difüzyon katsayısının hesaplanmasında kullanılır.

3.3.2 Yüzey Serbest Enerjisinin Kristal Yönüne Bağlılığı

Denklem 2.1'de tanımlanan kısmi diferansiyel denklemdeki $\hat{f}(\theta, \phi, m)$ yüzey sertliğinin (surface stiffness) açısız parçasını belirtir ve aşağıdaki eşitlik ile tanımlanır:

$$\hat{f}(\theta, \phi, m) = f(\theta, \phi, m) + \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} f(\theta, \phi, m) \quad (3.2)$$

Burada $f(\theta, \phi, m) = 1 + B \sin^2[m(\theta - \phi)]$ 2-boyutlu sistemde Helmholtz serbest enerjisini vermektedir. Yüzey sertliği (surface stiffness) ise $\tilde{f}_{F/s}(h) = f_{F/s}(h) \hat{f}(\theta, \phi, m)$ ile tanımlanır. Denklem 3.2, yukarıda tanımlanan Helmholtz serbest enerjisini ile beraber kullanılırsa yön bağımlı Yüzey sertliği (surface stiffness) için aşağıdaki formül elde edilir.

$$\hat{f}(\theta, \phi, m) = (1 + B/2) \left(1 - \frac{B(1 - 4m^2)}{B + 2} \cos[2m(\theta - \phi)] \right) \quad (3.3)$$

Denklem 2.1'deki $\omega(h, \theta) = \omega_{iso} + \omega_{aniso}$ ise hem izotropik hem de anizotropik ıslatma potansiyelini içerir ve bu potansiyeller aşağıdaki eşitlikler ile tanımlanır.

$$\omega_{iso} = -\cos(\theta) \hat{f}(\theta, \phi, m) \cdot \frac{f_s - f_f}{f_f} \frac{\delta}{\pi(\delta^2 + h^2)} \quad (3.4)$$

$$\omega_{aniso} = \sin(\theta) \partial_\theta \hat{f}(\theta, \phi, m) \cdot \frac{f_s - f_f}{f_f} \frac{\delta}{\pi(\delta^2 + h^2)} \quad (3.5)$$

Literatüre incelemeleri sonucunda ıslatma potansiyelinin film kalınlığı ile olan ilişkisinin nasıl tanımlanması gerektiği konusunda bazı fikir ayrılıkları olduğu görülmüştür. Tekalign ve Spencer [82], Denklem 3.6'daki etkileşimi önerirken, Gao [83] ise Denklem 3.7'deki etkileşimi önermişlerdir.

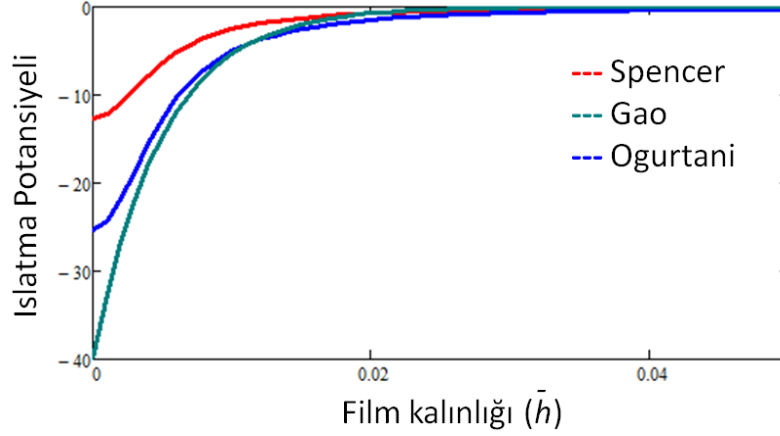
$$\bar{f}_{f/s}(\bar{h}) = \frac{f_s + f_f}{2} - (f_s - f_f) \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\bar{h}}{\bar{\delta}}\right) \quad (3.6)$$

$$\bar{f}_{f/s}(\bar{h}) = f_f + (f_s - f_f - f_{sf}) \exp\left(-\frac{\bar{h}}{\bar{\delta}}\right) \quad (3.7)$$

Bu çalışmada, Spencer potansiyelinin [82] sığ etkisi ile Gao potansiyelin [84] film kalınlığı \bar{h} azaldıkça üstsel artışını (exponential) dengeleyen üçüncü bir potansiyel önerilmiştir (Oğurtanı Potansiyeli).

$$\bar{f}_{f/s}(\bar{h}) = (f_s - f_{sf}) - (f_s - f_f - f_{sf}) \frac{2}{\pi} \arctan\left(\frac{\bar{h}}{\bar{\delta}}\right) \quad (3.8)$$

Bu potansiyellerin etkileri Şekil 3.12'de gösterilmiştir.



Şekil 3.12. Farklı ıslatma potansiyellerinin karşılaştırılması.

Bu potansiyellerin çok daha detaylı analizleri ileride yapılmaya devam edilecektir. Bu tez kapsamında ilk olarak deneylerimiz literatürde sıkça kullanılan Spencer potansiyeli Denklem 3.6'yı kullanarak yapılmıştır. Ardından, Gao ve Ogurtani potansiyelleri ile bazı deneyler yapılarak sistemin potansiyele olan bağımlılığı gösterilmiştir.

Yukarıdaki eşitliklerde, ϕ açısı kristal eğim açısını (tilt angle) belirtir ve seçilen kristal yüzeyinin x -ekseni ile yaptığı açıyı tanımlar. Parametre m ise seçilen yüzeydeki simetri sayısının yarısını verir. Örneğin kübik yapılarda $\{100\}$ düzlem aileleri 4-katlı simetriye (4-fold symmetry) sahiptirler ve bu düzlemler için m değeri 2 olmaktadır. B değeri ise serbest enerji anizotropi şiddeti olarak tanımlanır ve serbest enerjinin aldığı en yüksek ve en düşük değerler arasındaki oranı verir.

3.3.3 Damlacık Simülasyonları

Bu bölümdeki çalışmalar, yukarıda detaylı bir şekilde anlatıldığı üzere benzetim deneylerinin daha gerçekçi olması için gereken malzemenin kristalografik bilgileri simülasyonlara eklenerek yapılmıştır. Malzemenin kristalografik yönleri sistem içerisinde hem yüzey enerjisinde hem de yüzey difüzyonunun şiddetinde yöne

bağımlılık geliştirmektedir. Deneyler bu yönsellik etkilerinin damlacıkların gelişim aşamalarını ve denge morfolojilerini etkilediklerini göstermiştir.

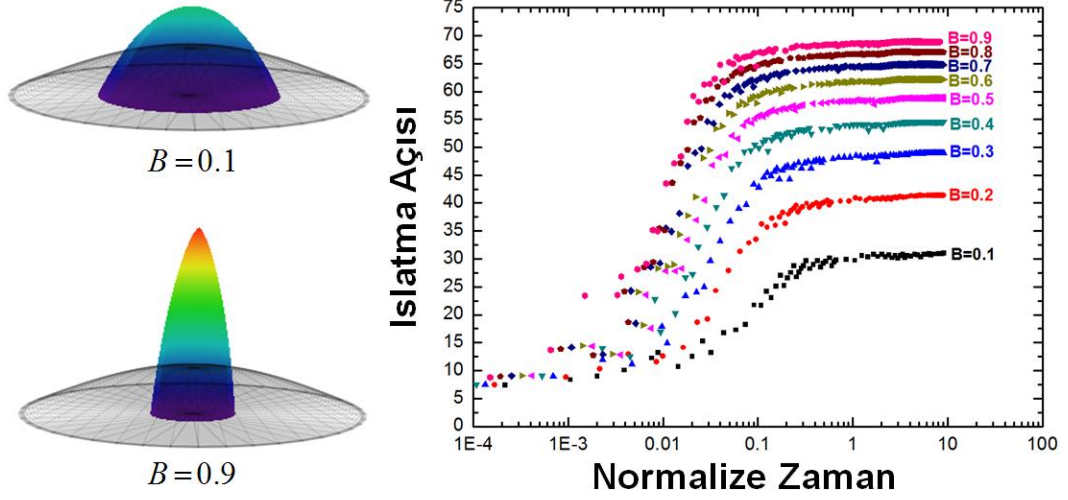
Bu bölümde yönsellik etkileri detaylı bir şekilde gerilimsiz ve içsel gerilimlere sahip sistemler için ayrı ayrı incelenmiştir.

Yüzey sertliği Denklem 3.3'te verildiği gibi sistemin yüzey enerjisinin bir fonksiyonudur ve yüzey enerjisi de kristal yönlerine bağlı olarak değişmektedir. Bu denklemdeki B değeri serbest enerji yönsellik şiddeti (anisotropy intensity) olarak tanımlanır ve serbest enerjinin aldığı en yüksek ve en düşük değerler arasındaki oranı verir.

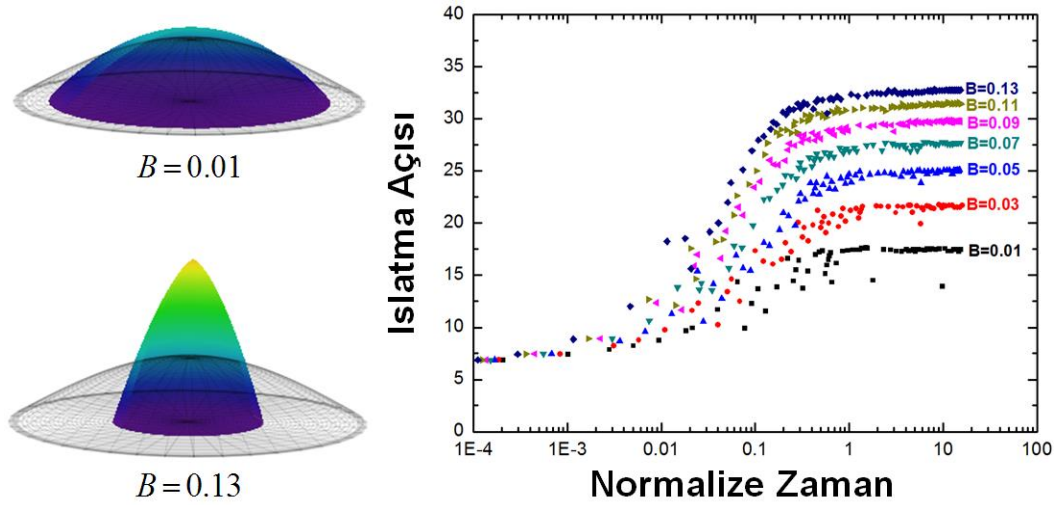
Deneylerimizde öncelikle serbest enerji yönsellik şiddetinin (B) etkileri farklı kristal sistemleri için incelenmiştir. Bu amaçla öncelikle yüzey difüzyonunun yönsellik etkileri göz ardı edilmiştir yani yüzey difüzyonu yönsellik şiddeti (Denklem 3.1), $A=0$ alınarak yüzey difüzyonunun her yön için eşit büyüklükte alınması sağlanmıştır.

3.3.3.1 Gerilimsiz Anizotropik Sistemler

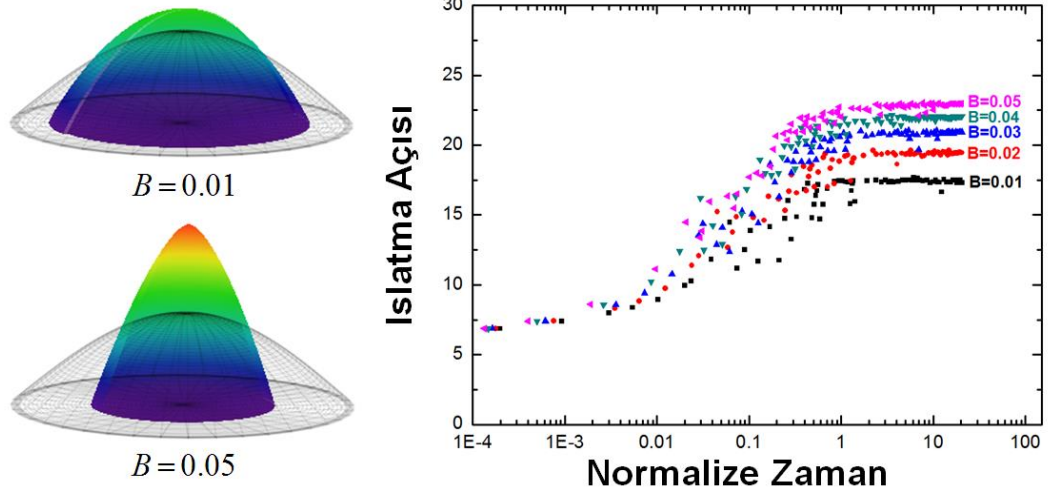
Şekil 3.13-Şekil 3.15 için verilen kristal düzleminde maksimum yüzey enerjisine sahip kristal yönü x-ekseni yönünde olacak şekilde ayarlanmıştır. Yani sistemdeki eğim açısı $\phi=0$ olarak değerlendirilmiştir. Yüzey merkezli kübik (YMK) yapılar için üç ana kristalografik yüzey ($\{110\}$ (Şekil 3.13), $\{100\}$ (Şekil 3.14) ve $\{111\}$ (Şekil 3.15)) seçilmiş ve bu seçilen yüzeyler için yapılan deney setleri incelendiğinde final morfoloji üzerinde yüzey enerjisinin dolayısı ile sertliğinin etkileri gözlenmiştir.



Şekil 3.13. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\{110\}$ kristal düzlemi, $m=1$, $\phi=0$, $\Sigma=0$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.

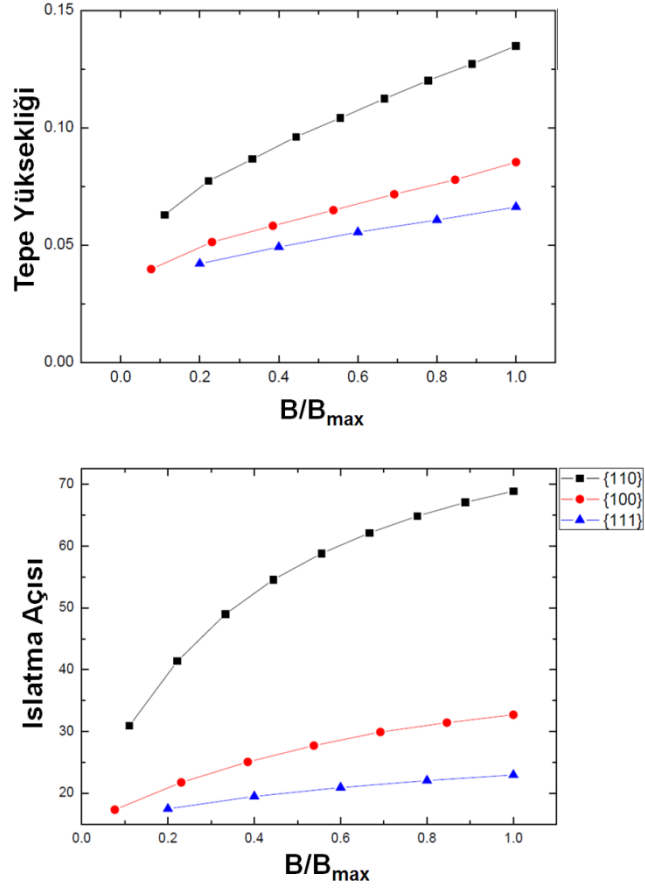


Şekil 3.14. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\{100\}$ kristal düzlemi, $m=2$, $\phi=0$, $\Sigma=0$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.



Şekil 3.15. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\{111\}$ kristal düzlemi, $m=3$, $\phi=0$, $\Sigma=0$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.

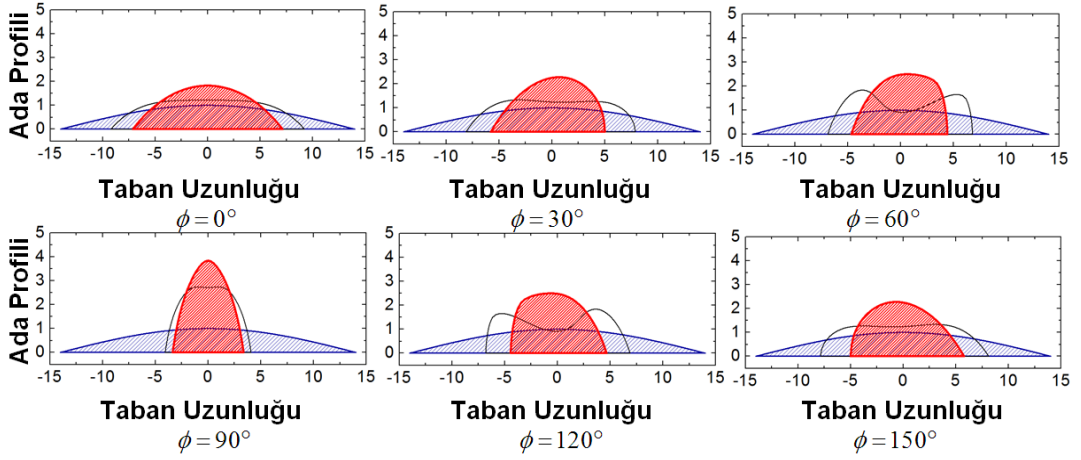
Bu tip içsel gerilimlerin olmadığı sistemlerde, yüzey enerjisi yönsellik şiddeti yani yüzey sertliği (surface stiffness) arttırıldıkça, verilen kristalografik sistemler için, damlacıkların yüzeyde daha fazla toparlandığı gözlenmiştir. Bu durumda damlacığın ıslatma açısının ve tepe yüksekliği artarak denge durumundaki adacığın en/boy oranı (aspect ratio) kontrol edilebilmektedir. Bu verilerle ilgili değerler Şekil 3.16'da verilmiştir.



Şekil 3.16. Yüzey sertliği oranının damlacık tepesi ve damlacık ile altlık arasındaki denge ıslatma açısına etkileri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\phi = 0$, $\Sigma = 0$, $\beta = 28$, $M_g = 2$, $\nu = 0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$.

Şekil 3.13-Şekil 3.15'te verilen normalize zaman-ıslatma açısı grafikleri incelendiğinde, yüzey sertliği oranının sadece final morfoloji üzerinde etkili olmadığı aynı zamanda bu değerlerin sistemin dengeye ulaşma kinetiğini de etkilediği ortaya çıkmıştır. Yüzey sertliği değeri arttıkça sistemin izotropik denge açısından daha fazla ve daha hızlı uzaklaşarak dengeye geldiği gözlenmiştir.

Kristalin x -eksenine göre eğiminin (tilt angle) final morfoloji üzerindeki etkileri incelendiğinde ise kristal eğiminin adacık profilini kontrol etmek için kullanılabileceği gösterilmiştir.



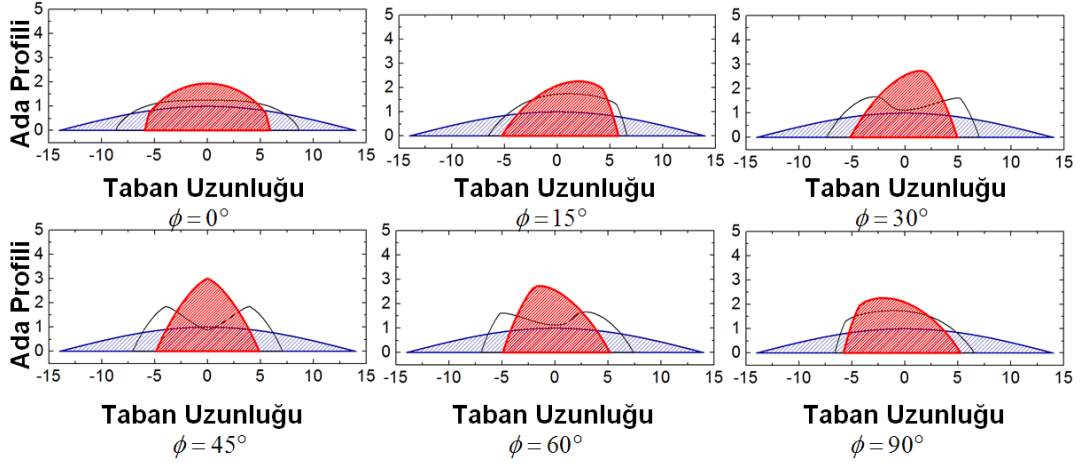
Şekil 3.17. {110} kristal düzleminde ($m=1$) kristal eğiminin KN final morfolojisine etkileri.

Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $B = 0.7$, $\beta = 28$, $M_g = 2$, $\nu = 0.3$,

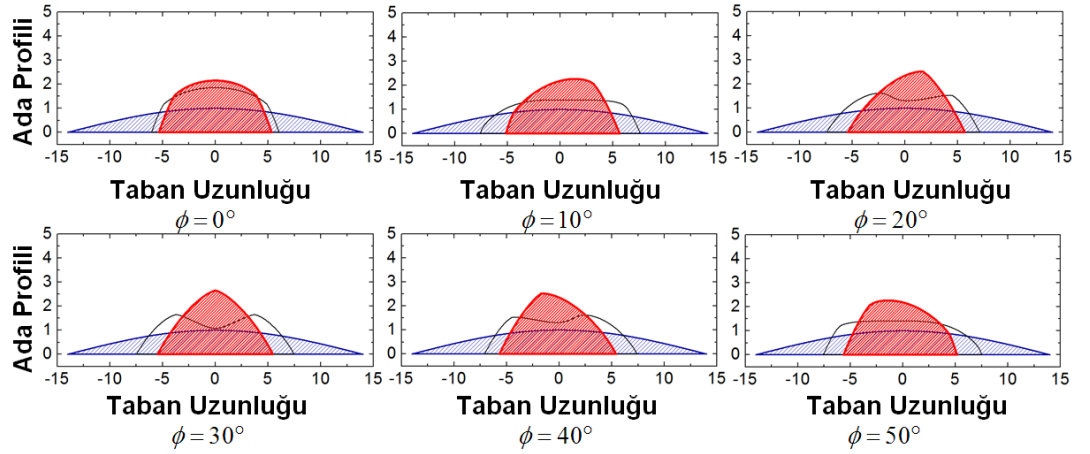
$$\bar{\delta} = 0.005, f_s = 1.2, \text{ ve } f_d = 1.$$

Şekil 3.17’de {110} kristal düzleminde ($m=1$) içsel gerilmelerin olmadığı sistemler için farklı kristal eğimleri (tilt angle) altında yapılan simülasyonlar sonucunda elde edilen denge morfolojileri verilmiştir. Kristal eğimine göre sistem y-ekseni simetrisini kaybederek belirli yönlere doğru deformasyona uğramaktadır. Bu kristal sistemi YMK sistemlerde 2 katlı (2-fold) bir simetri içermektedir. Bu nedenle sistem $0-180^\circ$ aralığında 30° ’lik artırımlar ile taranmıştır. Sistemin kristal eğiminin (tilt angle) 90° olduğu durumda daha sivri (yüksek height to width ratio) ve keskin hatlara sahip adacıklar oluştuğu görülmektedir.

Benzer deneyler, Şekil 3.18’de {100} kristal düzlemi ($m=2$) için Şekil 3.19’da ise {111} kristal düzlemi ($m=3$) için yapılmıştır. Bu kristal sistemleri YMK sistemlerde sırası ile 4 katlı (4-fold) ve 6 katlı (6-fold) bir simetri içermektedir. Bu nedenle 1. kristal sistemi, $0-90^\circ$ aralığında 15° ’lik artırımlar ve 2. kristal sistemi ise $0-60^\circ$ aralığında 10° ’lik artırımlar ile taranmışlardır.



Şekil 3.18. $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) kristal eğiminin KN final morfolojisine etkileri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $B = 0.14$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$.



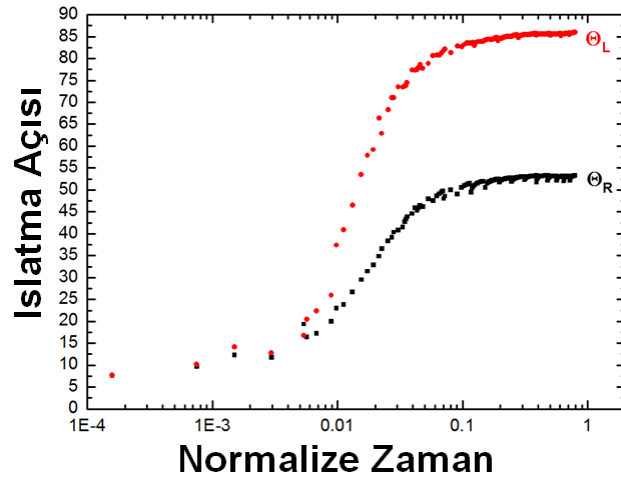
Şekil 3.19. $\{111\}$ kristal düzleminde ($m=3$) kristal eğiminin KN final morfolojisine etkileri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0$, $B = 0.05$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $f_s = 1.2$, ve $f_d = 1$.

Şekil 3.18 ve Şekil 3.19’da ise $\{100\}$ kristal düzlemi ($m=2$) için kritik kristal eğiminin (tilt angle) 45° olduğu ve $\{111\}$ kristal düzleminde ($m=3$) ise kritik kristal eğiminin (tilt angle) 30° olduğu bulunmuştur. Bu durumda, daha sivri (yüksek en boy

oranı) ve keskin hatlara sahip adacıklar oluşturabilmek için kristalin en düşük enerjiye sahip yönünün x -ekseni ile çıkışacak şekilde yerleştirilmesi gerektiği bulunmuştur.

Şekil 3.17-Şekil 3.19'da farklı kristalografik sistemlerde oluşan kristal yönleri (faset) gözlenmektedir. Sistemdeki yüzey enerjisinin y -eksenine göre simetrik olmadığı durumlarda beklendiği gibi oluşan KN'ler de simetrik olmamaktadır. Bu durumda KN'lerin altlık ile oluşturduğu ıslatma açısı da sağ ve sol taraf için simetrik olmayıp farklı değerlerde dengeye gelmektedir.

Buna örnek olarak $\{110\}$ kristal yönünün x -eksenine göre saat yönüne ters yönde 30° döndürülmesi sonucunda başlangıçta tamamen simetrik olan damlacığın morfolojik değişimi sonucu sağ ve sol ıslatma açılarının dengeye gelme kinetikleri verilmiştir (Şekil 3.20). Beklendiği gibi yüzey enerjisinin yönselliği etkisi ile sağ ve sol açılar farklı değerlerde dengeye ulaşmıştır.

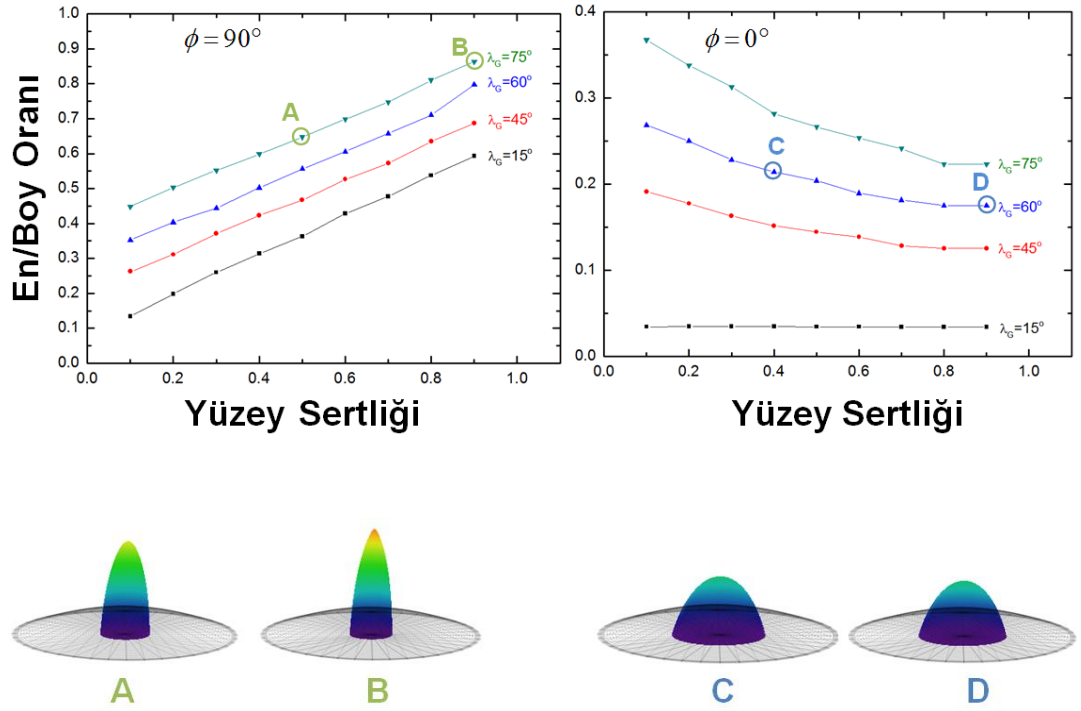


Şekil 3.20. $\{110\}$ kristal düzleminde ($m=1$) $\phi=30^\circ$ kristal eğimi için KN'nin yüzey ile yaptığı ıslatma açılarının evrimi.

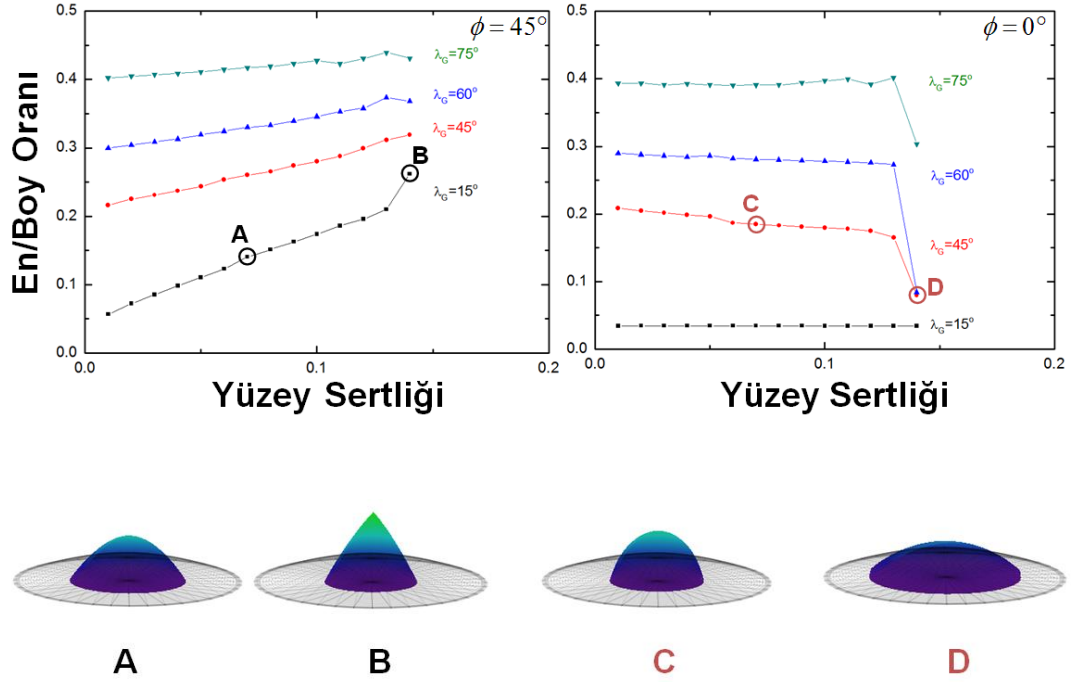
Bu deneyler ile gösterildiği şekilde, yüzey sertliği parametresi KN'lerin final en/boy oranlarını (aspect ratio) ve yüzeylerini oluşturan kristal yönleri (faset) kontrol

etmemizi sağlamaktadır. KN'lerde elektronik bant yapıları (band gap); en/boy oranına ve şekillerine (küresel, piramit, v.b. gibi) bağlıdır.

Yüzey sertliği parametresinin etkilerini gösterebilmek için farklı kristal sistemlerde deneyler yapılmıştır ve sonuçları aşağıda verilerek tartışılmıştır.

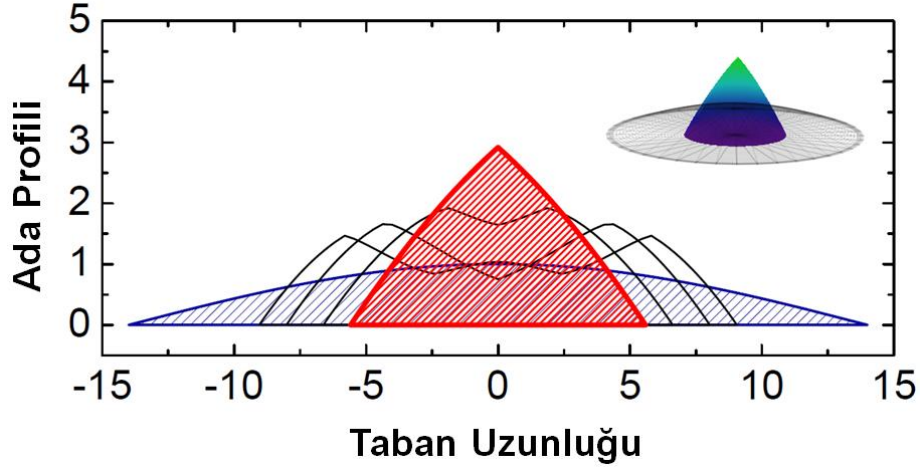


Şekil 3.21. {110} kristal düzleminde ($m=1$) $\phi = 90^\circ$ (sol üst) ve $\phi = 0^\circ$ (sağ üst) kristal eğimi için KN'lerin final morfolojilerinin farklı yüzey sertlikleri için en/boy oranları. Altta ise KN'ler için denge morfolojisi örnekleri verilmiştir.



Şekil 3.22. $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi = 45^\circ$ (sol üst) ve $\phi = 0^\circ$ (sağ üst) kristal eğimi için KN'lerin final morfolojilerinin farklı yüzey sertlikleri için en/boy oranları. Alttan ise KN'ler için denge morfolojisi örnekleri verilmiştir.

Şekil 3.21 ve Şekil 3.22 incelendiği zaman yüzey sertliği ve kristal eğimi değiştirilerek, yarı küresel KN'lerden piramit şekilli KN'lere kadar farklı yapılarda KN elde edebildiğimiz görülmektedir. Özellikle Şekil 3.22'de kristal eğimi $\phi = 45^\circ$ ve ıslatma denge açısı 15° olduğunda yüzey sertliği parametresinin kritik bir değeri aşması sonucunda sistem normal davranışının dışına çıkarak hızla keskin hatlar oluşturmaktadır (faset) ve bu hatlarını koruyarak Şekil 3.23'te gösterilen morfolojik değişimi yapmaktadır.

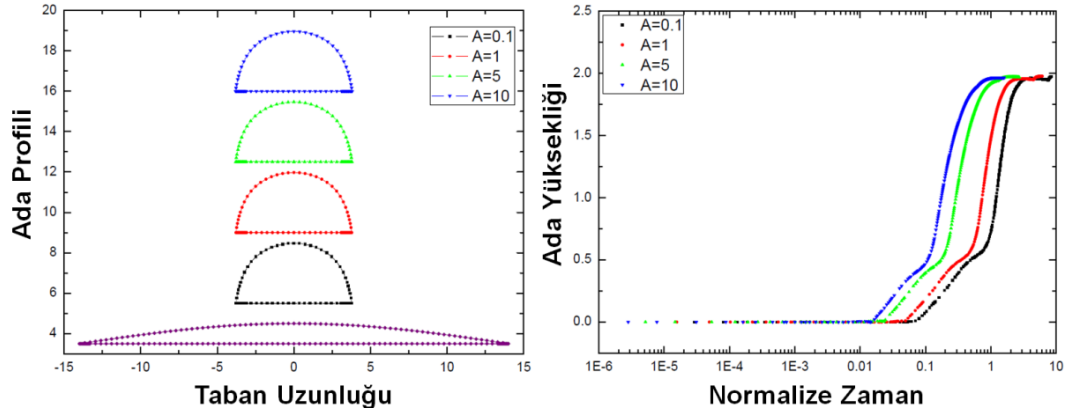


Şekil 3.23. $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi=45^\circ$ kristal eğimi için yüzey sertliği parametresi, $B=0.14$ olarak seçildiğinde, tek damlacığın piramit şekilli KN'ye evrimi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma=0$, $\beta=28$, $M_g=0.1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.

Şekil 3.23'te gösterilen morfolojik değişim sonucunda yüzey sertliği parametresinin kritik bir değeri aşması sonucunda sistemin hızla keskin hatlar oluşturduğu (faset) ve bu hatlarını koruyarak denge konumuna geldiği gösterilmiştir. Bu literatür bölümünde verilen piramit şekilli kuantum noktaların oluşumlarının anlaşılmasına yardımcı olacak önemli bir bulgudur.

Yukarıda bahsettiğimiz gibi kristal yönselliğine bağlı olan bir başka parametre de Denklem 3.1 ile tanımlanan yüzey difüzyonunun yön bağımlılığıdır. Yüzey difüzyonunun yöne bağlı şiddetinin etkilerini görebilmek için Denklem 3.1 ile tanımlanan difüzyon yönsellik şiddetini belirleyen A parametresi değiştirilerek deneyler yapılmıştır.

Deneyler sonucunda A parametresindeki artışın en azından bizim deney yaptığımız parametre uzayında KN final morfolojisi üzerinde bir etkisinin olmadığı ancak final morfolojiye ulaşma kinetiğini arttırdığı gözlenmiştir. Bu etki Şekil 3.24'de gösterilmiştir.



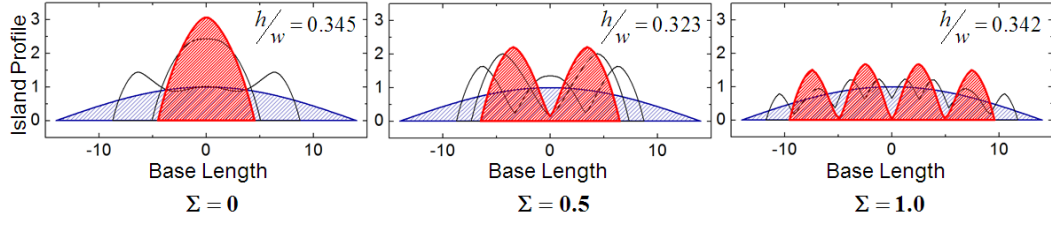
Şekil 3.24. Difüzyon yönsellik şiddetini belirleyen A parametresinin adacık morfolojik değişimine etkileri.

Şekil 3.24'de verilen normalize zaman - ada yüksekliği grafiği incelendiğinde, difüzyon yönsellik şiddetinin final morfoloji üzerinde etkili olmadığı ancak bu değerlerin sistemin dengeye ulaşma hızını etkilediği ortaya çıkmıştır. Difüzyon yönsellik şiddetinin değeri arttıkça sistemin daha hızlı bir şekilde dengeye geldiği gözlenmiştir. Bu katsayının sistem kinetiğini yüzey difüzyonunu artırarak hızlandırdığı görülmektedir.

3.3.3.2 İçsel Gerilimlere Sahip Anizotropik Sistemler

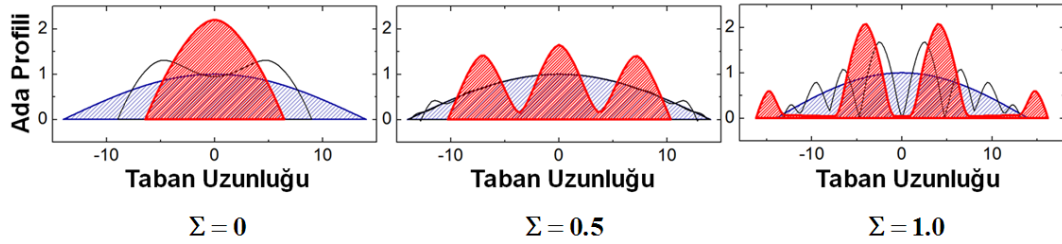
Buraya kadar yapılan deneylerde kristal yön bağımlılığını içsel gerilim içermeyen sistemler için inceledik. Bu bölümde yapılan deneylerde ise, anizotropik malzeme özelliklerinin sistem gelişimine etkileri içsel gerilimler altında incelenmiştir.

Şekil 3.25'te yönsellik etkileri gerilim (stress) altında $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi=45^\circ$ eğimine sahip kristal sisteminde incelenmiştir. Farklı gerilim değerlerinde yapılan deneyler gerilim artışı ile beraber damlacıkların parçalandığı gözlenmiştir.

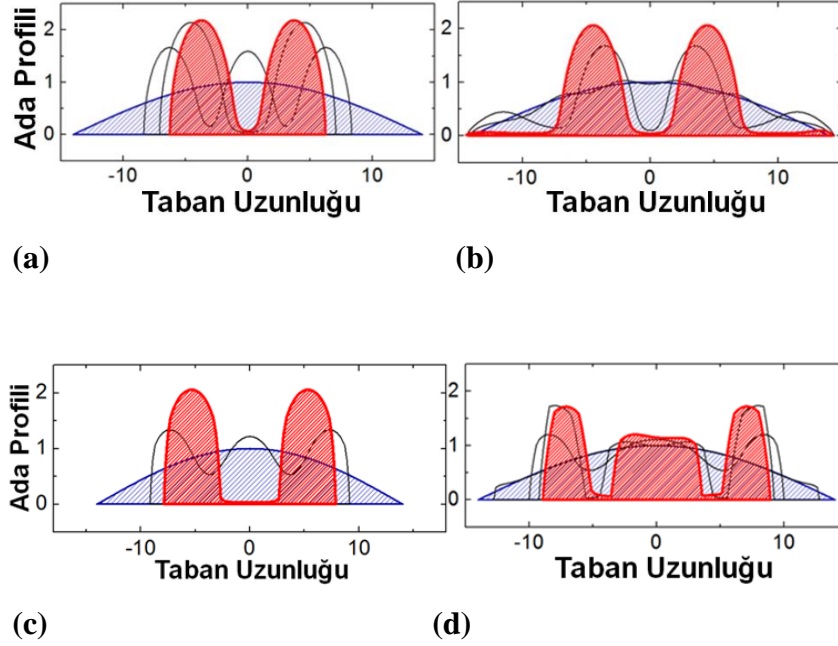


Şekil 3.25. $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi=45^\circ$ eğimine sahip kristal sisteminde gerilime bağlı adacık gelişimleri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Theta=60^\circ$, $B=0.1$, $A=2$, $\beta=28$, $M_g=0.1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.

Parçalanma sayısı uygulanan gerilim ile artmaktadır. Şekil 3.25'te oluşan adacıkların (kuantum noktalar) en/boy oranları incelendiğinde, başlangıçtaki damlacıkların parçalanmasına rağmen oluşturdukları yeni adacıklarda, neredeyse sabit kaldığı gözlenmiştir. Benzer bir deney, farklı bir ıslatma denge açısı, $\Theta=15^\circ$, kullanarak yapıldığında ise, kritik bir gerilim değerinin üzerinde adacık parçalanması gözlenmiş ama oluşan adacık sayılarında ve oluşan ıslatma katmanlarının özelliklerinde değişiklikler gözlenmiştir (Şekil 3.26).



Şekil 3.26. $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi=45^\circ$ eğimine sahip kristal sisteminde gerilime bağlı adacık gelişimleri. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Theta=15^\circ$, $B=0.1$, $A=2$, $\beta=28$, $M_g=0.1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.

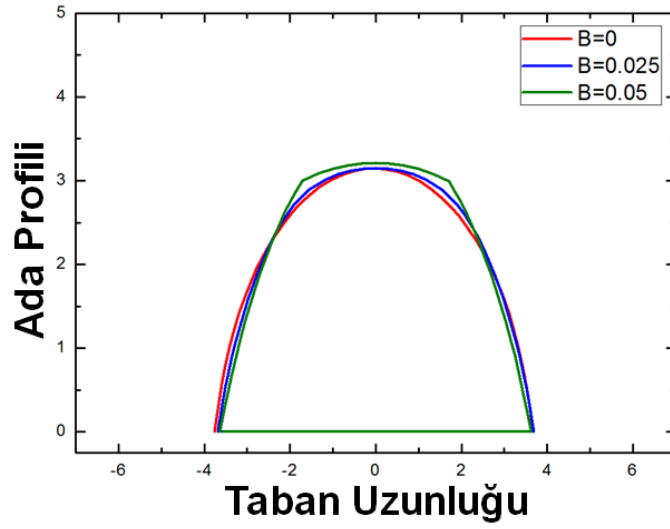


Şekil 3.27. Gerilim altında yönsel sistemlerde kuantum nokta oluşumları. Bu simülasyonlarda kullanılan deney parametreleri: $\beta=28$, $M_g=0.1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $f_s=1.2$ ve $f_d=1$; (a): $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi=0^\circ$ eğimine, $\Sigma=1$, $B=0.01$, $A=2$ (b): $\{110\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi=0^\circ$ eğimine $\Sigma=1$, $B=0.1$, $A=2$ (c): $\{111\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi=0^\circ$ eğimine $\Sigma=1$, $B=0.05$, $A=2$ (d): $\{100\}$ kristal düzleminde ($m=2$) $\phi=0^\circ$ eğimine $\Sigma=1$, $B=0.1$ $A=2$

Yönsel özelliklere sahip malzemelerde gerilim altında adacık davranışları çok karmaşık olup farklı sistemler için bu davranış örnekleri Şekil 3.27 ile gösterilmiştir. Bu şekil incelendiğinde malzeme özellikleri ayarlanarak birbirinden çok iyi tanımlanmış bir ıslatma katmanı ile ayrılan kararlı kuantum noktalarının oluşturulabileceği gösterilmiştir.

Bu noktada anisotropic malzeme özelliklerinden yüzey sertliğinin iç gerilimlerin olduğu bir sitemde ada parçalanmasına ve faset oluşumuna etkileri 3 farklı kristal düzleminde incelenmiştir.

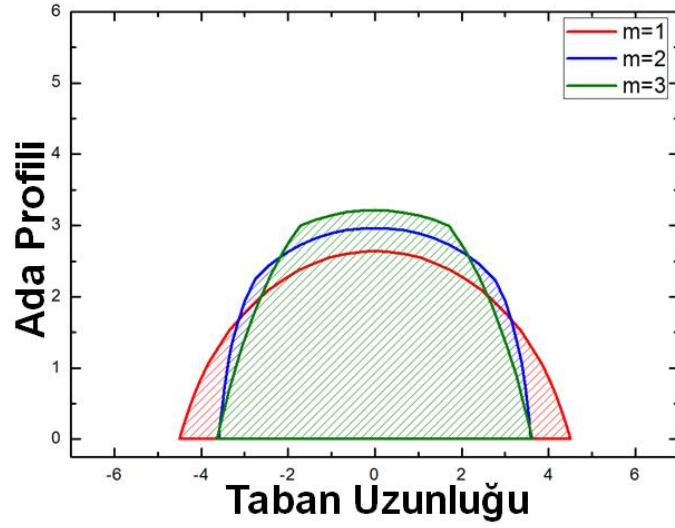
Şekil 3.28'de $\{111\}$ kristal düzleminde ($m=3$) $\phi=0$ kristal eğimine sahip damlacıkların farklı B parametreleri altında ulaştıkları denge morfolojileri verilmiştir. Yüzey sertliği değerinin sıfır olması durumu aslında izotropik duruma denk gelmektedir ve bu durumda KN yüzeyinde herhangi bir faset oluşmadığı gözlenmektedir. Yüzey sertliği değerlerinin arttırılması durumunda ise düzgün yüzlü (fasetleri olan) bir KN morfolojisi elde edildiği görülmüştür.



Şekil 3.28. $\{111\}$ kristal düzleminde ($m=3$) $\phi=0^\circ$ kristal eğimi için KN'lerin final morfolojilerinin farklı yüzey sertlikleri altında gelişimi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma=0.5$, $\beta=28$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $\lambda_g=0.259$, $A=0$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.

Malzemelerin yüzey sertliğinin KN'lerin şeklini değiştirdiği literatür bölümünde anlatıldığı gibi deneysel olarak gösterilmiştir. Burada yapmış olduğumuz simülasyonlar genel hatları ile faset oluşumunun kaynağını net bir şekilde ortaya çıkarmıştır.

Şekil 3.29'da ise $\{101\}$, $\{100\}$ ve $\{111\}$ kristal düzlemlerinde ($m=1, 2$ ve 3) damlacığın simülasyon sonucunda ulaştığı denge morfolojileri gösterilmektedir.



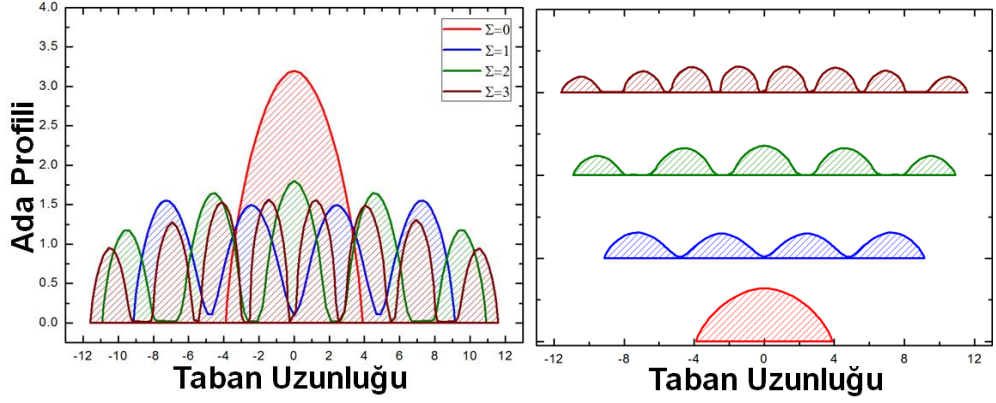
Şekil 3.29. $\{101\}$, $\{100\}$ ve $\{111\}$ kristal düzlemlerinde ($m=1, 2$ ve 3) $\phi = 0^\circ$ kristal eğimi için KN'lerin final morfolojileri.

Malzemenin kaç katlı simetriye sahip olduğu, KN morfolojisini ve yüzeyde fasetler oluşmasını etkilemektedir. Şekil 3.29'da sonuçları verilen deneylerde 2-katlı, 4-katlı ve 6-katlı simetriye sahip sistemler için aynı parametreler ile simülasyonlar yapılmış ve 2-katlı simetride faset oluşumu net olarak görülmezken 4 ve 6-katlı simetride beklendiği şekilde düzgün yüzlü yapıların oluşumu gözlenmiştir.

Geliştirmiş olduğumuz program oldukça kapsamlı olup, birçok farklı gerçek malzeme özelliklerinin çalışılması için uygun bir platform ortaya çıkmıştır. İçsel gerilmelerin etkilerini daha iyi analiz edebilmek için $\{100\}$ kristal düzlemlerinde ($m=2$, 4-katlı simetri) farklı gerilim değerlerinin KN'lerin final morfolojilerine etkileri geniş bir aralıkta incelenmiştir $0 \leq \Sigma \leq 3$.

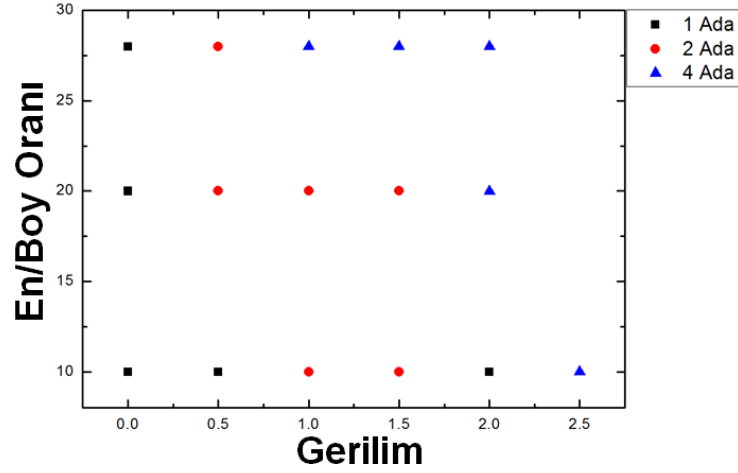
Sonuçlar Şekil 3.30'da iki farklı şekilde sunulmaktadır. Sol tarafta denge şekilleri üst üste gelecek şekilde (superimposed) gösterilirken sağ tarafta ise ayrı ayrı gösterilmiştir. Malzemede oluşan gerilim sonucu biriken enerji malzeme yüzeyinde oluşan adalar ve bölünmeler şeklinde harcanmaktadır. Bu sebepten artan gerilim değeri ile orantılı olarak ada sayısının artması beklenmektedir. Bu deneyler

sonucunda gerilimin sıfır olması durumunda tek adacık oluştuğu, gerilimin artırılması sonucu oluşan ada sayısının arttığı ve Stranski-Krastanow büyümesinde tipik olarak görülen adaların birbirine ince bir ıslatma katmanı ile bağlı olması durumu gözlenmiştir.



Şekil 3.30. {100} kristal düzlemlerinde ($m=2$) farklı gerilim değerlerinin KN'lerin final morfolojilerine ve oluşan ada sayısına etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\beta=28$, $M_g=1$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $\lambda_g=0.259$, $A=10$, $B=0.05$, $\phi=0$, $f_s=1.2$, ve $f_d=1$.

Şekil 3.30'da gözlenen ada bölünmeleri içsel gerilmeler ile kontrol edilebileceği gibi aynı zamanda damlacığın başlangıç koşullarına yani başlangıç en/boy oranına da bağlıdır. Bu durumu analiz etmek için farklı içsel gerilim değerlerinde ve farklı başlangıç en/boy oranları ile {100} kristal düzlemlerinde ($m=2$) deneyler yapılmıştır (Şekil 3.31).

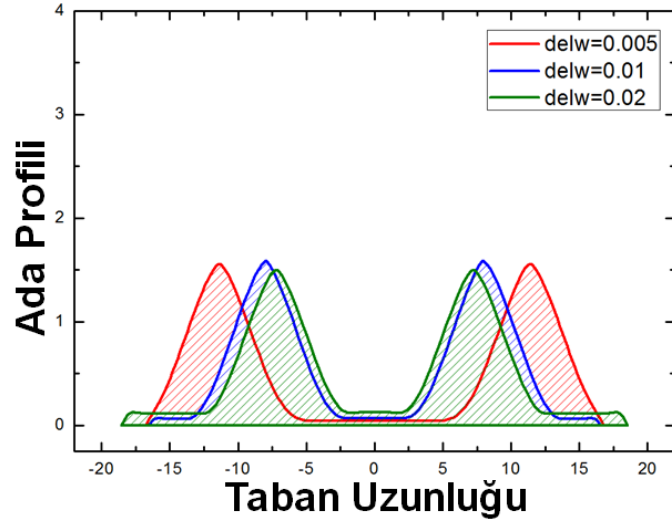


Şekil 3.31. {100} kristal düzlemlerinde ($m=2$) farklı gerilim değerlerinde oluşan ada sayıları için faz diyagramı. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $M_g=1$, $\nu=0.3$,

$$\bar{\delta} = 0.005, \lambda_g = 0.5, A = 2, B = 0.1, \phi = 45, f_s = 1.2 \text{ ve } f_d = 1$$

Şekil 3.31 aslında en/boy oranına ve içsel gerilimlere bağlı olarak adacık evrimini belirten bir faz diyagramıdır. Bu faz diyagramından da anlaşılacağı üzere, içsel gerilimlerin artması ile başlangıç en/boy oranının artması sistemde benzer etkiler göstermekte ve sonuçta oluşan adacık sayıları artmaktadır.

Buraya kadar yaptığımız deneylerde, ıslatma katmanında kullanılan $\bar{\delta}$ parametresinin etkisi tartışılmamıştır. Bu parametre sistemde oluşan ıslatma katmanının kalınlığını kontrol etmektedir. Bu denge kalınlığının etkilerini gözlemek için yapılan bir seri deney sonucu Şekil 3.32'de sunulmuştur.

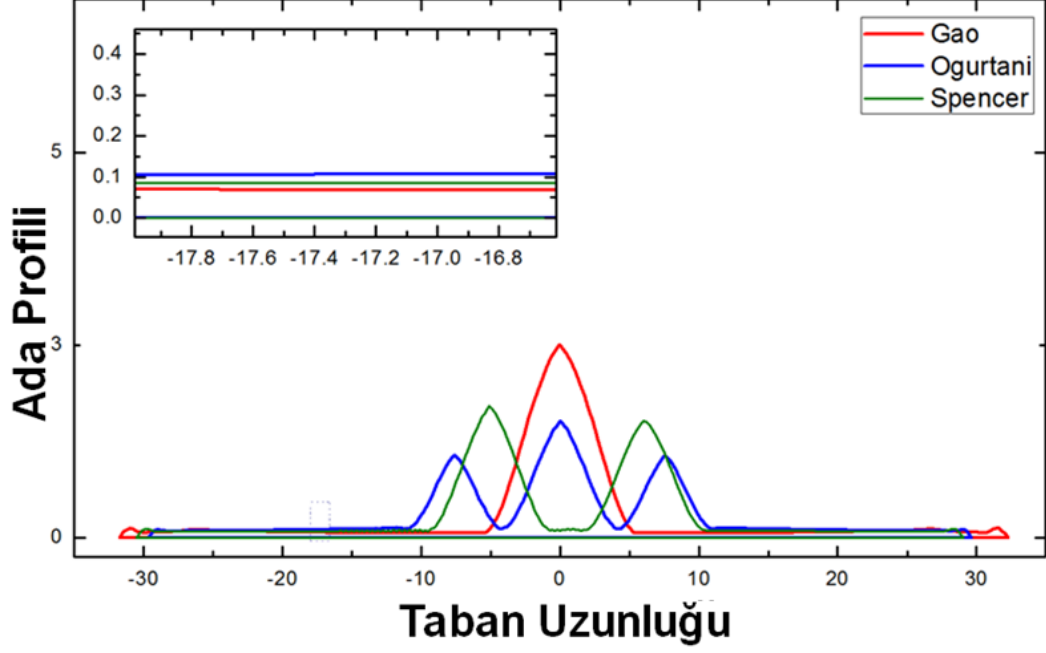


Şekil 3.32. {111} kristal düzlemlerinde ($m=3$) farklı ıslatma potansiyeli değerlerinin KN'lerin ıslatma katmanı oluşumuna ve kalınlığına etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0.4$, $M_g = 2$, $\nu = 0.3$, $\lambda_g = 1.1375$, $A = 0$, $B = 0.05$, $\phi = 30$, $f_s = 1.2$ ve $f_d = 1$.

Malzeme de oluşan gerilim enerjisi ile ıslatma potansiyeli malzemenin adalara bölünmesini ve ıslatma katmanı oluşmasını sağlamaktadır. ıslatma katmanı oluşumunun başlaması için belirli bir kritik ıslatma potansiyel değeri vardır ve bu değerden sonra ıslatma katmanı görülmeye başlanır. Şekil 3.32'de görüldüğü gibi simülasyonda ıslatma potansiyelinin etki alanının (altlık/film ara yüzeyinden yükseklik) değerinin küçük olması durumunda ıslatma katmanı sadece adacıklar arasında görülmüş, sistemdeki üçlü kavşaklardaki ıslatma açısı dinamiği ise adacıkların dış kenarlarında ıslatma katmanı oluşumunu engellemiştir. Potansiyelin etkili olduğu kalınlık artırıldıkça kararlı ıslatma katmanlarının hem adacıklar arasında hem de adacıkların dış kenarlarında oluştuğu gözlenmiştir.

Daha önce belirtildiği ve Şekil 3.12'de gösterildiği şekilde farklı ıslatma potansiyeli formülasyonları bulunmaktadır. Bu potansiyeller üzerinde hala bir konsensüs oluşmamıştır ve hangi sistemin hangi koşullarda daha doğru sonuçlar verdiğine dair

çalışmalar devam etmektedir. Burada sistemimize bahsi geçen 3 farklı ıslatma potansiyelini ekleyerek farklılıklarını inceledik.



Şekil 3.33. {111} kristal düzlemlerinde (m=3) farklı ıslatma potansiyeli formülasyonlarının ıslatma katmanına olan etkisi. Bu simülasyonda kullanılan deney parametreleri: $\Sigma = 0.4$, $M_g = 2$, $\nu = 0.3$, $\bar{\delta} = 0.005$, $\lambda_g = 1.1375$, $A = 0$, $B = 0.05$, $\phi = 30$, $f_s = 1.2$ ve $f_d = 1$.

Şekil 3.33'te bütün malzeme özellikleri aynı kalmak şartıyla sadece potansiyellerin tipleri değiştirilerek sistem üzerindeki etkileri gösterilmiştir. Kullanılan potansiyeller sistemi farklı denge konumlarına taşımışlar ve farklı ıslatma katmanları ve adacık sayı ve profilleri oluşturmuşlardır.

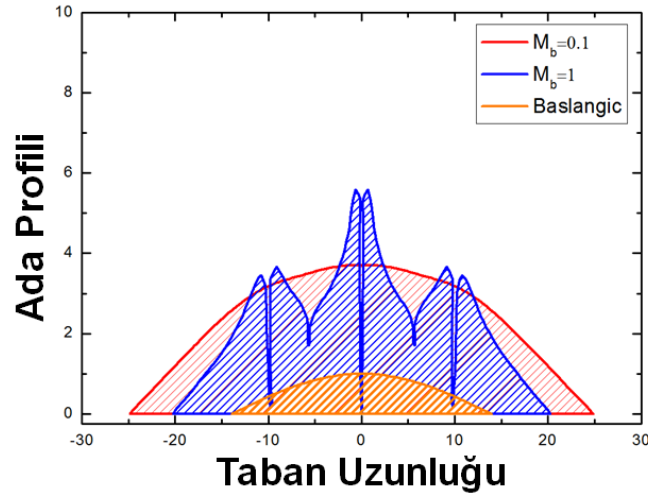
3.4 Sistemde Büyümenin Etkileri

Formül 2.1'de daha önce de belirtildiği gibi iki ana terim vardır: birinci terim yüzey sürüklenme difüzyonunu ifade ederken ikinci terim de büyüme ya da faz değişimi

(yoğuşma ve buharlaşma) kinetiğini ifade eder. \bar{M}_{dv} sıcaklık ve yüzey gerilimlerine bağlı olan normalize büyüme hareketliliğidir.

Literatürde yapılan çalışmalarda sistemin büyümesi için genellikle bir terim ile sistem genişletilmektedir (enlargement). İlk olarak [79], [80] tarafından geri dönüşümsüz termodinamik kullanılarak geliştirilmeye başlanan büyüme terimi sistemdeki elastostatik ve kapiler etkileri de içerecek şekilde programa entegre edilmiştir.

Sistemin büyüme hareketliliğinin etkilerini gözlemek için farklı değerler kullanılarak deneyler yapılmış ve Şekil 3.34'te sonuçlar verilmiştir.



Şekil 3.34. {111} kristal düzleminde (m=3) KN'lerin final morfolojilerinin farklı depoizasyon parametreleri için en/boy oranları. Bu simülasyonda kullanılan ortak deney parametreleri:

$$\Sigma = 0.1, \beta = 28, M_g = 2, \nu = 0.3, \bar{\delta} = 0.005, \lambda_g = 1.1375, A = 0, B = 0.14, \phi = 0, f_s = 1.2$$

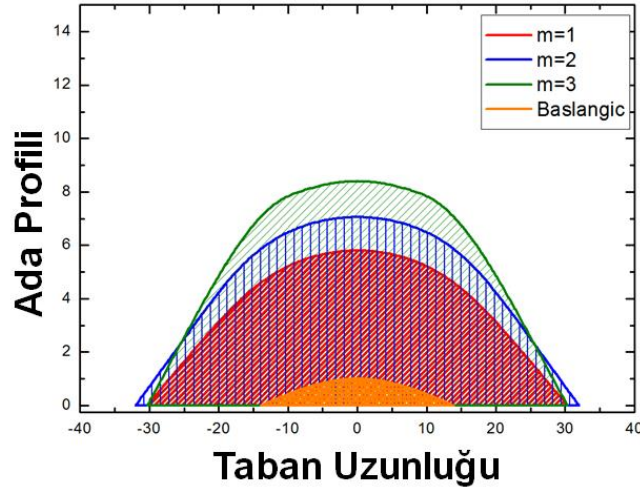
$$\text{ve } f_d = 1.$$

Şekil 3.34 incelendiğinde $M_b=0.1$ değeri için sistemin yoğuşma ile büyüyerek alanını (3 boyutta hacmini) arttırdığı gözlenmiştir. Aynı zamanda büyüme yüzeyde faset oluşumunu engellememiş ve beklendiği gibi sistem fasetlerini muhafaza ederek

büyümesini durdurmuştur. Aynı sistem daha hızlı bir büyüme hızı ile $M_b=1$ büyütüldüğünde ise sistemde ani çatlaklar oluştuğu gözlenmiştir. Bu çatlakların gerçek olup olmadığı yani bir sistem hatasından mı kaynaklandığı yapılacak çalışmalar ile ayrıca ortaya çıkarılacaktır.

Son olarak aynı malzeme ve kinetik parametreler kullanılarak yapılan büyüme deneylerinde kristal düzlemlerinin etkisi çalışılarak Şekil 3.35'te verilmiştir.

Malzemenin kaç katlı simetriye sahip olduğu, KN morfolojisini ve yüzeyde fasetler oluşmasını etkilemektedir. Şekil 3.29'da sonuçları verilen deneylere paralel olarak $M_b=0.1$ kullanılarak büyüme deneyleri yapılmıştır.



Şekil 3.35. Büyüme altında $\{101\}$, $\{100\}$ ve $\{111\}$ kristal düzlemlerinde ($m=1, 2$ ve 3) $\phi=0^\circ$ kristal eğimi için KN'lerin final morfolojileri. Bu simülasyonda kullanılan ortak deney parametreleri: $M_b=0.1$, $\Sigma=0.4$, $\beta=28$, $M_g=2$, $\nu=0.3$, $\bar{\delta}=0.005$, $\lambda_g=1.1375$, $A=0$,

$$B=0.14, \phi=0, f_s=1.2 \text{ ve } f_d=1.$$

Büyüme deneyleri sonucunda 2-katlı, 4-katlı ve 6-katlı simetriye sahip sistemler için aynı parametreler ile simülasyonlar yapılmış ve 2-katlı simetride faset oluşumu net

olarak görülmezken 4 ve 6-katlı simetride beklendiđi şekilde düzgün yüzlü yapıların (faset) oluşumu ve fasetlerin yapılarının korunarak büyümesi gözlenmiştir.

4. YORUM VE ÖNERİLER

Tez kapsamında, Ogurtani, Celik ve Oren [4, 5] tarafından kapsamı, ince film kalınlığı ve anizotropik Helmholtz serbest enerjisini de içerecek şekilde genişletilen, geri dönüşümsüz termodinamiğin mikro ayrık formülasyonu [77, 79] ile altlık üzerinde çekirdeklenmiş damlacıkların gerilim ve kapiler etkiler altında gelişimi ve kuantum nokta oluşumları modellenmiştir. Sistemi kontrol eden diferansiyel denklemler ile ilgili detaylı bilgi [77, 79] numaralı referanslarda verilmiştir.

Sistemin zamanla değişimini kontrol eden bu diferansiyel denklemler, 2-boyutlu sistemler için sayısal olarak MathCad ortamında çözümlenmiş ve geliştirilen bu algoritmalar C++ kodlama dili kullanılarak bir program haline getirilmiştir. Bu program ile sistemdeki yüzey pürüzünün başlangıç geometrisi ve malzeme özellikleri tanımlanarak sistemin morfolojik gelişiminin modellenmesi yapılarak yön bağımlı özelliklere sahip epitaksiyel ince filmlerin şekil değiştirme süreçleri ve SK adacıklarının oluşumları incelenmiştir.

Epitaksiyel ince filmlerin şekil değiştirme süreçlerinin ve Stranski-Krastanow adacıklarının (kuantum noktaların) oluşum kinetiklerinin anlaşılması ve kontrol edilebilmesi, bu tip adacıkların şeklinin dolayısı ile enerji bandı gibi elektronik özelliklerinin kontrolünü sağlayabilir. Bu nedenle kuantum noktaların teknolojik kullanımı açısından hangi malzeme sistemlerinde ve hangi koşullar altında oluştuklarının anlaşılması çok büyük öneme sahiptir.

Geliştirilen program öncelikle gerekli testlerden geçirilerek güvenilirliği kontrol edilmiş ve farklı malzeme özelliklerinin etkilerinin anlaşılabilmesi için gereken simülasyon deneyleri yapılmıştır. Bu çalışmalarda, film en/boy oranı, ıslanma parametresi, ara yüzey kalınlığı, damlacık ve altlık arasındaki yüzey enerjisi farklılıklarına bağlı denge açıların ve gerilimlerin damlacığın morfolojik gelişimi üzerindeki etkileri gibi farklı parametreler detaylı bir şekilde incelenmiştir. Deneyler sonucunda aşağıdaki sonuçlara ulaşılmıştır:

Yapılan deneyler sonucunda oluşan KN'lerin en/boy oranlarının gerilim artışı ile belirli bir aralıkta arttırılabileceği gösterilmiştir. Bu en/boy oranı değişimi tez içerisinde daha önce bahsedildiği gibi KN'lerin elektronik özelliklerinin değişimi anlamına gelmektedir. Uygulanan gerilimin daha da arttırılması durumunda ise sistemde parçalanma (fragmentation) olduğu görülmüştür. Ayrılan bu parçaların yine gerilim değerine bağlı olan bir ıslatma katmanı ile birbirlerine bağlı olduğu gözlenmiştir. Bu da literatürde Stranski-Krastonow adıyla anılan ince film büyüme moduna karşılık gelmektedir. Islatma katmanı KN'lerin birbirlerine bağlı olmasını sağlamaktadır ve bu adacıkların birbirine bağlı olması teknolojik açıdan (örneğin kuantum nokta içerisinde açığa çıkan foto-elektronların alınabilmesi sonucu yüksek verimli güneş pillerinin tasarlanması) son derece önemlidir.

Bu tez kapsamında istenen boyutta kuantum nokta üretimi için gerekli koşullar hakkında fikir elde edilmesini sağlayacak deneyler yapılmıştır. Bunlardan bir tanesi de ıslatma parametresi ile sistem içi gerilimlerin adacık parçalanması üzerine etkileridir. Artan gerilim ile adacık parçalanmasının (fragmentation) artmasının yanı sıra yüksek ve düşük ıslatma açılarında da (no wetting/perfect wetting) adacık parçalanması olduğu ortaya çıkarılmıştır.

Literatürdeki deneysel çalışmalardan da görüldüğü gibi sistemi kontrol eden malzeme özelliklerinin sistemin kristal yapısına bağlı olarak değiştiği yani anizotropik olduğu durumlar söz konusudur. Bu koşullar simülasyon programına entegre edilerek daha gerçekçi bir model geliştirilmiştir.

Deneysel sonucunda, damlacığın ıslatma açısının ve tepe yüksekliğini ve denge durumundaki adacığın en/boy oranı (aspect ratio) kontrol edilebilmek için yüzey enerjisi yönsellik şiddeti yani yüzey sertliğinin (surface stiffness) kullanılabileceği ortaya çıkmıştır. Bu durumda, daha sivri (yüksek height to width ratio) ve keskin hatlara sahip adacıklar oluşturabilmek için kristalin en düşük enerjiye sahip yönünün x -ekseni ile çakışacak şekilde yerleştirilmesi gerektiği bulunmuştur. Yüzey merkezli kübik (YMK) yapıları için bu değerler, $\{110\}$ kristal düzlemi ($m=1$) için

kritik kristal eğiminin (tilt angle) 90° , $\{100\}$ kristal düzlemi ($m=2$) için kritik kristal eğiminin (tilt angle) 45° ve $\{111\}$ kristal düzleminde ($m=3$) ise kritik kristal eğiminin (tilt angle) 30° olduğu bulunmuştur. Bu bilgi ile yüzeyde kristalleşen filmin kristalleşme yönü kontrol edilerek oluşacak kuantum noktaların en/boy oranlarını (aspect ratio) ve morfolojileri (küresel, piramit, v.b. gibi) kontrol edilebilmektedir.

Simülasyonlar sonucunda difüzyon yönsellik şiddeti değerinin sistemin dengeye ulaşma kinetiğini etkilediği fakat KN'lerin denge durumundaki morfolojileri üzerinde etkili olmadığı anlaşılmıştır. Sonuçlara göre difüzyon yönsellik şiddetinin değeri ile sistemin dengeye gelme hızı doğru orantılıdır.

Kuantum nokta gelişimini kontrol edilmesinde kullanılabilecek bir başka sonuç ise en/boy oranına ve içsel gerilimlere bağlı olarak adacık evrimini belirten faz diyagramıdır. Bu faz diyagramı, içsel gerilimlerin artması ile başlangıç en/boy oranının artmasının sistemde benzer etkiler gösterdiğini ve sonuçta oluşan adacık sayılarını arttırdığını göstermiştir.

Malzemede oluşan gerilim enerjisi ile ıslatma potansiyeli malzemenin adalara bölünmesini ve ıslatma katmanı oluşmasını sağlamaktadır. Islatma katmanı oluşumunun başlaması için belirli bir kritik ıslatma potansiyel değeri olduğu deneylerle ortaya çıkarılmıştır. Islatma potansiyelinin etki alanının (altlık/film ara yüzeyinden yükseklik) değerinin küçük olması durumunda ıslatma katmanı sadece adacıklar arasında oluşurken potansiyelin etkili olduğu kalınlık artırıldıkça kararlı ıslatma katmanlarının hem adacıklar arasında hem de adacıkların dış kenarlarında oluştuğu gözlenmiştir.

Tez kapsamında çözülen diferansiyel denklemlerde bulunan büyüme terimi sistemdeki elastostatik ve kapiler etkileri içermektedir. Sistemdeki büyümenin etkisi görmek amacıyla deneyler yapılmış ve faset oluşumu ve adacık büyümesi gözlemlenmiştir. Deneyler sonucunda 2-katlı, 4-katlı ve 6-katlı simetriye sahip sistemler için 2-katlı simetride faset oluşumu net olarak görülmezken 4 ve 6-katlı

simetride faset oluşumu ve fasetlerin şekillerini koruyarak büyümesi gözlenmiştir. Literatürdeki deneysel çalışmalar ile karşılaştırıldığında simülasyon sonuçlarının deneysel olarak üretilen kuantum noktaların yüzeylerinde oluşan fasetler ile uyumlu olduğu görülmektedir.

Sonuç olarak, ince filmlerde çekirdeklenme sonucu oluşan KN'lerin morfolojik evriminin sistemin içsel gerilim değerlerine, film/altlık sisteminin denge ıslatma açısına, sistemin başlangıç koşuluna, kristalografik düzlem ve yönlere, yüzey sertliğine bağlı olduğu yapılan simülasyonlar sonucunda gösterilmiştir. Bu bilgiler kuantum nokta oluşumu için yeni fabrikasyon tekniklerinin geliştirilmesi ve dolaylı olarak yeni cihazların tasarlanması için gerekli bilimsel altyapının sağlanması açısından çok önemlidir.

Son olarak, tez çalışmaları sonucunda çalışmanın daha da geliştirilmesi için gereken adımlar öngörülmuş ve gelecekteki çalışmalara yol göstermesi için öneri olarak sunulmuştur: Tez kapsamında kullanılan diferansiyel denklem geliştirilirken elektrogöçün (yani uygulanan elektrik alan altında madde difüzyonunun) malzeme büyümesi üzerine etkisi göz önüne alınmıştır. Ancak bu tez kapsamında bu etkiler göz önüne alınmamıştır. Gelecekte bu parametrenin de devreye sokulması sonucu oluşturulacak kapsamlı programlar ile, KN'lerin alttabaka üzerinde hareketleri ve dolaylı olarak KN dizilimleri kontrol edilebilir. Bu mekanizmanın kontrol edilmesi KN'ler kullanılarak devre elemanı tasarlanmasını sağlayabilir. Ayrıca gelecekte yapılacak çalışmalarda, tez kapsamında ana hatları ile programa eklenen ve çalıştığı gösterilen büyüme etkisi (sisteme malzeme girişi) ayrıntılı bir şekilde incelenmeli ve KN'lerin son şekline etkileri bulunmalıdır. KN'ler için tez içerisinde anlatılan üç farklı potansiyelin (Spencer, Ogurtani ve Gao potansiyelleri) ıslatma katmanına etkisi daha ayrıntılı olarak incelenmeli ve KN'ler üzerindeki diğer etkileri bulunmalıdır. Tez çalışmaları sırasında kullanılan kodlar iki-boyutta sistem için geliştirilmiştir. Bu kodlar üç boyutlu sistemleri çözebilecek şekilde geliştirilmeli ve tez kapsamındaki deneyler bu yeni sistem içerisinde tekrarlanarak daha gerçekçi bir analiz yapılmalıdır.

KAYNAKLAR

- [1] M. A. Reed, J. N. Randall, R. J. Aggarwal, R. J. Matyi, T. M. Moore, A. E. Wetsel, "Observation of Discrete Electronic States in zero-Dimensional Semiconductor Nanostructure", *Phys Rev Lett*, 60 (6), 535-537 (1988).
- [2] D. Bimberg, U. W. Pohl, "Quantum Dots: Promises and Accomplishments", *Materials Today*, 14 (9), 388-397 (2011).
- [3] J. V. Barth, G. C. Costantini, K. Kern, "Engineering Atomic and Molecular Nanostructures at Surfaces", *Nature*, 437, 671-679 (2005).
- [4] T. O. Ogurtani, A. Celik, and E. E. Oren, "Morphological evolution in a strained-heteroepitaxial solid droplet on a rigid substrate: Dynamical simulations," *J. Appl. Phys.*, 108(6), 063527, 2010.
- [5] T. O. Ogurtani, A. Celik, and E. E. Oren, "Generic role of the anisotropic surface free energy on the morphological evolution in a strained-heteroepitaxial solid droplet on a rigid substrate," *J. Appl. Phys.*, 108(10), 103516, 2010.
- [6] A. Luque, "Will We Exceed 50% Efficiency in Photovoltaics?" *J. Applied Physics*, 110, 031301 (2011).
- [7] V. Popescu, G. Bester, M. C. Hanna, A. G. Norman, A. Zunger, "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).
- [8] G. Burkard, D. Loss, D. P DiVincenzo, "Coupled Quantum Dots as Quantum Gates", *Phys. Rev. B*, 59, 2070-2078 (1998).
- [9] O. Kumar, M. Kaur, "Single Electron Transistors: Applications & Problems", *Int. J. VLSI Design & Communication Systems*, 1, 24-29 (2010).
- [10] Y. Yin, A. P. Alivisatos, "Colloidal Nanocrystal Synthesis and the Organic-Inorganic Interface", *Nature*, 437, 664-670 (2005).
- [11] C. W. Snyder, B.G. Orr, D. Kessler, L. M. Sander, "Effect of Strain on Surface Morphology in Highly Strained InGaAs Flms", *Phys. Rev. Lett.*, 66 (23), 3032-3035 (1991).
- [12] D. Leonard, K. Pond, P. M. Petroff, P.M. "Critical Layer Thickness for Self-Assembled InAs Islands on GaAs", *Physical Review B*, 50 (16), 1-9 (1994).

- [13] J. Stangl, V. Holy, G. Bauer, "Structural Properties of Self-Organized Semiconductor Nanostructures", *Reviews of Modern Physics*, 76, 725-783 (2004). M.,
- [14] D.J.Eaglesham, M.,Cerullo "Dislocation-free Stranski-Krastanow Growth of Ge on Si(100)", *Phys. Rev. Lett.*, 64 (16), 1943-1946 (1990).
- [15] G. Wang, S., Fafard, D. Leonard, J. E. Bowers, J. L. Merz, P.M. Petroff, "Time Resolved Optical Characterization of InGaAs/GaAs Quantum Dots, *Appl. Phys. Lett.*, 64 (21), 2815-2817 (1994).
- [16] A. Golovin, M. Levine, T. Savina, and S. Davis, "Faceting instability in the presence of wetting interactions: A mechanism for the formation of quantum dots," *Phys. Rev. B*, 70(23), 235342, 2004.
- [17] W. T. Tekalign and B. J. Spencer, "Thin-film evolution equation for a strained solid film on a deformable substrate: Numerical steady states," *J. Appl. Phys.*, 102(7), 073503, 2007.
- [18] B. J. Spencer and J. Tersoff, "Symmetry breaking in shape transitions of epitaxial quantum dots," *Phys. Rev. B*, 87(16), 161301, 2013.
- [19] G. Tóth and C. S. Lent, "Quantum computing with quantum-dot cellular automata," *Phys. Rev. A*, 63 (5), 052315 (2001).
- [20] P. M. Petroff, A. Lorke, and A. Imamoglu, "Epitaxially Self-Assembled Quantum Dots," *Phys. Today*, 54 (5), 46 (2001).
- [21] D. Austing, H. Tamura, and Y. Tokura, "Single dot and strongly coupled double dots at high magnetic fields," *Phys. E*, 10, 112–116, 2001.
- [22] W. Lu, a. J. Rimberg, K. D. Maranowski, and a. C. Gossard, "Single-electron transistor strongly coupled to an electrostatically defined quantum dot," *Appl. Phys. Lett.*, 77(17), 2746, 2000.
- [23] E. S. Snow and P. M. Campbell, "AFM Fabrication of Sub-10-Nanometer Metal-Oxide Devices with in Situ Control of Electrical Properties," *Science* 270(5242), 1639–1641, Dec. 1995.
- [24] L. L. Chang, "Resonant tunneling in semiconductor double barriers," *Appl. Phys. Lett.*, 24(12), 593, 1974.
- [25] P. M. Petroff, "Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties," *Appl. Phys. Lett.*, 41(7), 635, 1982.

- [26] M. G. Bawendi, P. J. Carroll, W. L. Wilson, and L. E. Brus, "Luminescence properties of CdSe quantum crystallites: Resonance between interior and surface localized states," *J. Chem. Phys.*, 96(2), 946, 1992.
- [27] L. E. Brus, "Electron–electron and electron-hole interactions in small semiconductor crystallites: The size dependence of the lowest excited electronic state," *J. Chem. Phys.*, 80(9), 4403, 1984.
- [28] A. C. Warren, "Fabrication of sub-100-nm linewidth periodic structures for study of quantum effects from interference and confinement in Si inversion layers," *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanom. Struct.*, 4(1), 365, 1986.
- [29] M. F. Bertino, R. R. Gadipalli, L. a Martin, L. E. Rich, A. Yamilov, B. R. Heckman, N. Leventis, S. Guha, J. Katsoudas, R. Divan, and D. C. Mancini, "Quantum dots by ultraviolet and x-ray lithography," *Nanotechnology*, 18(31), 315603, 2007.
- [30] T. Ishikawa, T. Nishimura, S. Kohmoto, and K. Asakawa, "Site-controlled InAs single quantum-dot structures on GaAs surfaces patterned by in situ electron-beam lithography," *Appl. Phys. Lett.*, 76(2), 167, 2000.
- [31] R. L. Kubena, R. J. Joyce, J. W. Ward, H. L. Garvin, F. P. Stratton, and R. G. Brault, "Dot lithography for zero-dimensional quantum wells using focused ion beams," *Appl. Phys. Lett.*, 50(22), 1589, 1987.
- [32] A. Raviswaran, C.-P. Liu, J. Kim, D. Cahill, and J. Gibson, "Evolution of coherent islands during strained-layer Volmer-Weber growth of Si on Ge(111)," *Phys. Rev. B*, 63(12), 125314, 2001.
- [33] O. Kienzle, F. Ernst, M. Rühle, O. G. Schmidt, and K. Eberl, "Germanium 'quantum dots' embedded in silicon: Quantitative study of self-alignment and coarsening," *Appl. Phys. Lett.*, 74(2), 269, 1999.
- [34] T. Nishiguchi, M. Nakamura, K. Nishio, T. Isshiki, and S. Nishino, "Heteroepitaxial growth of (111) 3C–SiC on well-lattice-matched (110) Si substrates by chemical vapor deposition," *Appl. Phys. Lett.*, 84(16), 3082, 2004.
- [35] R. Asaro and W. Tiller, "Interface morphology development during stress corrosion cracking: Part I. Via surface diffusion," *Metall. Trans.*, 3, 5-8, 1972.
- [36] M. Grinfeld, "The Stress Driven Instability in Elastic Crystals : Mathematical Models and Physical Manifestations," *J. Nonlinear Sci.*, 3, 35–83, 1993.
- [37] D. Jesson, K. Chen, and S. Pennycook, "Mechanisms of Strain Induced Roughening and Dislocation Multiplication in SiGe Thin Films," *J. Electron.*, 26(9), 1997.

- [38] Y. Mo, D. Savage, B. Swartzentruber, and M. Lagally, “Kinetic Pathway in Stranski-Krastanov Growth of Ge on Si (001),” *Phys. Rev. Lett.*, 65(8), 1990.
- [39] J. Tersoff and F. LeGoues, “Competing Relaxation Mechanism in Strained Layers,” *Phys. Rev. Lett.*, 72(22), 3570–3574, 1994.
- [40] M. Tomitori, K. Watanabe, and M. Kobayashi, “Layered heteroepitaxial growth of germanium on Si (015) observed by scanning tunneling microscopy,” *Surf. Sci.*, 6028(113), 1994.
- [41] J. Floro, E. Chason, R. Twisten, R. Hwang, and L. Freund, “SiGe Coherent Islanding and Stress Relaxation in the High Mobility Regime,” *Phys. Rev. Lett.*, 79(20), 3946–3949, 1997.
- [42] D. Leonard, K. Pond, and P. Petroff, “Critical layer thickness for self-assembled InAs islands on GaAs,” *Phys. Rev. B*, 50(16), 1994.
- [43] F. Patella, F. Arciprete, M. Fanfoni, A. Balzarotti, and E. Placidi, “Apparent critical thickness versus temperature for InAs quantum dot growth on GaAs(001),” *Appl. Phys. Lett.*, 88(16), 161903, 2006.
- [44] N. Ledentsov, M. Grundmann, and N. Kirstaedter, “Luminescence and Structural Properties of (In,Ga)As/GaAs Quantum Dots,” *Proc. 22nd Int. Conf. Phys.*, 1994.
- [45] H. Ahmed, “Novel nanodevices for electronics: fabrication and characteristics,” *Microelectron. Eng.*, 62, 3–4, 2002.
- [46] P. Politi, G. Grenet, A. Marty, A. Ponchet, and J. Villain, “Instabilities in crystal growth by atomic or molecular beams,” *Phys. Rep.*, 324, 2000.
- [47] T. Wiebach, M. Schmidbauer, and M. Hanke, “Strain and composition in SiGe nanoscale islands studied by x-ray scattering,” *Phys. Rev. B*, 61(8), 5571–5578, 2000.
- [48] I. Berbezier, A. Ronda, and A. Portavoce, “SiGe nanostructures : new insights into growth processes,” *J. Phys.*, 8283, 2002.
- [49] P. Zhou, S. Wise, X. Li, and J. Lowengrub, “Coarsening of elastically stressed, strongly anisotropic driven thin films,” *Phys. Rev. E*, 85(6), 061605, 2012.
- [50] S. Lee, L. Wang, and W. Lu, “Formation of ordered nanodroplet chains on a solid surface by enhanced surface diffusion and shadow effect,” *Surf. Sci.*, 606(5), 659–663, 2012.
- [51] V. Zela, I. Pietzonka, T. Sass, C. Thelander, S. Jeppesen, and W. Seifert, “Unimodal dome-shaped island population of Ge/Si by step-wise growth in

- UHV-CVD,” *Phys. E Low-dimensional Syst. Nanostructures*, 13(2), 1013–1017, 2002.
- [52] F. Montalenti, P. Raiteri, D. Migas, H. von Känel, A. Rastelli, C. Manzano, G. Costantini, U. Denker, O. Schmidt, K. Kern, and L. Miglio, “Atomic-Scale Pathway of the Pyramid-to-Dome Transition during Ge Growth on Si(001),” *Phys. Rev. Lett.*, 93(21), 216102, 2004.
- [53] J.-M. Baribeau, X. Wu, N. L. Rowell, and D. J. Lockwood, “Ge dots and nanostructures grown epitaxially on Si,” *J. Phys. Condens. Matter*, 18(8), 139–174, 2006.
- [54] D. Eaglesham and M. Cerullo, “Dislocation-Free Stranski-Krastanov Growth of Ge on Si(100),” *Phys. Rev. Lett.*, 64(16), 15, 1943.
- [55] R. Hull, J. L. Gray, M. Kammler, T. Vandervelde, T. Kobayashi, P. Kumar, T. Pernel, J. C. Bean, J. a. Floro, and F. M. Ross, “Precision placement of heteroepitaxial semiconductor quantum dots,” *Mater. Sci. Eng. B*, 101(1), 1–8, 2003.
- [56] M. Shaleev, A. Novikov, and D. Yurasov, “Transition from the two-to three-dimensional growth of Ge films upon deposition onto relaxed SiGe/Si (001) buffer layers,” *Semiconductors*, 5(2), 12, 2013.
- [57] J. Berrehar, C. Caroli, C. Lapersonne-Meyer, and M. Schott, “Surface patterns on single-crystal films under uniaxial stress: Experimental evidence for the Grinfeld instability,” *Phys. Rev. B*, 46(20), 52, 1992.
- [58] M. Grinfeld, “Instability of the separation boundary between a nonhydrostatically stressed elastic body and a melt,” *Sov. Phys. Dokl.*, 831, 198, 1986.
- [59] D. Srolovitz, “On the stability of surfaces of stressed solids,” *Acta Metall.*, 37(2), 621–625, 1989.
- [60] Y. Zhang and A. Bower, “Numerical simulations of island formation in a coherent strained epitaxial thin film system,” *J. Mech. Phys. Solids*, 47, 2273–2297, 1999.
- [61] Y. W. Zhang and a. F. Bower, “Three-dimensional analysis of shape transitions in strained-heteroepitaxial islands,” *Appl. Phys. Lett.*, 78(18), 2706, 2001.
- [62] A. Golovin, M. Levine, T. Savina, and S. Davis, “Faceting instability in the presence of wetting interactions: A mechanism for the formation of quantum dots,” *Phys. Rev. B*, 70(23), 235342, 2004.

- [63] W. T. Tekalign and B. J. Spencer, “Evolution equation for a thin epitaxial film on a deformable substrate,” *J. Appl. Phys.*, 96(10), 5505, 2004.
- [64] W. T. Tekalign and B. J. Spencer, “Thin-film evolution equation for a strained solid film on a deformable substrate: Numerical steady states,” *J. Appl. Phys.*, 102(7), 073503, 2007.
- [65] H. Hu, H. Gao, and F. Liu, “Quantitative Model of Heterogeneous Nucleation and Growth of SiGe Quantum Dot Molecules,” *Phys. Rev. Lett.*, 109(10), 106103, 2012.
- [66] G. Vastola, Y.-W. Zhang, and V. B. Shenoy, “Experiments and modeling of alloying in self-assembled quantum dots,” *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, 16(2), 64–70, 2012.
- [67] C. Gamage and Z. Huang, “Nonlinear dynamics of island coarsening and stabilization during strained film heteroepitaxy,” *Phys. Rev. E*, 522(5), 15, 2013.
- [68] P. Gaillard, J. Aqua, and T. Frisch, “Kinetic Monte Carlo simulations of the growth of silicon germanium pyramids,” *Phys. Rev. B*, 61(20), 54, 2013.
- [69] X. Xu, J. Aqua, and T. Frisch, “Growth of a strained epitaxial film on a patterned substrate,” *Comptes Rendus Phys.*, 46(20), 52, 2013.
- [70] V. Tokar and H. Dreyssé, “Nucleation of size calibrated three-dimensional nanodots in atomistic model of strained epitaxy: a Monte Carlo study,” *J. Phys. Condens. Matter*, 6(2), 17, 2013.
- [71] B. J. Spencer and J. Tersoff, “Symmetry breaking in shape transitions of epitaxial quantum dots,” *Phys. Rev. B*, 87(16), 161301, 2013.
- [72] K. a. Lozovoy, A. V. Voytsekhovskiy, A. P. Kokhanenko, and V. G. Satdarov, “Comparative analysis of pyramidal and wedge-like quantum dots formation kinetics in Ge/Si(001) system,” *Surf. Sci.*, 619, 1–4, 2014.
- [73] X. Xu and J.-N. Aqua, “Quantum dot growth on a stripe-pattern,” *Thin Solid Films*, 543, 7–10, 2013.
- [74] J. Hernández-Saz, M. Herrera, S. Latinas, and S. I. Goet, “Strain analysis for the prediction of the preferential nucleation sites of stacked quantum dots by combination of FEM and APT.,” *Nanoscale Res. Lett.*, 8(1), 513, 2013.
- [75] V. V. Kuryliuk and O. a. Korotchenkov, “Features of the stress-strain state of Si/SiO₂/Ge heterostructures with germanium nanoislands of a limited density,” *Semiconductors*, 47(8), 1031–1036, 2013.

- [76] T. O. Ogurtani, “Mesoscopic nonequilibrium thermodynamics of solid surfaces and interfaces with triple junction singularities under the capillary and electromigration forces in anisotropic three-dimensional space,” *J. Chem. Phys.*, 124(14), 144706, 2006.
- [77] T. O. Ogurtani and E. E. Oren, “Irreversible thermodynamics of triple junctions during the intergranular void motion under the electromigration forces,” *Int. J. Solids Struct.*, 42(13), 3918–3952, 2005.
- [78] R. V. Kukta and L. B. Freund, “Minimum energy configuration of epitaxial material clusters on a lattice-mismatched substrate,” *J. Mech. Phys. Solids*, 45(11), 1835–1860, 1997.
- [79] T. O. Ogurtani and E. E. Oren, “Computer simulation of void growth dynamics under the action of electromigration and capillary forces in narrow thin interconnects,” *J. Appl. Phys.*, 90(3), 1564, 2001.
- [80] T. O. Ogurtani and E. E. Oren, “Electromigration-induced void grain-boundary interactions: The mean time to failure for copper interconnects with bamboo and near-bamboo structures,” *J. Appl. Phys.*, 96 (12), 7246, 2004.
- [81] O. Akyildiz, E. E. Oren, and T. O. Ogurtani, “Mesoscopic nonequilibrium thermodynamics treatment of the grain boundary thermal grooving induced by the anisotropic surface drift diffusion,” *J. Mater. Sci.*, 46(18), 6054–6064, 2011.
- [82] W. T. Tekalign and B. J. Spencer, “Evolution equation for a thin epitaxial film on a deformable substrate,” *J. Appl. Phys.*, 96(10), 5505, 2004.
- [83] H. Gao and W. Nix, “Surface roughening of heteroepitaxial thin films,” *Annu. Rev. Mater. Sci.*, 173–209, 1999.
- [84] C. Ozkan, W. Nix, and H. Gao, “Stress-driven surface evolution in heteroepitaxial thin films: Anisotropy of the two-dimensional roughening mode,” *J. Mater. Res.*, 14(3), 87, 1999.
- [85] T. Ogurtani, “Unified theory of linear instability of anisotropic surfaces and interfaces under capillary, electrostatic, and elastostatic forces: The regrowth of epitaxial amorphous silicon,” *Phys. Rev. B*, 74(15), 155422, 2006.
- [86] I Prigogine, “Thermodynamics of irreversible processes,” in *Thermodynamics of irreversible processes*, 75, 1961.
- [87] A Guggenheim, “Thermodynamics,” in *Thermodynamics*, 39, 1959.

- [88] T. O. Ogurtani, M. R. Güngör, and E. E. Oren, “Simulation of dislocation damping spectra associated with the collective motion of point defects and kink chain subjected to bulk segregation,” *J. Appl. Phys.*, 91(4), 1860, 2002.
- [89] P. Glansdorff and I. Prigogine, “Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations,” 1971.
- [90] A. Celik, “Investigation of electromigration and stress induced surface dynamics on the interconnect by computer simulation,” Middle East Technical University, 2011.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı: Şengül, Mert Yiğit

Uyruğu: T.C.

Doğum tarihi ve yeri: 10.06.1986 Bursa

Medeni hali: Evli

Telefon: +1 (814) 404 55 42

e-mail: mertyigitsengul@gmail.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	Hacettepe Üniversitesi / Fizik Müh.	2011

Yabancı Dil

İngilizce, Almanca

Yayınlar

1. Haddadian S., Sengul M.Y., Oren E.E. "Evolution of strained isotropic thin solid films into quantum dots on rigid substrates" *Computational Materials Science*, gönderildi 2014.
2. Sengul M.Y., Haddadian S., Celik A., Ogurtani T.O., Oren E.E. "The effect of anisotropic surface properties on the formation of strained-heteroepitaxial quantum dots" *CPC X: Chemical Physics X*, Ankara, Türkiye, 10-12 Eylül 2013.
3. Sengul M.Y., Haddadian S., Celik A., Ogurtani T.O., Oren E.E. "Strained-heteroepitaxial quantum dots with anisotropic surface properties" *IWPMEO II: International Workshop on the Physics based Modeling of Material Properties & Experimental Observations*, Antalya, Türkiye, 15-17 Mayıs 2013.
4. Sengul, M.Y., Haddadian, S., Celik, A., Ogurtani T.O., Oren E.E., Simulation of Strained-Heteroepitaxial Quantum Dot Formation under the Effect of Anisotropic Surface Properties, MRS 2014 Spring Meeting, MRS Symposium WW: Materials by Design-Merging Advanced In-Situ Characterization with Predictive Simulation, 21-25 Nisan 2014, San Francisco, CA, ABD.