
GAZİ ÜNİVERSİTESİ
Gazi
1926

Ge ÜZERİ Si, Ti, Au ve ZnO TABAKALARIN PİK PROFİL YARDIMIYLA DİSLOKASYON VE KORELASYON UZUNLUKLARININ TAYİNİ

Hasan Celal DERVİŞOĞLU

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TEMMUZ 2018

Hasan Celal DERVİŞOĞLU tarafından hazırlanan "Ge ÜZERİ Si, Ti, Au ve ZnO TABAKALARIN PİK PROFİL YARDIMIYLA DİSLOKASYON VE KORELASYON UZUNLUKLARININ TAYİNİ" adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Gazi Üniversitesi Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Prof. Dr. M. Kemal ÖZTÜRK

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum. .....

Başkan: Prof. Dr. Semran SAĞLAM

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum. .....

Üye: Prof. Dr. Abdullah YILDIZ

Enerji Sistemleri Mühendisliği Anabilim Dalı, Ankara Yıldırım Beyazıt Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum. .....

Tez Savunma Tarihi: 20/07/2018

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Yüksek Lisans Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.

.....

Prof. Dr. Sena YAŞYERLİ

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmasında yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Hasan Celal DERVİŞOĞLU

20/07/2018



Ge ÜZERİ Ti, Si, Au ve ZnO TAMPON TABAKALARIN PİK PROFİL YARDIMIYLA DİSLOKASYON VE KORELASYON UZUNLUKLARININ TAYİNİ

(Yüksek Lisans Tezi)

Hasan Celal DERVİŞOĞLU

GAZİ ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Temmuz 2018

ÖZET

Sputtering sistemi ile Ge alltaş üzerine 500 nm olarak büyütülmüş Si, Ti, Au ve ZnO epitaksiyel tabakaların rastgele dağılmış diskolasyonların bulunduğu X-ışını difraksiyon profillerinin pik çizgi şekli analiz edildi. Pik noktasının en yoğun kısmında pik davranışı Gauss fonksiyonuna uygundur. Fakat, XRD pikin sağ ve sol iki kuyruğu q^{-3} güç yasasına uymaktadır. Rastgele diskolasyonlar için tipik olan q^{-3} bozunumu açık dedektör ile omega XRD eğrilerinde gözlenir. Tüm profil, sınırlı bir rastgele diskolasyon dağılımı ile iyi bir şekilde fit edildi. Hem yaklaşık 10^{10} cm^{-2} mertebesinde kenar diskolasyonlarının yoğunlukları ve hemde yaklaşık 10^3 nm korelasyon uzunlukları elde edilir. Dislokasyon ve koreleasyon hesapları için Kragner in metodun da bulunan yarı deneysel denklemler kullanılmıştır. İyi bir fit için fit iterasyon adımı ortalama $9{,}0x10^6$ mertebesinde alınmıştır.

Bilim Kodu : 20226

Anahtar Kelimeler : XRD, sputtering, Ge, Si, Ti, Au ve ZnO dislokasyon ve korelasyon uzunlukları

Sayfa Adedi : 39

Danışman : Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

THE DISLOCATION AND CORRELATION LENGTHS'S DETERMINATION OF THE Ti, Si, Au and ZnO LAYERS ON Ge WITH THE HELP OF THE PEAK PROFILE

(M. Sc. Thesis)

Hasan Celal DERVİŞOĞLU

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

July 2018

ABSTRACT

With the sputtering system over the Ge subsrate magnified as 500 nm Si Ti, Au and ZnO containing random scattering epitaxial layer dislocations of XRD peak profiles were analyzed. The most intensive part of the peak point behavior conforms to the Gaussian function. Although the tail of the left and right XRD peaks comlien with q^{-3} law. q^{-3} decay can be seen in the outdoor detector with omega XRD curve typical for random dislocations. All profile fitting with limitted random dislocation scattering. Both dislocations densities about 10^{10} cm^{-2} order of edge and 10^{3} nm correlation lengths are obtained. Experimental equations in Kragner method has been used for dislocation and correlation calculation. Iteration step has been taken in an average of $9{,}0x10^{6}$ for a good fit.

Science Code : 20226
Key Words : XRD, sputtering, Ge, Ti, Au ve ZnO, dislocation ve corelation lengths
Page Number : 39
Supervisor : Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın oluşmasında her konuda yardımını esirgemeyen, her zaman destek olan saygıdeğer büyüğüm danışman hocam sayın Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK'e, tez çalışmamın en iyi şekilde noksansız olması için uğraşan değerli dostum Semih DOĞRUER'e teşekkürlerimi bir borç bilirim.

Bana her zaman destek veren ve aldığım her kararda daima yanımda olan, maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman benden esirgemeyen başta canımdan çok sevdiğim annem Emine DERVİŞOĞLU olmak üzere biricik aileme çok teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET iv

ABSTRACT v

TEŞEKKÜR vi

İÇİNDEKİLER vii

ŞEKİLLERİN LİSTESİ viii

SİMGELER VE KISALTMALAR ix

1. GİRİŞ 1

2. BÜYÜTME TEKNİĞİ 7

2.1. Püskürtme (Sputtering) Yöntemi 7

3. MALZEME BÜYÜTÜLMESİ VE KARAKTERİZASYONU 11

3.1. Deney 11

3.2. X-Işını Kırınımı 13

3.3. Bragg Yasası ve XRD Ölçümlerinde Kullanımı 14

3.4. Enine Tarama Ölçümleri 15

3.5. Sinkrotron XRD Topografisi 15

4. TEORİ 17

5. SONUÇ VE TARTIŞMA 25

KAYNAKLAR 35

ÖZGEÇMİŞ 39

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil **Sayfa**

Şekil 1.1. Eğri geometrisi x-ışını kırınımı taslağı. Gerçek yansımanın örgü düzlemleri, şeklin sol alt kısmında tasvir edilmiştir. Gelen dalga K^{in} ve kırınan dalga K^{out} numune yüzeyine aynı Φ açısını yapar. Saçılma vektörü Q numune yüzeyine Ψ açısı yapar. 2

Şekil 2.1. Magnetron püskürtme sistemi 8

Şekil 3.1. Argon gaz atmosferinde radyo frequency (RF) magnetron püskürtme sistemi (BESTEC GmbH, Berlin, Germany). 11

Şekil 3.2. Doğru akım (D.C.) püskürtme yöntemi 12

Şekil 3.3. Kullanılan APD 2000 PRO difraktometrenin bir fotoğrafını gösterir CuKa, X-Işını tüp, optik, gonyometre, detektör, bilgisayar ve X-ışını jeneratöründen oluşur. 13

Şekil 4.1. R parametresinin farklı değerleri için integral Eşitlik 5.12'ün davranışı bütün eğriler ortak q^{-3} asimtotu ile birleşir. Bir gaussian pik profili karşılaştırma için ince çizgi ile gösterilir 20

Şekil 5.1. Au/Ge(Alttaş) yapının 2Theta XRD taraması 26

Şekil 5.2. Ge üzeri büyütülen Au tabakasının (220) XRD düzlem yansımasının profil fit eğrisi. 27

Şekil 5.3. Si/Ge(Alttaş) yapının 2Theta XRD taraması 28

Şekil 5.4. Ge üzeri büyütülen Si tabakasının (400) XRD düzlem yansımasının profil fit eğrisi. 29

Şekil 5.5. Ti/Ge(Alttaş) yapının 2Theta XRD taraması 30

Şekil 5.6. Ge üzeri büyütülen Ti tabakasının (200) XRD düzlem yansımasının profil fit eğrisi 31

Şekil 5.7. ZnO/Ge(Alttaş) yapının 2Theta XRD taraması 32

Şekil 5.8. Ge üzeri büyütülen ZnO tabakasının (002) XRD düzlem yansımasının profil fit eğrisi 33

Şekil 5.9. Au, Si, Ti ve ZnO tabakaların dislokasyon ve kristal boyut karşılaştırması 34

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	**Açıklamalar**
Al	Alüminyum
Ar^+	Argon
As	Arsenik
Au	Altın
C	Karbon
Ga	Galyum
Ge	Germanyum
In	İndiyum
Mn	Mangan
N	Azot
O	Oksijen
P	Fosfat
Si	Silisyum
Ti	Titanyum
Zn	Çinko

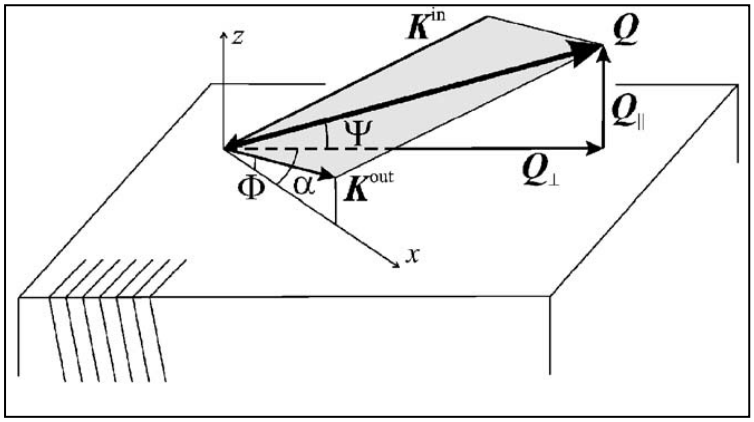
Kısaltmalar	**Açıklamalar**
AlN	Aliminyum Nitrat
Al_2O_3	Aliminyum Oksit
APD	Avalanche photodiode
FWHM	Full-Width Half-Maximum
GaAs	Galyum Arsenik

Kısaltmalar	Açıklamalar
GaN	Galyum Nitrat
HRXRD	Yüksek çözünürlüklü x-ışınları kırınımı
InGaAs	İndiyum Galyum Arsenik
InGaN	İndiyum Galyum Nitrat
InGaP	İndiyum Galyum Fosfat
InP	İndiyum Fosfat
MBE	Molecular Beam Epitaxy
MD	Moleküler dinamik
PIN-FET	Field-effect transistor
RF	Radio Frequency
SiC	Silisyum Karbon
SiGe	Silisyum Germanyum
TEM	Transmission Electron Microscope
VPE	Vapor Phose Epitaxy
XRD	X-Ray Diffraction
ZnO	Çinko Oksit

1. GİRİŞ

Yapı kusurları opto elektronik aygıtların optik ve elektrik performansını olumsuz yönde etkilemektedir. Yapının optimize edilmesi başta gelen çözüm yöntemlerinden bir tanesidir [1]. En önemli yapı kusuru olarak dislokasyon görülebilir. Dislokasyonun artması yapıda yüzey çatlamalarına sebep olmaktadır. Ayrıca ufak taneli aynı tür poli-kristaller de yapıyı optiksel ve elektriksel olarak etkileyebilmektedir [2]. Germanyum iyi bir yarı iletken olup 5,78 Å örgü uzunluklu kübik yapılı oda sıcaklığında 0,67 eV band enerji aralığına sahiptir. Hatta iyi bir alttaş olarak da kullanılmaktadır [3]. Ge alttaş üzerine büyütmelerde örgü uyumluluğuna bağlı olarak büyütülen tampon tabakalarda kusur düzeyleri değişmektedir. Yüzeye paralel ve dik örgü düzlemlerin sınırlı durumlarda, X-ışını yansımalarının genişlemesi üzerine kenar ve vida dislokasyonların etkisi, yaygın olarak tabaka eğimi ve tabakaların burkulması ile alakalıdır. Bu durum rastgele dağılımlı dislokasyonlar tarafından sebep olan bozulmalar için yanlış yönelimli bloklardan kaynaklanır. Bu durumda ortalama karekök değerinde kusurların tanımlanabilmesi tam olarak yeterli değildir [4]. Kristalize tabakası örneğin Ge, Ti, Au ve ZnO için simetrik piklerin Bragg yansımaları bütünüyle çok daha dardır. Çünkü bu yapılar kenar dislokasyonlarından etkilenmez, ayrıca kenar dislokasyonlar yüzeye paralel örgü düzlemleri içerisinde kusurlar üretir fakat tabaka normali boyunca bu düzlemlerin pik pozisyonlarını etkilemez. Kenar dislokasyonları en yüksek değeri, yüzeye dik örgü düzlemlerinden gelen kırınım desenleri ile elde edilir. Bu kırınım geometrisinde X-ışını yüzeyi yalayarak gelir [4].

Girişte problemi iyi tanımlayabilmek için konun temellerini burada verilmesi iyi olacaktır. Bunun için Kaynak [5, 4] de Kaganerin yöntemi kullanarak dislokasyon kristal boyutunu hesaplamak için kullanılacaktır. Laboratuvarda kolayca gerçekleştirilebilen alternatif geometri asimetrik (skew) geometridir. Bu geometri yarı simetrik (gelen ve kırılan dalgalar yüzeye doğru aynı açıya sahip) aynı düzlemde olmayan (yüzey normali gelen ve kırılan dalga boyları ile tanımlanan yüzeyde uzanmaz) Şekil 1.1'de gösterilen geometridir. Artan eğimli örgü düzlemi ile kırınım yansımalarını ölçerek yüzeye dik örgü düzlemlerini bulabiliriz. Geniş eğimler tek yansımaya odaklanarak tarama eğrisi elde edilebilir. 4-çember kırınımölçer simetrik geometri için gereklidir. Çünkü örnek yüzeyin normaline göre eğimlidir. 3-çember kırınımölçer üzerine aynı olmayan asimetrik düzlemleri kenar dislokasyonlara daha az duyarlı olup yüzeye paralel örgü kısımlarına dokunur [5].



Şekil 1.1. Eğri geometrisi x-ışını kırınımı taslağı. Gerçek yansımanın örgü düzlemleri, şeklin sol alt kısmında tasvir edilmiştir. Gelen dalga K^{in} ve kırınan dalga K^{out} numune yüzeyine aynı Φ açısını yapar. Saçılma vektörü Q numune yüzeyine Ψ açısı yapar [5]

Asimetrik geometri X-ışını kırınımın krokisinde, örgü düzlemleri için keskin yansımalarının şekli altta sol kısımda gösterilir. Gelen dalga K^{in} ve kırınan dalga K^{out} örnek yüzeyi ile aynı açı Φ dir. Saçılma vektörü Q örnek yüzeyi ile Ψ açısı yapar. Kırınım pikinin maksimumdaki yarısının pik genişliği (FWHM) yalnız dislokasyon yoğunluklarına bağlı değil ayrıca dislokasyonlar arasındaki korelasyonlara bağlıdır. Daha da fazlası o, saçılma vektörünün doğal yörüngelerine, dislokasyon hattı yönüne ve Burger vektör yönüne bağlıdır [5, 6]. Sunulan çalışmada bütünüyle kırınım profilinin çizgi pik şekli ve özellikle pikin kuyruk bölgeleri analiz edildi. Kaganer tarafından tez doğrultusunda q^{-3} güç yasası takip edilerek dislokasyon yoğunlukları tanımlandı. Yönteme göre bütün kırınım profili korelasyon fonksiyonuna nümerik olarak Fourier dönüşümü uydurulur ve bu sayede dislokasyon yoğunlukları ve dislokasyon korelasyon menzilleri elde edilir [5].

Kristal yapı kusurları için X-ışınları kırınımı analizi iyi bir teknik olarak karşımıza çıkmaktadır. Farklı kırınım piklerinin yansımalarının karşılaştırılmasında yaygın olarak kullanılan yöntemler etkili geleneksel yöntemlerdir. İncelenen örnekte örgü kusurları nedeniyle karşımıza iki durum çıkmaktadır. Bunlardan biri pik genişlemesi diğeri ise kristal boyutun sonlu boyutta olmasıdır. Kristal boyut etkileri saçılma vektörüne bağlı değil iken kırınım pikinin zorlama genişlemesi saçılma vektörünün uzunluğu ile orantılıdır. Bu sayede Williamson-Hall bağıntısında ardışık piklerin yansımaları ile zorlama ve kristal boyut katkılarını ayırt edebiliriz. Ayırma metotlarına göre bütün pikler Lorentz ya da Gaussian'a göredir. Geçerliliği olmayan metotlara göre pik yalnızca kristalin mükemmel olması tahminlerine dayanır. Yeni gelişmelere göre yapı bozukluklarının ve Burgers

vektörlerinin saçılmasına bağlı olarak yönelimli düzlemler için düzeltmeler önerilmektedir. Gelecek kilometre taşı olarak Warren ve Averbach tarafından önerilen kırınım pik profilinin Fourier analizi üzerinedir [7, 8]. Araştırmacıların analizlerinde başlama noktası toz kırınımında grain yönelimi üzerine ortalamadır. Ters uzayda saçılma şiddetinin uygun integrasyonu, gerçek uzayda korelasyon fonksiyonunu bir boyutta kesmesi durumudur. Toz kırınım literatüründe korelasyon fonksiyon terimini kullanmaz fakat pik şiddetinin Fourier dönüşümü sabitini tercih eder. Burada bu nicelik çift korelasyon fonksiyonu olarak isimlendirilir. Kristoglafide aynı fonksiyon patterson fonksiyonunu kaynak gösterebilir. Warren-Averbach [7, 8] analizinin yaklaşımı, korelasyon fonksiyonu sırasıyla kristal boyut ve strain etkilerini tanımlayan terimlerini dikkate alır. Bununla birlikte, düzgün olmayan zorlama Gaussian fonksiyonu ile tanımlanırken grainlerin sınırlı hacimleri, Lorentzian piki ile tanımlanır (üstel düzeltme fonksiyonudur) ve kristal boyutu ile zorlama etkileri Fourier dönüşümlü pik profili diferansiyeli sayesinde ayırt edilir. Birçok durumda sonraki adım yeterli kesinlikte değildir. Bunun sebebi gürültülü deneysel datadan elde edilen birkaç Fourier sabitlerine bağlı olmasıdır. Balzar bu sorunu pik profillerinin Voigt fonksiyonu olan Lorentz ve Gaussian 'nin toplamında olan bir pik profilleri kullanılmasını önermiştir. Deneysel pik profilleri yalnız voigt fonksiyonu ile tanımlanamaz ve değişik diğer fonksiyonu teorik olarak fenomenolojik temellerde önerilmiştir [9].

Düzgün olmayan zorlamanın, Gaussian korelasyon fonksiyonunu kullanmaya yol açması memnuniyet verici bir durumdur. Bu zorlamanın karmaşık doğasının dikkate alınması rastgele dağılımlı kristalin örgü noktasından kaynaklanır. Ancak Krivoglaz ve Ryboshapka [10, 11] gösterdiler ki zorlamanın çok önemli bir kaynağı ve yaygınlığı olan rastgele dislokasyonlar için doğru değildir. Daha ziyade onlar ifadelerine göre dislokasyon hattından R uzaklıkta zorlamanın yavaş (αr^{-1}) bozunumu korelasyon fonksiyonunun geliştirilmesine yol açar ve korelasyon fonksiyonu [5]:

$$G(x) = exp\left(-C\rho x^2 \ln\frac{L}{\xi x}\right) \qquad (1.1)$$

olur. Burada büyük C~1, x yönüne (korelasyonda ölçülen keyfi bir yöndür) göre Burgers vektörü ve dislokasyonu yörüngesine bağlı olarak boyutsuz bir faktördür. Saçılma vektörü Q 'ya bağlılığı $C\alpha\ (Q.b)^{-2}$ ile gösterilir. Dislokasyon yoğunluğu birim hacim başına dislokasyon çizgilerinin toplam sayısı olarak tanımlanır. Düz dislokasyonlar için ρ,

dislokasyon çizgilerine dik bir düzlemin birim alanı başına dislokasyonlarının sayısına eşittir. $\xi = |Q.b|/2\pi$ düzelmesiz dislokasyonlar için boyutsuz faktör iken, ξ~1, dir boyutsuz bir faktördür [5].

Rastgele ve düzeltilmemiş dislokasyonlar için kaynağı L kristal hacmi olarak görülür. Bu yüzden genelde L, rastgele düzensiz dislokasyonlar ile sınırlı kristalin kırınım pik genişliği sonsuza yönelmesi olarak tanımlanır [10]. Willkens [12-14] dikkat etmektedir ki bu kusur yakınsaması, dislokasyonlar ile bir kristalin elastik enerjisinin yakınsaması olarak aynı kaynağa sahiptir. Elastik enerji:

$$\mu b^2 \ln L/a \tag{1.2}$$

Denklemi ile orantılıdır. Burada μ shear modülüdür. B burgers vektörünün uzunluğudur ve a örgü aralığıdır. Sistemde dislokasyon şiddetinde çok az düzenleme ile elastik enerji azalır. Dislokasyonların pozisyonları rastgele olur fakat Burgers vektörlerine bağlı değildir. Bu yüzden bazı karakteristik skalaları aşan bir bölgede burgers vektörü toplamı sıfır olur. Daha sonra dislokasyon görüntüleme ile elastik enerji ve kırınım pik genişliği sınırlı kalmaktadır. Willkens, kristali hücrelere bölerek dislokasyonların sınırlandırılmış rastgele dağılımlarını tanıtmıştır ve her bir hücredeki toplam Burgers vektörü sıfır olarak tanımlamıştır [12-14]. Eşitlik 1.1'in fonksiyonel formu değişmemektedir bu durum hücrelerin sınırlı hacimleri olarak anlaşılmalıdır. Krivogaz ve arkadaşlarının [10, 15], ekranlama korelasyonlu dislokasyon dağılımları, geniş bir grup için geçerli olduğuna dair aynı sonucu göstermiştir.

Ayrıca dislokasyon ekranlamanın sınırlı limiti olarak iki boyutlu kristali kullanırız. Burada dislokasyonların elastik enerjileri entropik -TS terimle karşılaştırılır. Burada T sıcaklıktır. S entropi $\ln(L/a)^2$ dislokasyonun yerleştiği örgü noktalarının sayısıdır. Her iki elastik ve entropik terimleri lnL ile orantılıdır. Sonuçlardan biri, bazı T_m sıcaklıkları üzerindeki dislokasyonlar, malzemenin erimesi ile dislokasyona yol açan termal olarak uyarılmış dislokasyon çiftlerinin çözülmesi ile üretilir. Korelasyon fonksiyonunun hesaplanması yüksek korelasyonlu dislokasyon sisteminde denklem 1'deki logaritmik terimin 0 olması ile gözükür [16].

Korelasyon fonksiyon Eşitlik 1.1 in fourier dönüşümü pikin merkezinde Gaussian şeklini verir. Gaussian pik şeklinin menzili boyutsuz faktör ile verilir ve M artarken artar [5].

$$M = L\sqrt{p} \tag{1.3}$$

Önemli derecedeki bir pik şiddeti yoğunluğunun kırınım pikinin kuyruğunda Gaussian pik şeklinde sapar. Dislokasyonlara göre kırınım piki kuyruğu $I(q)\infty q^{-3}$ olarak evrensel yasa ile temsil edilir. Bu yasa Eşitlik 1.1 fourier dönüşümünden elde edilir [17]. q^{-3} yasası geniş q değerlerinde geçerlidir. Saçılma diskolasyon çizgilerine yakın zorlanmış bölgelerde yer alır. Bu bölgede kristal örgü ağırlıklı olarak yanlış yönlenmiştir, bu durumda Bragg yasası yerel olarak dalga vektörü q için sağlanır. Bu bölgelerdeki hacim hesaplamaları q^{-3} bağımlıdır [10, 17, 18]. q^{-3} asimtotu dislokasyon zorlama alanlarında saçılmanın genel bir özelliğidir ve yeterince geniş q değerlerinde herhangi bir dislokasyon dağılımı için gerçekleşir. Özellikle bu durum, dislokasyon duvarında (küçük açılı domain sınırları) bulunan dislokasyonlar arasında ters ortalama uzunluğunu geçen q dalga vektörlerinde dislokasyon duvarları için geçerlidir [10]. Groma ve arkadaşları [17, 19, 20] I(q)'nın sınırlandırılmış momentlerin hesaplarına dayalı pik profil analizleri için metodlar geliştirmiştir. Özellikle yeniden kısıtlandırılmış ikinci derece moment $v(q) = \int_{-q}^{q} q^2 I(q) dq$ ve $\ln(q)$ ile orantılıdır. Bu durumda onlar ortalama dislokasyon yoğunluğunu tanımlamak için kullanılır. Yüksek mertebe momentler dislokasyon yoğunluklarını tanımlar.

Ge, Ti, Au ve ZnO, epitaksiyel filmler için iyi bir kristal yapıyı oluşturur. Burada dislokasyonlar yüzey üzerine dik ayarlanır. Filmler toz örneklerin aksine yönelimlidir. Bir boyutlu korelasyon fonksiyonunun terimlerinde problem, ancak toz kırınım tekniğinin avantajını kullanarak ve açık dedektör ile ölçümler yapılarak aşılır. Bu korelasyon fonksiyonu toz kırınım şiddet yoğunluğu ortalamasına çok benzer bir ortalama gösterir. Şiddet, kırınım vektörü yönleri boyunca toplam yerine yayılan demetin yönleri boyunca toplanır. Ters uzaydaki integrasyon toplamı aksine gerçek uzaydaki kesilmelere yol açar.

Bu tez çalışması şu sıralama izlenilerek düzenlenmiştir: Birinci bölümde; temel bilgilere değinilmiştir. İkinci bölümde, malzeme büyütme teknikniği olan magnetron büyütme sistemi ile çalışmamıza yön veren boyutları ile ele alınmaktadır. Üçüncü bölümde; X-Işınları ve yöntemlerine yer verilirken, dördüncü bölümde dislokasyon yöntemi olan profil fit yöntemi

verilmiştir. Beşinci bölümde sonuçları tartışarak tez çalışmamızda katkı sunulmasını amaçladığımız bilgiler vermeye gayret gösterdik.

2. BÜYÜTME TEKNİĞİ

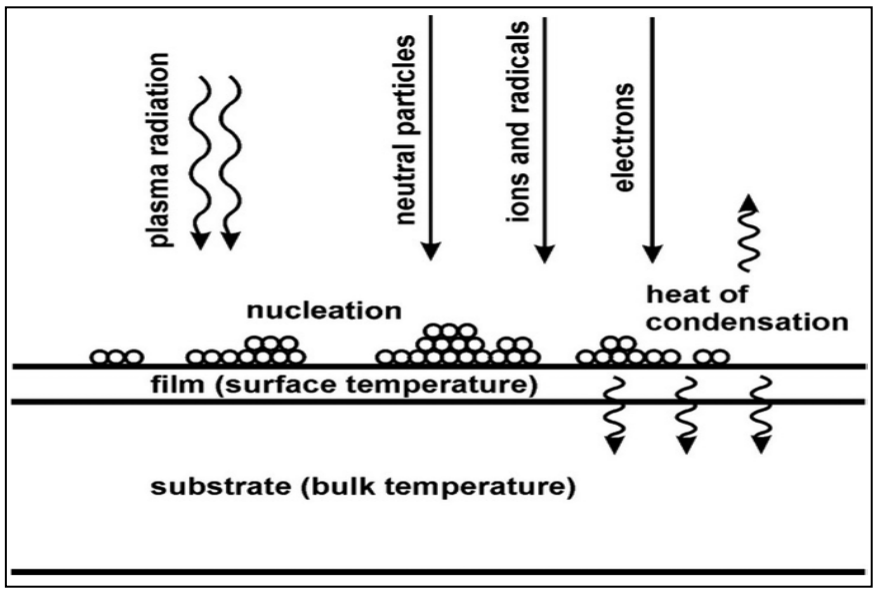
2.1. Püskürtme (Sputtering) Yöntemi

Son 20 yıl boyunca magnetron kaplama yoğunluk yapışkanlık yüzey pürüzlülüğü, kristallenme ve ayrıca endüstriyel uygulamalardaki maliyet gibi film özelliklerinin ve mikro yapısının hassas ayarlanmasına imkân verdiğinden kaplama endüstrisinde yer alan en önemli tekniklerden birisidir (diğer film katkılama işlemlerindeki akım bariyerini aşmak için). Bariyerin aşılması için filmin katkılama işlemleri bilimsel ve teknolojik olarak sınıflandırılabilir [21]. Bu bilimsel konulardan bir tanesi mikroyapı ve ilgili özelliklerin kontrolü amacıyla kullanılan plazma parametrelerinin filmin çekirdeklenme ve büyütülmesi amacıyla anlaşılmasıdır. Diğer bir bilimsel engel ise ince film yapısı ile plazma parametrelerinin ilişkisinin basınç, girişteki güç yoğunluğu ve işlem sıcaklığı gibi parametreler ile ilgili olmasıdır. Çeşitli magnetron kaynakları ve işlemlerinin çeşitli uygulama amaçları için bulunması magnetron kaplama teknolojisinin avantajını özetler. Bu avantajlardan en önemlisi geleneksel magnetron kaplamanın limitlerinin açılarak yüksek oranda katkılama yapılabilmesi ve yüksek yoğunlukta film sentezi için magnetron kaplamanın plazma yoğunluğunun kontrolü ve geliştirilebilmesidir. Buna imkân veren teknikler darbeli kaplama, ikili magnetron kaplama [22], ICP ve mikrodalga yardımlı püskürtmedir [23,24]. Plazma yoğunluğu ICP veya mikrodalga yardımı püskürtme ile 2-3 mertebe ile 10^{11} - 10^{13} cm^{-3} olarak yükseltilebilir. Bu sayede yüksek yoğunlukta ve daha iyi bir film, aha yüksek katkılama oranı elde edilebilir. Yüksek güç darbeli (HPP) magnetron püskürtme yüksek yoğunluklu plazma püskürtmesi elde edilebilmesi için kullanılabilir [25-29]. Bu alandaki son araştırmalara göre HPP magnetron tahliyesi boşaltımdaki [6] iyonizasyon oranınını artırarak [27] darbe parametrelerinin kontrolü ile film yapısını değiştirir [28,29]. Düşük enerjili film katkılama yeni bir teknik olup ve özellikle düşük sıcaklık işlemlerinde kullanıldığı gibi film katkılama engeli için görüntüleme cihazları da kullanılabilir. Buna OLED (organik ışık emici diyot) ekranları gösterebiliriz [30,31]. Bu tür uygulamalar için yapılacak işlemlerden biri yüzey hedefli magnetron kaynaklı püskürtmedir. Yüzey hedefli magnetron kaplama özellikle düşük sıcaklıklarda ki uygulamalarda boşaltım kontağı yoğunluğu genel magnetron kaynağından [32] düşük iken kullanışlıdır. Düşük sıcaklıktaki film katkılama yakın zamanda hong tarafından rf magnetron kaplama yaklaşımında kullanılmıştır [33].

Toplama işlemini ve sistemine yeni bir bakış açısı olarak püskürtme Hedef kullanımının verimliliğini yükseltmek amacıyla düzlemsel magnetron kaynağının modifikasyonun hedefleyen altında hareket eden manyetik düzenek ile yapılmıştır. Bazı durumlarda Ayrıca Hedef kullanımının verimini %80 kadar yükseltmiştir [34,35]. Silindirik kaplama kaynağı döngüsel hareketli hedef mekanizması kullanılarak da hedef verimini %80 kadar yükseltir vb Prosedür büyük olanlar için uygulanmakta kullanılabilir [36].

Film üretimi hakkındaki bir konuda sentezlenen filmlerin düşük sıcaklık yüksek kristallenme magnetron kaplamasındır. Polimerlerin veya camlarının metalizasyon, kristal oksit ve nitrit filmlerin [22,37,38] sentezi için düşük sıcaklıkta gerçekleştirilen bu işlemleri geliştirilmesi için çalışmalar yapılmaktadır [39, 40]. Düşük alttaş sıcaklığında sentezlenen yüksek sıcaklıktaki kristal yapı darbeli magnetron püskürtmenin sırasındaki plazma parametrelerinin ile partiküllerin enerjisini kontrolü yumlu olmalıdır [41].

Bilimsel araştırmalar çekirdekler ve büyütme mekanizmasını gelişmesi için odaklanmasına rağmen enerji ile plazma parametrelerinin ilişkilendirmesi yönünden kısıtlıdır. Bu sebeple bu çalışma filmin çekirdeklenme ve büyütmesini magnetron püskürtme sırasındaki verdiği enerji yönünden bir temel oluşturacaktır. Katkı Lan oğlum filminin yapısını kontrol etmek için yapılan plazma tanımasın uygulaması magnetron püskürtme boşaltımı için uygulanacak plazma tanılama cihazlarının önizlemesi olacaktır.



Şekil 2.1. Magnetron püskürtme sistemi

Magnetron boşaltımı oluştuğundaki giriş enerjisi magnetron bakımından kaynaklı enerji, boşaltımda kaynaklı çeşitli parçacıklar, elektronik aksiyon ve radikaller, sistemdeki aktive edilmiş parçacıkları enerjinin çeşitli formlarına dönüşür. Altaş yüzeyin aktarılan genişin enerjisi aşağıdakilerden oluşur:

- Hedef düzeyinde püskürtme sırasında ekilen iyonların çalışması ile üretilen hedef yüzeyi kaynaklı radyasyon ısısı
- Boşaltılan gazları ve püskürtülen parçacıkların iyonlarının enerjiye dönüşmesi
- Boşaltılan gazları ve püskürtülen ne türlerinin içindeki aktive olan nötrallerin enerjiye dönüşümü
- Boşaltımdaki doğal radyasyon olan türlerden kaynaklı radyasyon enerjisi
- Katı filmi dönüşürken gizli ısı aşaması
- Sisteme ait kafes duvarları gibi çevresel ısı kaynakları

Magnetron püskürtme sırasındaki bütün enerji akışı Şekil 1'deki gibi birkaç şekilde sınıflandırılabilir:

- Nötrler ve iyonlara ait kinetik enerji E_k
- Çoğunlukla uyarılmış nötrlerin enerjisi (elektronik durum enerjisi) $E_{el.st}$
- Plazma ile Hedef yüzeyi arasındaki radyasyon akışı E_{rad}
- Sıcak elektronların enerjisi içinde E_e

Film yüzeyine aktarılan toplam giriş enerjisi şu terimlerin toplamı şekilde yazılabilir: $toplam\ enerji = E_a + \tilde{E}_n + \tilde{E}_i + \Delta H_{cond} + E_e + E_{el.st} + E_{rad}$. E_a, püskürtülen atomların enerjisi, $\tilde{E}_n$ ve $\tilde{E}_i$ sırasıyla hızlı nötrlerin ve iyonların yüzeyi ulaşması ile oluşan etkin enerjileridir. ΔH_{cond} ısı yoğunluğu, $E_{el.st}$ elektronik durum enerjisi, E_e serbest elektronların enerjisi, E_{rad} film yüzeyinin soğurduğu plazmadan oluşan radyasyon akışıdır. Yüzeyi iletilen toplam enerji aşağıdaki yollarla kısmen harcanabilir:

- Film yüzeyine tekrar püskürtülen parçacıkların ilettiği enerji
- Yüzeyden kaynaklı radyasyon
- Alt taştan yüzeye ısı transferi ve film büyütülmesi sırasındaki filmin biçimi

Filmin çekirdeklerini ve büyütülmesi için üretilen toplam enerji toplam giriş enerjisi ile toplam harcama enerjinin dengesinden oluşur film üretimi sırasında bütün enerji terimlerini hesaplama ve ölçümlerine göre istenilen film yapısının sentezi ve dizaynı

plazma parametrelerinin kontrolü ile çeşitlerine göre mikroyapı ve plazma parametrelerine bağlıdır.

3. MALZEME BÜYÜTÜLMESİ VE KARAKTERİZASYONU

Bu bölümde Sputterring plazma sistemi ile Ge üzerine büyütülen Au, Si, Ti ve ZnO kaplamaların büyütülmesi ve kullanılan çeşitli yapısal XRD teknikler tartışılmıştır.

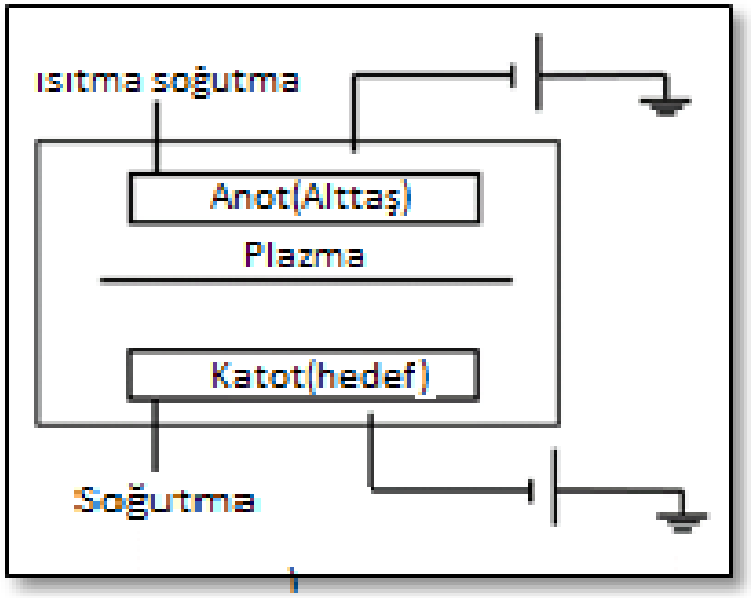
3.1. Deney

Püskürtme sistemi, vakum ortamında hedef malzemeden (target) fiziksel olarak koparılan atomların, alltaş üzerine ince film oluşturulması için yaygın şekilde kullanılabilen bir sistemdir. Bu sistemde Ar^+ gibi reaktif olan iyonlar yüksek gerilim altında hızlandırılır ve hedef malzeme hızlandırılan bu iyonlar tarafından bombardıman edilmektedir. Bombardıman sonucu hedef malzemeden sökülen moleküller alttaş üzerine biriktirilmektedir. Bu sistemdeki en büyük avantaj, sistemin düşük sıcaklıklarda biriktirme işlemine imkân vermesidir. Dolayısıyla hemen her tür alttaşa istenilen malzeme biriktirilebilmektedir. Şekilde hedef malzemeden bir molekülün kopartılması ve alttaş yüzeyine yerleşmesi gösterilmiştir. Buradaki kesikli çizgilerle taranan mavi renkteki bölge, Ar^+ iyonları (sarı renk) tarafından oluşturulan plazma ortamıdır. Püskürtme yöntemi ile çeşitli iletken, yarıiletken veya yalıtkan malzemeler elde edilebilmektedir. İletken özellikteki malzemeler DC Magnetron Püskürtme, yalıtkan malzemeler ise RF Magnetron Püskürtme yöntemiyle oluşturulmaktadır ve Şekil 3.1'de gösterilir.



Şekil 3.1. Argon gaz atmosferinde radyo frequency (RF) magnetron püskürtme sistemi (BESTEC GmbH, Berlin, Germany).

Au, Si, Ti ve ZnO yapılarının Ge üzerindeki büyümesinde kullanılan püskürtme tekniği, yüksek vakumda katı metale yüksek voltaj uygulayarak atomları uzaklaştırır. İletken malzeme bir anot olarak kullanılırken, materyal bir metal katot olarak kullanıldığında yüksek bir vakum ortamında kaplanacaktır. Anot ve katottan oluşan tüpe argon gibi inert bir gaz gönderildikten sonra, alt ve üst elektrot arasında bir plazma oluşur ve yüksek voltajda plazma oluşur. İstenen gerilim elde edildiğinde bir kıvılcım çıkışı meydana gelir. Püskürtme yöntemleri radyo frekansı (RF), manyetik alan, triyot, doğru akım (D.C.) ve iyon demeti püskürtme (4) olarak uygulanır. Bu çalışmada, D.C. Si, Au, Ti ve ZnO, mevcut diode püskürtme ile yüksek kristalize Ge üzerinde büyümüştür. Doğru akım püskürtme yönteminde, kaplama malzemesi katoda yerleştirilirken, kaplanacak malzeme anodiğe yerleştirilir.

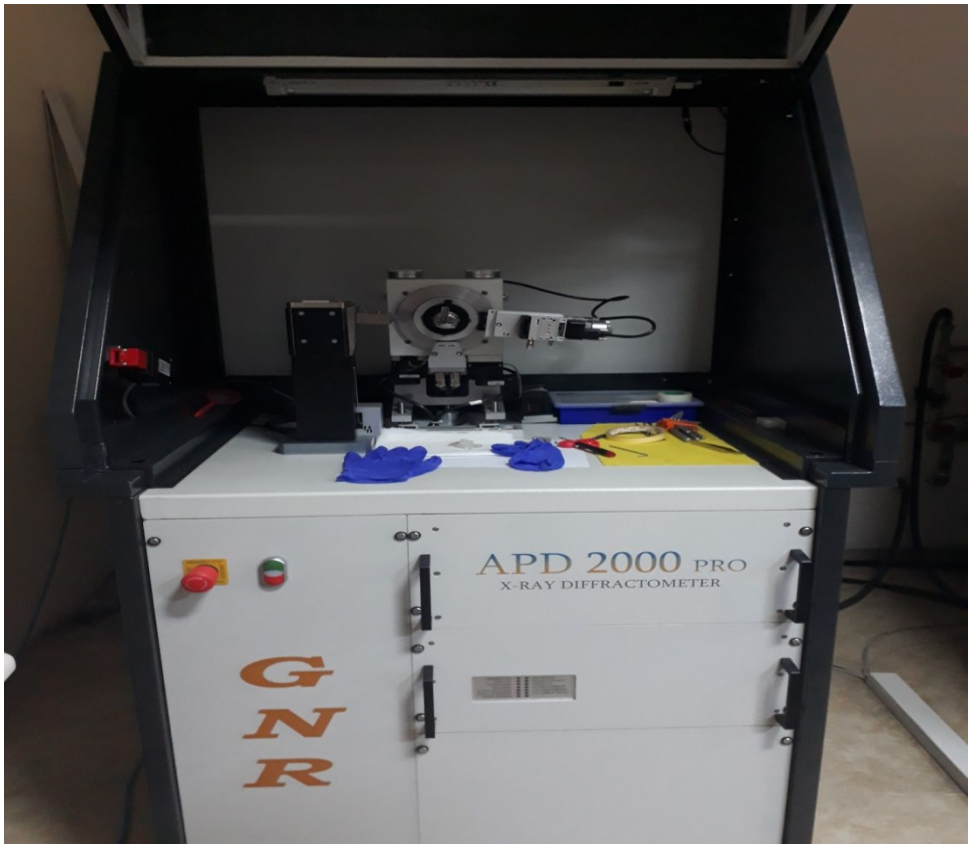


Şekil 3.2. Doğru akım (D.C.) püskürtme yöntemi

Şekil 3.2'de sistemdeki su, katot malzemesinin arka yüzeyinin hasar görmemesi ve anotun istenen şartlara göre ısıtılması veya soğutulması için tasarlandığı şekilde soğutulur. Argon gazı odaya sokulduğunda, anot-katot tabakası DC'ye maruz kaldığında ve gerilim uygulandığında, plazma oluşur. Argon iyonları, katetere sonuna doğru hızlanırken hedef materyali dağıtır ve bu işlemin sonunda substrat yüzeyi kaplanır. Ge üzeri Au, Si, Ti ve ZnO kaplamalar kristalize olarak ve yüksek X-ışınları pikini sağlamak için 500 nm olarak kaplandı. Örnekler oda sıcaklığında 10^{-3} mbar kristalize değeri oluşturcak şekilde 500 nm kalınlıkta kaplama yapılmıştır.

3.2. X-Işını Kırınımı

X ışını kırınımı (XRD), malzemelerin kristal yapısını incelemek için kullanılan deneysel bir yöntemdir. XRD ölçümünde, monokromatik bir X-ışını ışını numuneye çarpar ve ölçüm geometrisine bağlı olarak kırılır, yansır veya dağılır. Kırılmış ışınların yoğunluğu dedektör ile farklı açılardan ölçülür. Numunenin yapısal bilgisi ölçülen eğriden çıkarılabilir.



Şekil 3.3. Kullanılan APD 2000 PRO difraktometrenin bir fotoğrafını gösterir CuKa, X-Işını tüp, optik, gonyometre, detektör, bilgisayar ve X-ışını jeneratöründen oluşur.

X-ışını kırınımı (XRD), yarı iletken malzemelerin, özellikle de heteroyapıların çalışılmasında önemli bir araçtır. Bu nedenle, homojonksiyonlar ve heterojonksiyonları içeren cihazların çalışmasına dahil edilmelidir. Ölçümün ana amacı, epitaksiyal tabakaların örgü sabitini belirlemektir. Bu değerleri kullanarak, strainin doğru hesaplanması ve heterojektörün bileşimi yapılabilir. Ayrıca, arayüz kalitesi, eğme ve diskolasyon yoğunluğu hakkında bilgi de incelenebilir. X-ışını kırınımı kullanarak malzeme kompozisyonlarının hesaplanması ile ilgili detaylar başka yerlerde açıklanmıştır [42,43].

Bu karakterizasyon tekniği, kristal büyümesinin, malzeme kompozisyonunun tanımlanmasının ve cihaz waferlarının yeterliliğinin optimizasyonu için çok önemlidir.

3.3. Bragg Yasası ve XRD Ölçümlerinde Kullanımı

Tek renkli bir ışın olan X-ışınları bir kristalin atomlarından dağılır ve belirli açılarda yapıcı bir girişim oluşturur. Bragg'ın yasası, kırılan radyasyonun en yüksek yoğunluğunun θ tatmin edici şekilde bulunduğunu belirtmektedir.

$$2d \sin\theta = \lambda \tag{3.1}$$

Burada $d = \sqrt{h^2+k^2+l^2}$ çinko blende kristal kafesinin kırılma (hkl) kristal düzlemleriyle örgü sabiti (a) ve X-ışını radyasyonunun dalga boyu arasındaki mesafedir. Kristalin örgü sabitinden alınan bilgiler 2θ-ω ölçümleriyle elde edilebilir. Bu ölçümde, aparatın 2θ ve ω açıları, difraksiyon açısının function bir fonksiyonu olarak kırınım yoğunluğunu elde etmek için eş zamanlı olarak değiştirilir. Bu tezde, yüksek çözünürlüklü ve tozlu kurulumlarda 2θ-ω ölçümleri yapılmıştır. Bu yapıların faydaları farklıdır ve bu nedenle ikisi arasındaki seçim, numuneye bağlıdır.

Epitaksiyel filmlerde yüksek çözünürlüklü XRD ölçümleri yapılmıştır. Bu ayarın açısal çözünürlüğü, tabakaların kalınlığı ile örgü sabitini tanımlamak için son derece yüksek ve sonuç olarak, zorlanma durumu ve kristalin bileşimi doğrudur. Bu tez için HRXRD ölçümleri, kırılmış ışın tarafındaki bir üç eksenli geometri kullanılarak, 12 arklık bir analizör kristal kabul açısı ile gerçekleştirilmiştir. Gelen ışın demetinde, X-ışını ışını bir X-ışını aynası boyunca yönlendirildi ve dört Ge (220) kristal ile monokromatize edilmiştir.

Toz XRD kurulumu tipik olarak malzemelerin mükemmel olmayan kristal yapı ve yönelimle incelenmesi için kullanılır. Bu tezde nanotel örneklerinin yapısal çalışmaları için toz XRD kurulumu seçilmiştir. Tipik olarak, toz XRD ölçümleri polikristalin toz örneklerine, bunun sonucu olarak uygulandı. Bu tipteki numunelerin içindeki kristalitler birbirlerine göre eğimlidir. Toz XRD kurulumu, yapının zayıf X-ışını optikleri ve yüksek X-ışını radyasyon yoğunluğu nedeniyle bu örneklerin XRD çalışmaları için çok uygundur. Zayıf optikler, her zaman Bragg'ın durumunun yerine getirilebileceği ve kristal yapısına ilişkin bilgilerin toplandığı bir şekilde hizalanmış bazı kristalitelerin var olduğunu garanti

eder. Toz XRD kurulumunun optikleri sadece iki yarıktan oluşur, X-ışını kaynağının önünde dedektörün ve diğerinin önünde ölçüm sırasında açılan her ölçüm açısında numunenin aynı bölgesinden saçılır.

3.4. Enine Tarama Ölçümleri

X-ışını kırınımlı eğri ölçümlerinde, 2θ açısı Bragg açısına ve kırılan yoğunluğa göre sabittir. Numune ω açısı sallanarak ölçülür. Sonuç olarak, sallanan eğri ölçümleri, sallanma eğrisinin pikinin genişliğini ve şeklini etkileyen kristal bozukluğundan gelen bilgiyi içerir. Bozukluk, kristal kusurları, alttaş eğriliği, mozaik oluşumu ve aynı zamanda fonon titreşimleri gibi birçok sebepten kaynaklanabilir [44]. Bu bilgiyi sağlamak için enine tarama ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Enine tarama ölçümü, yüksek çözünürlüklü bir sallanma eğrisinin ölçümünü ifade eder ve yüksek çözünürlüklü XRD ölçümlerinde kullanılan kuruluma benzer şekilde gerçekleştirilir. Enine tarama piki profilleri, içinde iki bileşenli çizgi şekillerine sahip olabilir. Dar bileşen, numunenin Bragg tepe noktasıdır (uzun menzilli yapısal korelasyondan kaynaklanır) ve geniş bileşen dağınık saçılmadan ortaya çıkar. Kristallerdeki bozukluk hakkında bilgi içerir. Sallanan eğri ölçümlerinde (açık bir dedektörle gerçekleştirilen omega-scan), geniş ve dar bileşenler tipik olarak üst üste biner. Bu tezde, enine tarama analizi (bir arka monokromatör ile gerçekleştirilen omega-scan), rotasyon eğrisinin genişlemesini incelemek ve Létoublon tarafından sunulan yöntemle silikon üzerinde büyütülmüş GaP tabakalarında antifaze bozukluğuna ilişkin bilgileri çıkarmak için gerçekleştirilmiştir [45]. Bu yöntem, 5. bölümde daha ayrıntılı olarak açıklanmıştır.

3.5. Sinkrotron XRD Topografisi

X-ışını kırınımı topografisi, X-ışını görüntülerinin kırınımı kullanılarak kristalin numunelerden alındığı deney yöntemini ifade eder. X-ışını topograflarında, atomlar dağılma merkezleri gibi davranır. Böylelikle, kristal kusurları saran gerilim alanı görüntüde bir kontrast farkı oluşturur. Yeterli küçüklükte ($<10^4 cm^{-2}$) kusur yoğunluğu durumunda, topograflardan misfit ve vida dislokasyonları, istifleme hataları, ikiz faylar, boşluklar, çökeltiler ve manyetik alanlar gibi farklı tipte kristalin defektleri çözülebilir. Tekniğin daha ayrıntılı bir incelemesi için bkz. Ref. [46]. X-ışını topografları, Hamburg'daki Hasylab beamline F1'de senkrotron radyasyonu kullanılarak yüksek

çözünürlüklü X-ışını filmleri (Slavich VRP-M) üzerine kaydedildi. Pozitron depolama halkasının bükme mıknatıs kaynağından yayılan X ışını, birçok farklı Bragg yansıması için dalga boyları bulunduğunu garanti eden geniş bir dalga boyuna sahiptir. Bu nedenle, X-ışını ışını bir dizi örgü düzlemi tarafından kırılır ve numuneyi belirli bir yönelime hizalamaya gerek yoktur. Geri yansıma ve iletim X-ışını topografları, numuneyi hizalayarak, yatay doğrultunun <110> yönüne karşılık gelmesini ve [001] kristal yönünün, gelen ışına göre 12° 'lik bir açıda tutulmasını sağlayacak şekilde kaydedilmiştir. Film ile örnek arasında 60 mm'lik mesafe vardır.

4. TEORİ

Örgü kusurlarının kusur alanlarından etkilenmiş bir kristalde X-ışınları saçılmasının şiddeti çift korelasyon fonksiyonun Fourier transformu olarak ifade edilebilir [5, 44].

$$I_{(q)} = \int G_{(r)} exp\left(iqr\right) dr \tag{4.1}$$

$$G\left(r\right) = < exp\left\{ iQ\left[U_{(r)} - U\left(0\right) \right] \right\} > \tag{4.2}$$

Burada $Q=K^{out} - K^{in}$ saçılma vektörüdür (K^{in} ve K^{out} sırasıyla gelen ve saçılanın dalga vektörüdür) ve $q=Q-Q_0$ en yakın ters örgü vektörü Q_0 dan Q nun küçük sapmasıdır. Şöyle ki, q<<Q U(r) verilen r noktasında kristalin bütün kusurları tarafından üretilen yer değiştirmeleridir. Eğer bütün kusurlar aynı tipte ise $U(r) = \sum_R U(r-R)$ toplam yer değiştirme ile verilebilir. Burada U(r) orjinde yerleşen bir kusur ile r noktasında üretilen yer değiştirmedir ve R kusurların pozisyonlarıdır. Birkaç kusur tipinin durumlara genişletilmesi basittir. Açı parantezleri < > kusur dağılımını istatistiksel verilerin ortalamasını verir. Eşitlik 5.2 bir sonsuzluğu ifade eder ve istatistiksel olarak düzgün örneği tanımlar. Şöyle ki, orjin seçimi yeterlidir. Sınırlı hacim etkileri konu olduğu zaman örneğin, epitaksiyel tabakalarda örgü uyumsuzluğu kaynaklı diskolasyonlar için korelasyon fonksiyonu G (r_1, r_2), U(r_1)-U(r_2) yer değiştirmelerin farkına bağlıdır ve Eşitlik 5.1 üstel bir fonksiyondur, $exp\left[iq\left(r_1 - r_2\right)\right]$ ile verilir [47].

Geniş diskolasyon yoğunluğu durumunda kırınım pikleri geniştir ve korelasyon fonksiyonu Eşitlik 5.2 küçük uzunluklar (r=$\left|\,r\,\right|$) için hesaplamak gerekir. Diğer bir ifadeyle diskolasyon bozuklukları R^{-1} olarak çok yavaşça bozunur ve korelasyon fonksiyonunun ana katkısı, uzaktaki diskolasyonlara göredir, R>>r daha sonra yer değiştirmelerin farkı Taylor serisi olarak açılabilir [4].

$$Q\left[U\left(R+r\right) - U\left(R\right)\right] \approx \left(r\nabla\right)\left[Q.U\left(R\right)\right] = r_i Q_i \frac{\partial U_j}{\partial U_i} \tag{4.3}$$

Gaussian rastgele değişimleri olarak R diskolasyon pozisyonları düşünülerek biri istatistiksel ortalama yapabilir ve Eşitlik 5.4 ile verilir.

$$G(r) = exp\left[-\frac{\rho}{2} \int \left(r_i Q_j \partial u_j / \partial R_i \right)^2 dR \right] \tag{4.4}$$

Burada ρ diskolasyon yoğunluğudur. Gaussian istatistiğinin kullanılması geniş diskolasyon yoğunluklarının sunulan durumunu sağlar. Birisi, $G(r) = exp\left[-1/2 < Q\left[U_{(r)} - U(0) \right] >^2 \right]$ olarak Eşitlik 5.4'ü genelleştiremez. Bu sonraki formül diskolasyonun olduğu düzlem boyunca kesen Burgers vektörü tarafından diskolasyon yer değiştirmesinin süreksizliğinin çözümünü başarısız kılar. Aksine Eşitlik 5.3 süreksizliğe sahip değildir. Çünkü $Q_0 . b$ çarpanı, örgü vektörü ve ters örgü vektörünün 2π lik bir çarpanıdır**.** Küçük diskolasyon yoğunluklarının işlemi rastgele dağılmış kusurlar için poisson istatistiklerine dayalı çok daha genel bir yaklaşımı gerektirir [47, 44, 11, 48]. Ancak Eşitlik 5.4 sunulan denklem çalışma için yeterlidir. Dislokasyonla rahatsız edilen alan, evrensel bir R bağımlılığına sahip olur, $\partial uj/\partial Ri = b\psi ij/2\pi R$ ile yazılır. Burada b, Burgers vektörü uzunluğudur. Ψ_{ij} bir mertebesinde boyutsuz bir faktördür. Bu faktör yalnız azimuth açısına bağlıdır. (ϕ) Daha sonra biri

$$G(r) = exp\left\{ -C\rho r^2 \int \frac{dR}{R} \right\} \tag{4.5}$$

elde edebilir [25]. Burada:

$$C = \gamma \left(Qb \right)^2 / 4\pi \text{ ve } \gamma = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\hat{r} \varphi_{ij} \hat{Q}_j \right)^2 d\varnothing \tag{4.6}$$

olur. C ve ɣ bir mertebesinde boyutsuz faktördür. Burada $\hat{r}$ ve $\hat{Q}$ sırasıyla $\hat{r}$ ve $\hat{Q}$ 'nın yönlerinde birim vektörlerdir. Eşitlik 5.5'daki integral ξ_r den (Burada ξ yaklaşık 1 boyutsuz faktördür) sınırlı L hacmine kadar alınır. Bu hacim korelasyonsuz diskolasyonların bütünü için kristal hacime eşittir. Daha sonra integral L/ξ_r ye eşittir ve $G(x) = exp(-C\rho x^2 \ln L/x)$ denklemin'den elde edilir. Diskolasyon korela edildiği zaman toplam Burgers vektörü (Kesin karakteristik skala boyunca ortalama olarak) sıfırdır. Korelasyon fonksiyonunun fonksiyonel formu değişmez fakat L skala durumunda bir anlamsızlığa sahiptir [10, 12-15]. Kendimizi paralel düz dislokasyonlarla sınırlıyoruz ve z ekseni olarak dislokasyon çizgilerinin yönlerini alıyoruz. Daha sonra,

$$I(q) = \int G(r) exp(iqr) dr \tag{4.7}$$

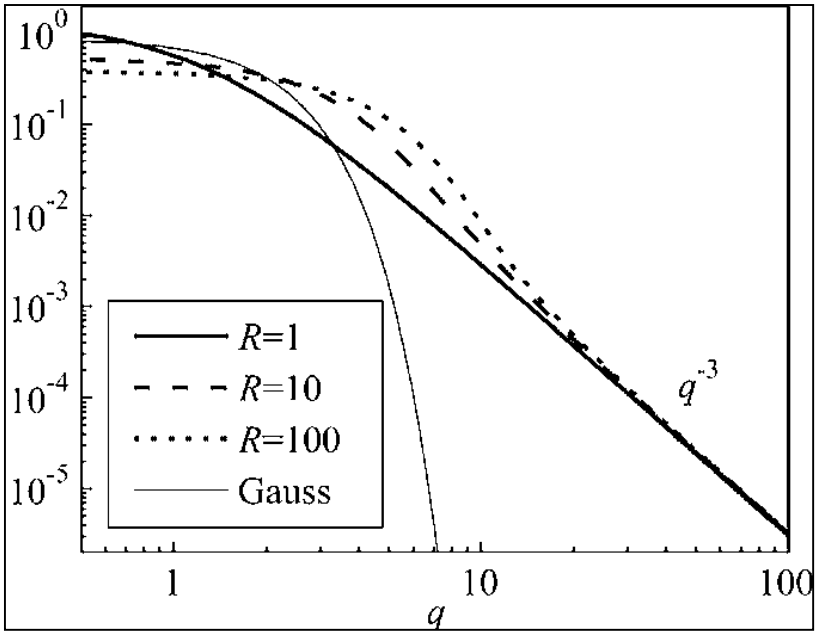
$$I(q) = \xi(q_s) \int G(x,y) exp\left(iq_x x + iq_y y\right) dxdy \tag{4.8}$$

olarak yazılır. Burada $f(q_z)$ fonksiyonu dislokasyon çizgilerinin yönünde öteleme değişmezler üzerinedir. Korelasyon fonksiyonunun yörüngesel bağımlılığı ve dolayısıyla xy düzleminde şiddet dağılımı ɣ faktörü ile tanımlanabilir (Eşitlik 5.6). Onun açısal bağımlılığı çok zayıf burgers vektörlerinin kristalografik olarak eşdeğer yörüngeleri üzerine bir ortalamada sonra Eşitlik 5.16 ve denklem 5.17'i aşağıda görebiliriz. Daha sonra seçilen bir yönde korelasyon fonksiyonunun çalışması korelasyon fonksiyonu yoğunluğu araştırmaları için yeterlidir. Doğal olarak geniş açık dedektör ile ölçümler yaparak yapılabilir. Şiddet Eşitlik 5.8 daha sonra K^{out} saçılma dalgasının bütün yönleri üzerine toplanır. Bu araştırmanın sonucu toz ortalamasına çok benzerdir $|K^{out}|$=k küresinin tam kısmı (Burada k, dalga vektörüdür.) K^{out} yönüne paralel düzlemler ile yer değiştirilebilir. Bu düzlem üzerine şiddet 8 denkleminin integrasyonu bir boyutlu integraline yol açar.

$$I(q) = \int G(x) exp(iqx / \cos\varnothing) dx \tag{4.9}$$

Burada, φ,(x,y) düzlemi ve K^{out} arasında açıdır (Şekil 1.1'e bakınız). Açı, $\sin\Phi = \sin\psi.\sin\theta_b$ ile verilir. Burada ψ,(x,y) düzlemi ve $\hat{Q}$ saçılma vektörü arasındaki açıdır ve θ_B Bragg açısıdır. X ekseni, diskolasyon çizgilerine dik düzlem üzerinde K^{out} un yansıması boyunca seçilir. Toz kırınım durumu için uygun ifade yalnız x'in yönü ile farklı olur. $\hat{Q}$ yönlenmiş filmler için ve toz kırınımları için $\hat{Q}$ boyunca çalışır. Eşitlik 4.9'daki *q* dalga vektör K^{out} un yönünde q nun iz düşümüdür. Şöyle ki, $q=Q_w.\cos\theta_B$ burada w, pik merkezinde açısal sapmadır. Eşitlik 4.9'deki $\hat{r}$ yönü kırılan dalganın yönündedir. Şöyle ki, ɣ parametresi diskolasyon kusurlarının bütün bileşenlerinin karmaşık kombinasyonlarını içerir. $\hat{Q}$ hem örgü zorlamasını hem de rotasyon bileşenlerini içerir. Özellikle GaN filminin kırınım çalışmalarında tartışılan eğilme ve burkulma katkılarını içerir. Aksine toz kırınım durumu $\hat{Q}$ yönde $\hat{r}$ için korelasyon fonksiyonunun hesaplanmasını gerektirir. $\hat{Q}$ yönde ς koordinatı ile verilerek korelasyon fonksiyonu ifadesi diskolasyon civarında u_ς^2 kare zorlama bileşeni ortalaması ile toz kırınımı durumunda elde edilir. Denklem 4.9'daki integrasyon L de daha küçük uzunluklar ile sınırlandırılır. İntegralin nümerik gelişiminde Eşitlik 4.9 da verilen sınır integrasyon limiti, katı olarak sınırlı bir aralık üzerine alınan Fourier integrallerinde

yaygın olarak ortaya çıkan I(q) de fiziksel olmayan osülasyonlara yol açar. Uygun bir somut integral menzilini sonsuza genişleterek ve ln[(L+ξx)/ξx] ile Eşitlik 1.1' de ln(L/ξx) yerine koyarak elde edilir. ξ=ξ(Q) için ifadeler karmaşık ve diskolasyon pozisyonlarında korelasyonların tipine bağlıdır [10,13-15]. Biz kendimizi ilk yaklaşıma sınırlandırabiliriz. Bu yaklaşım korelasyon tipi ξ= | Q.b | /2π bağlı değildir [5].



Şekil 4.1. R parametresinin farklı değerleri için integral Eşitlik 5.12'ün davranışı bütün eğriler ortak q^{-3} asimtotu ile birleşir. Bir gaussian pik profili karşılaştırma için ince çizgi ile gösterilir [5]

Sonuç olarak yukarıdaki denklemler birleştirilerek kırınım şiddeti [5],

$$I(w) = \frac{I_i}{\pi}\int_0^{\infty} exp\left(-Ax^2 \ln\frac{B+x}{x}\right)\cos(wx) + I_{backgr} \qquad (4.10)$$

ile tanımlanır. Burada I_i pilin toplam şiddetidir. Burada biz, maksimum w dan açısal sapmaya kadar ilerletiriz ve background şiddeti $I_{background}$ tam formülü sağlamak için eklenir. Aşağıda sunulan deneysel piklerin fitleri için bu formül kullanılır. Parametre A (diskolasyon yoğunluğunu tanımlar.) ve B (diskolasyon korelasyon menzilini tanımlar.) $A = f\rho b^2$ ve $B = gLIb$ ile tanımlanır. Burada f ve g kırınım geometrisi ile verilen boyutsuz niceliklerdir.

$$f = \frac{g\cos^2 Æ}{4p\cos^2 Æ_B} \qquad g = \frac{2p\cos q_B}{\cos Æ\cos j} \tag{4.11}$$

Bu denklemlerde, g için ifade ξ═ | Q.b | /2 π yaklaşımı dikkate alan kenar diskolasyonlar için yazılır. Vida diskolasyonlar için bu ifadedeki cosψ.sinψ ile yer değiştirmelidir. Burgers vektöörü b nin uzunluğu hem kenar hem de vida diskolasyonları için büyük Burgers vektörleri gibidir. $pb^2<<1$ boyutsuz çarpan diskolasyon çizgilerine dik bir düzlemde b.b her bir b.b hücresine karşı diskolasyonların ortalama sayısıdır. Dört parametre A, B, I_i, $I_{background}$ ile Eşitlik 4.11 pik profillerini elde edebilmek için aşağıda kullanılır ve diskolasyon yoğunluğunu ve L uzunluğunu elde ederiz.

$$I(q) = \int_0^\infty exp\{-x^2 \ln[(R+x)/x]\}\cos(qx)dx \tag{4.12}$$

Burada fonksiyon Eşitlik 4.12 nümerik olarak R parametrelerinin farklı değerleri için hesaplanabilir. Eğriler ortak q^{-3} asimtotunda birleşirler. Bu asimtot R ye bağlı değildir [10, 14, 17, 19]. Daha sonra Eşitlik 4.10 (pik genişliği ile karşılaştırıldığında geniş omegalar için) asimtotik bir davranışa sahiptir;

$$I\left(w\right) = A\frac{I_i}{w^3} + I_{backgr} \tag{4.13}$$

R yaklaşık 1 için pik tepesine oldukça yakın iken R için denklem davranışının tepe noktasının merkezi kısmı Gaussian açısal menzili gaussian yaklaşımının geçerli olduğu artan R değerleri için geçerlidir. Hesaplanan piklerin FWHM değerleri için artan R ile artar ve $\Delta q \approx 2.4 + lnR$ ile yaklaşılabilir. Şiddet dağılımının ikinci sınırlı hareketleri kullanılır [5].

$$U_2(w) = \int_{-w}^{w} \overline{w}^2\left[I(\overline{w}) - I_{backgr}\right]d\overline{w} \tag{4.14}$$

Amacı asimtotik davranış 4.14'den diskolasyon yoğunluğunu elde etme amacıyla türetildi. Eşitlik 5.14 durum sonsuz limitte alınırken ıraklaşır. Eşitlik 4.13 ü Eşitlik 4.14' de yerine koyarak,

$$U_2(w) = wl_iA\ln w + sabit \tag{4.15}$$

bulunur. Eşitlik 4.6'daki yörüngesel C faktörünün hesaplanması gerekir [12-14] (Toz kırınım durumunda r vektörü, (x y) düzleminde saçılma vektörü Q nun Q dik izi boyunca yönlenir. Bu durumda r vektörü (x y) düzlemi üzerinde K^{out} un izi boyunca yönlenir ve Q dik vektör ile bir α açısı yapar. (Şekil 1'e bakınız). Bu açı cos α =sin QB*cosψ/cos ϕ ile verilir. Kenar diskolasyon için Eşitlik 4.6'yi geliştirmek hegzagonel Burgers vektörlerinin mümkün yörüngeler üzerine ɣ 'yı ortalarız. (Diskolasyon çizgileri altı katlı eksen boyunca alınır.) ve

$$\gamma_\varepsilon = \frac{9-8\nu^2-2(3-4\nu)\cos^2\alpha}{16(1-\nu^2)}\cos^2\varphi \qquad (4.16)$$

elde edilir. Burada ν poisson oranıdır. γ_e α 'ya zayıf bağlıdır. Örneğin hegzogonel GaN için ν=0,2 alarak yaklaşıklı olarak $\nu_e=0{,}7\cos^2\psi$ makul α açılarının bütün menzillerinde verilir. Vida diskolasyonları için hesaplama,

$$\gamma_\varepsilon = \frac{1}{2}\sin^2\varphi \qquad (4.17)$$

ile verilir. İki sınırlama durumu ilginçtir; Asimetrik eğilimli geometrinin sınır durumları olarak yalayarak gelen veya yalayarak çıkan yansıma durumları ile vida diskolasyonlarını çalışmak için simetrik Bragg yansıması uygun olur.

Simetrik Bragg yansımaları için ψ= π/2, $\Phi=\theta_B$ daha sonra φ=18π ve vida diskolasyonları için g=2π elde ederiz. Yalayarak gelen veya yalayarak çıkan geometri φ=ψ=0 limitindedir.

Şöyle ki, $f=\gamma/4\pi\cos^2\theta_B$ 'dir. Kenar dislokasyonlar içinde $g = 2\pi\cos\theta_b$ olur Epitaksiyel tabakasının sınırlılık kalınlığı t (tabaka düzlemin dik diskolasyonlar ile) Warren-Avverbach ansatz 'ını dikkate alır [7].

$$G(x) = G_d(x)G_s(x) \qquad (4.18)$$

$G_d(x)$ yukarıda düşünülen korelasyon fonksiyonudur. Sınırlı hacim etkilerini tanımlayan korelasyon fonksiyonu $G_s(x) = exp(-x/T)$ olarak yazılır. Bunun Fourier dönüşümü Lorentzian'dır ki bu fonksiyon kalınlık değişimleri üzerine ortalamadan sonra $[\sin(qT/2)/(qT/2)]^2$ sınırlı aralık fonksiyonunda tahminde bulunur. Asimetrik yansımada

Eşitlik 4.9 kırınım dalgasında yönleri boyunca T/cosφ etki kalınlığına yol açar. Sınırlı hacim düzeltmesi yerine Eşitlik 4.9'un nümerik integrasyonu ile şiddetin hesaplanması karmaşık değildir. Deneyin çözünürlüğü pik genişliği ile karşılaştırıldığında ihmal edilmese bile korelasyon Eşitlik 4.18, gerçek uzay fonksiyonu, R(x) ile çarpılmak zorundadır. Bu durumda nümeriksel integrasyonunun ek karmaşıklığının yol açmaz.

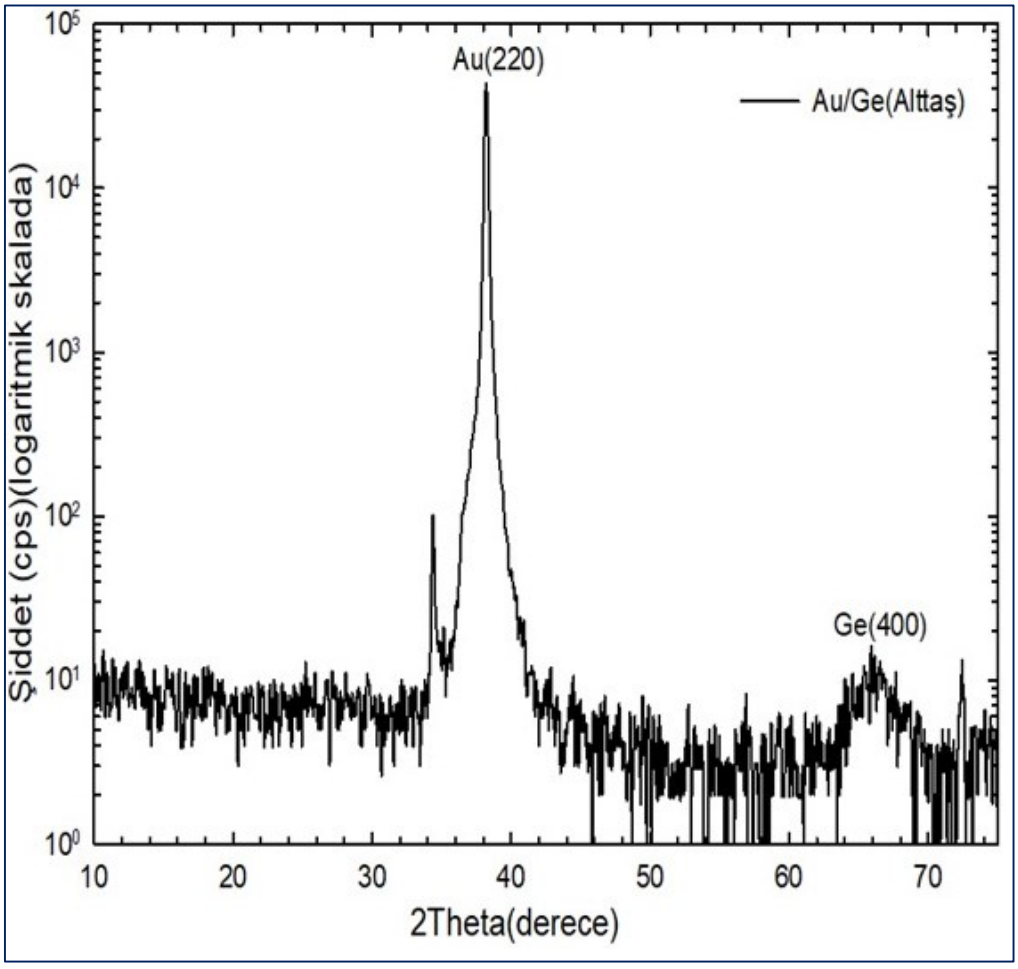
5. SONUÇ VE TARTIŞMA

Toz kırınımında pik profil analizlerinde son çalışmalar şiddet dağılımının sınırlı momentlerini hesaplayarak direk bir yönde q^{-3} asimptotunu kullanıldı. Ancak sınırlı rastgele diskolasyon yoğunluklarında görüntüleme menzilini pikin asimptotik kısmında elde edilemez. Bütün pik profilinin fiti diskolasyon dağılımını yoğunluğu ve görüntüleme menzili her iki parametresini sağlar. Pik profilini nümerik hesaplanması henüz bir boyutlu Fourier integrali içerir. Bu durum hızlıca hesaplanabilir. q^{-3} asimtotu kullanımı diskolasyon yoğunluğunun tanımlanabilmesi için çok daha güvenilir bir yoldur çünkü o diskolasyonlar arasında etkilenememesi ve her bir diskolasyon çizgisine yakın bölgelerdeki saçılmaya göredir. Şiddet dağılımının asimtotik kısmı GaN filmini x-ışını kırınım çalışmaları içermez. Diskolasyon yoğunluğu tanımlası pikleri FWHM 'larına dayanır. Hem hacim hemde kusur etkilerini içerdiği zaman Gaussian ve Lorentz fonksiyonlarını (Psevdo-Voigt) toplamlarını fit edilir ve gaussian kısmının FWHM kısmı diskolasyon yoğunluğu tanımlaması için kullanılır.

Simetrik veya asimetrik yansımalarının genişliği diskolasyon yoğunluklardan etkilenmesi ile pikin şekli değişir. Diskolasyon dağılımları aynı tür film kaplama ve büyütmelerde benzer olması olmasıdır. Hatta kısmi diskolasyonlar sahip filmler için verilen pik yansımasının genişliği diskolasyon yoğunluğuna yalnızca bağlı olmaz ayrıca sınırlı rastgele diskolasyon yoğunluğunda korelasyon menzillerine de bağlı olur. Bu çalışmada sunulduğu gibi kırınım piklerinin pik şekil analizi aynı zamanda korelasyon menzili genişliğinidir. Bu yüzden pik genişliğin basit düşünmesinden dolayı diskolasyon yoğunluğunun tahmin edilmesi çok daha güvenilir olmasıdır. Pik çizgi şekil analizi göstermektedir ki ve literatürden anlaşıldığı üzere filmlerinin x-ışını kırınım profilleri pikin merkezinde Gaussian'dır. Pik kuyrukları rastgele dağılmış diskolasyonlar ile kristallerin x-ışını kırınımın da karakteristik güç yasasına uyar. Analizör kristali ile omega eğrileri q^{-4} davranışına uyduğunda omaga eğrileri q^{-3} davranışını izleyen geniş açık bir dedektörle ölçülür [5].

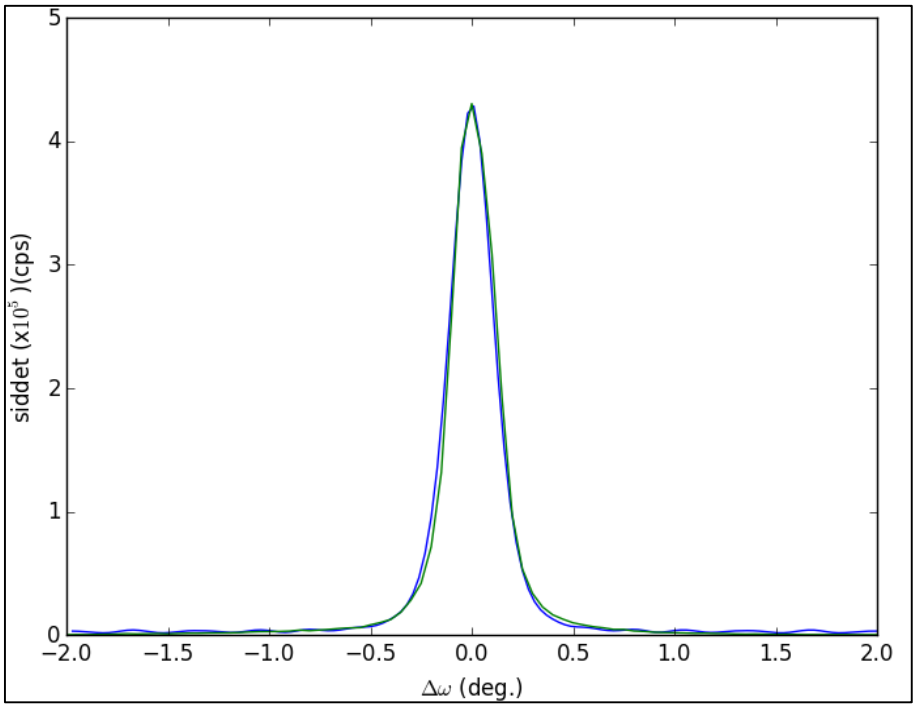
Omega eğrilerinin açık dedektörle hem deneysel ve teoriksel olarak çalışmak çok basittir. Çünkü kırınım yoğunluğu daha yoğundur daha geniştir ve pik profilleri bir boyutlu Fourier dönüşümleri ile çift korelasyon fonksiyonu dönüşerek kırınım yoğunluğunu tanmlanır. Kırınım profillerinin q^{-3} pik kuyrukları diskolasyon yoğunluklarını çok daha güvenilir

tanımlamasına izin verir ve diskolasyonlar arasındaki korelasyonlar ile daha yoğundur. Bütün kırınım profilleri uygun paremetrelerle ana denklem fit edildi. Bunlar; ortalama diskolasyon yoğunluğu ρ, görüntüleme menzili veya parçaık boyutu L ile verilir. Sonraki nicelik sıfıra eşit toplam burgers vektörü ile hücrelerin ortalama parçacık hacimlerine uygunluk gösterir [5]. Sonuç kısımlarda profil fit den dislokasyon sonucunu kıyaslamak için Scherrer denkleminin tersini karesi dislokasyon değerini verir literatürde sık olarak kullanılır [40].



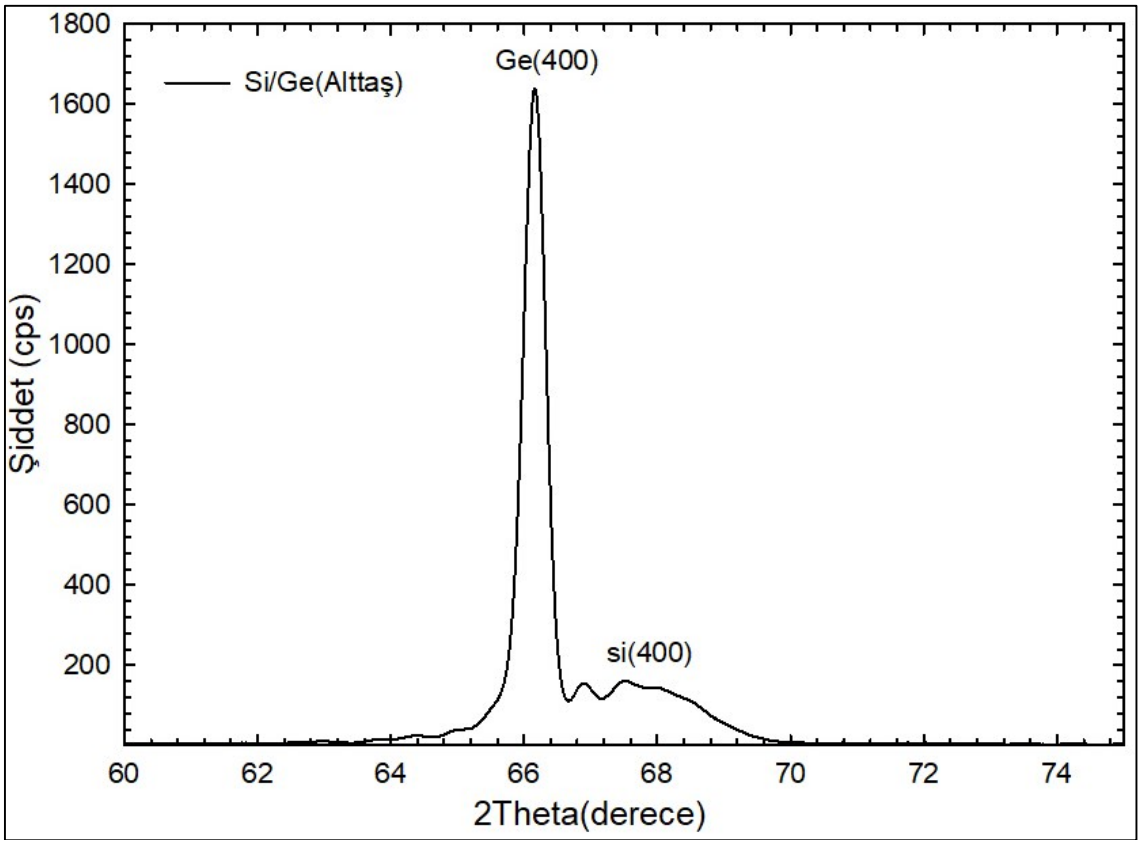
Şekil 5.1. Au/Ge(Alttaş) yapının 2Theta XRD taraması

Yukarıdaki şekil XRD 2xTheta karşılık şiddet eğrisini gösterir. Germanyum piki 66,017 derece ile (400) piki PDF-4-545 XRD database karşılılık gelir örgü uzunluğu *a*=5,657Å olur. Yapı yüzey merkezli kübik dir. Altın piki 66,017 derece ile (400) piki PDF 4-784 XRD database karşılılık gelir örgü uzunluğu *a*=4,079Å olur. Yapı yüzey merkezli kübikdir.



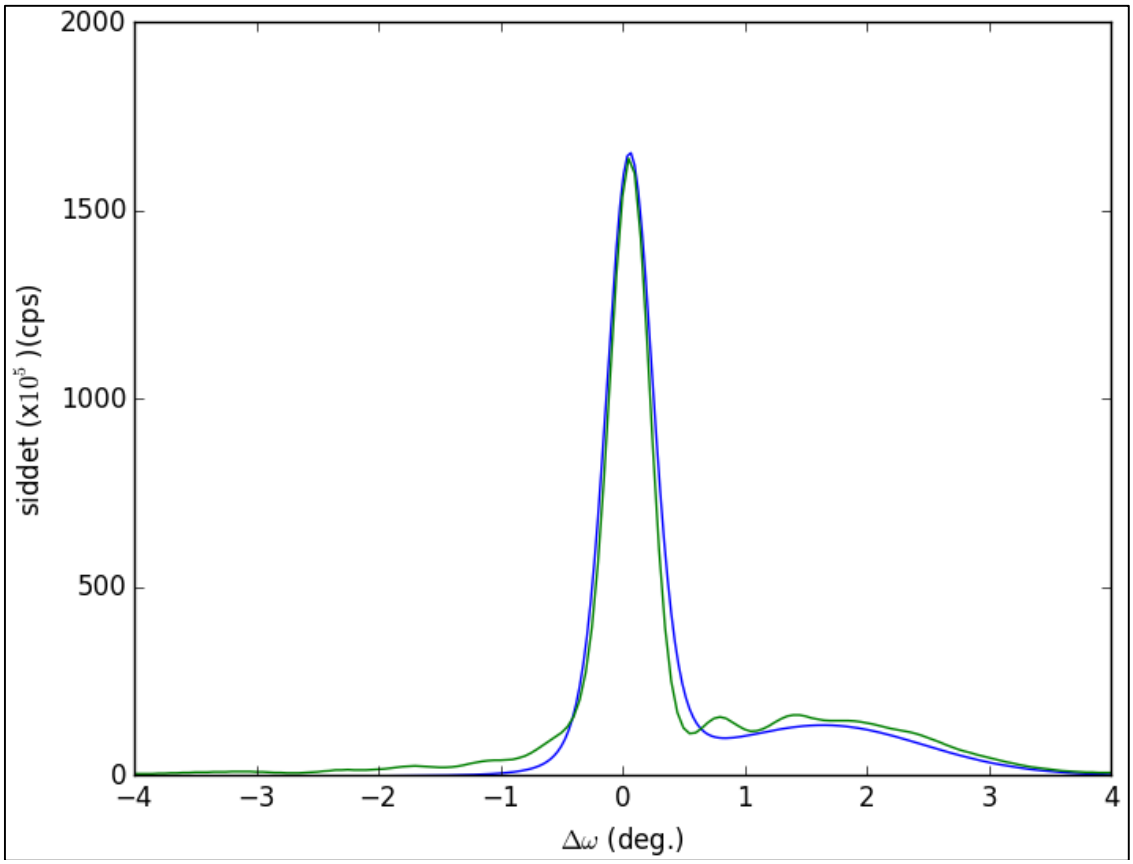
Şekil 5.2. Ge üzeri büyütülen Au tabakasının (220) XRD düzlem yansımasının profil fit eğrisi

Yukarıdaki şekil XRD Au'nun omega şiddet tarama eğrisini gösterir. XRD tarama eğrisi (yeşil renk) yukarıda verilen şiddet denklemi ile fit edilir. Fit eğrisi yeşil ile gösterilir. Şekil 5.2'de fit sonucundan $\rho_e b_e^2 = A/f = 6{,}52 \times 10^{-5}$ olarak germanyum üzeri altın elde ederiz. Burada b_e= 0,40786 nm kenar diskolasyon için Burgers vektörü uzunluğudur. Altın ince film için dislokasyon yoğunluğu $\rho e = 3{,}919 \times 10^{10}$ cm olarak bulunur. Basit Shereer denklemin yardumıyla (400) miller düzlemi üzeinden bulunan dislokasyon değeri 5.78×10^{10} a çok yakındır. Kenar diskolasyonlarını arasındaki ortalama uzunluklar $r_d = 1/\sqrt{\rho_e}$ =50,5 nm olur. Şekil 5(b) 'dan $L/b_e = B/\rho = 842$ verir. Bu durum L=343 olarak diskolasyon korelasyonların karakteristik uzunluklarını verir. Diskolasyon korelasyonları karakterize eden boyutsuz parametre örnek için $M = L/r_d$= 6,5 değerleri sonuç olarak elde edilir.



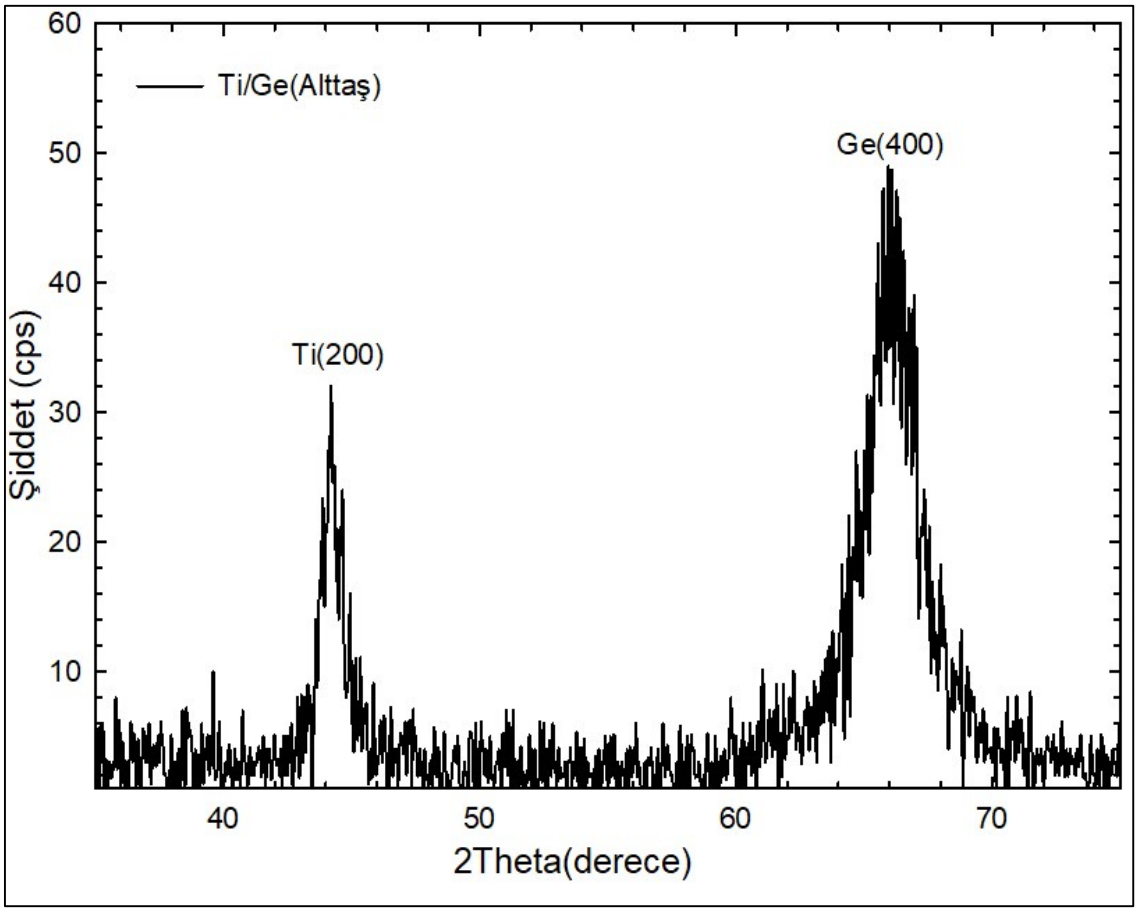
Şekil 5.3. Si/Ge(Alttaş) yapının 2Theta XRD taraması

Yukarıdaki şekil XRD 2xTheta karşılık şiddet eğrisini gösterir. Germanyum piki 66,017 derece ile (400) piki PDF 4-545 XRD database karşılılık gelir örgü uzunluğu *a*=5,657Å olur. Yapı yüzey merkezli kübikdir. Si piki 67,9 derece ile (400) piki PDF 75-589 XRD database karşılılık gelir örgü uzunluğu *a*=5,043Å olur. Yapı yüzey merkezli kübikdir. Şekil 5.3 den görüldüğü gibi Si'nun kristal yapısı düşük pik geniş yarı genişlikten dolayı örgü zorlaması ve Ge 004 düzlemine doğrı Si eğimli gözükmektir. Bu durumda ofsetlerle birlikte pik kayması birkaç dereceyi bulur.



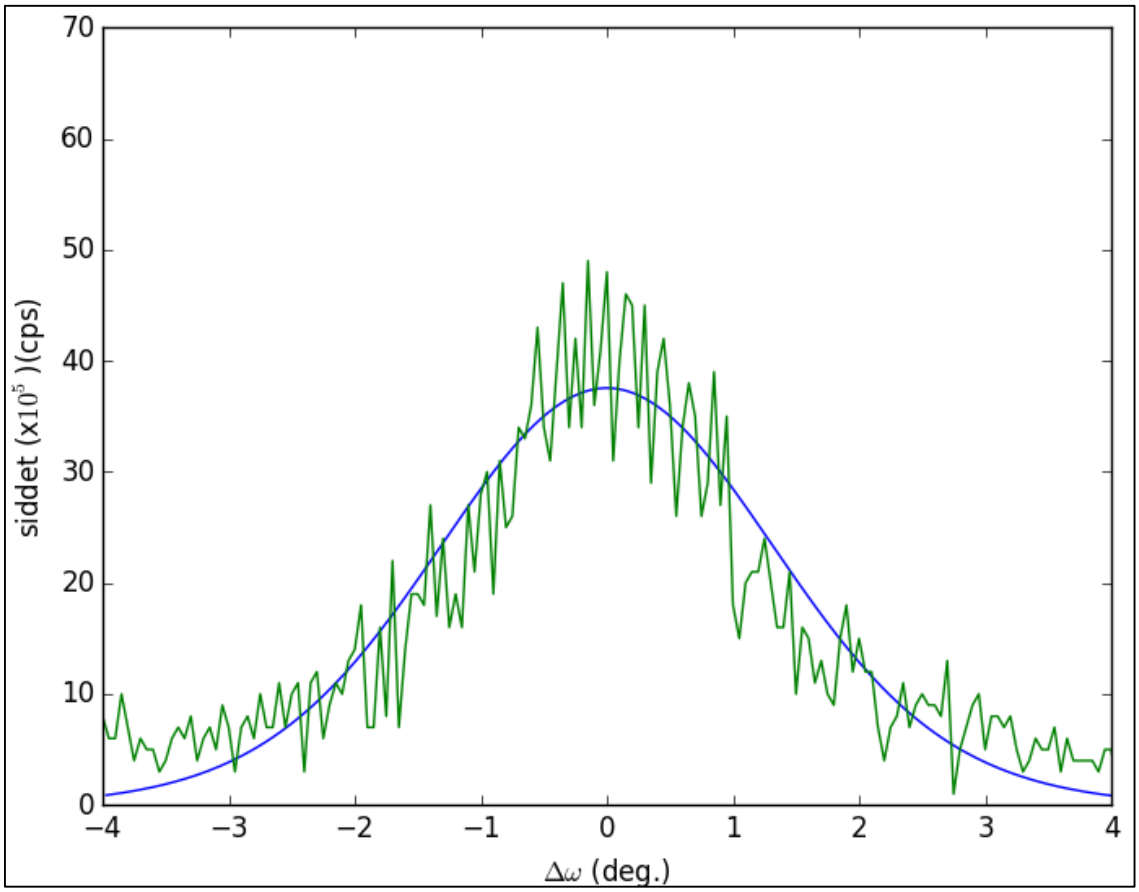
Şekil 5.4. Ge üzeri büyütülen Si tabakasının (400) XRD düzlem yansımasının profil fit eğrisi

Yukarıdaki şekil XRD Ge üzeri Si'nun omega şiddet tarama eğrisini gösterir. XRD tarama eğrisi (yeşil renk) yukarıda verilen şiddet denklemi ile fit edilir. Fit eğrisi yeşil ile gösterilir. Şekil 5.4'de fit sonucundan $\rho_e b_e^2 = A/f = 9.4 \times 10^{-4}$ olarak germanyum üzeri altın elde ederiz. Burada b_e= 0,5658 nm kenar diskolasyon için burgers vektörü uzunluğudur. Altın ince film için dislokasyon yoğunluğu $\rho_e = 4.03 \times 10^{10}$ cm olarak bulunur. Basit Shereer denklemin yardumıyla (400) miller düzlemi üzeinden bulunan dislokasyon değeri $6{,}55 \times 10^{10}$ a çok yakındır. Kenar diskolasyonlarını arasındaki ortalama uzunluklar $r_d = 1/\sqrt{\rho_e} = 49{,}75$ nm olur. Şekil 5(b)'dan $L/b_e = B/\rho = 1923$ verir. Bu durum L=1031 olarak diskolasyon korelasyonların karakteristik uzunluklarını verir. Diskolasyon korelasyonları karakterize eden boyutsuz parametre örnek için $M = L/r_d = 1{,}85$ değerleri sonuç olarak elde edilir.



Şekil 5.5. Ti/Ge(Alttaş) yapının 2Theta XRD taraması

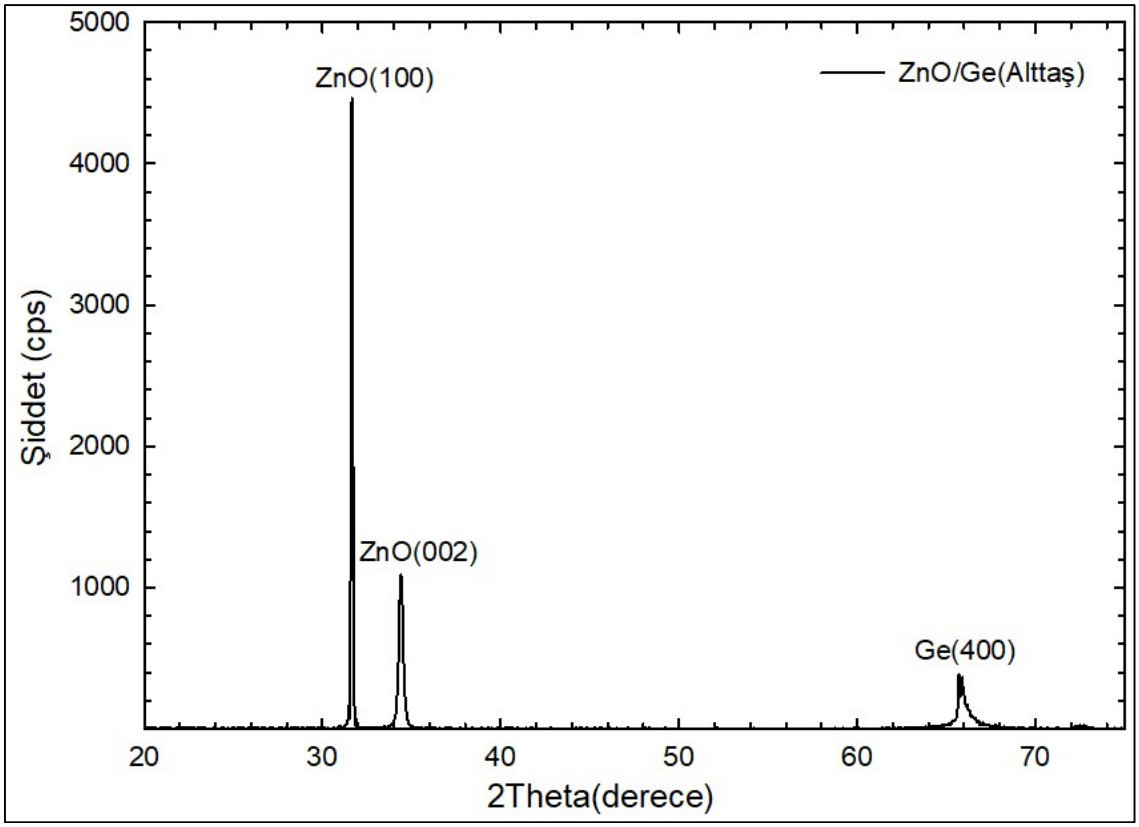
Yukarıdaki şekil XRD 2xTheta karşılık şiddet eğrisini gösterir. Titanyum piki 44,025 derece ile PDF 88-2321 XRD database karşılılık gelir örgü uzunluğu *a*=4,0600Å olur. Yapı yüzey merkezli kübik dir. Altın piki 66,017 derece ile (400) piki PDF-4-784 XRD database karşılılık gelir örgü uzunluğu *a*=4,079Å olur. Titanyum yapı yüzey merkezli kübikdir. Ti yapısının (200) düzlem pikinin düşük şiddetli tek çeşit poli kristal yapıda büyüdüğü görülür.



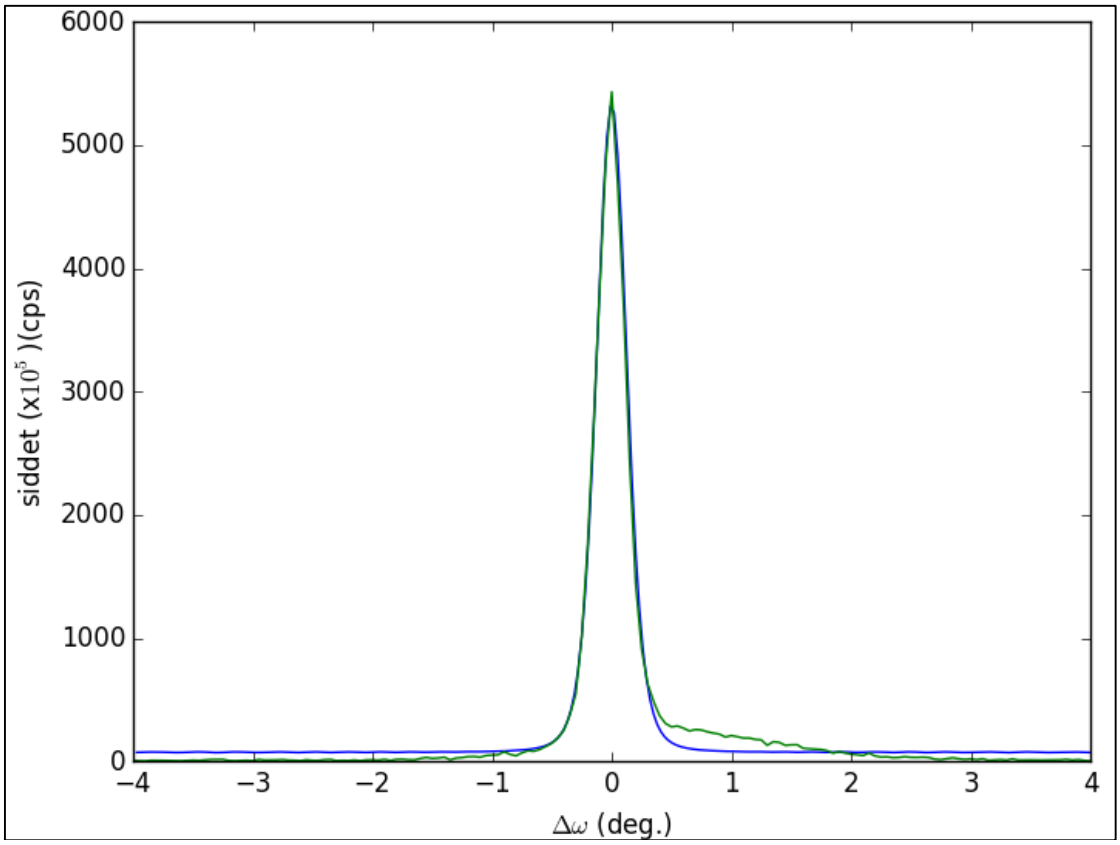
Şekil 5.6. Ge üzeri büyütülen Ti tabakasının (200) XRD düzlem yansımasının profil fit eğrisi

Yukarıdaki şekil XRD Au'nun omega şiddet tarama eğrisini gösterir. XRD tarama eğrisi (yeşil reknk) yukarıda verilen şiddet denklemi ile fit edilir. Fit eğrisi yeşil ile gösterilir. Şekil 5.6'da fit sonucundan $\rho_e b_e^2 = A/f = 2{,}5 \times 10^{-3}$ olarak germanyum üzeri altın elde ederiz. Burada b_e=0,32nm kenar diskolasyon için Burgers vektörü uzunluğudur. Altın ince film için dislokasyon yoğunluğu $\rho e = 6{,}1 \times 10^{10}$ cm olarak bulunur. Basit Shereer denklemin yardumıyla bulunan dislokasyon değeri 1.57×10^{10} ne çok yakındır. Bu hesap (200) miller düzlemi üzerinden hesap edildi. Kenar diskolasyonlarını arasındaki ortalama uzunluklar $r_d = 1/\sqrt{\rho_e}$ =9,299 nm olur. Şekil 6(b)'dan $L/b_e = B/\rho = 1898$ verir. Bu durum L=889 nm olarak diskolasyon korelasyonların karakteristik uzunluklarını verir. Diskolasyon korelasyonları karakterize eden boyutsuz parametre örnek için $M = L/r_d = 1{,}85$ değerleri sonuç olarak elde edilir.

Aşağıda şekil XRD 2xTheta karşılık şiddet eğrisini gösterir. ZnO piki 44,025 derece ile PDF 88-2321 XRD database karşılılık gelir örgü uzunluğu *a*=4,0600Å olur. Yapı yüzey merkezli kübik dir. ZnO pikleri 31,736 derece ile (100) piki ve 34.378 derece (002) piki ile PDF 89-1397 XRD database karşılığına gelir örgü uzunluğu *a*=3,253Å ve *c*=5,213Å olur. ZnO yapı hexagonal yapıdadır. ZnO yapının keskin XRD pikleri ile iyi kristalize yapıya sahiptir.

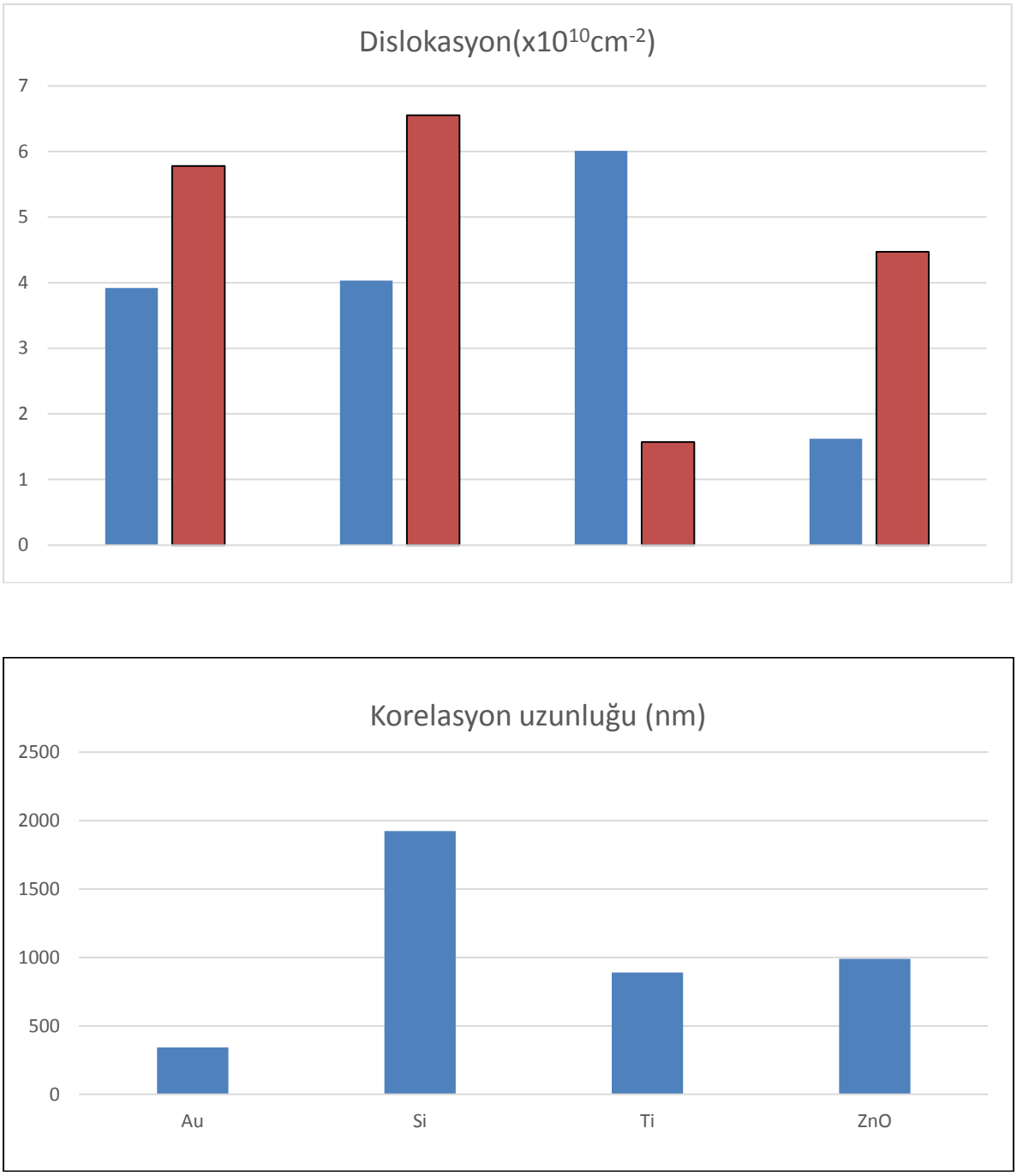


Şekil 5.7. ZnO/Ge(Alttaş) yapının 2Theta XRD taraması



Şekil 5.8. Ge üzeri büyütülen ZnO tabakasının (002) XRD düzlem yansımasının profil fit eğrisi

Yukarıdaki şekil XRD ZnO'nun Omega şiddet tarama eğrisini gösterir. XRD tarama eğrisi (yeşil renk) yukarıda verilen şiddet denklemi ile fit edilir. Fit eğrisi yeşil ile gösterilir. Şekil 5.8'de fit sonucundan $\rho_e b_e^2 = A/f = 4{,}42 \times 10^{-5}$ olarak germanyum üzeri altın elde ederiz. Burada b_e= 0,5241nm kenar diskolasyon için burgers vektörü uzunluğudur. Altın ince film için dislokasyon yoğunluğu $\rho_e = 1{,}62 \times 10^{10}$ cm olarak bulunur. Basit Shereer denklemin yardumıyla bulunan dislokasyon değeri 4.47×10^{10} ne çok yakındır. Bu hesap (100) ve (002) düzlemleri kullanılarak ortalama olarak hesap edilmiştir. Kenar diskolasyonlarını arasındaki ortalama uzunluklar $r_d = 1/\sqrt{\rho_e}$ =78 nm olur. Şekil 5(b) 'den $L/b_e = B/\rho = 1898$ verir. Bu durum L=989 olarak diskolasyon korelasyonların karakteristik uzunluklarını verir. Sonuç olarak sputtering sistemi ile Ge üzeri Au, Si, Ti ve ZnO büyütülen ince filmlerin XRD taramaları sonrası düzlem yansımaların profil fitleri yapılmıştır. Fit sonucu ile dislokasyonlar ve korelasyon uzunluğu elde edilmiştir ve Karşılaştırma için şekil 5.9 da verilmiştir. Sonuçlara göre dislokasyonlar aynı mertebede ($\sim 10^{10}$) sonuç vermiştir. Ayrıca scherrer temelli $1/D^2$ den hesaplanan dislokasyon şekilde kırmızı olarak gösterilir. Burada En yüksek dislokasyon Ti olurken en yüksek kristal boyutu Si da gözlenmiştir.



Şekil 5.9. Au, Si, Ti ve ZnO tabakaların $1/D^2$ den (kırmızı) ve profil fitden (mavi) dislokasyon ve korelasyon uzunluğu karşılaştırması

KAYNAKLAR

1. Borbély, A., and Groma, I. (2001). Variance method for the evaluation of particle size and dislocation density from X-ray Bragg peaks. *Applied Physics Letters, 79*(12), 1772-1774.

2. Bugaev, S. P., Zakharov, A. N., Oskomov, K. V., Sochugov, N. S., and Solovjev, A. A. (2003). *Rotating Cylindrical Magnetrons and Accelerators with Anode Layer for Large—Area Film Deposition Technologies*. In AIP Conference Proceedings 669, 373-376. AIP.

3. Busing, W. R., and Levy, H. A. (1967). Angle calculations for 3-and 4-circle X-ray and neutron diffractometers. *Acta Crystallographica, 22*(4), 457-464.

4. Camps, E., Escobar-Alarcón, L., Lopez, J., Zambrano, G., and Prieto, P. (2006, December). Characterization of DC magnetron sputtering plasma used for deposition of amorphous carbon nitride. *In AIP Conference Proceedings 875*, 161-164). AIP.

5. Cullity, B. D., and Stock, S. R. (2001). *Elements of X-ray diffraction.* (3rd edn). Englewood Cliffs, New York: Prentice-Hall.

6. De Bosscher, W., and Lievens, H. (1999). Advances in magnetron sputter sources. *Thin Solid Films, 351*(1-2), 15-20.

7. de Poucques, L., Imbert, J. C., Boisse-Laporte, C., Bretagne, J., Ganciu, M., Teulé-Gay, L., and Touzeau, M. (2006). Study of the transport of titanium neutrals and ions in the post-discharge of a high power pulsed magnetron sputtering device. *Plasma Sources Science and Technology, 15*(4), 661.

8. de Poucques, L., Imbert, J. C., Boisse-Laporte, C., Vasina, P., Bretagne, J., Teulé-Gay, L., and Touzeau, M. (2005). Spatial characterization of an IPVD reactor: neutral gas temperature and interpretation of optical spectroscopy measurements. *Plasma Sources Science and Technology*, *14*(2), 321.

9. Durukan, İ. K., Öztürk, M. K., Çörekçi, S., Tamer, M., Baş, Y., Özçelik, S. and Özbay, E. (2017). Microstructual Analysis with Graded and Non-Graded Indium Solar Cell. *Journal Of Nanoelectronıcs And Optoelectronıcs*, *12*(2), 109 -117.

10. Ehiasarian, A. P., Wen, J. G., and Petrov, I. (2007). Interface microstructure engineering by high power impulse magnetron sputtering for the enhancement of adhesion. *Journal of Applied Physics, 101*(5), 054301.

11. Groma, I. (1998). X-ray line broadening due to an inhomogeneous dislocation distribution. *Physical Review B, 57*(13), 7535-7542.

12. Groma, I., and Székely, F. (2000). Analysis of the asymptotic properties of X-ray line broadening caused by dislocations. *Journal of Applied Crystallography, 33*(6), 1329-1334.

13. Hammond, C. (2001). *The Basics of Crystallography and Diffraction. (2nd edn).* Oxford: Oxford University Press.

14. Hong, Z., Luan, L., Paik, S. B., Deng, B., Ellis, D. E., Ketterson, J. B., and Rossi, A. (2007). Crystalline hydroxyapatite thin films produced at room temperature—an opposing radio frequency magnetron sputtering approach. *Thin Solid Films, 515*(17), 6773-6780.

15. Hordon, M. J., & Averbach, B. L. (1961). X-ray measurements of dislocation density in deformed copper and aluminum single crystals. *Acta Metallurgica, 9*(3), 237-246.

16. Iseki, T. (2006). Flat erosion magnetron sputtering with a moving unbalanced magnet. *Vacuum, 80*(7), 662-666.

17. Kaganer, V. M., Brandt, O., Trampert, A., and Ploog, K. H. (2005). X-ray diffraction peak profiles from threading dislocations in GaN epitaxial films. *Physical Review B, 72*(4), 045423.

18. Kaganer, V. M., Köhler, R., Schmidbauer, M. R. O. R., Opitz, R., and Jenichen, B. (1997). X-ray diffraction peaks due to misfit dislocations in heteroepitaxial structures. *Physical Review B, 55*(3), 1793.

19. Kang, J. W., Jeong, W. I., Kim, J. J., Kim, H. K., Kim, D. G., and Lee, G. H. (2007). High-performance flexible organic light-emitting diodes using amorphous indium zinc oxide anode. *Electrochemical and Solid-State Letters, 10*(6), J75-J78.

20. Konstantinidis, S., Dauchot, J. P., Ganciu, M., Ricard, A., and Hecq, M. (2006). Influence of pulse duration on the plasma characteristics in high-power pulsed magnetron discharges. *Journal of Applied Physics, 99*(1), 013307.

21. Kouznetsov, V., Macak, K., Schneider, J. M., Helmersson, U., and Petrov, I. (1999). A novel pulsed magnetron sputter technique utilizing very high target power densities. *Surface and Coatings Technology, 122*(2-3), 290-293.

22. Krivoglaz, M. A. (1961). Theory of the scattering of x-rays by crystals containing defects. *Fizika Metallov Metalloped, 12*(4), 465-475.

23. Krivoglaz, M. A. (1996). *X-Ray and neutron diffraction in nonideal crystals*. Berlin: Springer.

24. Krivoglaz, M. A. (2012). *X-ray and neutron diffraction in nonideal crystals*. Berlin: Springer Science & Business Media.

25. Krivoglaz, M. A.; Ryaboshapka, K. P. (1963). Fizika Metallov i Metallovedenie, Theory of x-ray scattering by crystals containing dislocations. Case of random distribution of screw and edge dislocations in the crystal. *Journal Knowledge*, *15*, 18-31.

26. Krivoglaz, M. A., Martynenko, O. V., and Ryboshapka, K. P. (1983). Influence of Dislocation Arrangement Correlation on X-Ray-Diffraction by Deformed-Crystals. *Fizika Metallov I Metallovedenie*, *55*(1), 5-17.

27. Kupfer, H., and Wolf, G. K. (2000). Plasma and ion beam assisted metallization of polymers and their application. *Nuclear instruments and methods in physics Research section B: Beam in teractions with materials and Atoms, 166-167*, 722-731.

28. Lee, J. W., Cuomo, J. J., and Bourham, M. (2004). Plasma characteristics in pulsed direct current reactive magnetron sputtering of aluminum nitride thin films. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 22*(2), 260-263.

29. Li, T. L., and Hsu, S. L. C. (2007). Preparation and properties of a high temperature, flexible and colorless ITO coated polyimide substrate. *European Polymer Journal, 43*(8), 3368-3373.

30. Metzger, T., Höpler, R., Born, E., Ambacher, O., Stutzmann, M., Stömmer, R., and Strunk, H. P. (1998). Defect structure of epitaxial GaN films determined by transmission electron microscopy and triple-axis X-ray diffractometry. *Philosophical magazine A, 77*(4), 1013-1025.

31. Moram, M. A., and Vickers, M. E. (2009). X-ray diffraction of III-nitrides. *Reports on progress in physics, 72*(3), 036502.

32. Muralidhar, G. K., Musil, J., and Kadlec, S. (1996). Discharge characteristics of a facing target sputtering device using unbalanced magnetrons. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 14*(4), 2182-2186.

33. Musil, J., Heřman, D., and Šícha, J. (2006). Recent Advances in Sputter-Deposition, *Journal of Vacuum Science & Technology A, 24*(3), 521.

34. Musil, J., Šícha, J., Heřman, D., and Čerstvý, R. (2007). Role of energy in low-temperature high-rate formation of hydrophilic Ti O 2 thin films using pulsed magnetron sputtering. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 25*(4), 666-674.

35. Peterson, R., and Kaganer, V. M. (1994). Diffraction line profile of a two-dimensional hexatic. *Physical Review Letters, 73*(1), 102-105.

36. Sarakinos, K., Alami, J., and Wuttig, M. (2007). Process characteristics and film properties upon growth of TiOx films by high power pulsed magnetron sputtering. *Journal of Physics D: Applied Physics, 40*(7), 2108.

37. Sertel, T., Ozen, Y., Cetin, S. S., Öztürk, M. K., and Özcelik, S. (2017). GaP1−x−yAsyNx structures grown on Si and GaP substrates. *Journal of Materials Science-Materials In Electronics, 29*(3), 1939-1946.

38. Warren, B. E., and Averbach, B. L. (1950). The effect of cold-work distortion on X-ray patterns. *Journal of Applied Physics, 21*(6), 595-599.

39. Warren, B. E., and Averbach, B. L. (1952). The separation of cold-work distortion and particle size broadening in X-ray patterns. *Journal of Applied Physics, 23*(4), 497-497.

40. Wilkens, M. (1963). Über die Röntgenstreuung an Kristallen mit Versetzungen III. Die asymptotische Darstellung von Debye-Scherrer-Linienprofilen. *Physica Status Solidi (b), 3*(9), 1718-1737.

41. Wilkens, M. (1969). Das mittlere Spannungsquadrat $\langle\sigma^2\rangle$ begrenzt regellos verteilter Versetzungen in einem zylinderförmigen Körper. *Acta Metallurgica*, *17*(9), 1155-1159.

42. Wilkens, M. (1970). in Fundamental Aspects of Dislocation Theory, (edited by J. A. Simmons, R. de Wit, and R. Bullough). *National Bureau of Standards (U.S.) Spec. 317*(2), 1195.

43. Wilkens, M. (1970). The determination of density and distribution of dislocations in deformed single crystals from broadened X-ray diffraction profiles. *Physica status solidi (a), 2*(2), 359-370.

44. Williamson, G. K., and Hall, W. H. (1953). X-ray line broadening from filed aluminium and wolfram. *Acta Metallurgica, 1*(1), 22-31.

45. Window, B. (1995). Recent advances in sputter deposition. *Surface and Coatings Technology, 71*(2), 93.

46. Yıldırım, M., ve Durmuş, H. (2007). Silikon ve Germanyum'un Yasak Enerji Band Aralıklarının Düşük Sıcaklık Ölçümü ile Belirlenmesi, *Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fen Dergisi*, 2(30), 93-96.

47. Yoon, S. S., Kim, D. O., Park, S. C., Lee, Y. K., Chae, H. Y., Jung, S. B., and Nam, J. D. (2008). Direct metallization of gold patterns on polyimide substrate by microcontact printing and selective surface modification. *Microelectronic Engineering, 85*(1), 136-142.

48. Krivoglaz, M. A., and Ryaboshapka, K. P. (1963). Fizika Metallov i Metallovedenie, Theory of x-ray scattering by crystals containing dislocations. Case of random distribution of screw and edge dislocations in the crystal. *Journal Knowledge, 15*, 18-31.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler



Soyadı, adı	: DERVİŞOĞLU, Hasan Celal
Uyruğu	: T.C.
Doğum tarihi ve yeri	: 28.06.1987, Ardahan
Medeni hali	: Bekar
Telefon	: 0 (554)962 68 65
e-mail	: h.c.dervisoglu@gmail.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik	Devam ediyor
Lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik	2015
Lisans	Anadolu Üniversitesi / Maliye	2015
Lise	Ankara Tuzluçayır Y.D.A. Lisesi	2005

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2018- devam ediyor	Gazi Üniversitesi Fotonik Uygulama ve Araştırma Merkezi	XRD Uzmanı

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

- Dervişoğlu, H. C., Öztürk, M. K., ve Özçelik, S. (2018, 15 Mayıs). *Ge Alttaş Üzeri Au'nun X- ışını kırnım pik profilleri (X-ray diffraction peak profiles of Au on Ge substrate)*. International 1st Light and Light Based Tecnologies Workshop (1. Işık ve Işık Temelli Teknolojiler Çalıştayı). Gazi Üniversitesi Mimar Kemaleddin Salonu, Ankara.

Hobiler

Futbol, Basketbol, Kick Box



GAZİ GELECEKTİR..