

TOBB EKONOMİ VE TEKNOLOJİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**KUANTUM NOKTALARIN ELEKTRİK VE GERİNİM ALANLARI ETKİSİ
ALTINDA MODELLENMESİ VE TASARIMI**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Nur Seda AYDIN

Mikro ve Nanoteknoloji Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. Ersin Emre ÖREN

ARALIK 2017

Fen Bilimleri Enstitüsü Onayı

.....
Prof. Dr. Osman EROĞUL
Müdür

Bu tezin Yüksek Lisans/Doktora derecesinin tüm gereksinimlerini sağladığını onaylarım.

.....
Prof. Dr. Hamza KURT
Anabilimdalı Başkan V.

TOBB ETÜ, Fen Bilimleri Enstitüsü'nün 141611013 numaralı Yüksek Lisans Öğrencisi **Nur Seda AYDIN**'ın ilgili yönetmeliklerin belirlediği gerekli tüm şartları yerine getirdikten sonra hazırladığı "**KUANTUM NOKTALARIN ELEKTRİK VE GERİNİM ALANLARI ETKİSİ ALTINDA MODELLENMESİ VE TASARIMI**" başlıklı tezi **07.12.2017** tarihinde aşağıda imzaları olan jüri tarafından kabul edilmiştir.

Tez Danışmanı: **Yrd. Doç. Dr. Ersin Emre ÖREN**
TOBB Ekonomive Teknoloji Üniversitesi

Jüri Üyeleri: **Prof. Dr. Turgut BAŞTUĞ (Başkan)**
TOBB Ekonomive Teknoloji Üniversitesi

Yrd. Doç. Dr. Aytaç ÇELİK
Sinop Üniversitesi

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, alıntı yapılan kaynaklara eksiksiz atıf yapıldığını, referansların tam olarak belirtildiğini ve ayrıca bu tezin TOBB ETÜ Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlandığını bildiririm.

Nur Seda AYDIN

.....

ÖZET

Yüksek Lisans

KUANTUM NOKTALARIN ELEKTRİK VE GERİNİM ALANLARI ETKİSİ ALTINDA MODELLENMESİ VE TASARIMI

Nur Seda AYDIN

TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Mikro ve Nanoteknoloji Anabilim Dalı

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Ersin Emre ÖREN

Tarih: Aralık 2017

Kuantum noktalar (KN), 2-50 nm boyutlarında, metalik veya yarıiletken parçacıklardır. KN'lerde enerji düzeyleri kuantize olup, iyi tanımlanmış bant aralıkları bulunmaktadır ve bu enerji düzeyleri KN'lerin boyut, şekil belirli bir bölgedeki dizilim/yoğunluk ve malzeme kompozisyonu ayarlanarak kontrol edilebilmektedir. Stranski-Krastanov (SK) ince film büyütme metodu ile dislokasyon gibi kusurları içermeyen ve birbirlerine ince bir ıslatma katmanı ile bağlı KN'lerin üretimi yapılabilmektedir. Bu özellikleri nedeni ile, KN'ler fotovoltailer, tek elektron transistörler, lazerler gibi elektronik, fotonik ve manyetik birçok yeni cihazın üretilmesi/geliştirilmesi için düşünülmekte ve denenmektedir.

DeneySEL çalışmalar, oluşan KN'lerin şekil ve büyüklüklerinde; başlangıç film kalınlığı, kristal yapı/yönelim, difüzyon, yüzey katılığındaki anizotropi, ıslatma katmanının özellikleri, denge ıslatma açısı, sistemde bulunan uyumsuzluk gerinimleri ve uygulanan elektrik alanın yönü/şiddeti gibi faktörlerin önemli etkilerinin olduğunu göstermektedir. Ancak, bu etkileri kullanarak elde edilecek KN'lerin özelliklerini kontrol etmemizi sağlayacak, eğriliğe sahip yüzey ve arayüzeylerin çeşitli kuvvet

alanları altındaki morfolojik gelişimi/evrimi ile ilgili teorik modeller halen geliştirilmeye devam etmektedir. SK büyüme modu ile, kendi kendine organize olabilen (self-assembled) ve istenilen morfolojik özelliklere sahip KN'ler elde edebilmek için, farklı kuvvet alanları (elektrik alan ve gerinim alanları) altında KN çekirdeklenmesi, büyümesi ve morfoloji değişimleri hakkında detaylı bilimsel bilgi birikimine ihtiyaç vardır. Bu bilgilerin, nanoyapılı KN'lerin optoelektronik özelliklerinin hassas bir şekilde kontrol edilebilmesini sağlayarak, yeni KN fabrikasyon tekniklerinin geliştirilmesi ve yeni KN-tabanlı cihazların tasarlanmasının önünü açması beklenmektedir.

KN'lerin yapısal ve elektronik özelliklerinin kontrol edilmesi için gerinim kuvvetlerine ek olarak önerilen bir diğer yöntem ise elektrik alan uygulanmasıdır. Bu tekniğin, teknolojik açıdan gerinim alanlarına göre daha kolay uygulanabileceği öngörülmektedir. Bu tez kapsamında kuantum nokta ve dizilerinin heteroepitaksiyel ortamlarda oluşum dinamikleri, taşınım kinetiği ve evrimi eş zamanlı gerinim ve elektrik alanları altında ilk kez modellenmiş ve simülasyonlar ile incelenmiştir. Bu çalışmada, öncelikle KN morfolojik evrimi ve ıslatma katmanının oluşumu yönetici diferansiyel denklemler ve gerçekçi sınır koşulları ile modellenmiş, bu denklemler sayısal çözümlene yöntemleri ile çözülmüş ve yapılan simülasyonlar sonucunda kristal yapı/yerleşim, difüzyon ve yüzey katılığının şiddeti ve anizotropisi, yüzey enerjileri gibi malzeme özellikleri ile uygulanan dışsal elektrik ve gerinim alanlarının etkileri eş zamanlı olarak incelenmiştir.

Simülasyonlardan elde edilen veriler sonucunda, malzeme özelliklerine göre hangi dışsal kuvvet alanlarının uygulanması durumunda ne tür kararlı nanoyapılar elde edileceği hakkında bilgiler elde edilmiştir. Bu tez çalışması sonucunda elde edilen bilgilerin, istenilen kullanım alanları için gerekli optimum özelliklere sahip kuantum nokta nanoyapıların tasarımına yardımcı olması beklenmektedir.

Anahtar Kelimeler: Kuantum noktalar, İnce filmler, Yayınım, Yönsel malzeme özellikleri, Bilgisayar simülasyonu.

ABSTRACT

Master of Science

MODELING AND DESIGN OF QUANTUM DOTS UNDER THE EFFECT OF ELECTRIC AND STRESS FIELD

Nur Seda AYDIN

TOBB University of Economics and Technology
Institute of Natural and Applied Sciences Science Programme
Micro and Nanotechnology Science Programme

Supervisor: Assist. Prof. Dr. Ersin Emre OREN

Date: December 2017

Quantum dots are metallic and semiconductor nano materials having sizes between 2-50 nanometers. QDs have discrete energy levels and thus a well-defined band gap, which may be engineered by controlling their size, morphology, arrangement/density and material compositions. Stranski Krastanov (SK) growth mode leads to the formation of dislocation-free nanoislands, which are interconnected with a thin wetting layer. These unique properties make QDs promising candidates for designing novel electronic, photonic and magnetic devices, such as single electron transistors, lasers and solar cells, with improved performance and reliability.

Experimental studies demonstrated that initial thickness of the film, crystallographic structure/orientation, diffusion and surface stiffness anisotropies, wetting contact angle, mismatch and residual stresses and the strength as well as direction of the applied external electric field are among the several parameters that affect the final morphology of nanoislands. Despite intense attention and extensive research on capillary-driven shape and microstructural evolution under various force fields, it

continues to be a challenging theoretical problem in materials science. To be able to produce quantum dots with controlled morphology and self-assembly we need to understand their growth kinetics and morphology differentiation under various force fields in detail. This knowledge will allow us to control the morphology and thus the optoelectronic properties of produced QD nanostructures and lead us to develop novel fabrication techniques and design novel QD-based technologies.

Experimental studies have shown that applied electric field has an effect on the QD formation and thus may be used to control structural and electronic properties of quantum dots together with residual and applied stresses. This technique is thought to be technologically more feasible in contrast to application of stress fields. In this thesis, formation, spontaneous evolution and stability of single quantum dots and quantum dot series in hetero-epitaxial systems under the simultaneous action of electric and strain fields has been studied for the first time. In this thesis, we numerically solved the the system of differential equations governing the evolution dynamics of QDs with realistic boundary conditions and finally carried out extensive simulations to reveal the interplay between the final equilibrium QD shapes and the material properties (crystal structure, surface energies, diffusion and surface stiffness anisotropies) and the applied external fields (electric and strain fields).

Finally, based on the simulation results, we obtained the tendencies related to the equilibrium QD shapes for a given set of material properties and applied external force fields. The knowledge gained from these simulations will help us to control and design the QD nanostructures with optimum properties.

Keywords: Quantum dots, Thin films, Diffusion, Anisotropic material properties, Computer simulation.

TEŐEKKÜR

Çalıřmalarım boyunca deęerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren hocam Yrd. Doç. Dr. Ersin Emre ÖREN'e, kıymetli tecrübelerinden faydalandığım TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi Malzeme ve Nanoteknoloji Mühendislięi ve Biyomedikal Mühendislięi Bölümleri öğretim üyelerine ve destekleriyle her zaman yanımda olan aileme ve Biyonanotasarım Laboratuvarı'nda birlikte çalıştığım arkadaşlarıma çok teşekkür ederim.

Ayrıca, tez kapsamında geliřtirdiğimiz programların kodlanmasında ve yorumlanmasındaki katkı ve yardımları nedeniyle Prof. Dr. Ömer Tarık OĞURTANI'ya ve Yrd. Doç. Dr. Aytaç ÇELİK'e teşekkürlerimi sunarım.

Son olarak, yüksek lisans eğitimim boyunca sağladıkları burs imkanları için TOBB ETÜ'ye ve bu çalışmaların yapılması için sağladıkları desteklerden dolayı TÜBİTAK'a (315M222 nolu proje) teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	iv
ABSTRACT	vi
TEŞEKKÜR	viii
İÇİNDEKİLER	ix
ŞEKİL LİSTESİ	xi
KISALTMALAR	xv
SEMBOL LİSTESİ	xvi
1. GİRİŞ	1
1.1 Tezin Amacı	1
1.2 Kuantum Noktalarda Kuantize Olmuş Enerji Seviyeleri	1
1.3 Kuantum Noktaların Üretim Teknikleri	2
1.3.1 Kimyasal sentez.....	2
1.3.2 Litografi.....	3
1.3.3 Epitaksiyel büyüme	3
1.4 Kuantum Noktaların Kullanım Alanları.....	5
1.4.1 Bilgi depolayıcılar ve KN bilgisayarlar.....	5
1.4.2 Lazerler.....	6
1.4.3 Güneş panelleri.....	7
2. LİTERATÜR ÖZETİ	9
2.1 Deneysel Çalışmalar	9
2.2 Modelleme Çalışmaları (Teorik Çalışmalar).....	13
3. TEORİ VE MATEMATİKSEL MODEL	17
3.1 Elektrik Alan Denkleminin Sınır Elemanları Yöntemi Kullanılarak Sayısal Çözümü ve Programlanması	21
4. SİMÜLASYON SONUÇLARI VE YORUMLAR	29
4.1 Yön-Bağımsız (İzotropik) Sistemler	29
4.1.1 Yön-bağımsız sistemlerde denge ıslatma açılarının etkileri.....	30
4.1.2 Yön-bağımsız sistemlerde gerinim etkileri.....	33
4.1.3 Yön-bağımsız sistemlerde elektrik alan etkileri	38
4.1.4 Yön-bağımsız sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve denge ıslatma açısı ile kontrolü	41
4.1.5 Yön-bağımsız sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve gerinim alanlarıyla kontrolü	45
4.2 Yön-Bağımlı (Anizotropik) Sistemler	49
4.2.1 Yön-bağımlı sistemlerde yüzey katılığı etkisi	50
4.2.2 Yön-bağımlı sistemlerde gerinim etkisi	55
4.2.3 Yön-bağımlı sistemlerde gerinim ve yüzey katılığı etkileri	56
4.2.4 Yön-bağımlı sistemlerde denge ıslatma açısının etkileri.....	61
4.2.5 Yön-bağımlı sistemlerde elektrik alan ve kristal eğim açısının etkileri	63
4.2.6 Yön-bağımlı sistemlerde elektrik alan ve yüzey katılığı etkisi	71
4.2.7 Yön-bağımlı sistemlerde elektrik alan ve gerinim etkisi.....	76
4.2.8 Yön-bağımlı sistemlerde elektrik alan ve denge ıslatma açısının etkileri .	94

5.SONUÇ VE ÖNERİLER.....	101
KAYNAKLAR.....	109
ÖZGEÇMİŞ.....	115



ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1:	KN boyutlarıyla enerji aralıklarının değişimi.....	2
Şekil 1.2:	(a) Tabaka büyümesi (Frankvan der Merve modü), (b) Adacık ve ince film büyümesi (Stranski Krstanov modü), (c) Adacık büyümesi (Volmer Weber modü).....	4
Şekil 1.3:	GaAs matriks üzerinde büyütülen InAs KN dizilerinin çoklu hücre yapısını gösteren TEM görüntüsü.....	7
Şekil 2.1:	GaAs KN yoğunlukların azalan sıcaklık değerleriyle artışı.....	10
Şekil 3.1:	Laplace denkleminin iki boyutlu problem için temel analitik çözümünün (Denklem 8) grafiği.....	22
Şekil 3.2:	Temel analitik fonksiyonun notasyonu.....	23
Şekil 3.3:	Q' Qya yaklaşırken AB boyunca alınan integralin limiti.....	23
Şekil 3.4:	Dairesel sistem için analitik (noktalar) ve sayısal çözümün (renkli çubuklar) karşılaştırılması.....	28
Şekil 3.5:	Program akış şeması.....	28
Şekil 4.1:	Başlangıçta yüzeyde oluşturulmuş bir damlacığın zamanla değişerek dengeye ulaşması.....	29
Şekil 4.2:	(a) İslatma açılarının zaman ile değişim grafiği ve (b) simülasyonların örnek çıktıları (Şengül, 2014).....	30
Şekil 4.3:	Farklı denge ıslatma açıları, (a) 15°, (b) 45°, (c) 75° için KN'lerin zamanla evrimi ($\Sigma=0$).....	31
Şekil 4.4:	Farklı KN sistemlerinde (a) GaAs, (b) GaSb, (c) InAs, (d) InSb boyut ile enerji seviyelerinin değişimi (Suman ve diğ., 2014).....	32
Şekil 4.5:	Bir altlık ve üzerine depozit edilen malzemenin farklı kafes parametreleri ve altlığa uygulanan itme ve çekme kuvvetleri.....	33
Şekil 4.6:	Gerinim ve denge ıslatma açısı ile KN'lerin en boy oranlarının değişimi.....	34
Şekil 4.7:	Farklı gerinim kuvvetleri altında elde edilen kuantum noktaların en-boy oranları.....	35
Şekil 4.8:	Bir KN sisteminin farklı gerinim değerlerindeki morfolojisi.....	35
Şekil 4.9:	İzotropik bir sistemde gerinim ve denge açılarına bağlı KN fragmentasyonu.....	36
Şekil 4.10:	KN sistemi ve tepe eğriliklerinin hesaplandığı düğüm noktaları.....	37
Şekil 4.11:	Denge ıslatma açılarının (a) ve gerinim kuvvetlerinin (b) KN tepe eğriliklerine etkisi.....	38
Şekil 4.12:	Elektrik alan altında başlangıç damlacığının zamanla (kırmızıdan – mora doğru) ulaştığı denge şekilleri.....	39
Şekil 4.13:	Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri.....	39
Şekil 4.14:	(a) KN tepe yüksekliğinin, (b) KN genişliğinin, (c) KN en boy oranlarının (d) KN tepe eğriliklerinin elektrik alan ile değişimleri.....	40
Şekil 4.15:	Filmin uzunluğunun (a) ve kalınlığının (b) elektrik alan ile değişimi.....	41

Şekil 4.16: Farklı denge açıları için gerinimsiz durumda KN morfolojilerinin elektrik alan ile değişimi.....	42
Şekil 4.17: KN, ara faz geçişi, film, bozulma morfoloji fazlarını gösteren denge ıslatma açısı- elektrik alan faz diyagramı ($\Sigma = 0$).....	43
Şekil 4.18: İzotropik sistemde denge ıslatma açısının $\theta_{eq}=75^\circ$ için elektrik alan kuvvetlerinin KN morfolojisine etkisi.....	44
Şekil 4.19: KN'lerin elektrik alan altında yükseklik, genişlik, en boy oranı ve tepe eğriliğinin değişimi ($\Sigma = 0$, $\theta_{eq}=75^\circ$).....	44
Şekil 4.20: Elektrik ve gerinim kuvvetleri altında başlangıç damlacığının zamanla (kırmızıdan – mora doğru) ulaştığı denge şekilleri ($\Sigma=0.5$,	45
Şekil 4.21: Farklı gerinim kuvvetlerinde ve elektrik alan etkisi altında KN morfolojileri.....	46
Şekil 4.22: Farklı gerinim kuvvetlerinde ve elektrik alan etkisi altında KN morfolojileri ($\theta_{eq}=45^\circ$).....	47
Şekil 4.23: (a) $\Sigma= 0$, (b) $\Sigma= 0.5$, (c) $\Sigma= 1$ gerinim kuvvetleri ve elektrik alan etkisindeki KN denge morfolojileri.....	48
Şekil 4.24: Yüzey merkezli kübik yapıda $\{110\}$, $\{100\}$, $\{111\}$ yönleri.....	50
Şekil 4.25: Yüzey katılığı anizotropisinin farklı düzlemlerde göstermiş olduğu davranışlar, $A=5$	51
Şekil 4.26: Yüzey katılığı parametresi ile KN en boy oranları ve KN tepe eğriliklerinin kontrolü.....	51
Şekil 4.27: Yüzey katılığının KN'lerin en boy oranları ve KN tepe eğriliklerine etkisi.....	52
Şekil 4.28: $\{110\}$ düzleminde farklı kristal eğim açılarının KN morfolojilerine etkisi.....	53
Şekil 4.29: $\{100\}$ düzleminde farklı kristal eğim açılarının KN morfolojilerine etkisi.....	54
Şekil 4.30: $\{111\}$ düzleminde farklı kristal eğim açılarının KN morfolojilerine etkisi.....	54
Şekil 4.31: (a) KN tepe yükseklikleri ile, (b) KN genişlikleri, (c) KN en-boy oranları ile gerinim ilişkisi.....	55
Şekil 4.32: $\{110\}$ yüzeyinde farklı gerinim kuvvet değerleri altında KN'lerin zamanda ilerleyerek denge morfolojisine ulaşması.....	56
Şekil 4.33: $\{110\}$ yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 90^\circ$ durumları için en boy değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).....	57
Şekil 4.34: $\{110\}$ yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 90^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).....	58
Şekil 4.35: $\{100\}$ yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 45^\circ$ durumları için en boy değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).....	58
Şekil 4.36: $\{100\}$ yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 45^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).....	59
Şekil 4.37: $\{111\}$ yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 30^\circ$ durumları için en boy oranlarının değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).....	60
Şekil 4.38: $\{111\}$ yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 45^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).....	600

Şekil 4.39: Farklı denge ıslanma açılarında en/boy oranının ve tepe eğriliğinin anizotropi şiddetine bağlılığı ($\phi=90^\circ$).....	61
Şekil 4.40: Farklı denge ıslanma açılarında en/boy oranının ve tepe eğriliğinin anizotropi şiddetine bağlılığı ($\phi=45^\circ$).....	62
Şekil 4.41: Farklı denge ıslanma açılarında en/boy oranının ve tepe eğriliğinin anizotropi şiddetine bağlılığı ($\phi=30^\circ$).....	62
Şekil 4.42: $\phi=0^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.....	64
Şekil 4.43: $\phi=60^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.....	66
Şekil 4.44: $\phi=120^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü....	67
Şekil 4.45: {110} yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.....	68
Şekil 4.46: {100} yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.....	69
Şekil 4.47: {111} yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.....	70
Şekil 4.48: {110} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).....	72
Şekil 4.49: {110} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	73
Şekil 4.50: {110} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).....	74
Şekil 4.51: {100} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	75
Şekil 4.52: {111} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).....	77
Şekil 4.53: {111} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	78
Şekil 4.54: {110} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	79
Şekil 4.55: {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	80
Şekil 4.56: {110} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	81
Şekil 4.57: {110} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).....	82
Şekil 4.58: {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).....	83
Şekil 4.59: {110} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).....	84
Şekil 4.60: {100} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	85

Şekil 4.61: {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	86
Şekil 4.62: {100} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	86
Şekil 4.63: {100} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).....	87
Şekil 4.64: {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).....	88
Şekil 4.65: {100} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).....	89
Şekil 4.66: {111} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).....	90
Şekil 4.67: {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	90
Şekil 4.68: {111} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).....	91
Şekil 4.69: {111} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.25) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).....	92
Şekil 4.70: {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.55) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).....	93
Şekil 4.71: {111} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde (B=0.85) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).....	93
Şekil 4.72: {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).....	94
Şekil 4.73: {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=90^\circ$).....	95
Şekil 4.74: {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).....	96
Şekil 4.75: {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=45^\circ$).....	987
Şekil 4.76: {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).....	99
Şekil 4.77: {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında (B=0.55) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=30^\circ$).....	99

KISALTMALAR

Kısaltmalar	Açıklama
Ag	Gümüş
Al	Aliminyum
As	Arsenik
BEM	Sınır elemanı yöntemi
Cu	Bakır
DFT	Yoğunluk fonksiyon teorisi
FM	Frank-van-der-Merwe
Ga	Galyum
Ge	Germanyum
In	İndiyum
KN	Kuantum nokta
LED	Işık yayın diyot
MBE	Moleküler ışın epitaksi
MOVPE	Metalo-organik kimyasal buhar depoziti
Pb	Kurşun
QD	Quantum dot
RAM	Rastgele ulaşım hafıza
Ru	Rutenyum
Si	Silisyum
SK	Stranski-Krastanov
STM	Taramalı tünelleme mikroskobu
UV	Ultra Viyole
VW	Volmer-Weber

SEMBOL LİSTESİ

Simgeler	Açıklama
\bar{V}_{edge}	Üçlü kavşak noktalarındaki normalize hız vektörü
\bar{V}_{ord}	Yüzey Normali Doğrultusundaki normalize hız vektörü
$\bar{\partial \ell}$	İki boyutlu yüzeyde eğrisel koordinat
\bar{D}	Yüzey Difüzyon katsayısı
θ	Yüzeydeki difüzyon doğrultusunun tanjant vektörü ile x -ekseni arasındaki açı
θ_{eq}	Denge ıslatma açısı
ϕ	Kristal düzlem eğim açısı
m	Simetri derecesi
\hat{f}_v^o	Gaz fazın hacimsel Helmholtz serbest enerji yoğunluğu
\hat{f}_d^o	Katı fazın hacimsel Helmholtz serbest enerji yoğunluğu
Ξ	Elastik dipol tensör etkileşimleri (EDTI)
$\bar{f}_{d/s}$	Helmholtz serbest enerji yoğunluğunun
$\bar{\kappa}$	Normalize olmuş yüzey eğriliği
χ	Elektrik alan
$\bar{\omega}$	Normalize edilmiş ıslanma potansiyeli
\bar{M}_{dv}	Normalize büyüme hareketliliği
\bar{M}_{edge}	Üçlü kavşak noktalarında normalize yüzey hareketliliği
f_s	Altlığın Helmholtz yüzey serbest enerjisi
f_d	Filmin Helmholtz yüzey serbest enerjisi
f_{ds}	Film ile altlık arayüzeyindeki serbest enerji
\bar{h}	Yüzey ile altlık arasındaki mesafe
y	Yüzey ile altlık arasındaki mesafe
$\bar{\sigma}$	Normalize çember gerinimi
a	Kafes parametresi
Σ	Elastik gerinim enerji yoğunluğu (ESED)
$\bar{\Omega}$	Yüzeyde Bulunan kimyasal türlerin ortalama hacimleri
\bar{u}	Yerdeğişim vektörü
A	Anizotropik sabit
B	Yüzey katılığı anizotropi sabiti
E_d	Young modülü
ν_d	Poisson oranı
ε_o	Film ile altlık arasındaki uyumsuzluk gerinimi
h_o	Film kalınlığı

w_0	Elastik gerinim enerjisi yoğunluđu.
∇^2	Laplace operatörü
∇	Del operatörü
$\vartheta(r)$	Sınırlardaki elektrostatik potansiyel
$U(P,Q)$	Kuvvet alanı temel analitik çözüm
$\mu(P)$	Yoğunluk fonksiyonu
δ	Ara yüzeyin denge kalınlığı



1. GİRİŞ

Kuantum Noktalar (KN) günümüzde, lazerlerden güneş panellerine, transistörlerden KN bilgisayarlar kadar çok farklı cihazlarda kullanılmakta/kullanılması için geliştirilmektedir (Pang ve diğ., 2016, Abdelbar ve diğ., 2016, Srathongluan ve diğ., 2016, Stewart ve diğ., 2016, Tang ve diğ., 2016). Daha üstün özelliklere sahip KN bazlı cihazların geliştirilmesi, KN'lerin fotonik ve elektronik özelliklerinin kontrol edilmesiyle mümkündür. KN'lerin fotonik ve elektronik özellikleri ise kuantize olmuş enerji seviyelerini düzenleyen, KN'lerin boyut, şekil, belirli bir bölgedeki dizilim/yoğunluk ve malzeme kompozisyonu ayarlanarak kontrol edilebilmektedir.

1.1 Tezin Amacı

Bu tezin temel amacı, istenilen şekil ve boyutsal özelliklere sahip kararlı kuantum nokta ve kuantum nokta dizilerini üretebilmek için gerekli temel malzeme özellikleri ile üretim mekanizmalarının ortaya çıkarılması için gerekli bilgi birikimine, uygulanacak özgün teorik ve sayısal çözümler ile, katkı sağlamaktır.

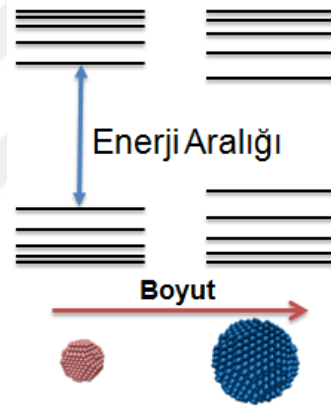
Temel bilim açısından bu araştırmanın amacı, serbest sınır problemleri tarafından yönetilen doğrusal olmayan ve karmaşık fiziksel bir olgu olan KN oluşum mekanizmalarını eş zamanlı uygulanan elektrik ve gerinim alanları altında incelenmesidir. Bu çalışmayla, farklı fiziksel parametrelerin etkisi altında kompleks davranışlar gösteren ilginç bir problemin anlaşılmasını ve çeşitli teknolojik uygulamalarda kullanılmaya uygun morfolojilerde ve dolayısı ile elektronik/optik özelliklerde nano-malzeme üretilebilmesi için gerekli bilgi birikimine katkı sağlamaktır.

1.2 Kuantum Noktalarda Kuantize Olmuş Enerji Seviyeleri

Bir malzemenin bant aralığı (band gap), dolu değerlik bandı (valance band) ile boş iletkenlik bantları (conduction band) arasındaki enerji farkını ifade eder. Elektronlar uygun enerjideki bir fotonu absorplayarak değerlik bandından, iletkenlik bandına çıkar ve değerlik bandında bir boşluk (hole) bırakır. Elektron ve boşluk çiftleri (exciton), Colomb etkileşimleri nedeni ile birbirlerine bağımlı bir şekilde hareket

ederler. Malzemelerin boyutu birkaç nanometreye kadar düştüğünde, elektron boşluk çiftlerinin hareketleri sınırlanmaya başlar ve bu geometrik sınırlamanın sonucunda, malzemenin bant yapısındaki enerji seviyeleri boyutlara bağlı hale gelir. Bu fenomen, kuantum sınırlanması olarak adlandırılır (Bawendi ve diğ., 1990, Rogach, 2008).

KN'lerde elektron-boşluk çiftleri boyutsal olarak üç yönde de, potansiyel bariyerlerle sınırlanmıştır ve elektriksel ve optik olarak yığın bir malzemenin aksine tek bir atom gibi davranırlar. Görece daha küçük KN'lerin daha fazla bant aralığı enerjisi, büyük KN'lerin ise daha küçük bant aralığı enerjisi vardır (Holmström ve diğ., 2010). Sonuç olarak, kuantum noktaların enerji tayfları ve bant aralıkları optik ve elektronik birçok fiziksel özelliklerini kontrol ederken aynı zamanda malzemenin kompozisyonu, yoğunluğu, boyutları, kafes gerinimleri ve morfolojisi ile ayarlanabilmektedir (Barth ve diğ., 2005; Ogurtani ve diğ., 2010a; 2010b) (Şekil 1.1).



Şekil 1.1: KN boyutlarıyla enerji aralıklarının değişimi.

1.3 Kuantum Noktaların Üretim Teknikleri

KN'lerin üretiminde iki farklı yaklaşım vardır: bunlar aşağıdan yukarı (bottom-up) ve yukarıdan aşağı (top-down) tekniklerdir. Kendiliğinden (self assembly) KN'lerin olduğu epitaksiyel üretim ve kimyasal sentez prosesleri aşağıdan yukarı, litografi ise yukarıdan aşağı yöntemlere örnek olarak verilebilir.

1.3.1 Kimyasal sentez

Yüksek sıcaklıklarda, kimyasal prosedürlerle üretim tekniğidir. İlk kez Murray ve diğ. (1993) tarafından, geliştirilen bu üretim tekniğinde, organometalik reaktiflerin bir çözelti içinde pirolizi ile başlayarak çekirdeklenme ile devam eden (nucleation and growth), istenen boyutlarda ve homojen nanokristal üretimi sağlayan bir metot

olarak geliştirilmiştir. Çözelti içinde elde edilen nano kristaller daha sonra, ince filmler üzerine yerleştirilerek silikon platform üzerinde, birçok farklı optik ve elektronik cihaz uygulamaları için hazırlanabilmektedir (Moreels ve diğ., 2008). Bu yöntem üretilen KN'nin özelliklerine, üretilen KN'nin malzemesine ve uygulama alanlarına göre modifiye edilen, misel benzeri KN'lerin koloidal sentezi, hidrofilik yarı iletken KN sentezi, geriakım (Refluxing) sentez, hidrotermal sentez, mikrodalga-yardımlı sentez, mikroreaktör sentez gibi birçok farklı çalışma ile literatürde yer almaktadır (Brichkin ve Razumov, 2016). Bu yöntemdeki dezavantaj ise çözelti içindeki nanokristallerin konsantrasyonlarının az oluşu, boyut dağılımlarında büyük değişikliklerin olması ve tekdüze (uniform) yapının elde edilmesinin zor olmasıdır.

1.3.2 Litografi

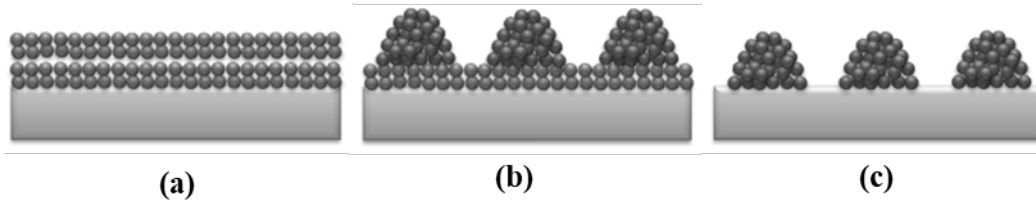
Yukarıdan aşağı (top-down) yaklaşımlardan bir tanesi olan litografi tekniğinde, kalıp olarak kullanılan nanoyapılar üzerinde, ışınlar yardımıyla istenen boyut ve şekillerde KN'lerin üretimi sağlanabilmektedir. Bu yöntemde KN'ler altlık üzerinde entegre şekilde üretildiği için üretim sonrası yüzeye yerleştirme işlemine ihtiyaç olmaması bir avantajdır. Farklı litografi metodlarında, çözünürlükleri farklı ışınlar farklı boyut ve şekillerin elde edilmesinde kullanılmaktadır. Optik litografi (fotolitografi), 100 nm, UV-litografi 10-100 nm, electron demeti litografisi 20 nm ve X-ışın litografi 0.1-10 nm çözünürlüklerinde KN'lerin üretimi mümkündür (Takahata, 2013).

Fakat kirlenme (contamination) oluşumuna müsait olması, hataların oluşması (defect formation) olması, tekdüzeliğin (uniformity) tam olarak sağlanamaması, zayıf arayüzey kalitesi ve yığın haldeki kristallerin zarar görebilmesi gibi dezavantajları bulunmaktadır (Henini, 2006). Yukarıdan aşağı (top-down) nano desenleme (patterning) yöntemlerinin (fotolitografi ve elektron ışın litografisi gibi), çok fazla zaman alan ve pahalı prosesler oldukları belirtilmiştir (Dai ve diğ., 2006).

1.3.3 Epitaksiyel büyüme

Epitaksi, kristal yapıdaki bir malzemenin, kristal yapıdaki bir altlık üzerine depozit edilerek, malzemenin, altlığın kristalografik yönelimine göre büyütülmesidir. Altlık ve depozit edilen malzemeler aynı olduğunda homo epitaksi, farklı olduğunda hetero epitaksi terimleri kullanılır.

Depozit edilen malzeme ve altlığın, kafes (lattice) parametrelerinin farklı olması durumunda, kafes parametresi uyumsuzluklarından kaynaklanan gerinimlerin büyüklüğüne bağlı olarak üç tip ince film büyüme modu olduğu gözlenmektedir: Volmer-Weber (VW) (Raviswaran ve diğ., 2001), Stranski-Krastanov (SK) (Kienzle ve diğ., 1999) ve Frank-van-der-Merwe (FM) (Nishiguchi ve diğ., 2004) büyüme modları (Şekil 1.2).



Şekil 1.2: (a) Tabaka büyümesi (Frankvan der Merve modu), (b) Adacık ve ince film büyümesi (Stranski Krstanov modu), (c) Adacık büyümesi (Volmer Weber modu).

Depozit edilen malzeme ve altlık malzemenin kafes parametrelerinin birbirine çok yakın ve ara yüzey enerjisinin düşük olduğu sistemlerde tabaka olarak görülen mod FM büyüme modudur. Kafes parametrelerinin arasındaki farkın en fazla olduğu büyüme modu VW modudur ve ara yüzey enerjisi yüksektir. Bu yöntemle birbirinden ayrı adacıklar oluşmaktadır. Kafes parametresi uyumsuzluklarının ve ara yüzey enerjilerinin bu iki büyüme modu arasında olduğu sistemlerde, FM gibi tabaka şeklinde başlayan ve belirli bir film kalınlığına ulaşıldıktan sonra, VW gibi adacık şeklinde büyüme geçişi görülen, sonuç olarak birbirlerine ince bir tabaka (wetting layer) ile bağlı, nano adacıkların olduğu büyüme modu SK modudur.. Kuantum noktaların oluşumu için gereken büyüme tipine örnek olarak SK tipi büyüme morfolojileri gösterilebilir ve deneysel olarak, $[In_xGa_{1-x}As/GaAs]$ (Leonard ve diğ., 1993; 1994) ve $[Ge/Si]$ (Eaglesham ve diğ., 1990) gibi epitaksiyel gerginliğe sahip ince filmlerde gözlenmektedir. SK büyüme modu ile KN oluşumu, bu KN'lerin içlerinde elektronik performanslarını kötü etkileyebilecek dislokasyon gibi kusurların oluşmaması ve ıslatma katmanı sayesinde KN'ler arası iletişimin sağlanabilmesi nedenleriyle, büyük dikkat çekmiştir (Eaglesham ve diğ., 1990; Wang ve diğ., 1994). SK büyüme modu tabanlı fabrikasyon teknikleri yüksek yoğunlukta KN yapılar oluşturabilmekte ve bu teknik yarıiletken teknolojileri ile uyum içerisinde seri üretime ve yüksek oranda entegrasyona uygunluk göstermektedir (Stangl ve diğ., 2004).

1.4 Kuantum Noktaların Kullanım Alanları

KN'ler kuantize olmuş enerji seviyeleri ve boyut, dizilim, yoğunluk ile ayarlanabilen enerji aralıklarından dolayı elektronik, fotonik, ve manyetik birçok yeni cihazın geliştirilmesi için çok önemli birer aday haline gelmişlerdir. Bu cihaz uygulamalarında tek bir KN veya KN dizilerinden yararlanılabilmektedir. Güneş panelleri için dizi KN'ler, depolama ve tek elektron transistörler için tek KN'ler kullanılmaktadır. Farklı cihazlar için KN'lerin farklı özelliklerinden yararlanılabilir. Örneğin KN kızılötesi dedektörler için yüksek yoğunluklu ve eşit boyutlara sahip KNlerin, LED ve lazerlerde, düşük yapı kusurlarına sahip KN dizilerinin üretilmesi önemli hale gelmektedir.

1.4.1 Bilgi depolayıcılar ve KN bilgisayarlar

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

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

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

Milyonlarca kuantum biti (Qubit) kullanan kuantum bilgisayarlar yapılabilmesi teorik olarak mümkündür. Elektronların KN'lerde kuantize oluşu, bilginin kuantum bitlerine kodlanmasını mümkün kılar, bu sayede çok güçlü bilgisayarlar elde edilebilir. Kubitler bir operasyon ile 0 veya 1 durumunu sabitleyinceye, kadar bilgiyi süperpozisyon denen hem 0 hem 1 durumunda tutabilir. Yükten ziyade, qubitler,

elektronların KN içindeki, yukarı (up) veya aşağı (down) olan spin değerlerini 0 ve 1 olarak temsil eder. Geleneksel bilgisayarlar, elektron spin hareketini dikkate almadan, bir sinyalin voltajı 2.4V üzerindeyse 1, altındaysa 0 konumuna geçer. Kuantum bitleri ise tek bir elektron ile elektronun pozisyonuna göre, yukarı (up) spin ise 1'i, aşağı (down) spin ise 0'I temsil eder (Szweda, 2001).

1.4.2 Lazerler

Lazerler, elektronların uyarılması ve yayılan fotonların dalga boylarının ve eş fazlılıklarının (coherence) kontrol edilmesi ile üretilir, aynı faz ve enerjideki ışıklardan oluşurlar. Lazer ışınları, medikal alanda göz ameliyatlarında, yazıcılarda, endüstride metallerin kaynak yapılmasında, fiber optikler ile optik iletişim gibi birçok alanda kullanılmaktadır. İlk kez, Dingle ve Henry (1976), kuantum sınırlama etkisinin, düşük uyarma seviyelerine ve kontrol edilebilir dalga boylarına sahip ışınlar yayan lazerlerin üretiminde kullanılabileceğini öne sürmüştür.

Optik kazanım, bir malzemedeki uyarılmış durumdaki elektronlar ile orantılı olduğundan, kuantize olan enerji seviyeleri sayesinde, yük taşıyıcıların bant kenarlarındaki yoğunlukları arttığından birim alandaki yoğun KN dağılımı (high dot density) sağlanarak KN lazerlerde malzeme kazanımı olduğu gösterilmiştir (Kirstaedter ve diğ., 1996). Yığın halindeki malzemelerde yük taşıyıcılar, sıcaklık arttıkça sürekli bir şekilde yüksek enerji bantlarına dağılırken, yük taşıyıcıları üç boyutta da sınırlanmış olan KN'lerde, bu durum görülmez. KN'lerin lazerlerde kullanılması ile verim artışının bir sebebi de sıcaklığa bağlı parametrelerin azaltılmasıdır.

SK ince film büyümesi ile elde edilen KN'ler bunlara ek olarak, fotovoltaiik cihazlarda bir problem olan yük taşıyıcıların tekrar elde edilememesi ve salınamaması problemi KN'leri yük taşıyıcı kayıplarını engelleyen ıslatma katmanı sayesinde aşmış ve KN'lerin lazerler olarak kullanılabilmesini sağlamıştır (Bimberg ve Pohl, 2011).

GaAs/AlGaAs hetero yapıdaki tek bir KN üzerinde yapılan teorik çalışmalara göre, malzeme kazanımının arttığı, ve daha düşük eşik akım değerlerine sahip ve sıcaklık stabilitesi sağlayacağı öne sürülmüştür (Asada ve diğ., 1986, Arakawa ve Sakaki, 1982). Deneysel olarak ilk lazer KN lazer, gergin altlıkla hetero-epitaksiyel olarak kendiliğinden organize olabilen KN'lerden üretilmiş ve teorik araştırmaları

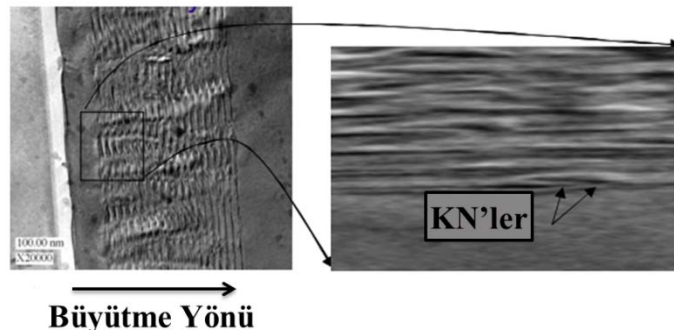
destekleyerek çok daha düşük akım eşik değeri ve daha az sıcaklık bağımlılığı göstermiştir (Ledentsov ve diğ., 1994, Bimberg ve Pohl, 2011).

1.4.3 Güneş panelleri

Güneş panelleri, güneş ışığını absorplayarak elektrik enerjisine çeviren sistemlerdir. Kendiliğinden organize olan çoklu InAs/GaAs KN tabakalarının p-i-n bağlantılarının dönüştürme verimini arttırarak güneş panellerinin verimini arttırabileceği teorik olarak gösterilmiştir (Aroutiounian ve diğ., 2000). Günümüze kadar yapılan çalışmalarla klasik silikon bazlı güneş panellerinin verimlerinin KN'ler kullanılarak %32 arttırılabildiği bilinmektedir (Shockley ve Queisser, 1961).

Temel yaklaşım, güneş panel hücresini oluşturan malzemenin bant aralığının arasında bir bant aralığına (intermediate band) sahip KN'nin bu ara bantta bir absorpsiyon sağlamaktır. KN bazlı güneş panellerinde ara bant oluşumunu inceleyen Tomic (2014), KN dizilim geometrilerinin değiştirilmesiyle oluşan ara bantların kontrol edilebileceğini öne sürmüştür. Genişleyen bir absorpsiyon spektrumuna sahip, daha düşük enerji bant aralıkları sahip hetero-yapı oluşturularak, çok hücreli (multi-junction) güneş panelleri elde edilebilmektedir.

Çok hücreli KN güneş panel sistemleri, teorik olarak analiz edilmiş ve deneysel olarak SK büyüme modunda MOVPE yöntemi ile kendiliğinden organize olan InAs KN'lerin, GaAs matriks üzerinde üretilmesiyle çalışılmıştır. KN morfoloji değişimleri, büyütme parametreleri, foto-luminesans ve optik absorpsiyon özellikleri gözlemlenerek, InAs KN'lerin, GaAs yapıları üzerinde kontrollü bir şekilde üretildiğinde (Şekil 1.3) GaAs yapılarında alt enerji bantları oluşabildiğini göstermişlerdir. Bant aralıklarındaki enerji değişimlerinin KN morfolojileri ve yoğunluklarıyla orantılı olduğu bildirilmiştir (Raffaella ve diğ., 2006).



Şekil 1.3: GaAs matriks üzerinde büyütilen InAs KN dizilerinin çoklu hücre yapısını gösteren TEM görüntüsü (Raffaella ve diğ., 2006).

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



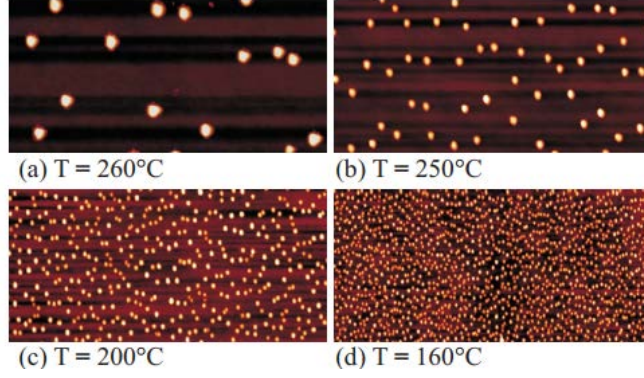
2. LİTERATÜR ÖZETİ

2.1 Deneysel Çalışmalar

Kendi kendine organize olabilen (self organized) KN'lerin üretiminde, boyutların kontrol edilebilirliğinin araştırılmasında, Leon ve diğ., (1998) üç yaklaşım bulunduğunu bildirmişlerdir. Bunlar, proses sıcaklıktaki kontrol, depozit edilen malzeme akısının ve malzemenin kristal düzlem açılarındaki değişimlerin kontrolüdür. Bu çalışmaya göre, depozit edilme sıcaklığı, oluşan KN'lerin çaplarını ve konsantrasyonlarını kontrol etmektedir. KN konsantrasyonlarındaki değişimler MOVPE yöntemiyle, InGaAs/GaAs sisteminde, As akısıyla kontrol edilebilmektedir. Adacıkların çekirdeklenmesinde (nucleation), malzemenin kristalografik yöneliminin önemli olduğu, adacık yoğunluğu ve boyutlarının kristal düzlem açılarıyla (miscut angle) kontrol edildiği bulunmuştur.

Berberier ve diğ., (2001) tarafından SiGe nano yapıları üzerinde yaptıkları çalışmalarda, kinetik proses parametrelerinin ve malzemelerin yönelimlerinin (orientation), KN'lerin büyüme modlarında ve morfoloji değişimlerinde kontrol mekanizmaları olduğunu bildirmişlerdir. (001) ve (111) yüzeylerinde, depozit edilen malzeme kalınlığı ve uyumsuzluk gerinim kuvvetinin büyüklüğüne bağlı olarak farklı fazlar oluştuğu görülmüştür.

Proses sıcaklığının önemi ile ilgili yapılan bir çok çalışma bulunmaktadır. Damla epitaksi yöntemiyle üretilen GaAs KN'lerde yapılan çalışmada KN'lerin yoğunlukları araştırılmıştır. Bu çalışmada, sıcaklığa bağlı olarak KN boyutlarında değişiklikler görülmüştür. 200° C'ye kadar KN'ler klasik çekirdeklenme teorisine uyumlu sonuçlar vermiştir, bu sıcaklığın üzerine çıkıldığında ise, KN'lerin olgunlaşma (Oswalt ripening) olarak bilinen adacıkların birleşmesi olayının gerçekleştiği ve buna bağlı olarak KN yoğunluklarının önemli ölçüde azaldıklarını bildirmişlerdir (Heyn ve diğ., 2007b). Bu çalışmada elde edilen KN'lerin farklı sıcaklıklarda birim alandaki yoğunluk değişimleri Şekil 2.1'de verilmiştir.



Şekil 2.1: GaAs KN yoğunluklarının azalan sıcaklık değerleriyle artışı (Heyn ve diğ., 2007b).

InAs kuantum noktalar üzerinde yapılan araştırmalarda, elektronik enerji seviyelerinin ikilileşmesi (electronic state coupling) ile artan foton taşıyıcılarının iki aşamalı üretimi sonucu, elektron ve boşluk çiftleri arasındaki rekombinasyon oranı azalmakta ve bunun sonucunda electron yarı ömrü artmaktadır. Elektron yarı ömrünün artması, daha verimli absorpsiyon oranını ifade eder. Bu çalışmada iki aşamalı foto akım, sıcaklık ile control edilen mini enerji bantlarının oluşumuyla elde edilmiştir (Watanabe ve diğ., 2017).

Shklyayev ve Budazhapova (2016), yaptıkları çalışmada yüksek sıcaklıklarda Si(100) düzlemi üzerine Ge yoğunlaştırılması sırasında oluşan SiGe adacıklarının oluşumu için gerekli kritik şartları incelemişlerdir. Adacık oluşumunda Ge difüzyon hızı ile Ge yoğunlaşma hızı arasındaki yarışın etkili olduğunu gözlemlemişlerdir, eğer Ge difüzyon hızı daha yüksek ise adacık oluşumunun engellendiği aksi durumda ise adacık oluşumunun gerçekleştiğini belirtmişlerdir. Ge atomlarının Si içindeki difüzyonunun 800° C altında Ge yoğunlaşma hızına göre daha hızlı olması nedeniyle adacık oluşumu gerçekleşirken, 840-960° C kritik aralığında bu iki sürecin dengede olduğunu ifade etmişlerdir. Bu aralıkta birbirinden 1µm mesafe uzaklıkta dengede bulundan pürüzsüz adacıkların oluşumunu gözlemlemişlerdir. Bu pürüzsüzlüğün yüzey gerinimlerinin homojen dağılmasından kaynaklandığını söylemişlerdir. Bu çalışma da proje konumuz olan nano yapıların şekil ve büyüklük kontrolünün önemini ortaya koymaktadır.

Zhao ve diğ., (2014) dislokasyon kaynaklı gerinim kuvvetlerinin etkisini, SK KN'ler üzerinde kinetik Monte Carlo simülasyonları ile incelemişlerdir. Gerinim kuvvetlerinden dolayı depozit edilen ve altlık malzemenin atomları arasındaki

bağlanma enerji değişimlerinin atomların kinetik davranışlarını önemli ölçüde etkilediğini belirtmişlerdir. Deneysel olarak da gerinim kuvvetlerinin KN birim alandaki KN dağılımlarını önemli ölçüde etkilediğini göstermişlerdir. Atomik kinetiklerin, sıcaklık bağımlılığını da arştırmışlardır. Sıcaklık artışına bağlı olarak, daha büyük ve düzenli dizilime sahip KN yapıları oluştuğunu göstermişlerdir.

Hull ve diğ., (2003) heteroepitaksiyel yarıiletken Ge_xSi_{1-x}/Si KN'leri, iki yaklaşım ile üretmişlerdir. İlk yöntemde yerel Ga^+ konsatrasyonu ve yüzey topografisini kontrol edebilmek için büyütme haznesinde odaklanmış iyon demeti büyütme tekniğini (focused ion beam in situ growth) kullanmışlar, ve aşılana düşük Ga^+ konsantrasyonlarının Ge nano yapılarının yerel çekirdeklenmesine yol açtığını saptamışlardır. Bu yaklaşım kullanılarak Ge nanoyapılarının kompleks yüzey paternleri oluşturmada kullanılabileceğini öne sürmüşlerdir. İkinci olarak, nano işleme (patterning) yapılmadan, gerginliğe sahip sistemde kendiliğinden organize olabilen KN'lerin üretiminde, gerinim gevşemesinin büyütme sıcaklığı ve büyütme oranlarıyla birlikte malzeme kompozisyonlarının etkili olduğunu öne sürmüşlerdir.

Kuantum noktaların kontrollü ve simetrik bir şekilde üretilmesi için bilinen yöntemlerden bir tanesi bu nano yapıların üzerinde büyütüleceği altlık yüzeyi üzerinde şablon oluşturulmasıdır. Surrente ve diğ. (2016), metal organik kimyasal buharlaştırma biriktirme (MOVPE) yöntemiyle tetrahedral piramit şeklinde kuantum noktaların üretimi için, altlık üzerinde hegzagonal nano şablonların (kalıpların) oluşumundan yararlanmışlardır. Şablonların kontrolü üzerinde sentezlenecek adacıkların kontrollü eldesini sağlamaktadır (Surrente ve diğ., 2016).

Kuantum nokta adacık yapılarının oluşum kinetiklerinin anlaşılması ile ilgili yapılan çalışmada, yüksek vakum magnetron püskürtme epitaksi yöntemiyle üretilmiş Ge/Si (001) nano adacıklar incelenmiştir. KN yapılarının fasetli yüzeylerini hesaplayarak, faset alanlarının KN hacmiyle birlikte değiştiğini ve piramit, kubbe şekilli KN'lerin ve daha büyük ayırık adacık morfoloji geçişlerinin depozit edilen malzemenin belirli kritik hacim değerlerine bağlı olarak değiştiğini göstermişlerdir (Rastelli ve Kanel, 2002). Wiebach ve diğ., (2000) de piramit şekilli KN'lerin oluşumunu sistemdeki gerinim kuvvetlerinin ve malzemenin kristal atomik düzlem açılarının gerinim kuvvetlerinin dağılımına bağlı olarak etkilediğini göstermişlerdir.

Kuantum nokta adacık yapılarının oluşum kinetiklerinin anlaşılması ile ilgili yapılan çalışmada, yüksek vakum magnetron püskürtme epitaksi yöntemiyle üretilmiş Ge/Si

(001) nano adacıklar incelenmiştir. KN yapılarının fasetli yüzeylerini hesaplayarak, faset alanlarının KN hacmiyle birlikte değiştiğini ve piramit, kubbe şekilli KN'lerin ve daha büyük ayırık adacık morfoloji geçişlerinin depozit edilen malzemenin belirli kritik hacim değerlerine bağlı olarak değiştiğini göstermişlerdir (Rastelli ve Kanel, 2002). Wiebach ve diğ., (2000) de piramit şekilli KN'lerin oluşumunda sistemdeki gerinim kuvvetlerinin ve malzemenin kristal atomik düzlem açılarının etkili olduğunu söylemişlerdir. Kritik hacim değerine ek olarak için gerinim kuvvetlerinin etkisiyle, KN oluşumu için belirli bir kritik kalınlığın olması gerektiği Ge/Si(100) sistemi için belirtilmiştir (Easlasham ve Cerullo, 1990).

Kendi kendine organize olabilen (self organized) GaAs KN'lerin damla epitaksi yöntemiyle ve SK büyüme modunda KN oluşum kinetiklerinin büyüme kinetiklerini kontrol ettiği görülmüştür (Heyn ve diğ., 2007a). Kritik hacim değerlerinin üzerinde, 55°'lik yan faset açılara sahip, kesik piramit şekilli, kritik hacim değerinin altında ise 25°'lik yan faset açılara sahip piramit şeklinde KN'ler oluştuğu gösterilmiştir.

Ma'rqez ve diğ., (2001) MBE yöntemiyle üretilen GaAs(001) KN'lerin, fasetli yapısını taramalı tünelleme mikroskopu (STM) ile analiz etmişler ve Miller indisleri {137} olarak belirlenen fasetlerinin termodinamik olarak kritik bir KN boyutuna kadar kararlı olduğu göstermişlerdir. {137} yönelimindeki As dimerlerinin ve sonuçta oluşan yüzey enerjilerinin KN boyut dağılımından sorumlu olduğunu öne sürmüşlerdir.

KN nanoyapılarının enerji bant yapılarında ara bant oluşturularak, daha geniş bir absorpsiyon aralığı sağlanması güneş panellerinin daha verimli hale getirilmesi için önemlidir (Tomic, 2014). Zunger ve Popescu (2012), KN'lerde ara bant oluşumlarında KN sistem tasarımlarının etkili olduğunu ortaya koymuştur. Bu çalışmaya göre, KN-matris sistem kombinasyonlarının doğru aralıklarda seçilerek ($a_{\text{matrix}} < a_{\text{substrate}} < a_{\text{QD}}$), kafes parametrelerinin ayarlanmasıyla, sistemdeki gerinim kuvvetlerinin kontrol edilebileceğini ve sonuç olarak istenen enerji aralıklarında KN elde edilebileceğini bildirmişlerdir.

Morfolojik kararsızlıklar sonucu KN oluşumu birçok sistemde gözlenmiştir. Örneğin, Ozkan ve diğ., (1997) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ epitaksiyel filmler üzerinde yüzey pürüzlenmesi sırasında oluşan kusur ve gerinim-gevşemesi (strain relaxation) mekanizmaları üzerine kontrollü tavlama (annealing) deneyleri yaparak çalışmışlardır. Bunun yanında yine aynı grup, film yüzeylerinin pürüzlenmesi ve takip eden ada ve oluk

oluşumlarını incelemişlerdir. Bunlara ek olarak, Ru üzerinde Ag kuantum noktalar (Pohl ve diğ., 1999); Cu altlık üzerinde Pb adacık oluşumu (Plass ve diğ., 2001) ve Si altlık üzerinde Ge noktacıkların büyütülmesi (Zhang ve diğ., 2001) çalışılan diğer malzeme sistemleri arasında gösterilebilir.

Makroskopik bir kuvvet olarak uygulanan elektrik alan ile yüzeyde morfolojik kararsızlık oluşturulması yoluyla tek katman homoepitaksiyel adacıklar oluşturulabildiği Kumar ve diğ. (2016a) tarafından yapılan modelleme çalışmasıyla gösterilmiş ve deneysel olarak Ag/Ag sistemiyle doğrulanmıştır. Bu çalışmaya göre, tek tabaka nano tel üretiminde elektrik alan uygulanması, nano teli kırarak uniform dağılan adacıkların oluşmasını sağlamaktadır. Uygulanan elektrik alanının nano tel eksenine göre yönü ve şiddeti ile oluşan adacıkların geometrik özellikleri ve boyutları kontrol edilebilmektedir (Kumar ve diğ., 2016a).

Organik yarı iletken malzemeler üzerinde yapılan çalışmada, ince film morfolojisini tavlama sırasında sisteme uygulanan dış elektrik alan etkisi altında incelenmiştir (Parhi ve Iyer, 2016). Elektrik alan etkisi farklı konsantrasyonlarda hazırlanan ince film bileşenleri üzerinde ve farklı sıcaklıklarda araştırılmıştır. Moleküllerin elektrik alan ile polarizasyonunun, etkileşimlerin, belirli bir bölgedeki birikmenin (stacking) ve ayrışmasının (segregation) anlaşılabilmesi için ise DFT hesaplamaları yapılmıştır. Sonuç olarak tavlama sırasında sisteme uygulanan elektrik alanının film özelliklerini kontrol etmek için ek bir kontrol parametresi olduğu anlaşılmıştır.

2.2 Modelleme Çalışmaları (Teorik Çalışmalar)

Gergin bir kristal altlık üzerinde heteroepitaksi ile elde edilen kuantum nokta dizi yapılarının (multiple QDs) oluşumu için Du ve Maroudas (2016) tarafından geliştirilen modelde, ıslatma potansiyelinin epitaksiyel filmin serbest enerjisine katkısı ve yüzey anizotropisi dikkate alınmıştır. Simülasyonlar ile epitaksiyel filmin morfoloji değişimi ve kararlılığı incelenmiştir. Bu çalışmada Stranski krastanov kararsızlığına ek olarak doğrusal olmayan bir kararsızlık modunu tetikleyebilecek pertürbasyon (long wavelength perturbation) ile, bir kuantum noktanın bölünerek daha küçük boyutlu çoklu kuantum noktalarını oluşturabileceği öne sürülmekte ve bu bölünme için kritik dalga boyu değerlerini ortaya koymaktadır (Du ve Maroudas, 2016).

Yüzey pürüzlülüğü (roughness) elektronik cihaz performanslarında problemler yaratmaktadır. Mikro ve nano cihazların üretimlerinde yüzey pürüzlülüğünü azaltacak yöntemler önem kazanmaktadır. Gerinim (stress ve residual stress), difüzyon anizotropisi, filmin kristal dokusu (texture), film ve altlık arasındaki ıslatma etkileşimleri ve yüzey elektrogöçünü dikkate alarak Du ve Maroudas (2017), dışarıdan uygulanan elektrik alanın yüzey pürüzlülüğüne etkisini, filmin morfoloji değişimlerini modelleyerek incelemiştir. Elektrik alan olmadığında, stres uygulanan gergin (strained) metalik ince film yüzeyi kararlı halde değildir ve ıslatma etkileşimleriyle dengeye gelene kadar yüzeyde kalıntı gerinim kaynaklı pürüzlülük oluşmaktadır. Uygulanan elektrik alanın yüzey pürüzlenme prosesinin hızını azaltarak atomik düzeyde yüzeydeki pürüzlülüğü azaltabileceği gösterilmiştir.

Benzer bir çalışmada Kumar ve diğ. (2016b) nanotel oluşumlarında elektrik alan uygulaması ile oluşan nanotellerin yöneliminin ve genişliklerinin kontrol edilebileceğini göstermişlerdir. Nanoteller elektrik alan doğrultusunda hizalanmış ve tellerin genişlikleri yaklaşık 10 nm civarında olmakla birlikte, elektrik alan yoğunluğuyla kontrol edilebilmiştir. Kristalin iletken altlık üzerinde büyütülen tek tabaka iletken nano adacıklar ile başlayan prosesde ada kenarlarında elektro göç ile devam eden süreçte yüzeyin kristalografik yönelimine ve boyun verme kararsızlığına bağlı olarak tek ada üzerinden çoklu ve birbirine paralel nano teller oluşabilmektedir.

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

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

Khennar (2017), metal nano-adacıklarında elektron yoğunlaşmasının etkisini göz önüne alarak morfolojik evrimlerini, büyüme ve yükseklik değişimlerini incelemiştir. Çalışmasında film yüksekliğinin nihai morfoloji ve büyüme dinamikleri kuvvetli şekilde etkilediği bulunmuştur. Düşük yükseklikteki ince filmlerde yüksek eş-yönlülük ve yüksek gerinim durumunda büyümenin durduğu gözlemlenmiştir. Khennar uyumsuzluk gerinimlerinin etkisi yanında yüzey gerinimlerinin etkisini de göz önüne alarak birleşik etkilerini kuantum boyut etkisi altında gözlemlenmiştir. Bu etkilerden kuantum boyut etkisinin sonuç morfolojinin oluşumunda kilit rol oynadığını göstermiştir.

Liao ve diğ. (2017) yüzey kararsızlığı sonucu küresel altlıklar üzerinde kendiliğinden oluşan adacıkları deneysel ve teorik olarak incelemiştir. Bu çalışmanın deneysel kısmında Ag çekirdekten oluşan küresel altlık üzerindeki SiO₂ katmanda gözlemlenen adacık oluşumu çekirdek yarı çapı ve uyumsuzluk gerinimi ile değişimi araştırılmıştır. Teorik kısmında ise 3 boyutlu faz alan teorisi kullanılarak bu oluşumlar modellenmeye çalışılmıştır. Çalışmalar sonucunda adacık oluşumunun kinetiğinin yüksek yüzey eğriliği ve uyumsuzluk gerinimlerinde hızlandığı gözlemlenmiştir. Bu çalışma, projede yüzey enerjilerindeki anizotropinin ve uyumsuzluk gerinimlerinin kuantum yapıların morfolojilerine etkisi üzerindeki önemini göstermektedir.

Sfyrıs ve diğ. (2012) gerilmiş ince filmlerin yüzey morfolojilerinin kararlılık analizlerini çeşitli yükler (elektrik, gerinim) altında incelemiştir. Geliştirdikleri 3 boyutlu modelin analizleri yüzey elektro-göç yeterli güçte uygulandığında SK

(Stranski-Krastanov) kararsızlıklarını engellediğini göstermiştir. Sonuç olarak yüzey elektro-göçünün yüzey kararsızlığını kontrol etmede kullanılabilmesi gösterilmiştir. Bir diğer çalışmada ise uygulanan elektrik ve termal alan sonucu gerçekleşen elektro-göç ve termal göçün difüzyon eşyönlülüğü altındaki kararlılık analizlerini yapmışlardır. Uygun şekilde ayarlanmış termal alan eğimin kritik elektrik alan ihtiyacını düşürebileceğini göstermişlerdir (Dasgupta ve diğ., 2012; Sfyris ve diğ., 2013).

Ogurtani ve diğ., (2010a; 2010b) kafes uyumsuzluğu bulunan adacık/altlık sistemleri üzerinde gerinim ve yönsel yüzey difüzyonu konularında çalışmışlar ve simülasyon sonuçları ile çok ilginç morfolojik dönüşüm ve davranışlar gözlemlemişlerdir. Ogurtani ve diğ., (2014) yılındaki çalışmalarında ise gerinim altında yüzey pürüzlenmesi kararsızlığı ile oluşan kuantum noktalar için gereken gerinim değerlerini ve başlangıç yüzey pürüzlülüğünün değerinin birbirleri ile olan ilişkilerini göstermişlerdir. Bu çalışmalar, Ogurtani ve Ören tarafından son 10 yıl içerisinde geliştirilen yüzey ve arayüzeylerin geri-dönüşümsüz termodinamik teorisi temeline dayanmaktadır (Ören ve Ogurtani 2000; Ogurtani ve Ören 2001; 2005, Ogurtani ve diğ. 2010a; 2010b; 2014 Akyildiz ve diğ., 2012).

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

3. TEORİ VE MATEMATİKSEL MODEL

Yüzey sürüklenme difüzyonu ve büyümesinin hem gerinim hem de elektrik alanları altındaki formülasyonu nanoyapıların morfolojik gelişimlerinin modellenmesi için, Ogurtani ve Oren (2001; 2005) tarafından geliştirilen, içlerinde üçlü kavşakları da bulunduran yüzey ve arayüzeyler için, geri dönüşümsüz (irreversible) termodinamiğin mikroayrık formülasyonunu temel alınarak geliştirilmiştir. Literatürdeki çalışmalar incelendiğinde, şu aşamada, arayüzey evrimi ile ilgili geliştirilmiş en kapsamlı teoriler son 10 yıldır Ogurtani ve Ören tarafından geliştirilmekte olan ve mikroelektronik devrelerde elektrogöç nedenli bozunma mekanizmaları, tane sınırı büyümesi, KN oluşum ve evrimi gibi farklı alanlara başarı ile uygulanan bu teoridir. (Oren ve Ogurtani 2000; Ogurtani ve Oren 2001; 2005, Ogurtani ve diğ. 2010a; 2010b; 2014). Üçlü kavşaklar (triple junction) yani teklikler içeren yüzeyler ve arayüzleri geri dönüşümsüz termodinamik formülasyonu dayalı bir süreklilik teorisi hem yön bağımsız (isotropic) hem de yön bağımlı sistemler için kapsamlı bir şekilde geliştirilmiştir. Bu modele uygulanan gerinim ve elektrik alanlar eş zamanlı olarak aşağıda belirtildiği şekilde eklenebilir.

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

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

ve

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

Formül (3.1)'de iki ana terim vardır, birinci terim farklı kuvvetler altında yüzeyde madde taşınım kinetiğini tanımlarken, ikinci terim ise büyüme ya da faz değişimi (yoğuşma ve buharlaşma) kinetiğini ifade eder. \bar{M}_{dv} sıcaklık ve yüzey gerinimlerine bağlı olan normalize büyüme hareketliliğidir. Formül (3.1)'de $\bar{\kappa}$ 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 katı faz yönünde olur ve dolayısıyla bölgesel küçülme ya da buharlaşma anlamına gelmektedir.

Bu çalışmada Helmholtz serbest enerji yoğunluğunun $f_{d/s}(y)$ izokorik sistemlerde yüzey ile altlık arasındaki mesafeye, y , bağlı olduğunu varsayılmıştır. Normalize edilmiş ıslanma potansiyeli ise $\omega(y) = \Omega_d n_y d\gamma / dy$ formülü ile ifade edilmiştir.

Burada $n = -\hat{n} \cdot \hat{j}$ ifadesi yüzey normalinin y eksenindeki projeksiyonunu ifade etmektedir.

Formül (3.1)'de normalize çember gerinimi (hoop stress) $\bar{\sigma} \equiv Tr \bar{\sigma}$ ile ifade edilir, burada boyutsuz gerinim şiddeti parametresi Ξ elastik dipole tensör etkileşimlerinin (EDTI), Σ ise elastik gerinim enerji yoğunluğunun (ESED) gerinim nedenli yüzey sürüklenme difüzyonuna katkısını ifade ederler. χ ise uygulanan elektrik alanın yüzey sürüklenme difüzyonuna etkisini belirtir. Bu çalışmada χ ve Σ parametrelerinin değerleri ve birbirlerine göre oranları sistemin evrimini kontrol eden malzeme özelliklerine ek olarak dışsal olarak kolaylıkla değiştirilebilen ana faktörler olarak ortaya çıkmaktadır.

Adacık ile altlık arayüzündeki uyumsuzluk gerinimi Dirichlet sınır koşulu olarak sisteme dahil edilmiştir. Bunun için yerdeğişim vektörü $\tilde{u} \rightarrow \hat{i} \varepsilon_o x$ tanımlanmış ve kordinat sisteminin merkezi adacık merkezi olarak alınmıştır. Bu sayede dengesiz gerinim sonucu oluşabilecek damlacık kaymaları engellenmiştir. Burada, iki eksenli gerinim $\sigma_o = E_d \varepsilon_o / (1 - \nu_d)$ gerinim ile ilgili normalizasyonlarda normalizasyon parametresi olarak kullanılmıştır. Bu seçimler sonucunda düzlemsel eşyönlü elastik

gerinimin sayısal çözümü için dolaylı sınır elemanı yönteminin kullanımı uygun hale gelmektedir. Bu durumda başlangıç boyutlama parametresi olarak $E_d \rightarrow 1$, $\varepsilon_o \rightarrow 1$ değerleri alınabilmektedir. Sonuç olarak, sadece Poisson oranının gerçek değeri verilerek normalize olmuş sistemde gerinim dağılımı hesaplanabilmektedir.

Ana formülasyonumuzda \bar{t} , 2-boyutlu yüzey boyunca alınan eğrisel koordinatı belirtir ve bu değer keyfi olarak seçilebilecek bir ℓ_o değeri ile normalize edilebilmektedir. ℓ_o değeri ister adacığın tepe yüksekliği olarak seçilebilir istenirse de filmin yüzey Helmholtz serbest enerjisinin elastik gerinim enerjisi yoğunluğuna oranı olarak da seçilebilir $\ell^* = f_d / w_o$. Burada $w_o = (1 - \nu_d^2) \sigma_o^2 / 2E_d$ elastik gerinim enerjisi yoğunluğunu belirtir. Burada E_d ve ν_d değerleri sırası ile damlacık şeklindeki filmin Young modülü ile Poisson oranını verirken ε_o da film ile altlık arasındaki uyumsuzluk gerinimini belirtmektedir. Bu çalışmada film kalınlığı h doğal normalizasyon uzunluğu olarak belirlenecektir: $\ell_o = h_o$. $\Delta \bar{f}_{dv}^o(T) = (\bar{f}_v^o - \bar{f}_d^o)$ 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 \bar{f}_v^o and \bar{f}_d^o sırası ile gaz ve katı fazların hacimsel Helmholtz serbest enerji yoğunluklarına karşılık gelmektedir.

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

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

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

$$\Xi = (1 + \nu) \frac{\ell_o \sigma_o}{3g_s} \left| Tr \underline{\lambda}_s^V \right|, \chi = \frac{e \left| \bar{Z} \right| E_o \tau_o^2}{\Omega_\sigma g_\sigma}$$

$$\bar{\omega}(\bar{y}) = \frac{1}{\sqrt{1 + \bar{y}_x^2}} \frac{(f_s - f_d)}{\pi f_d} \frac{\bar{\delta}}{\bar{\delta}^2 + \bar{y}^2}, \bar{f}_{d/s}(y) = \frac{(f_d + f_s)}{2f_d} + \left(\frac{f_d - f_s}{f_d} \right) \frac{1}{\pi} \arctan(y / \delta) \quad (3.5)$$

Yukarıdaki denklem takımlarında, f_s ve f_d değerleri sırası ile altlığın ve filmin Helmholtz yüzey serbest enerjilerini tanımlarken f_{ds} ise damlacık ile altlık arayüzeyindeki serbest enerjiyi tanımlanmaktadır. Bu çalışmada genelleştirilmiş hareketlilik değerinin \bar{M}_{vd} kristal katının yöneliminden bağımsız olduğu kabul edilmektedir. Bu değer yüzey sürüklenme difüzyonunun hareketliliğinin en küçük değeri \hat{M}_d ile normalize edilmiştir. Bu değerler sırası ile $\hat{M}_d = (\tilde{D}_d h_d / \Omega kT)$ ve $\bar{M}_{vd} = (\hat{M}_{vd} \ell_o^2) / \hat{M}_d$ formülleri ile gösterilir. Burada, $\bar{\Omega}$ yüzey tabakasında bulunan kimyasal türlerin ortalama hacimlerini belirtir. \tilde{D}_d ise yüzey difüzyon katsayısının eşyönlü isotropic partını verir (eşyönsüzlük durumunda ise aynı değer en küçük değeri belirtir).

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

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

$$\bar{D}(\theta, \phi, m) = D_\sigma^0 \left[1 + A \cos^2(m(\theta - \phi)) \right] \quad (3.6)$$

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

Yön bağımlı yüzey katılığı formülü aşağıdaki gibi elde edilebilir:

$$\hat{f}(\hat{\theta}, \hat{\phi}, m) = \left(1 + \frac{B}{2} \right) \left[1 - \frac{B(1 - 4m^2)}{B + 2} \cos \left[2m(\hat{\theta} - \hat{\phi}) \right] \right] \quad (3.7)$$

Bu bağıntıda $\hat{\theta} = \pi/2 - \theta$ olarak verilebilir ve iki boyutta genelleştirilmiş silindirik yüzey difüzyon düzleminin normal vektörü ile genel kartezyen referans sisteminde x -ekseninin yaptığı açıdır. Denklem 3.7'ye göre yüzey katılığı, yüzey Helmholtz

serbest enerji anizotropi sabitinin $B \leq 2 / \left(\left| 1 - 4m^2 \right| - 1 \right)$ eşitsizliğini sağladığı durumlarda pozitif alınabilmektedir. Bu şartlarda B sabiti için üst limitler iki katlı, dört katlı ve altı katlı simetrisi için: $B \leq \{1; 1/7; 1/17\}$ olarak ortaya çıkmaktadır.

3.1 Elektrik Alan Denkleminin Sınır Elemanları Yöntemi Kullanılarak Sayısal Çözümü ve Programlanması

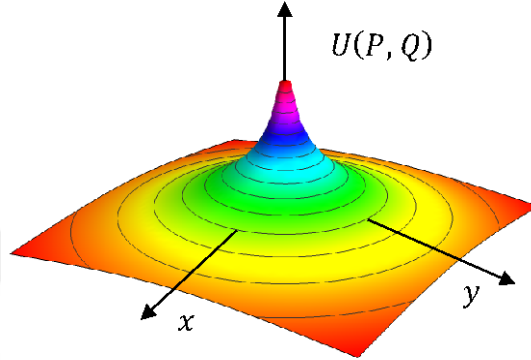
Elektrik alanın etkilerinin incelenebilmesi için öncelikle geometrisi belirlenen (şekli bilinen) bir KN için Laplace denklemi dolaylı sınır elemanları yöntemi kullanılarak çözülmüş ve simülasyon programına entegre edilmiştir. Dolaylı sınır elemanları yöntemi (BEM) bir çok mühendislik probleminin çözümüne başarı ile uygulanan bir sayısal hesaplama yöntemidir. Bu yöntemin en önemli avantajı çözümün sadece sınır değerleri kullanılarak elde edilebilmesi (Brebbia ve Dominguez, 1992), dezavantajı ise çözülecek olan diferansiyel denklemin eşleniği sınır integral denkleminin elde edilebilmesi için temel analitik çözümünün bilinmesi gerekliliğidir (Partridge ve diğ., 1992). Sınır elemanları yönteminin öncüsü Trefftz yöntemi (Brebbia ve Dominguez, 1992) olup, bu yöntemde yaklaşık çözüm, temel analitik çözümün etki alanı (domain) dışında konumlanan kaynak noktaları ile karşılaştırılması ile elde edilir. Sınır elemanları yönteminde de çözüm benzer bir şekilde temel analitik çözüm ile elde edilir, ancak bu yöntemde kaynak noktaları belirli noktalara yerleştirilmek yerine sınır boyunca sürekli bir şekilde yerleştirilir. Kaynak şiddetinin dağılımı yoğunluk fonksiyonu ile ifade edilir. Doğru bir yoğunluk fonksiyonunun bulunması ile parçalı diferansiyel denkleminin çözümü tüm etki alanı için sağlanır. Yoğunluk fonksiyonu bulunduktan sonra etki alanı ve sınırlarda fiziksel olarak anlamlı sonuçlar elde etmek için tek yapılması gereken sınır üzerinde integralin alınmasıdır.

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

$$\nabla^2 g(r) = 0 \quad (3.8)$$

$$\hat{n} \cdot \nabla g(r) = \hat{n} \cdot \frac{\partial g(r)}{\partial r} \hat{r} = 0 \quad (\text{Neuman sınır koşulu}) \quad (3.9)$$

Burada, $\mathcal{G}(r)$ sınırlardaki elektrostatik potansiyeldir. Problemin iki boyutlu çözümünde kaynak $z = -\infty$ dan $z = +\infty$ 'a kadar uzanan sonsuz uzunlukta bir çizgi üzerinde varsayılır. P (kaynak noktası) noktasındaki birim yük sahibi kaynağın Q noktasında (gözlem noktası) yarattığı kuvvet alanı temel analitik çözüm $U(P, Q)$ ile ifade edilir. Laplace denklemini sağlayan temel analitik çözüm aşağıdaki gibidir (Paris and Canas, 1997):



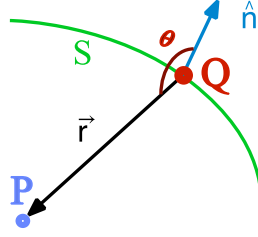
Şekil 3.1: Laplace denkleminin iki boyutlu problem için temel analitik çözümünün (Denklemler 3.8) grafiği.

$$U(P, Q) = \frac{1}{2\pi} \ln\left(\frac{1}{r}\right) \quad (3.10)$$

Bu denklemden r , P ile Q arasındaki mesafedir (Şekil 3.1).

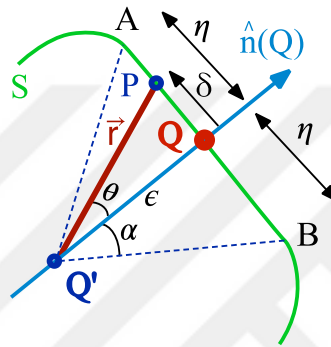
Temel analitik çözümün yönelimsel türevi Laplace denklemini sağlar ve aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\begin{aligned} T(P, Q) &= \hat{n} \cdot \nabla U(P, Q) \\ &= \hat{n} \cdot \frac{\partial U(P, Q)}{\partial r} \hat{r} = \hat{n} \cdot \frac{\partial U(P, Q)}{\partial r} \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} \\ &= -\frac{1}{2\pi |\vec{r}|} \hat{n} \cdot \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} = -\frac{1}{2\pi} \frac{|\hat{n}| |\vec{r}| \cos(\theta)}{|\vec{r}|^2} \\ &= -\frac{1}{2\pi} \frac{\cos(\theta)}{|\vec{r}|} \end{aligned} \quad (3.11)$$



Şekil 3.2: Temel analitik fonksiyonun notasyonu.

Burada θ açısı QP doğrusu ile sınırın dış normalinin \hat{n} yaptığı açıdır (Şekil 3.2). Dolaylı sınır elemanları yöntemi ile çözüm aşağıdaki integral formu ile bulunur:



Şekil 3.3: Q' Q ya yaklaşırken AB boyunca alınan integralin limiti.

$$u(Q) = \int_S U(P, Q) \mu(P) dS_p \quad (3.12)$$

Kaynakların, yani elektrik yüklerin şiddetini veren $\mu(P)$ yoğunluk fonksiyonu etki alanı sınırı boyunca sürekli dağıtılmıştır. İki boyutlu problemde dS_p integralin yüzeydeki yay uzunluğunca alınacağını ifade eder. Alt indis p , Q noktası sabit kalırken integrasyon noktasının sınır boyunca ilerlediğini göstermektedir. $U(P, Q)$, P noktası dışında her yerde parçalı diferansiyel denklemi sağladığı için $u(Q)$ etki alanı içindeki her yerde parçalı diferansiyel denklemi sağlarken, sınırdaki sağlamamaktadır.

Bu noktada ise sadece sınır koşulları sağlanmalıdır. İntegral gösterimi etki alanı içinde geçerli olsa da sınırlarda geçerli değildir, fakat çözüm hem etki alanının içinde hem de sınırlarda geçerli olmalıdır. Neuman sınır koşulunu sağlamak için S sınırı üzerindeki Q noktasına $u(Q)$ etki alanı içerisinde yaklaşırken limit değerlerin sınır koşullarına eşitlenmesi gerekir.

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

$$\begin{aligned}\hat{n} \cdot \nabla u(Q) &= \int_S \hat{n} \cdot U(P, Q') \mu(P) dS_p \\ &= \int_S T(P, Q') \mu(P) dS_p\end{aligned}\quad (3.13)$$

ve bu durumda sınır koşulu aşağıdaki şekilde ifade edilmiştir.

$$\lim_{Q' \rightarrow Q} \frac{\partial u}{\partial n}(Q') = \bar{t}(Q) \quad (3.14)$$

$\frac{\partial u}{\partial n}(Q')$ ifadesinin Q' noktası S 'e yaklaşıp geçtiği andaki davranışını göstermek için Q' 'nin iki boyutlu alanın sınırının düz bir parçası olduğu ve bu düz sınır çizgisinin üzerinde $\mu(P)$ yoğunluk fonksiyonunun değişmediğini kabul edilebilir. Dolayısıyla, $\mu(P) = \mu(Q)$ eşitliği geçerli olacaktır. $S(Q, n)$ şekil 3.3'deki düz AB sınırını ifade ederken ε QQ' çizgisini gösterir.

$$\frac{\partial u}{\partial n}(Q') = I_1(Q') + I_2(Q') \quad (3.15)$$

Burada,

$$\begin{aligned}I_1(Q') &= \int_{S(Q, n)} T(P, Q') \mu(P) dS_p \\ I_2(Q') &= \int_{S-S(Q, n)} T(P, Q') \mu(P) dS_p\end{aligned}\quad (3.16)$$

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

$$I_1(Q') = \int_{-n}^n \frac{1}{2\pi} \frac{\cos(\theta)}{r} \mu(P) dS_p = \mu(Q) \int_{-\alpha}^{\alpha} \frac{1}{2\pi r} d\theta \quad (3.17)$$

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

$$I_1(Q') = \mu(Q) \frac{\alpha}{\pi} \quad (3.18)$$

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

$$I_1(Q') = \frac{1}{2} \mu(Q) \quad (3.19)$$

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

$$\lim_{Q' \rightarrow Q} \frac{\partial u}{\partial n}(Q') = \int_S T(P, Q') \mu(P) dS_P + \frac{1}{2} \mu(Q) \quad (3.20)$$

Denklem (3.19)'daki sonuç Denklem (3.13)'de yerine konduğunda Neuman sınır koşulunun integral ifadesi aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\bar{t}(Q) = \int_S T(P, Q') \mu(P) dS_P + \frac{1}{2} \mu(Q) \quad (3.21)$$

Laplace denkleminin dolaylı sınır elemanları yöntemi ile çözümünün en basit uygulamasında S sınırı iki boyutlu düz çizgi ile tanımlanır ve bu eleman üzerindeki her yerde $\mu(Q)$ değeri sabittir. $\mu(Q)$ değerini hesaplamak için gerekli eş zamanlı denklemleri kurmak için Denklem (3.11)'deki Q noktası her elemanın ortasında konumlandırılır. N elemanı olan $S_1, S_2, S_3, \dots, S_N$ bir sistem için, eş zamanlı denklemler aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$\bar{t}(Q_i) = \frac{1}{2} \mu(Q_i) + \sum_{j=1}^N \Delta T_{i,j} \mu(Q_j) \quad (3.22)$$

Burada,

$$\Delta T_{i,j} = \int_{S_j} T(P_j, Q_i) dS_{P_j} \quad (3.23)$$

Denklem (3.21)'de Q_i noktası eleman ortalarında bulunduğu için, denklemin geçerliliği için gerekli olan düzgün yüzey koşulu sağlanır. Sınırlı etki alanında,

eleman sayısı sonsuza yaklaştıkça denklem katsayılarından oluşan matris tekildir ve elemanlardan bir tanesinde $u(Q)$ sıfır alınması gerekir. Sonsuzdaki integral ifade

$$u(Q) = \ln \frac{1}{r_0} \int_S \mu(P) dS_P \text{ şeklinde yazılabilir. Bu denklemde } r_0 \text{ rasgele seçilmiş sıfırdan}$$

farklı bir referans noktasıdır. Dolayısıyla Neuman sınır koşulunun çözümü ve denklem katsayılarının matrisi eleman sayısı sonsuza gittiğinde tekil olmazlar.

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

Pozitif x yönünde elektrik alan uygulanan Kuantum Nokta problemine yoğunlaşarak ve çözümü iki parçalı olarak hesaplanmaya çalışılmıştır. İlk parça hesabın yapılacağı yüzey olduğu yerde bulunmasa idi uygulanan elektrik alan nedeniyle burada oluşacak olan elektrostatik potansiyeldir. İkinci parça ise ilk parça çözümüne sınır koşullarını sağlamak için eklenecek olan perturbasyonun hesabıdır.

$$g(r) = g^I(r) + g^{II}(r) \quad (3.24)$$

Denklem (3.8)'de ifade edilen Neuman sınır koşulu bize sınır boyunca elektrik alanın yüzey normaline doğrultusundaki bileşeninin sıfır olduğunu ifade eder.

$$E(Q) = -grad(g(r)) = -grad(g^I(r)) - grad(g^{II}(r)) = E^I(Q) + E^{II}(Q) = 0 \quad (3.25)$$

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

$$g^I(Q) = -E_0 x = -E_0 r \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} = -E_0 r \cos(\phi) \quad (3.26)$$

Elektrik alanın yüzey normaline yönündeki bileşeni aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$E^I(Q) = -grad(g^I(Q)) = -\hat{n} \cdot \nabla g^I(Q) = -E_0 \cos(\phi) \quad (27)$$

Bu sonucu Denklem (3.24) ile karşılaştırarak Neuman sınır koşulunu sağlamak için yüzeye yerleştirilmesi gereken hayali yükler hesaplanır:

$$E^H(Q) = -E^I(Q) = E_0 \cos(\phi) \quad (3.28)$$

Dolayısıyla Q_i noktasında sınır koşulunu sağlamak için Denklem (3.21)'den yararlanılarak aşağıdaki eşitlik yazılabilir:

$$E^I(Q_i) = \frac{1}{2} \mu(Q_i) + \sum_{j=1}^N \Delta T_{i,j} \mu(Q_j) \quad (3.29)$$

Burada N yük sayısını belirtirken, $\Delta T_{i,j} = \Delta T(P_j, Q_i)$ 'dir ve Denklem (3.22)'de verilen integral ile hesaplanır. Buradan sınır koşullarını sağlayan yük dağılımı hesaplandıktan sonra $g^H(Q)$ hesaplanır.

$$g^H(Q) = \sum_{j=1}^N \Delta U_{i,j} \mu(Q_j) \quad (3.30)$$

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

$$\Delta U_{i,j} = \int_S \Delta U(P_j, Q_i) dS_{P_j} \quad (3.31)$$

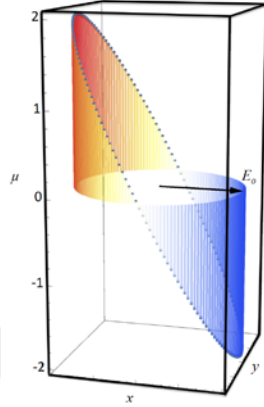
Denklem (3.22) ve Denklem (3.30)'da tanımlanan integralleri yamuk elamanlar (trepozoidal) kuralı ile sayısal olarak hesaplanmıştır.

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

$$\Delta T_{i,j} \cdot \mu_j = E_i^I \quad (3.32)$$

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

Yazılan programın doğru çalışıp çalışmadığını kontrol etmek için öncelikle analitik çözümünü bildiğimiz dairesel bir sistem kullanarak test edilmiştir. Dairesel bir kuntum nokta çevresinde yük dağılımının analitik çözümü $\mu(\phi) = -2\cos(\phi)$ ifadesi ile verilir. Bu durumda, Sınır Elemanları Yöntemi ile yapmış olduğumuz yük hesabı analitik çözüm ile karşılaştırılmış ve dairesel sistem sınırlarındaki yükler Şekil 3.4’de verilmiştir. Her iki sonucun da üst üste çakıştığı ve hata farkının 60 düğüm noktası kullanılması durumunda % 0.1 ‘in altına indiği belirlenmiştir.



Şekil 3.4: Dairesel sistem için analitik (noktalar) ve sayısal çözümün (renkli çubuklar) karşılaştırılması.

Daha sonra elektrik alan hesapları, Şekil 3.5’de ana hatları verilen program akış şemasında belirtildiği şekilde eğrilik ve gerinim hesaplarına eklenmiştir.



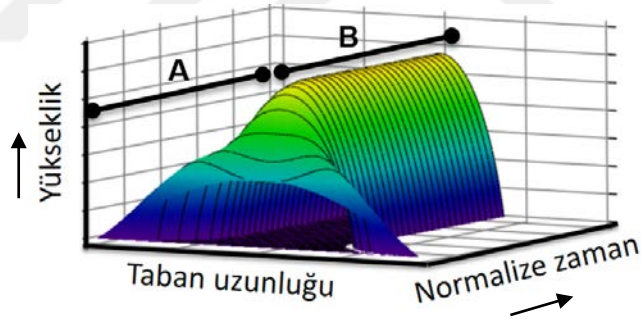
Şekil 3.5: Program akış şeması.

4. SİMÜLASYON SONUÇLARI VE YORUMLAR

Elektrik alanı da içeren yönetici diferansiyel denklemler sayısal olarak çözülmüş ve tüm sistemin farklı kuvvet alanları altında simülasyonunu yapmamızı sağlayacak program geliştirilmiştir. Bu bölümde bu program ile yapılan simülasyonlar ve sonuçları incelenecektir. Öncelikle yön-bağımsız (izotropik) sistemlerin daha sonra da kristal etkilerini gözlemleyebileceğimiz yön-bağımlı (anizotropik) sistemlerin elektrik ve gerinim alanları altındaki davranışları ve denge şekilleri irdelenecektir.

4.1 Yön-Bağımsız (İzotropik) Sistemler

İzotropik sistemde yüzey sürüklenme difüzyonunun yön bağımsız olduğu kabul edilmiştir. Simülasyon sonuçlarının daha kolay analiz edilebilmesi için Şekil 4.1.'de örnek bir simülasyon çıktısı verilmiştir.



Şekil 4.1: Başlangıçta yüzeyde oluşturulmuş bir damlacığın zamanla değişerek dengeye ulaşması.

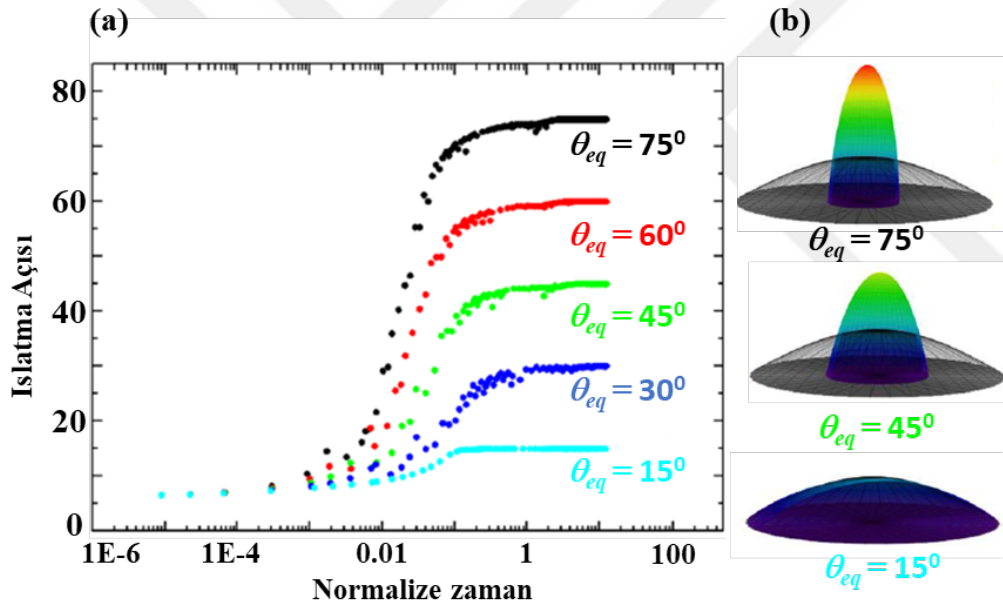
Şekil 4.1, başlangıçta yüzeyde oluşturulmuş bir damlacığın zamanla evrimini göstermektedir. Grafikte, eksenler sırası ile KN'nin taban uzunluğu ve yüksekliğini gösterirsek, Normalize zaman ise zamandaki ilerlemeyi. Damlacık zamanda ilerledikçe (A zaman aralığı) şekil değişimi sonucunda tek bir adacığa dönüşerek dengeye gelmiştir. Sistemin dengeye geldiği adacık morfolojisinin belirli bir süre sonra sabitlenerek zamanla değişmemesinden (B zaman aralığı) anlaşılmaktadır.

Tasarım açısından elde edilen kuantum noktaların şekilleri, en boy oranları (aspect ratio) ve tepe eğrilikleri büyük önem taşımaktadır. Bu özelliklerin kontrolü kuantum noktaların enerji bant yapılarının kontrolünü sağlar. Bu çalışmada anlatılan tüm farklı

KN morfolojileri, zaman içinde deęişim geçirerek dengeye gelmiş KN'lerdir, tüm grafikler ve diyagramlar, denge morfolojilerine ulaşmış KN'lerin özelliklerini incelemektedir.

4.1.1 Yön-bağımsız sistemlerde denge ıslatma açılarının etkileri

Denge ıslatma açısı (θ_{eq}), yüzeydeki difüzyon doğrultusunun tanjant vektörü ile x -ekseni arasındaki açıdır ve ıslatma parametresi (λ_g) ile arasında $\theta_{eq} = \arccos(\lambda_g)$ ilişkisi bulunur. Islatma denge ıslatma açısının, KN morfolojilerini nasıl etkilediğinin anlaşılması için farklı ıslatma denge açıları ile çalışılmış ve elde edilen sonuçlardan denge açılarının zamanla nasıl deęiştiğini gösteren grafik, Şekil 4.2 (a) 'daki gibi elde edilmiştir. Şekil 4.2 (b)'de ise $\theta_{eq}=15^\circ$, 45° , 75° için elde edilen denge morfolojileri örnek olarak verilmiştir (Şengül, 2014).

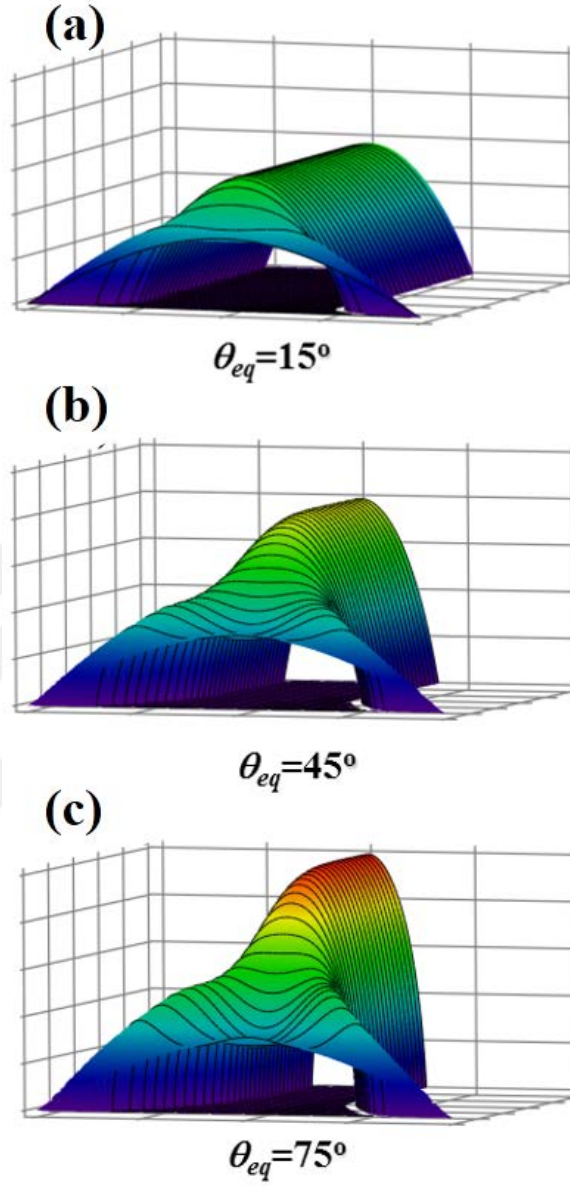


Şekil 4.2: (a) Islatma açılarının zaman ile deęişim grafięi ve (b) simülasyonların örnek çıktıları (Şengül, 2014).

Şekil 4.2 (a) başlangıçta, yaklaşık 7° olan ıslatma açısının, sistem zamanda ilerledikçe sisteme verilen denge ıslatma açısına göre zamanla dengeye gelişini, (b) ise seçilen üç farklı ıslatma denge ıslatma açısına sahip sistem için denge morfolojileri göstermektedir. Şekil 4.2 (b)'de verilen morfolojilere zamanla nasıl ulaşıldığı ise Şekil 4.3'de verilmiştir.

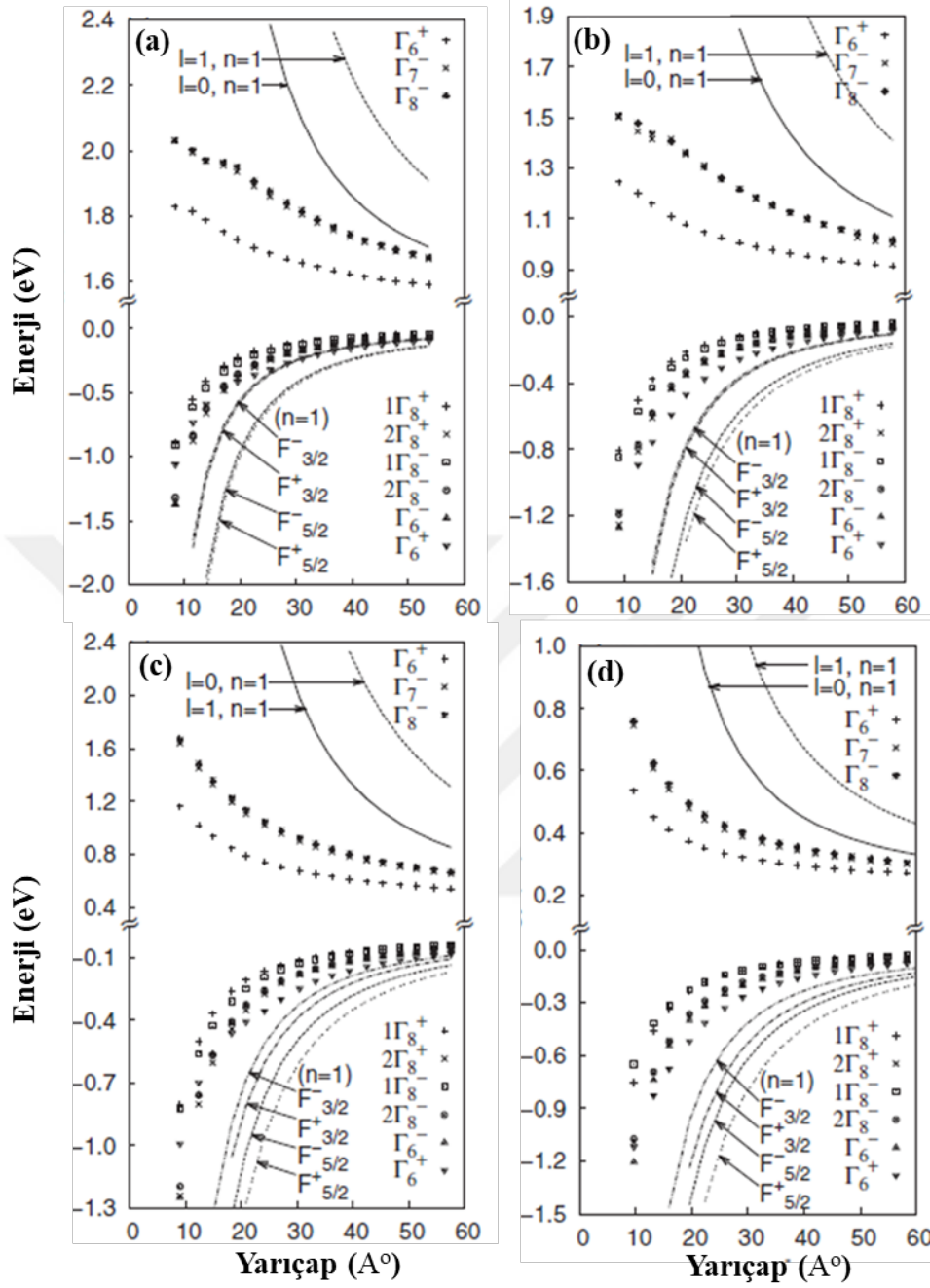
Başlangıçta yaklaşık 7° 'lik ıslatma açısına sahip olan damlacık, üç durumda da belirtilen denge açılarına ulaşmak için zamanda ilerlemekte ve sonuçta, dengeye

ulaşan KN'lerin belirtilen denge açlarına ulaştığı görülmektedir. Bu da geliştirilen programın doğru bir şekilde çalıştığı bize göstermektedir.



Şekil 4.3: Farklı denge ıslatma açıları, (a) 15° , (b) 45° , (c) 75° için KN denge ıslatma açıları, $\Sigma = 0$.

Bir altlık ve üzerine depozit edilen malzeme arasındaki denge ıslatma açısı, sistem denge koşullarındayken malzemeler için karakteristiktir. Sistemde bu açının değişmesi, altlık veya depozit edilen malzemelerden birinin veya her ikisinin değişmesini ifade eder. GaAs, GaSb, InAs ve InSb gibi farklı malzeme sistemleri için enerji bant aralıklarının KN çaplarıyla değişimi Suman ve diğerleri tarafından (2014) çalışılmıştır (Şekil 4.4).

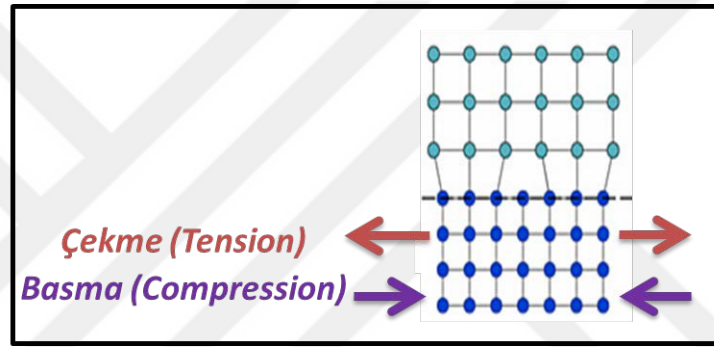


Şekil 4.4: Farklı KN sistemlerinde (a) GaAs, (b) GaSb, (c) InAs, (d) InSb boyut ile enerji seviyelerinin değişimi (Suman ve diğ., 2014).

Şekil 4.4'de KN'lerin enerji aralıklarının hem farklı ıslatma açıları sağlayacak farklı malzemeler kullanılarak, hem de KN çaplarının ayarlanarak kontrol edilebileceğini göstermektedir. Enerji aralıklarının kontrolü, cihaz tasarımı için önem arz etmektedir. Bu tez kapsamında denge ıslatma açıları ve KN boyut kontrolü, cihazlarda enerji aralıkları kontrol edilebilen KN'lerin elde edilebilmesi amacıyla ayrıntılı bir şekilde çalışılmıştır.

4.1.2 Yön-bağımsız sistemlerde gerinim etkileri

Gerinim, sistemde içsel ve dışsal gerinimlerin toplamını ifade eden Σ parametresidir. Sistemde içsel gerinimler altlık ve depozit edilen malzeme arasındaki kafes parametrelerinin uyumsuzluğundan ve/veya ısıl genişleme katsayılarının (thermal expansion coefficient) farklı olmasından kaynaklanan gerinim gevşemesinin oluşturduğu kuvvetlerdir. Dış kaynaklı gerinimler ise altlık malzemeye basma (compression) ve çekme (tension) kuvvetlerinin uygulanmasıyla oluşur (Şekil 4.5). İçsel ve dışsal gerinimlerin KN sistemi üzerindeki etkileri bu tez kapsamında birçok farklı durum için incelenmiştir. Bu kısımda, izotropik bir KN sisteminde gerinim etkisi incelenecektir.

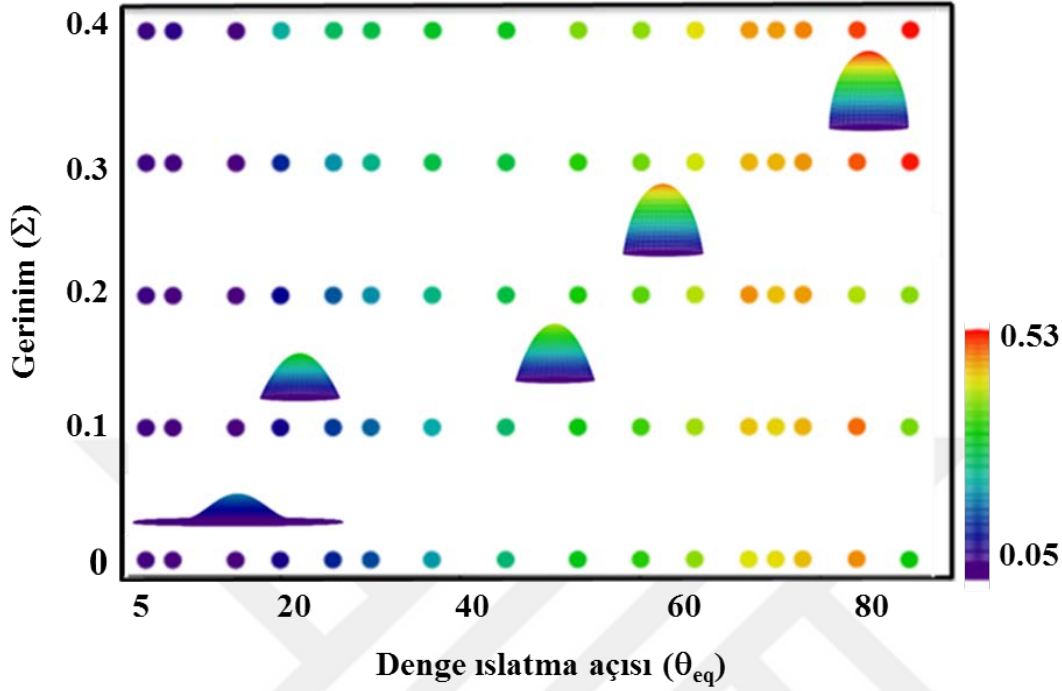


Şekil 4.5: Bir altlık ve üzerine depozit edilen malzemenin farklı kafes parametreleri ve altlığa uygulanan basma ve çekme kuvvetleri.

Tasarım açısından elde edilen kuantum noktaların en boy oranları (aspect ratio) büyük önem taşımaktadır. Bu parametrenin kontrolü kuantum noktaların enerji bant yapılarının kontrolünü sağlar. Tek bir KN'nin incelendiği izotropik sistemlerde gerinim şiddeti, KN'nin en boy oranlarına etki etmektedir. Farklı gerinim (stress) alanları altında en boy oranlarının değişimi Şekil 4.6'da verilmiştir.

Şekil 4.6'da denge ıslatma açısı-gerinim diyagramından da görüldüğü gibi, KN'lerin en boy oranları artan denge ıslatma açısı ve gerinim ile artmaktadır. En-boy oranlarına ek olarak KN'lerin morfolojilerindeki değişim de görülmektedir. Denge açılarının ve gerinimin çok küçük olduğu durumlarda elde edilen KN'lerde ıslatma tabakası varken (KN etrafındaki ince film tabaka), denge ıslatma açısı ve gerinim artmaya başladığında bu katman KN üzerine toplanarak KN'leri en-boy oranını arttırmaktadır. Bu parametrelerin değişimiyle grafikte kubbe ve çan gibi farklı

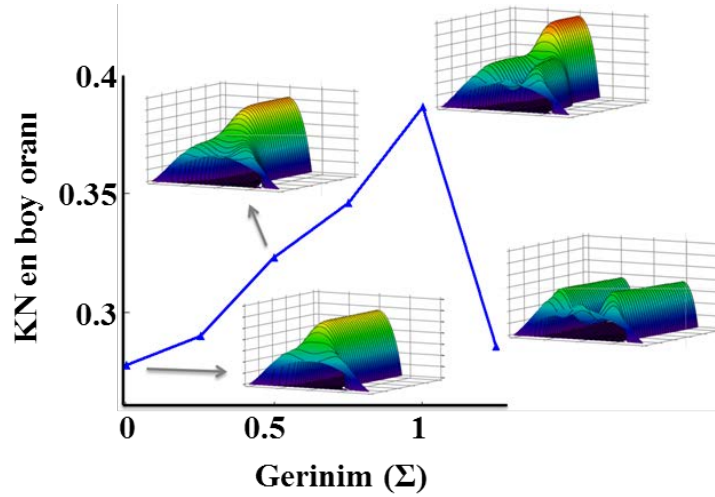
şekillerde KN'ler görülmektedir. Bu şekil farklılıkları, KN'lerin enerji düzeylerini kontrol etmektedir.



Şekil 4.6: Gerinim ve denge ıslatma açısı ile KN'lerin en boy oranlarının değişimi (noktaların renkleri en-boy oranlarını vermektedir).

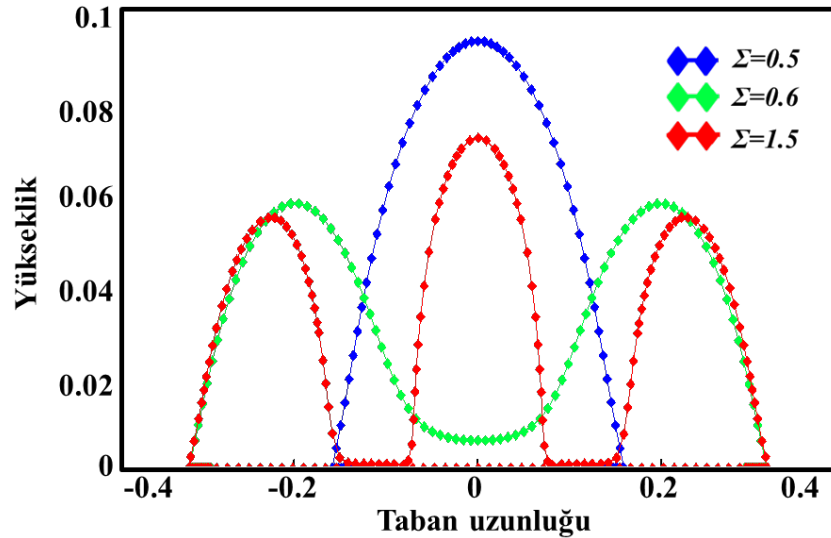
Floro ve Chason (1999), $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ (001) KN'lerde gerinim kuvvetinin boşalmasıyla (release of stress), daha yüksek en boy oranlarına sahip KN dizilerini deneysel olarak göstermişlerdir. Bu çalışma bizim modellediğimiz gerinim kuvvetleri altındaki, en boy oranları değişimiyle uyumludur.

KN'lerin en boy oranlarındaki artış belirli bir gerinim kuvveti değerine kadar devam etmektedir. Bu değerden sonra KN iki veya daha fazla KN'ye fragmente olarak en boy oranları azalmaktadır. KN'lern fragmente oldukları bu gerinim kuvvet değerleri kritik gerinim kuvveti olarak adlandırılmaktadır. Şekil 4.7'de gerinim ile KN en-boy oranları arasındaki ilişki gösterilmiştir. Normalize edilmiş gerinim değeri bu sistem için 1-1.25 değerleri arasında kritik değere ulaşmaktadır. Bu kritik değerin üstündeki gerinim altında KN sisteminin fragmentasyonu ayrıca verilmiştir ve görülebileceği üzere sistem ikiye bölünerek daha düşük en/boy oranına sahip ikili KN'ye dönüşmüştür.



Şekil 4.7: Farklı gerinim kuvvetleri altında elde edilen kuantum noktaların en-boy oranları.

KN'lerin denge halinde en-boy oranları Şekil 4.7'de da görüldüğü gibi, arttırılan gerinim kuvvetleri ile yükseltilebilmektedir. Ancak bu arttırım belirli bir eşik değerinden sonra en-boy oranlarını daha fazla arttıramamakta ve kuantum nokta toplam enerjisini küçültebilmek için ikiye ayrılarak (fragmentation) daha küçük boyutlu ve daha düşük en-boy oranlarına sahip ikili bir sisteme dönüşmektedir. İkili sisteme dönüşümden sonra bu davranış aynı şekilde devam etmekte ve belirli bir eşik değerinden sonra fragmentasyon devam etmektedir.

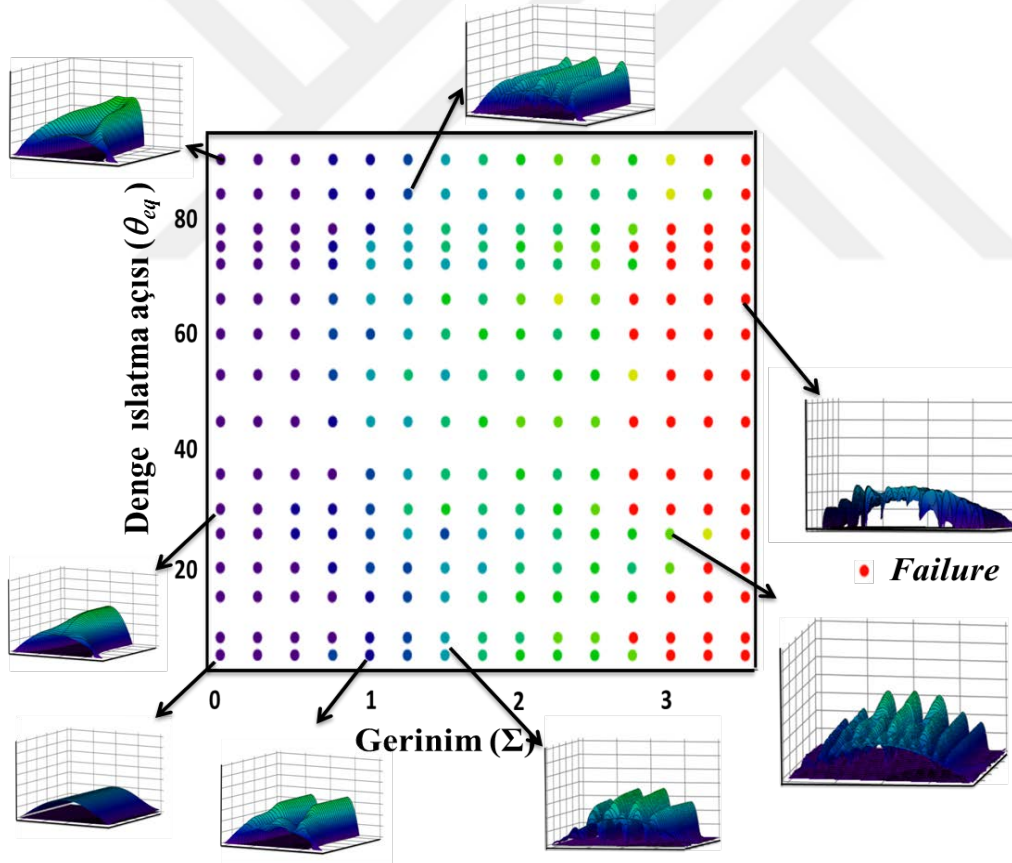


Şekil 4.8: Bir KN sisteminin farklı gerinim değerlerindeki morfolojisi ($\theta_{eq}=45^\circ$).

Şekil 4.8'de KN sisteminde gerinim değerinin 0.5 olduğu durum (mavi), tek bir KN'dir ve sisteme uygulanan gerinim değerinin artışıyla sistemin fragmente olarak daha küçük en boy oranına sahip iki KN'nin (yeşil) oluştuğu görülmektedir. Burada

iki KN oluşumu için kritik gerinim değeri $0.5-0.6$ arasındadır, iki KN'nin tekrar fragmente olarak üç KN (kırmızı) oluşturması için ise 1.5 olduğu görülmektedir.

Bölünme için gereken kritik gerinim değerlerinin bilinmesi, birim alandaki KN sayısının kontrol edilmesi, yeni cihaz tasarımları ve varolan KN cihazlarının daha kontrollü bir şekilde üretilmesi ile KN üretimi sırasında film kırılmalarının önlenmesi için büyük önem taşımaktadır. Literatürde bununla ilgili çalışmalar bulunmasına rağmen (Du ve Maroudas, 2016) deneysel veya gerçekçi sınır koşullarıyla modellenen ve birim alandaki KN sayısının kontrol edilebilirliğini net bir şekilde ortaya koyan bir çalışma bulunmamaktadır. Bu çalışmada, simülasyonlar sonucu, birim alandaki KN sayılarının, denge ıslatma açısı ve gerinim ile nasıl değiştiğini araştırdık ve yapmış olduğumuz simülasyonlar sonucunda sistemin nasıl kontrol edilebileceğini gösteren genel bir diyagram elde ettik (Şekil 4.9).



Şekil 4.9: İzotropik bir sistemde gerinim ve denge açısına bağlı KN fragmentasyonu.

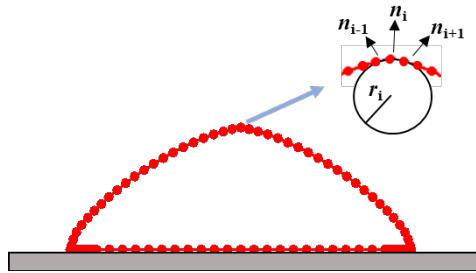
Şekil 4.9'da izotropik sistemde değişen denge açıları ve uygulanan gerinim kuvvetleri sonucu birim alandaki KN sayılarının değişimi verilmiştir. Mor ve mavi bölge tek adacık bölgesidir. Renk geçişleri KN sayılarının arttığını gösterir. Kırmızı

bölge ise filmin kırılmasına yol açacak yüksek kuvvet değerleridir. Bu diyagram farklı KN yoğunluklarına (birim alandaki KN sayısı) ulaşılması için gereken denge açıları ve gerinim değerlerini ortaya koymaktadır. KN yoğunluğu özellikle fotovoltaik uygulamalar açısından önemlidir ve yoğunluk kontrolü, daha verimli cihazların tasarımı için kullanılabilir.

KN'lerin Tepe Eğriliklerinin Kontrolü

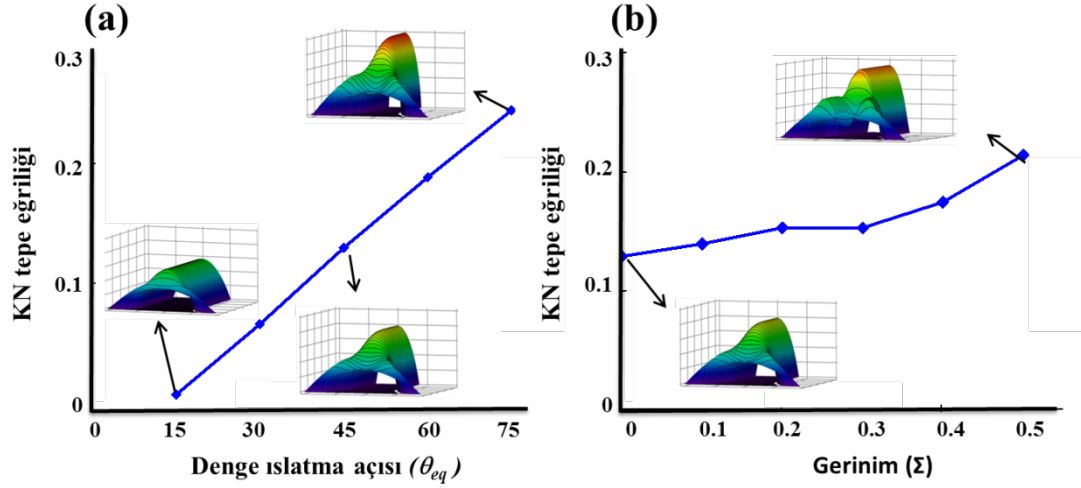
Nano küre, nano tüp ve KN gibi farklı nanoyapılar üzerinde yapılan çalışmalar yüzey eğriliklerinin, enerji seviyelerinde değişikliklere sebep olarak elektronik ve manyetik özellikleri etkilediği belirtilmiştir (Entin ve Magarill, 2001, Bulaev ve diğ., 2000, 2004, Huang ve diğ., 2012). Bu sebeple KN'lerin tepe eğriliklerinin ayarlanabilmesi enerji seviyelerinin kontrolünde önemli hale gelmektedir. Bu kısımda, yapılan deneyler sonucunda, KN tepe eğriliklerinin nasıl kontrol edileceği ile ilgili elde edilen sonuçlar paylaşılacaktır. Öncelikle KN'lerin tepe eğrilikleri şu şekilde hesaplanmıştır;

KN'nin tepe noktasında (KN yüksekliğinin en fazla olduğu düğüm noktası) belirlenir (n_i). Bu düğüm noktası ortada kalacak şekilde, bir önceki (n_{i-1}) ve bir sonraki düğüm noktaları (n_{i+1}) belirlenir ve bu üç noktadan bir çember geçirilir. Çemberin yarıçapı r olmak üzere eğrilik yarıçapı, $1/r$ 'dir (Şekil 4.10).



Şekil 4.10: KN sistemi ve tepe eğriliklerinin hesaplandığı düğüm noktaları.

Denge ıslatma açısının ve gerinim kuvvetlerinin KN'lerin en boy oranlarını (şekil 4.6) ve birim alandaki KN sayısını (şekil 4.9) kontrol ettiği, daha önce elde edilen sonuçlardan bilindiği için, bu parametrelerin KN'lerin tepe eğriliklerini de etkileyecekleri düşünülerek bu etkiler araştırılmıştır. Bunun için öncelikle farklı denge ıslatma açılarına sahip sistemlerde tepe eğrilikleri hesaplanmıştır (Şekil 4.11 (a)). Daha sonra incelenen bu sistemde KN ıslatma açılarından bir tanesi $\theta_{eq}=45^\circ$ seçilerek farklı gerinim kuvvetleri uygulanarak modellenmiştir (Şekil 4.11 (b)).



Şekil 4.11: Denge ıslatma açılarının (a) ve gerinim kuvvetlerinin (b) KN tepe eğriliklerine etkisi.

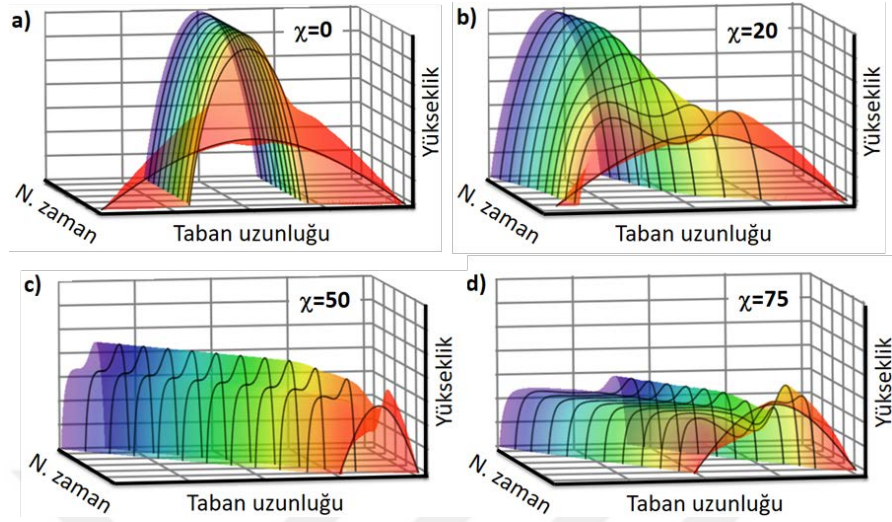
Şekil 4.11’de KN tepe eğriliklerine denge açılarının (a) ve gerinim kuvvetlerinin (b) etkisini gösteren grafikler verilmiştir. (a) incelendiğinde, en düşük tepe eğriliklerinin denge ıslatma açısının 15^0 olduğu durumda görülürken, denge ıslatma açısının artışıyla, tepe eğrilikleri artmaktadır. (b)’de $\theta_{eq}=45^0$ ’de gerinim kuvvetlerinin uygulanmasıyla da tepe eğriliklerinin arttığı görülmektedir. Bu bilgiler ile KN cihaz uygulamalarında istenilen KN tepe eğriliklerine sahip sistemlerin denge ıslatma açılarının ve gerinim kuvvetlerinin kontrol edilmesiyle elde edilebileceğini göstermiştir.

4.1.3 Yön-bağımsız sistemlerde elektrik alan etkileri

Elektrik alanın etkisini incelemek için geliştirilen programda, χ parametresi (Denklem 5) elektrik alanın kılcal kuvvetlere görece şiddetini belirlemektedir. Bu parametre, χ , sisteme uygulanan elektrik alan altında hareket eden elektronların malzeme içerisindeki atomlara momentum transferinin (elektrogöç, electromigration) şiddetini kontrol eder. Bu sistemde uygulanan elektrik alanın yönü $+x$ yönünde olup elektronlar ve dolayısı ile elektronlar tarafından sürüklenen yüzey atomları $-x$ yönünde hareket etmektedir.

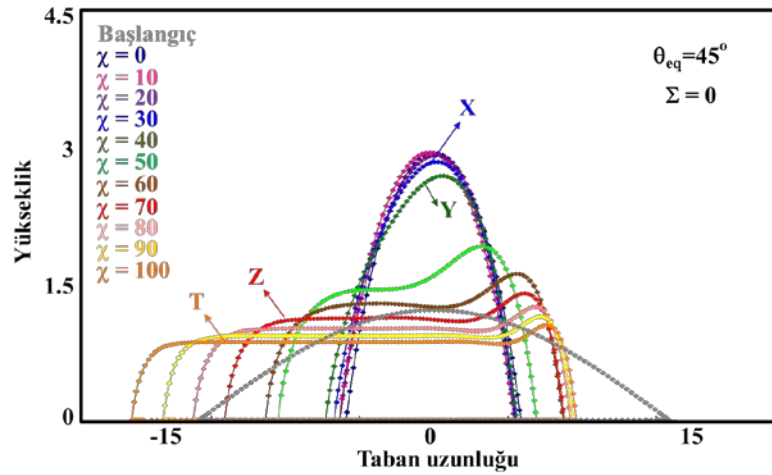
Öncelikle, hiçbir dışsal ve içsel gerinim (applied or residual stresses) olmadan sistemin elektrik alan altında hareketi incelenmiştir. Elektrik alanın etkileri Şekil 4.12 (a) referans alınarak daha iyi anlaşılabilir. Şekil 4.12 (a)’da sistemi kontrol eden

kuvvetler sadece kılcal kuvvetler, ıslatma potansiyeli ve üçlü kavşaklardaki (uçlardaki) ıslatma açılarıdır.



Şekil 4.12: Elektrik alan altında başlangıç damlacığının zamanla (kırmızıdan – mora doğru) ulaştığı denge şekilleri ($\Sigma = 0$).

Şekil 4.12 (b), (c) ve (d)' de ise sistem giderek daha yüksek elektrik alanlara maruz bırakılmıştır. Elektrik alan altında sistemin hem şekil değiştirdiği hem de altlık üzerinde elektrik alana ters yönde hareket ettiği gözlenmiştir. Elektrik alanın denge şekli üzerindeki etkilerini daha iyi inceleyebilmek için denge morfolojileri Şekil 4.13'de merkezleri ortalanarak aynı grafik üzerinde verilmiştir.

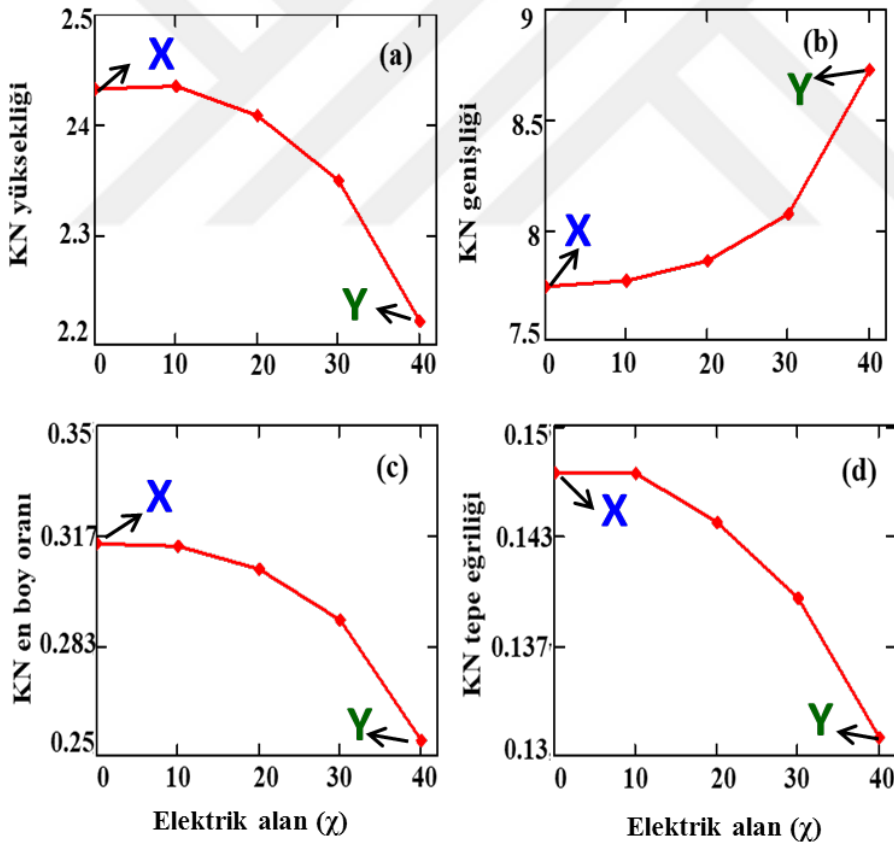


Şekil 4.13: Farklı elektrik alan şiddetleri altında başlangıç damlacığının (gri) zamanla ulaştığı denge şekilleri ($\Sigma = 0$, $\theta_{eq}=45^\circ$).

Şekil 4.13'de, elektrik alan parametreleri 0-100 arasında alınmış ve asimetric bir tarafa yatık veya iki tepeli, biri diğerinden daha uzun kuantum nokta sistemleri

üretilebileceği görülmektedir. Buna ek olarak, yüksek elektrik alanlarının başlangıçtaki damlacığı kuantum noktalarına dönüştürmek yerine, film şeklinde altlık yüzeyine yaydığı da gözlemlenmektedir. Bu sonuç, Du ve Maroudas (2017) tarafından izotropik sistemlerde gözlenen dışarıdan uygulanan elektrik alanın yüzey pürüzlülüğünü azaltabileceği olgusu ile uyumludur.

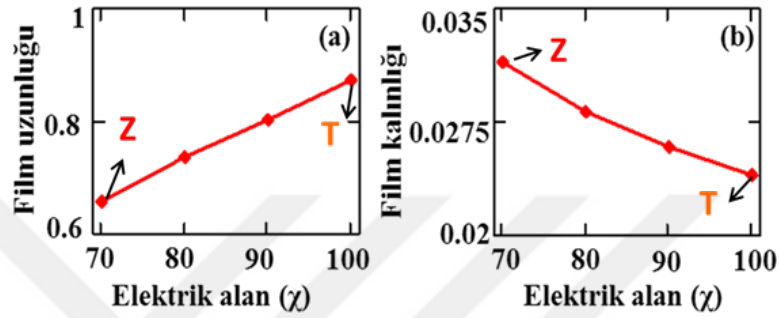
Şekil 4.13'te KN'lerin $\chi=50$ değerine kadar KN olarak kaldığını, bu değerden sonra elektrik alan şiddetinin daha fazla artırılmasıyla film şeklinde yayıldığı görülmektedir. Bu sistemde kritik değer, KN'lerden film morfolojisine geçiş için eşik değerini ifade etmektedir. Kritik değere ulaşılan kadar elektrik alanının KN'ler üzerindeki etkilerini anlamak için KN'lerin yükseklik, genişlik, en boy ve tepe eğriliği değerlerinin değişimi araştırılmıştır. Bunun sebebi, bu parametrelerin KN'lerin enerji aralıklarının kontrolünü sağlamalarıdır. Elde edilen sonuçlar Şekil 4.14'te verilmiştir.



Şekil 4.14: (a) KN tepe yüksekliğinin, (b) KN genişliğinin, (c) KN en boy oranlarının (d) KN tepe eğriliğinin elektrik alan ile değişimleri ($\Sigma = 0$, $\theta_{eq}=45^\circ$).

Başlangıç morfolojisinin KN'ye dönüştüğü elektrik alan bölgesinde ($\chi < 50$), elektrik alandaki artışın hem oluşan KN'nin en boy oranını hem de tepe eğriliğini

azalttığı gözlenmiştir. Burada sistemin izotropik olduğu unutulmamalıdır. Elektrik alan şiddeti arttırıldığında ise sistemin, film oluşturma eğiliminde olduğu görülmektedir. Oluşan filmin uzunluğu ve kalınlığı uygulanan elektrik alan şiddetine göre değişmektedir. Bunu gösteren grafik aşağıda verilmiştir. İnce filmlerde yüzey pürüzlülüğünün azaltılması elektronik cihaz performanslarını önemli ölçüde etkilemektedir. Bu sebeple, filmlerin kalınlık ve uzunluklarının uygulanan elektrik alan ile kontrol edilebilirliği araştırılarak gösterilmiştir (4.15).

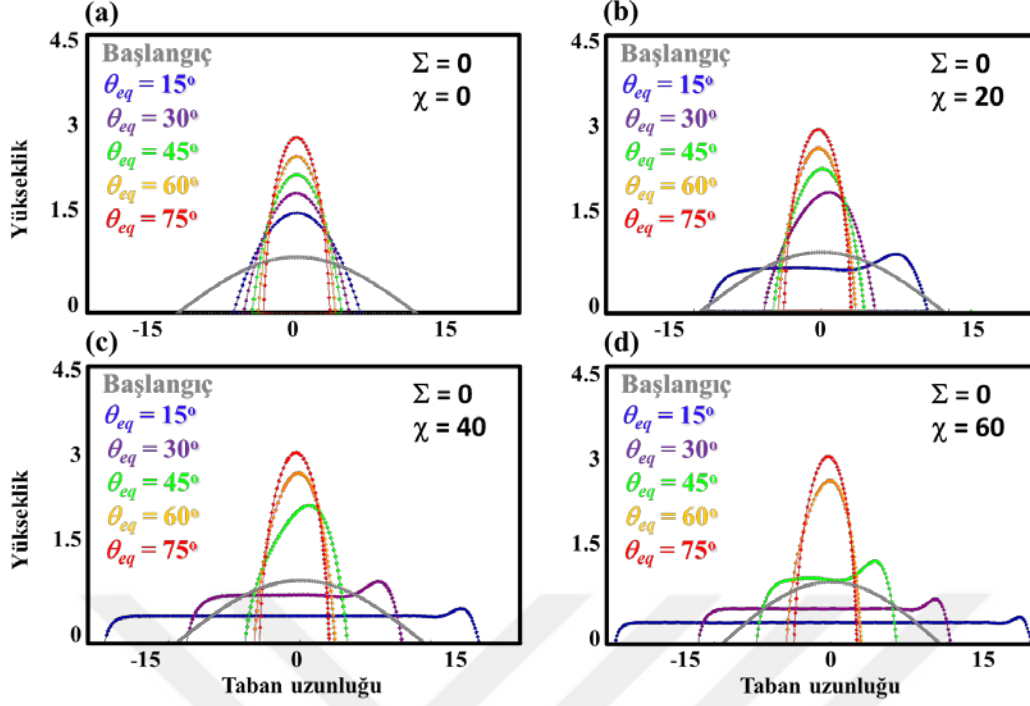


Şekil 4.15: Filmin uzunluğunun (a) ve kalınlığının (b) elektrik alan ile değişimi.

Şekil 4.15'de uygulanan elektrik alan altında oluşan filmin elektrik alan şiddeti arttırıldığında uzunluğunun arttığı, kalınlığının ise azaldığı görülmektedir. Bu sonuçlar bize hem kuantum noktaların şekillerinin elektrik alan uygulayarak kontrol edilebileceğini hem de elektronik cihaz performanslarında problemler yaratmakta olan yüzey pürüzlülüğünün filmin kalınlık ve uzunluğu ayarlanarak kontrol altına alınabileceğini göstermektedir.

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

Denge ıslatma açısı, KN morfolojilerinin kontrol edilmesinde önemli bir parametredir, ve KN'lerin yükseklik, genişlik, en boy oranları ve tepe eğriliklerini kontrol etmektedir. Denge açılarının uygulanan elektrik alan altında KN morfolojilerini nasıl etkilediğini anlamak için farklı denge açıları altında sisteme elektrik alan uygulanmış Şekil 4.16'daki sonuçlar elde edilmiştir.

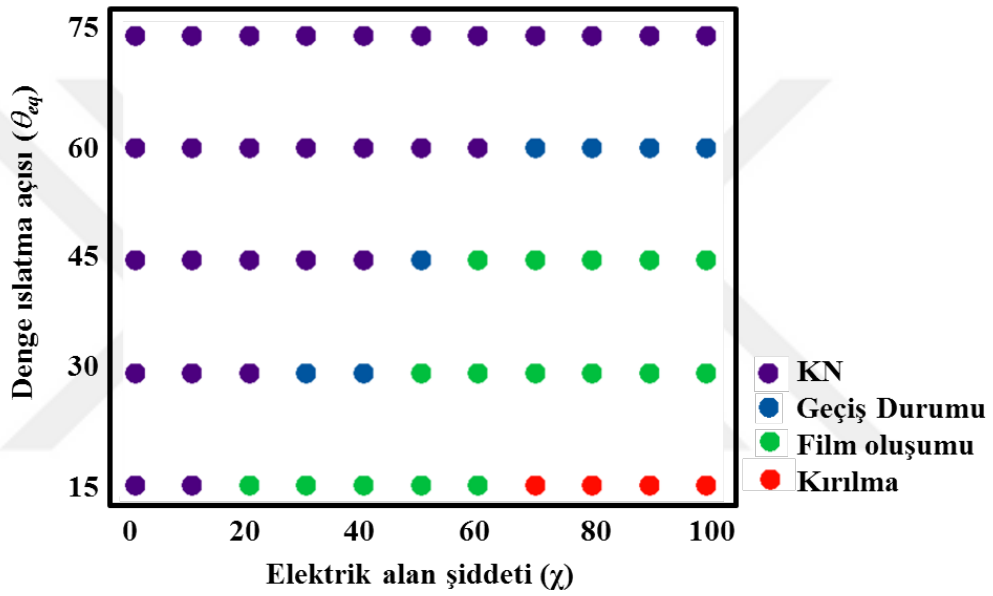


Şekil 4.16: Farklı denge açıları için gerinimsiz durumda KN morfolojilerinin elektrik alan ile değişimi.

Şekil 4.16'da gerinimsiz ortamda, farklı denge ıslatma açlarına sahip sistemlerde, artan elektrik alan şiddeti $\chi=0$ (a), $\chi=20$ (b), $\chi=40$ (c), $\chi=60$ (d) ile elde edilen morfoloji değişimleri verilmiştir. (a)'da, $\chi=0$ iken, denge açılarının KN'lerin şekillerini, en-boy oranları ile tepe eğriliklerini kontrol ettiği daha önce de belirtildiği gibi görülmektedir. Elektrik alan sisteme uygulanmaya başladığında ise hem oluşan KN'ler de simetri bozulumu hem de KN-film geçişinin değişimi gözlenmiştir. Düşük elektrik alan şiddetinde, $\chi=20$, değişen KN morfolojilerinde, sadece düşük denge ıslatma açısına sahip sistemlerde ($\theta_{eq}=15^\circ$), KN'den filme geçiş olmaktadır. Elektrik alan şiddeti arttırıldıkça KN'den filme geçiş daha yüksek ıslatma açlarına sahip sistemlerde de gözlenmektedir. Örneğin, $\chi=40$ 'da $\theta_{eq}=30^\circ$ 'de (c) ve $\chi=60$ 'da ise $\theta_{eq}=45^\circ$ (d) film oluşumu gözlemlenmiştir. Bu aynı zamanda belirli bir elektrik alan altında, yüzey pürüzlülüğünün denge ıslatma açısıyla kontrol edilebileceğini de ortaya çıkmaktadır. $\theta_{eq}=15^\circ$ 'de oluşan film (b), (c), ve (d)'de incelendiğinde, filmin kalınlığının artan elektrik alan ile azaldığını, uzunluğunun da arttığı gözlemlenmiştir. Bu sonuç literatürde, Du ve Maroudas (2017)'ın dışarıdan uygulanan elektrik alanın yüzey pürüzlülüğünü azaltacağını öne süren çalışmalarını destekler niteliktedir. Buna göre, eğer yüzey pürüzlülüğünün azaltılması amaçlanıyorsa, düşük denge ıslatma açlarına sahip altlık/adacık malzemeleri seçilerek yüzey pürüzlülüğünün kontrol

edilebileceği gösterilmiştir. Burada aynı zamanda oluşan filmin özelliklerinin kontrol edilmesi konusunda, denge ıslatma açısının da etkisi olduğu görülmektedir.

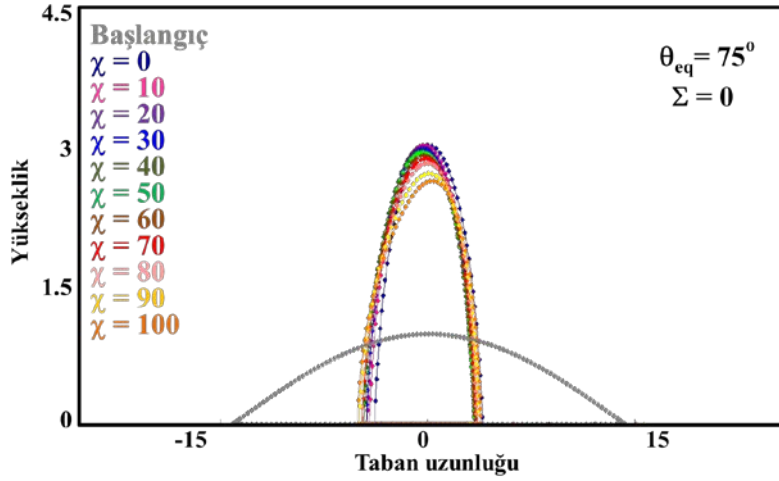
Farklı elektrik alan ve denge ıslatma açısı değerlerinin KN morfolojilerindeki etkilerinin daha net anlaşılabilmesi için, şekil 4.16 genişletilerek, oluşan KN, film ve KN-film arası geçiş fazlarını da içine alan morfolojileri gösteren, bir faz diyagramı haline getirilmiştir. Bu faz diyagramındaki renkler farklı fazları göstermektedir; mor ile gösterilen KN, mavi ile gösterilen KN-film arası geçiş, yeşil ile gösterilen film ve son olarak kırmızı ile gösterilen ise filmde çatlakların oluştuğu morfolojileri ifade etmektedir.



Şekil 4.17: KN, ara faz geçişi, film, bozulma morfoloji fazlarını gösteren denge ıslatma açısı- elektrik alan faz diyagramı ($\Sigma = 0$).

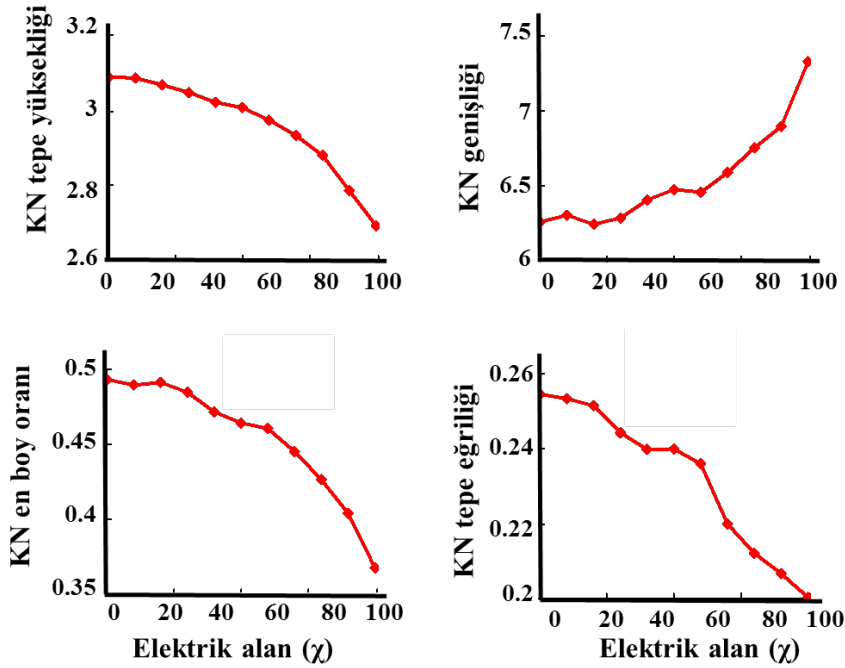
Bu diyagram KN-ince film geçişleri hakkında bilgi vererek, teknolojik olarak KN veya film morfolojilerinden hangisi elde edilmek isteniyorsa, denge ıslatma açısı ve uygulanması gereken elektrik alan değerlerini söylemekte ve malzeme bozunumu için kritik değerleri söyleyerek üretim sırasında malzeme kayıplarını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

Denge ıslatma açısı, daha önce ele alındığı gibi, KN'lerin en boy oranlarını kontrol etmektedir. Elektrik alan altında KN-film geçiş ve bozunum kritik değerlerinin yanında, denge açılarının elektrik alan altında KN'lerin en boy oranlarını etkileyip etkilemediği araştırılarak sonuçlar Şekil 4.18 ve Şekil 4.19'da verilmiştir.



Şekil 4.18: İzotropik sistemde denge ıslatma açısının $\theta_{eq}=75^\circ$ için elektrik alan kuvvetlerinin KN morfolojisine etkisi.

Şekil 4.18'de izotropik bir sistemde $\theta_{eq}=75^\circ$ denge ıslatma açısına sahip sisteme elektrik alan uygulanmasıyla KN'lerin morfoloji değişimleri görülmektedir. Elektrik alan şiddeti arttıkça hafif sağa doğru eğimli, asimetrik KN'ler oluşmaktadır. Elektrik alanın KN morfolojilerinde meydana getirdiği bu farklılıkları daha iyi analiz edebilmek için, KN'lerin yükseklik, genişlik, en boy oranı ve tepe eğriliklerinin nasıl etkilendiğini araştırdık ve simülasyonlardan elde edilen denge morfolojileri üzerinde yaptığımız hesaplamalar sonucu şekil 4.19 elde edilmiştir.

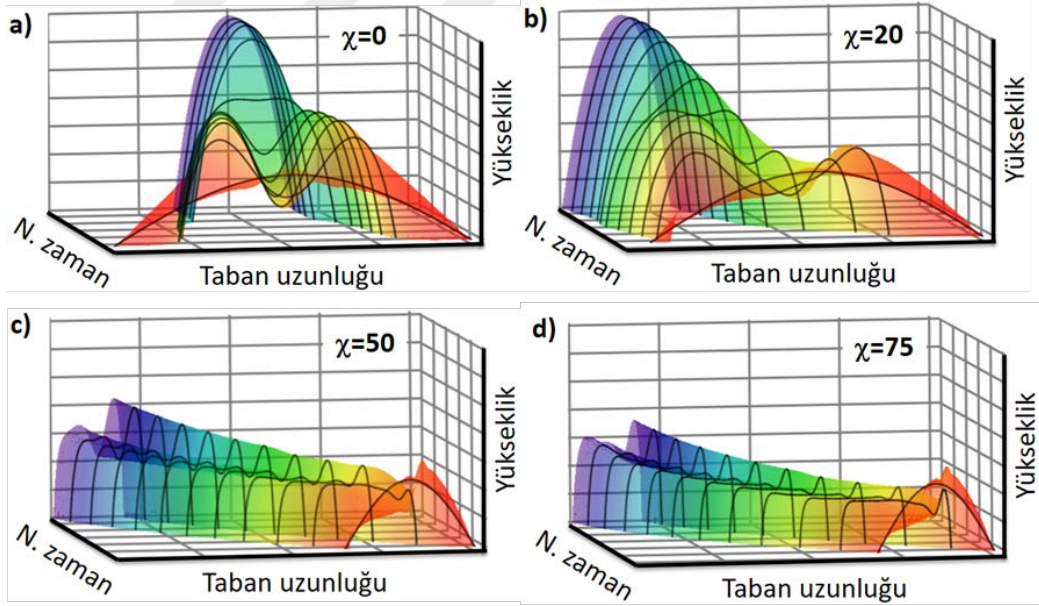


Şekil 4.19: KN'lerin elektrik alan altında yükseklik, genişlik, en boy oranı ve tepe eğriliklerinin değişimi ($\Sigma = 0, \theta_{eq}=75^\circ$).

Şekil 4.19’da uygulanan elektrik alan şiddetinin artışıyla KN yüksekliğinin azalışı (a), genişliğin artışı (b), en boy oranının azalışı (c) ve tepe eğriliklerinin azalışı gözlenmiştir ve bu daha önce belirttiğimiz Şekil 4.14’deki bulgularla uyumludur. Bu iki farklı deney seti (Şekil 4.14’te $\theta_{eq}=45^\circ$ Şekil 4.19’da $\theta_{eq}=75^\circ$ karşılaştırıldığında) bize, farklı ıslatma denge açılarındaki elektrik alan etkilerinin benzer olduğunu, Şekil 4.17 ise bu benzer etkilerin görülmesi için kritik değer geçişi bilgilerini sağlamaktadır.

4.1.5 Yön-bağımsız sistemlerde KN morfolojilerinin elektrik alan ve gerinim alanlarıyla kontrolü

Bu kısımda KN morfolojilerinin hem elektrik alan hem de gerinim kuvvetleri altındaki davranışlarını incelenmiştir. Öncelikle sisteme orta şiddette bir gerinim kuvveti ($\Sigma = 0.5$) uygulanmış ve 4 farklı elektrik alan uygulanarak simülasyonlar yapılmıştır (Şekil 4.20).

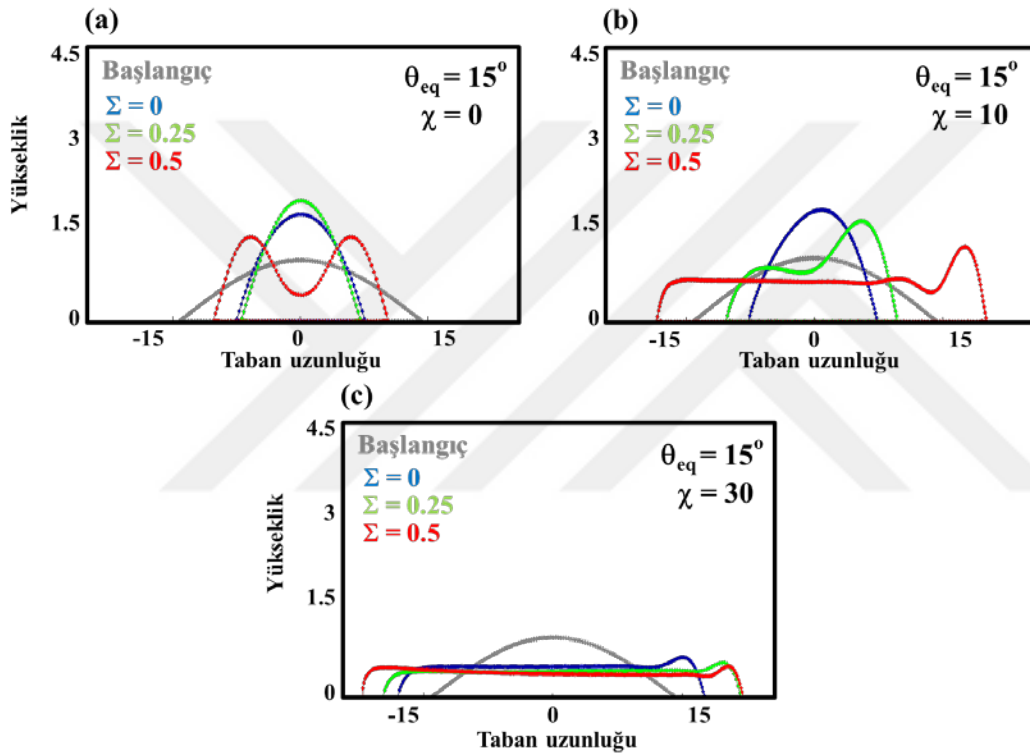


Şekil 4.20: Elektrik ve gerinim kuvvetleri altında başlangıç damlacığının zamanla (kırmızıdan – mora doğru) ulaştığı denge şekilleri ($\Sigma=0.5$, $\theta_{eq}=75^\circ$).

Şekil 4.20’de elektrik alan şiddetinin değerinin $\chi=20$ (b), $\chi=50$ (c), $\chi=75$ (d) durumları, $\chi=0$ (a), referans alınarak incelenebilir. $\chi=20$ (b)’de KN’nin zamanla sola doğru kaydığı, tek ada olarak dengeye geldiği, daha yüksek elektrik alan şiddeti değerleri olan $\chi=50$ (c), $\chi=75$ (d)’de ise gerinim etkisiyle tek KN’nin fragmente olarak ve sola kayarak ilerlediği görülmektedir. Bu sonuçlar bize, gerinim kuvvetleri

altında uygulanan elektrik alan değerlerinin artırılmasıyla birim alandaki KN sayısının kontrol edilebileceğini göstermiştir. Birim alandaki KN sayısı, KN'lerin dizi halinde kullanıldığı fotovoltaik uygulamalar için çok önemli bir parametredir.

Sisteme uygulanan gerinim kuvvetinin KN'lerin en boy oranlarını kontrol ettiğini gösteren daha önceki deney sonuçlarını göz önünde bulundurarak, gerinim kuvvetlerinin elektrik alan kuvveti altında KN morfolojilerindeki etkileri iki farklı denge ıslatma açısına sahip sistem üzerinde araştırılmıştır (Şekil 4.21 ($\theta_{eq}=15^\circ$) ve Şekil 4.22 ($\theta_{eq}=45^\circ$)).

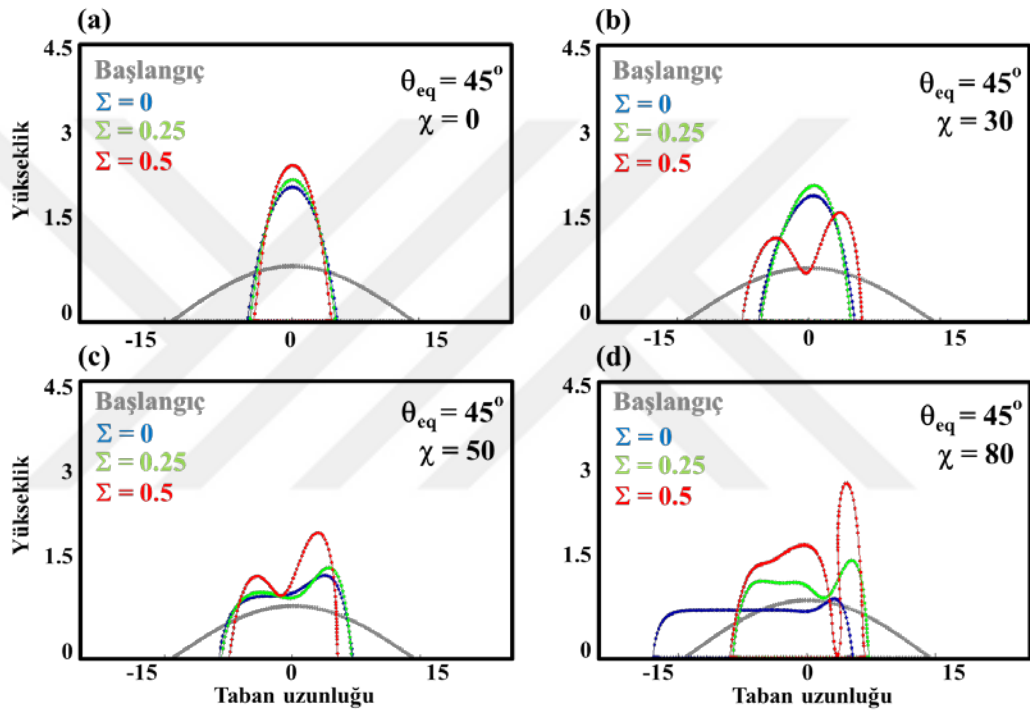


Şekil 4.21: Farklı gerinim kuvvetlerinde ve elektrik alan etkisi altında KN morfolojileri ($\theta_{eq}=15^\circ$).

Şekil 4.21 (a)'da daha önce gösterdiğimiz ve gerinim kuvvetinin artışı ile KN en boy oranı ve tepe eğriliğinin belirli bir eşik değere kadar artırılabilceği ve daha yüksek gerinim değerlerinde KN'nin fragmente olduğu durum referans olarak yeniden veilmiştir. Şekil 4.21 (b)'de aynı sisteme düşük şiddette $\chi=10$ elektrik alan kuvveti uygulanmıştır. $\Sigma=0$ (mavi) da KN'nin hafif sağa doğru eğimli bir denge morfolojisi olduğu, $\Sigma=0.25$ (yeşil)'de KN'nin sağa yaslı bir tepecik oluşturan ara bir geçiş morfolojisinde olduğu, $\Sigma=0.5$ (kırmızı) değerinde sağa yaslı bir tepecik ve sol kısmında film oluşumu görülmüştür. Bu durum bize, sistemde elektrik alan kuvveti

olduğunda uygulanan stres değerinin, sistemi film oluşumuna doğru yönlendirdiğini söylemektedir. Şekil 4.21 (c)'de ise elektrik alan şiddeti $\chi=30$ 'a çıkartılmış ve sistemde film oluşumu görülmüştür. Buna ek olarak, izotropik sistemlerde gerinim kuvvetinin artmasıyla oluşan filmin uzunluğunun arttığı ve kalınlığının azaldığı görülmektedir.

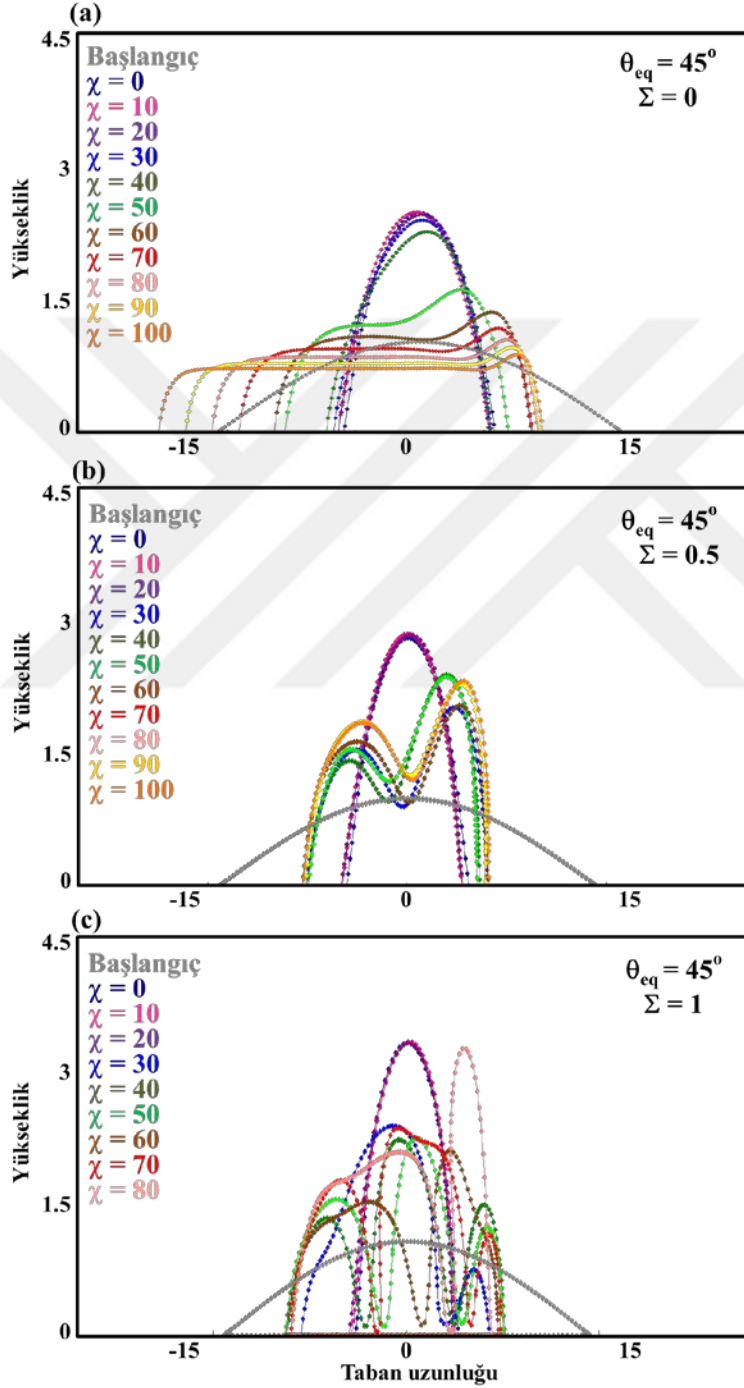
Şekil 4.22'de ise Şekil 4.21'deki benzer deneyler daha yüksek bir denge ıslatma açısı altında tekrarlanmıştır. 4.21'deki sistemde film geçişini görebilmek için daha yüksek elektrik alan şiddeti değerlerine çıkılmıştır.



Şekil 4.22: Farklı gerinim kuvvetlerinde ve elektrik alan etkisi altında KN morfolojileri ($\theta_{eq}=45^0$).

Şekil 4.22'de sisteme gerinim kuvvetleri ($\Sigma=0$, $\Sigma=0.25$ ve $\Sigma=0.5$) uygulanırken aynı zamanda $\chi=0$ (a), $\chi=30$ (b), $\chi=50$ (c) ve $\chi=80$ (d) değerlerinde elektrik alanın da sisteme uygulanması durumunda ne gibi değişiklikler olacağı görülmektedir. Gerinim kuvvetinin $\Sigma=0$ (mavi) ve $\Sigma=0.25$ (yeşil) değerleri incelendiğinde elektrik alan şiddetinin artışıyla KN'ler, film oluşturmuştur. Gerinim kuvveti, oluşan filmin kalınlığını ve şeklini kontrol etmektedir. Gerinim kuvvetinin $\Sigma=0.5$ olduğu durum incelendiğinde, (a)'dan (b)'ye geçildiğinde elektrik alanın sisteme uygulanmasıyla $\Sigma=0.5$ değerinde, KN'nin fragmente olduğu görülmüştür. Elektrik alan şiddeti artırılarak (c)'ye geçildiğinde KN yine iki adacıklı fragmente halde fakat biri

diğerinden daha büyük iki tepeli bir sistem elde edilmiştir. (d)'de ise KN elektrik alan etkisiyle KN sistemi tamamen fragmente olmuş ve en boy oranları ve tepe eğrilikleri çok farklı olan iki farklı KN elde edilmiştir. Bu sonuç, sabit bir gerinim kuvveti altında elektrik alan uygulanarak KN'lerin fragmentasyonlarının ve oluşacak ikili sistemin çok farklı şekillerde elde edilebileceğini göstermektedir.



Şekil 4.23: (a) $\Sigma = 0$, (b) $\Sigma = 0.5$, (c) $\Sigma = 1$ gerinim kuvvetleri ve elektrik alan etkisindeki KN denge morfolojileri.

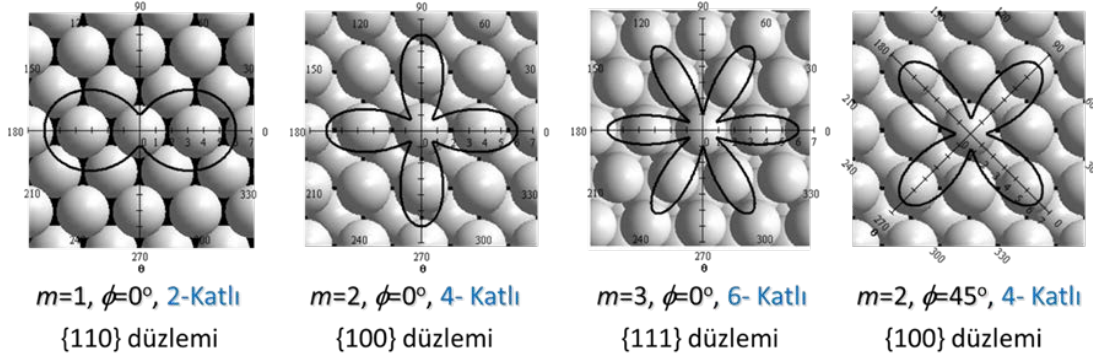
Elektrik alan ve gerinim kuvvetlerinin her ikisinin de sisteme uygulandığı durumlarda, morfoloji değişim kinetiklerinin anlaşılabilmesi için sisteme farklı gerinim kuvvetlerinde elektrik alan uygulanmıştır. Denge morfolojileri, sistemin ağırlık merkezleri ortalanarak incelenmiştir (Şekil 4.23).

Gerinim kuvvetinin olmadığı Şekil 4.23 (a)'da KN'ler elektrik alan şiddetinin artmasıyla filme doğru geçiş yaparken (b)'de gerinim kuvvetinin etkisiyle KN'ler artan elektrik alan şiddetiyle fragmente olmaya başlamış ve iki tepeli, biri diğerinden daha uzun KN'ler oluşmuştur. (c)'de gerinim kuvvetinin daha da artmasıyla, iki ve üç KN'ye kadar fragmente olmakta ve ana KN'ye ek, uydu yapılar oluşmaktadır. KN'lerin uydu nano yapıya sahip olmaları çok-bantlı (multi-band) elektronik yapıya sahip sistemlerin oluşturulmasını ve bu nedenle geniş spektrumlarda foto-elektron üreten sistemlerin geliştirilmesi ile daha yüksek güneş enerjisi çevirim verimlerine ulaşmamızı sağlayabilir (Raffaella ve diğ., 2006).

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

4.2 Yön-Bağımlı (Anizotropik) Sistemler

Yüzey merkezli kübik kristal yapıya sahip malzemeler, KN'lerin cihaz uygulamalarında en fazla kullanılan malzemelerdendir ve bu sebeple bu çalışmada, yüzey merkezli kübik kristal yapıdaki KN'ler araştırılmıştır. Yön bağımlı sistemler tez kapsamında yüzey merkezli kübik kristal yapıya sahip malzemelerdeki, üç farklı sistem için incelenmiştir. Bunlar, 2 katlı simetriye sahip {110}, 4 katlı simetriye sahip {100} ve 6 katlı simetriye sahip {111} düzlemleridir. Burada kristal eğim açısı ϕ , eğim açısını yani difüzyonun maksimum olduğu eksen ile x -ekseni arasındaki açıyı vermektedir.



Şekil 4.24: Yüzey merkezli kübik yapıda $\{110\}$, $\{100\}$, $\{111\}$ yönleri.

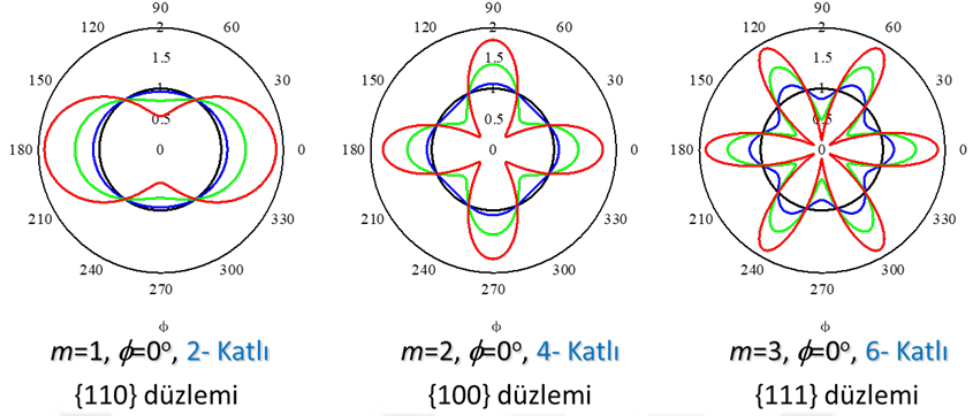
Şekil 4.24’de kristalografik $\{110\}$, $\{100\}$ ve $\{111\}$ yönleri gösterilmiştir ve kristal eğim açısının anlaşılması için $\{100\}$ yüzeyinde, 45° ’lik kristal eğim açısına sahip sistem örnek olarak verilmiştir. Bu çalışmada yapılan araştırmalar bu kristal yönlere sahip sistemlerde gerçekleştirilmiştir.

4.2.1 Yön-bağımlı sistemlerde yüzey katılığı etkisi

Kristal yapılar göz önüne alındığında karşılaştığımız anizotropik etkiler iki noktada karşımıza çıkmaktadır. Difüzyon katsayısının yön bağımlılığı ve yüzey katılığının (surface stiffness) yön bağımlılığı. Yüzey atomlarının anizotropik difüzyon hızı Denklem 6 kullanılarak nümerik hesaplamalara dahil edilmiştir. Denklem 6’da θ , yüzeydeki difüzyon doğrultusunun tanjant vektörü ile x -ekseni arasındaki açıyı, A anizotropik etkinin şiddetini belirleyen sabiti, m ise simetri derecesini belirtirken, ϕ eğim açısını yani difüzyonun maksimum olduğu eksen ile x -ekseni arasındaki açıyı verir. Denklem 7’de verilmiş olan yön bağımlı yüzey katılığı formülünde $\hat{\theta} = \pi/2 - \theta$ olarak verilir ve iki boyutta genelleştirilmiş silindirik yüzey difüzyon düzleminin normal vektörü ile genel kartezyen referans sisteminde x -ekseninin yaptığı açıdır. Denklem (7)’ye göre yüzey katılığı, yüzey Helmholtz serbest enerji anizotropi sabitinin $B \leq 2 / \left(\left| 1 - 4m^2 \right| - 1 \right)$ eşitsizliğini sağladığı durumlarda pozitif alınabilmektedir. Bu şartlarda B sabiti için üst limitler iki katlı, dört katlı ve altı katlı simetrisi için sırasıyla 1, 1/7 ve 1/17 olarak ortaya çıkmaktadır.

Yön bağımlı yüzey katılığı formülü (Denklem 7) incelendiği zaman yüzey Helmholtz serbest enerjisinin kristal düzlem ve yönüne bağlı olması nedeniyle yön bağımlı olduğu ortaya çıkmaktadır. Örnek olarak yüzey merkezli kübik (YMK) kristal

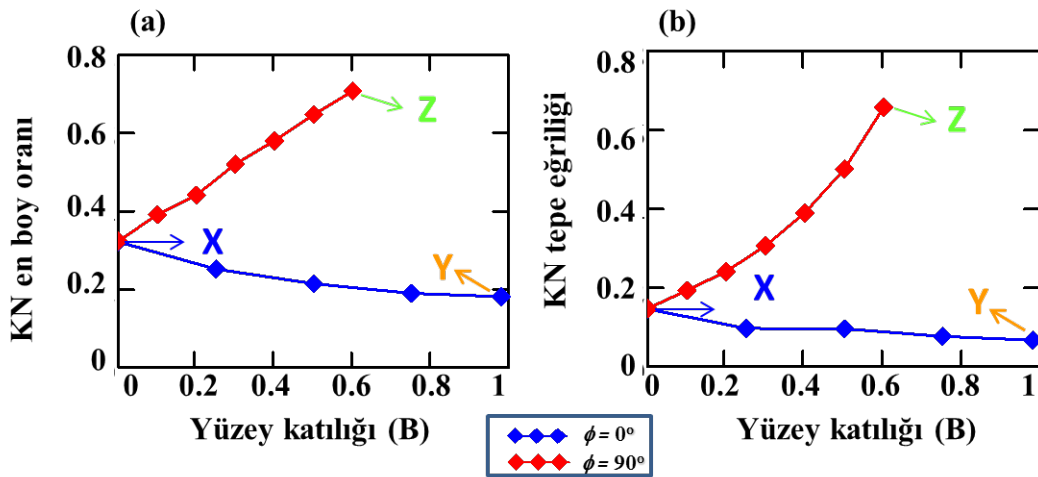
yapıdaki ince film yüzeyine normal $[001]$ eksenine sahip iki $\{110\}$, dört $\{100\}$ ve altı $\{111\}$ katlı simetri düzlemleri için davranış Şekil 4.25’de verilmiştir.



Şekil 4.25: Yüzey katılığı anizotropisinin farklı düzlemlerde göstermiş olduğu davranışlar.

Şekil 4.25’de yukarıda belirtilen limitler içerisinde kalmak koşulu ile sisteme düşük (mavi), orta (yeşil) ve yüksek (kırmızı) düzeylerde yüzey katılığı verilmiş ve izotropik (siyah) sistemle karşılaştırılmıştır.

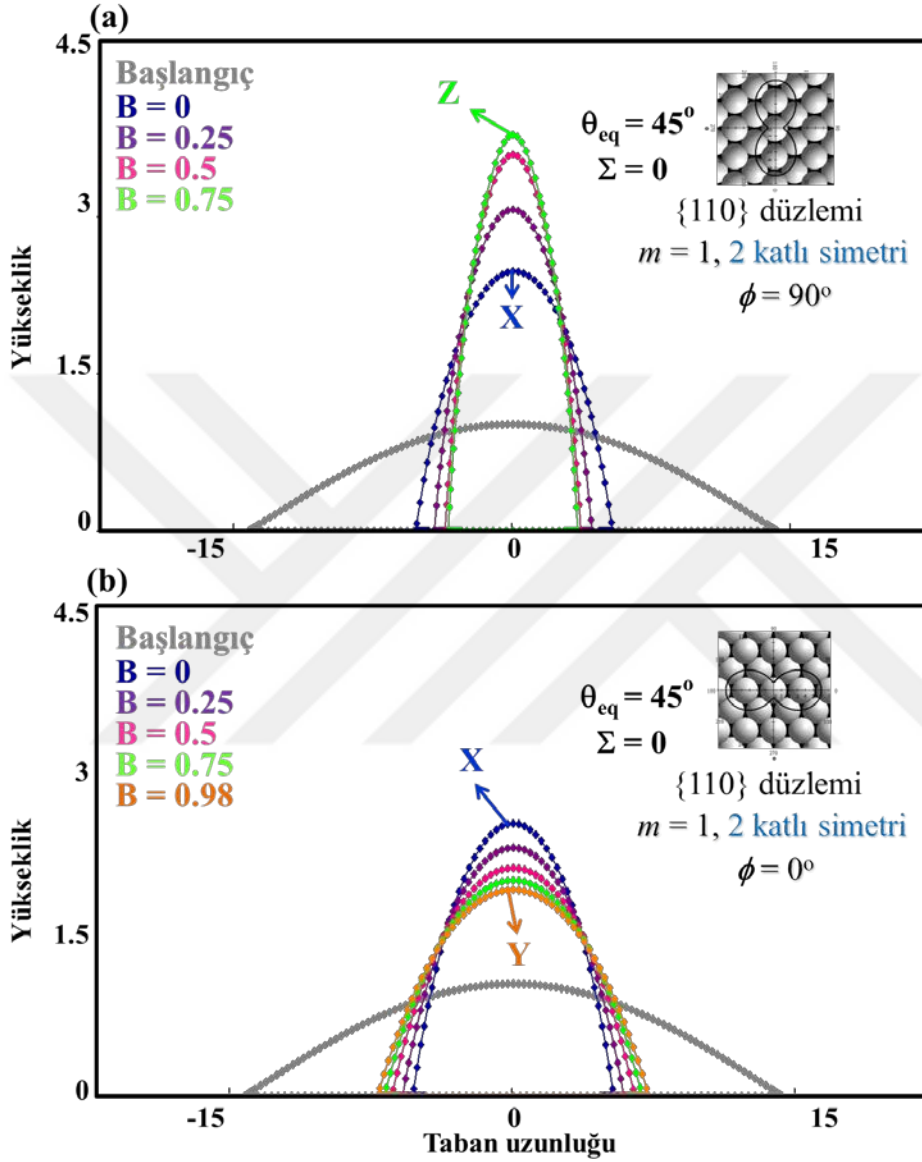
Yüzey katılığı etkisinin sistemdeki kristal eğim açısına göre nasıl değiştiğinin anlaşılması için farklı kristal eğim açılarında yüzey katılığı artırılarak deneyler yapılmış ve elde edilen sonuçlar Şekil 4.26’da sunulmuştur.



Şekil 4.26: Yüzey katılığı parametresi ile KN en boy oranları ve KN tepe eğriliklerinin kontrolü.

Şekil 4.26’da $\{110\}$ düzleminde (2 katlı simetri) kristal eğim açısının 0° (mavi) ve 90° (kırmızı) olduğu değerlerde KN tepe yüksekliklerinin (a) ve en boy oranlarının

(b) deęişimi görlmektedir. KN tepe ykseklikleri ve en boy oranları, kristal eęim aısının 90° olması durumunda yzey katılıęının arttırılmasıyla artarken, kristal eęim aısının 0° olması durumunda ise azalmaktadır. Burada elde edilen KN'lerin morfolojileri Őekil 4.27'de gsterilmiřtir.

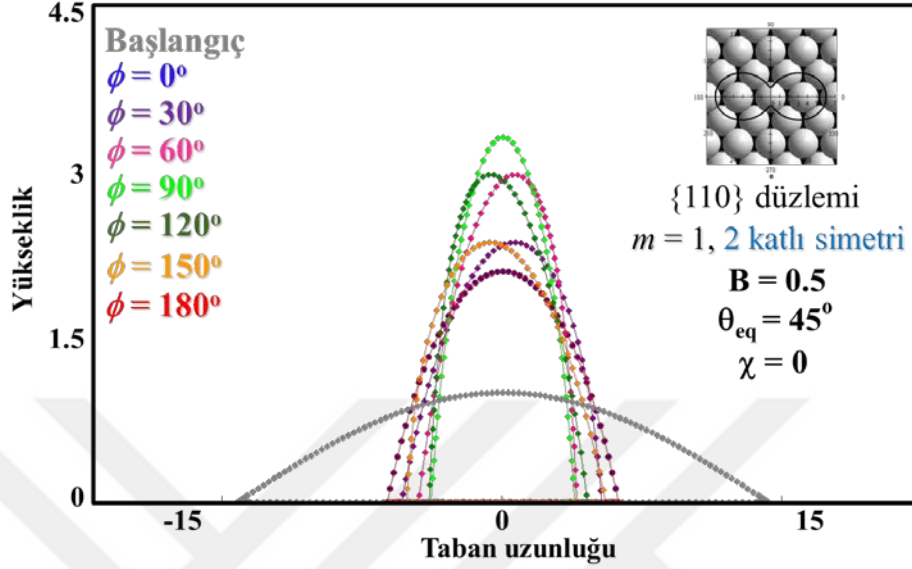


Őekil 4.27: Yzey katılıęının KN'lerin en boy oranları ve KN tepe eęriliklerine etkisi.

Bu deneyler bize teknolojik olarak kontrol edilebilen bir iřlem parametresi olan kristal eęim aısı ile yzey katılıęının etkisini kontrol edebileceęimizi, dolayısıyla KN'lerin morfolojilerinde istenen modifikasyonların yapılabileceęini gstermektedir.

Bu sonular bize yzey katılıęı etkisinin kristal eęim aısıyla deęiřtięini gsterdięi iin, bu kısımda farklı kristal eęim aılarında KN morfolojileri incelenecektir. rnek olarak $\{110\}$ dzlemi ele alınarak incelendięinde, bu dzlemde 2 katlı simetri olduęu

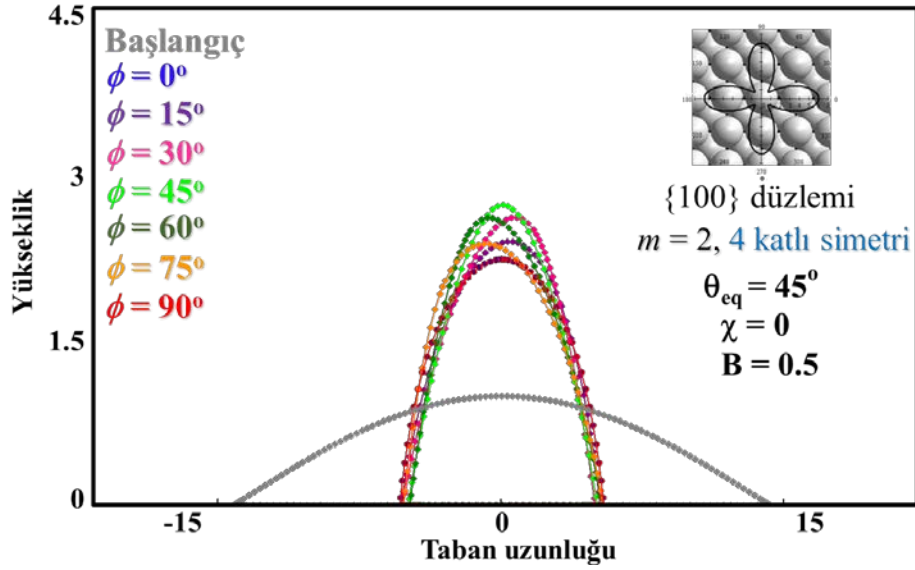
için 180^0 periyotlarla sistem kendisini tekrar etmektedir. Bu düzlem için seçilen ortalama bir yüzey katılığı ($B=0.5$) değeri için kristal eğim etkileri $0-180^0$ aralığı için incelenmiştir.



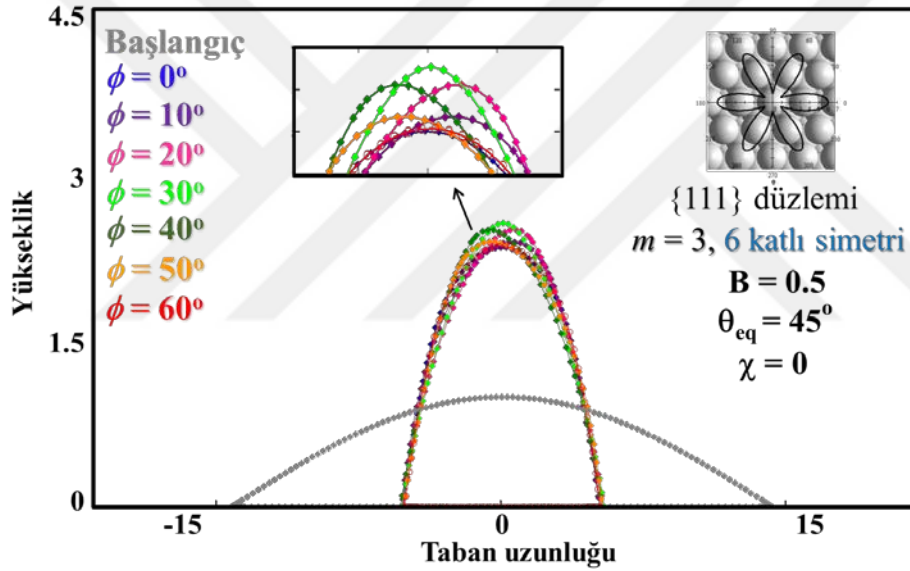
Şekil 4.28: {110} düzleminde farklı kristal eğim açılarının KN morfolojilerine etkisi.

Şekil 4.28’de farklı kristal eğim açıları ile değişen KN morfolojileri görülmektedir. Sistem incelendiğinde, kristal eğim 0^0 ve 180^0 ’nin üst üste çakıştığı (kırmızı ve mavi) görülmektedir. Bunu sebebi, {110} düzleminde 2 katlı simetri olması ve 180^0 periyotlarla sistemin kendisini tekrar etmesidir. Kristal eğim 30^0 (mor) ve 150^0 ’nin (turuncu) ve aynı şekilde, kristal eğim 60^0 (pembe) ve 120^0 ’nin (koyu yeşil) birbirlerinin simetriği oldukları görülmektedir. Bunun sebebi ise birbirlerini 180^0 ’ye tamamlayan açılar olmalarıdır. Kristal eğim 90^0 (açık yeşil) ise periyot açısı olan 180^0 ’nin tam yarısıdır bu durumda da gördüğümüz simetrik ve en yüksek en boy oranına sahip KN’nin elde edildiğidir. {100} ve {111} düzlemlerinde kristal eğim açılarının etkilerinin anlaşılması için yapılan deneylerin sonucu ise Şekil 4.29 ve Şekil 4.30’de incelenmiştir.

Şekil 4.29’da {100} düzlemi için farklı kristal eğim açıları ile değişen KN morfolojileri görülmektedir. {100} düzlemi, 4 katlı simetriye sahiptir ve dolayısıyla 90^0 ’lik periyotlarla sistem kendisini tekrar etmektedir. Kristal eğim 45^0 (açık yeşil) ise periyot açısı olan 90^0 ’nin tam yarısıdır, bu durumda da gördüğümüz simetrik ve en yüksek en boy oranına sahip KN’nin elde edildiğidir.



Şekil 4.29: {100} düzleminde farklı kristal eğim açılarının KN morfolojilerine etkisi.



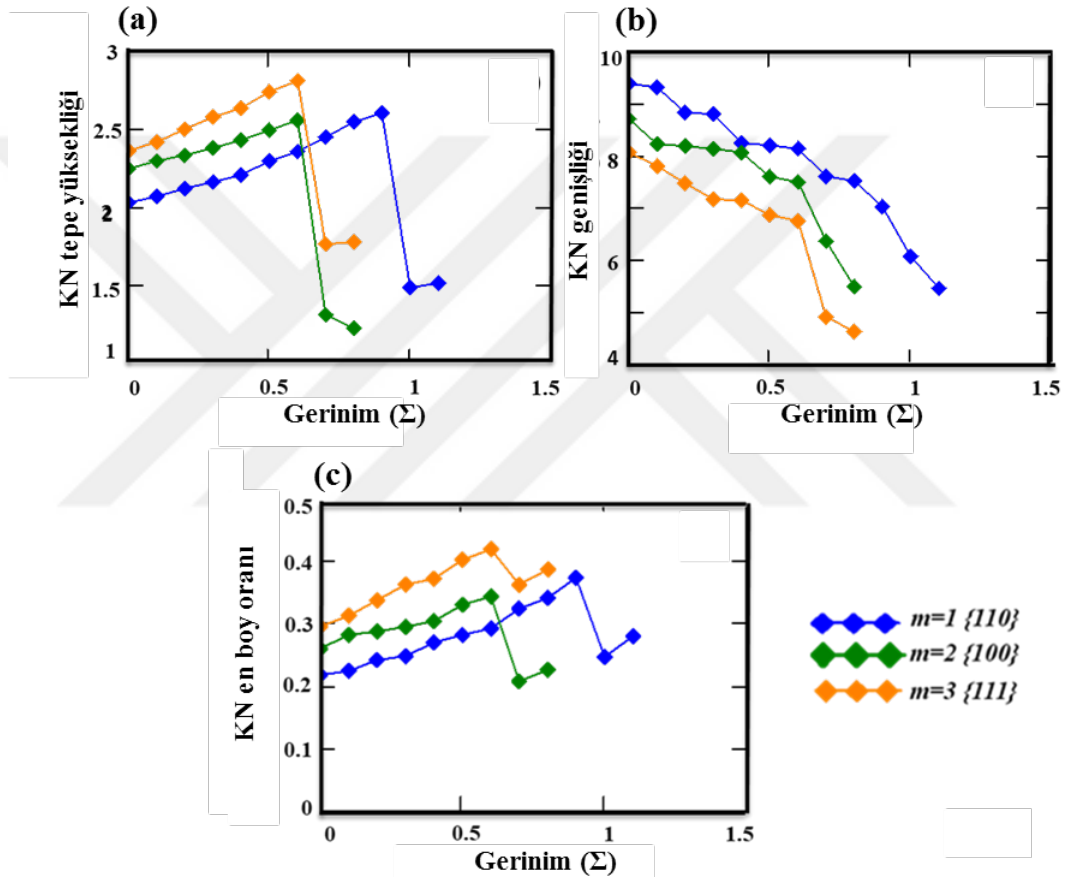
Şekil 4.30: {111} düzleminde farklı kristal eğim açılarının KN morfolojilerine etkisi.

Şekil 4.30'da {111} düzlemi için farklı kristal eğim açıları ile değişen KN morfolojileri görülmektedir. {111} düzlemi, 6 katlı simetriye sahiptir. Diğer düzlemlerde karşımıza çıkan etki burada da gözlenmiş ve en yüksek en boy oranına sahip KN'ler periyot açısı 60° 'nin tam yarısı olan kristal eğim 30° (açık yeşil)'de elde edilmektedir.

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

4.2.2 Yön-bağımlı sistemlerde gerinim etkisi

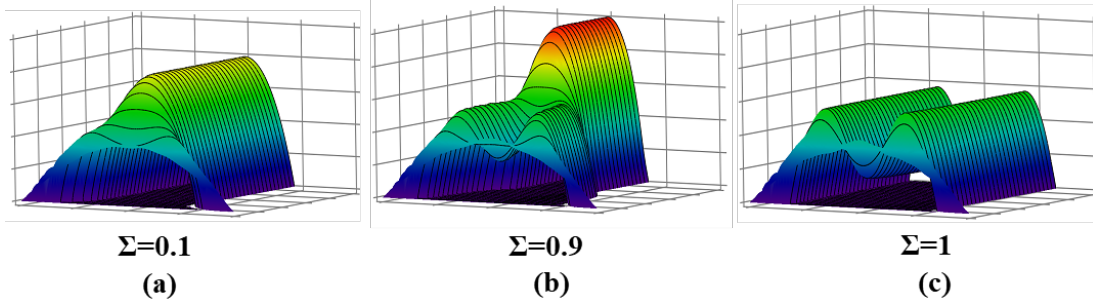
Yön bağımlı durumlarda gerinim etkileri, yön bağımsız durumlarda karşılaşılan etki ile benzerlikler göstermektedir. Gerinim etkisi ile sistemde, öncelikle en boy oranlarını arttığı daha sonra ise belirli kritik gerinim değerlerinin aşılması durumunda, sistemin serbest enerjisini azaltmak için parçalanarak birden fazla KN'lere dönüştüğü görülmektedir. Sistemimizde incelediğimiz üç farklı kristalografik düzlem için de gerinim etkileri tek KN'den iki KN geçişleri örnek olarak Şekil 4.31'de gösterilmiştir.



Şekil 4.31: (a) KN tepe yükseklikleri ile, (b) KN genişlikleri, (c) KN en-boy oranları ile gerinim ilişkisi.

Şekil 4.31'de sisteme uygulanan gerinim kuvvetinin, KN tepe yüksekliklerini arttırdığı (a) ve kritik gerinim değerinden sonra da azalttığı görülmektedir. KN genişlikleri azalmakta (b) ve en boy oranları kritik gerinim değerine kadar artmakta ve daha sonra azalmaktadır. {110} yüzeyinde (mavi), kritik gerinim değeri 0.9, {100} (yeşil) ve {111} (turuncu) yüzeyleri için ise 0.6 olarak görülmektedir. Bu kritik değerlerden sonra, KN'ler parçalanarak en boy oranları daha küçük iki KN'ye

ayrılmaktadırlar. Oluşan KN'lerin morfolojileri, örnek olarak {110} yüzeyi için şekil 4.32'de verilmiştir.



Şekil 4.32: {110} yüzeyinde farklı gerinim kuvvet değerleri altında KN'lerin zamanda ilerleyerek denge morfolojisine ulaşması.

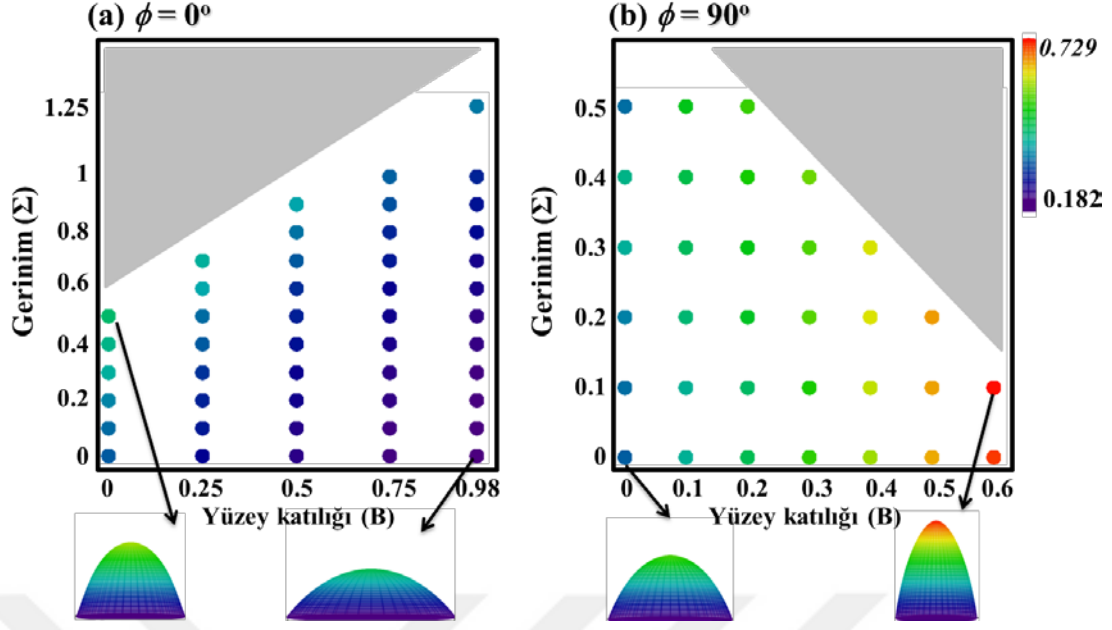
Şekil 4.32'de görüldüğü gibi gerinim kuvveti 0.1'den (a), 0.9'a (b) arttırıldığında, KN'lerin yükseklikleri ve en boy oranları artmaktadır. Bu yüzey için kritik olan 0.9 gerinim değerinden sonra gerinim arttırılmaya devam edildiğinde (c) de görüldüğü gibi yükseklikleri ve en-boy oranları daha az olan iki KN oluşmaktadır.

DeneySEL olarak KN'lerin en boy oranlarının reaksiyon zamanı, deposit edilen malzemenin konsantrasyonu ve reaksiyon sıcaklığı gibi parametrelerin etkisi olduğu bilinmektedir (Peng ve diğ., 2000) fakat bu parametrelerle kesin bir şekilde kontrol edilebilmeleri ve istenen en-boy oranlarına sahip KN'lerin sentezi için genel bir yaklaşım bulunmamaktadır. KN'lerin en-boy oranlarının istenen şekillerde elde edilebilmesi, enerji bant aralıklarının kontrol edilebilmesini sağlamaktadır ve teknolojik açıdan istenen özelliklere sahip KN cihazlarının üretilebilmesi için kritik öneme sahiptir.

4.2.3 Yön-bağımlı sistemlerde gerinim ve yüzey katılığı etkileri

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

Şekil 4.33'de kristal eğim açısının 0° (a) ve 90° (b) olduğu iki durumda gerinim kuvvetleri ve yüzey katılığı parametreleriyle en boy oranlarının kontrolünü sağlayan diyagram {110} yüzeyi için verilmiştir. Bu iki diyagramda da tek KN'ler incelenmektedir ve KN'lerin fragmente olarak adacık sayısını arttırdığı durumlar gri bölgeler olarak gösterilmiş ve hesaplamalara dahil edilmemiştir.

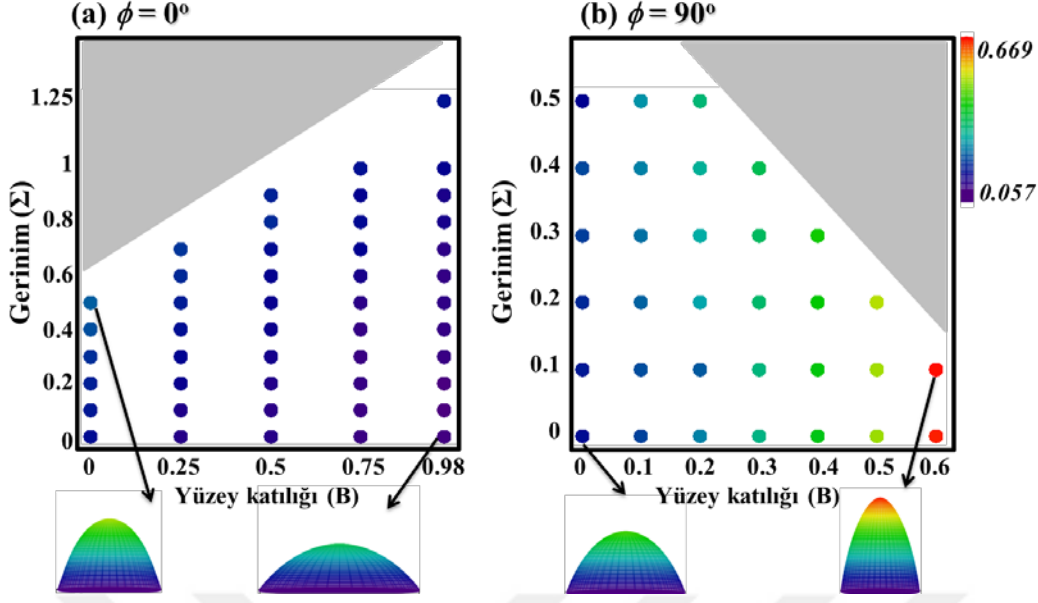


Şekil 4.33: {110} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 90^\circ$ durumları için en boy oranı değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).

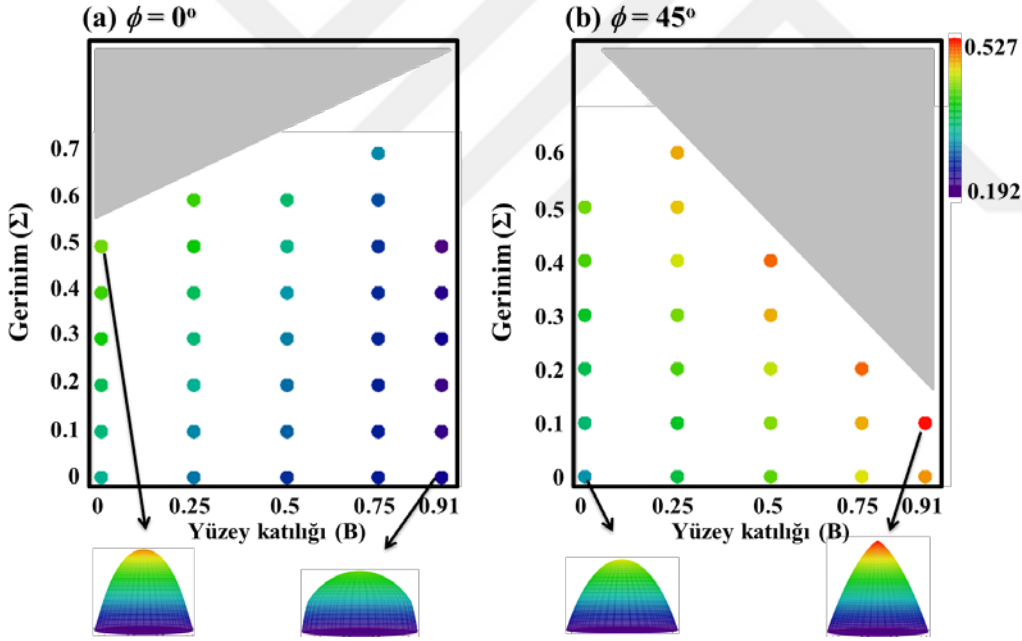
Şekil 4.33 (a)'da, yüzey katılığının minimum değerlerinde görece yüksek en boy oranları elde edilmektedir. Gerinim kuvvetinin artırılması, en boy oranlarını arttırmaktadır. Şekil 4.33 (b)'de ise, yüzey katılığının minimum değerlerinde en boy oranları en düşük değerlerindedir, gerinim kuvvetinin artırılmasıyla en boy oranları artmıştır.

Şekil 4.34'te KN tepe eğriliklerinin kristal eğim açısının 0° (a) ve 90° (b) olduğu iki durumda gerinim kuvvetleri ve yüzey katılığı parametreleriyle nasıl kontrol edilebileceğini gösteren diyagram verilmiştir. Kristal eğim açısı 90° iken adacık bölünmesinin (fragmentasyon) görüldüğü değer yüzey katılığının 0.7 olduğu değerdir. Bu sebeple yüzey katılığı değerleri 0-0.6 aralığında alınarak incelenmiştir (Şekil 4.35 (b)'de de aynı şekilde alınmıştır).

Şekil 4.31'deki en boy oranları diyagramına benzer şekilde, kristal eğim açısının 0° olduğu durumda, KN tepe eğriliği de yüzey katılığının artışı ile azalmakta, kristal eğim açısının 90° olduğu durumda ise artmaktadır. Gerinim kuvvetinin, her iki durumda da KN tepe eğriliklerini arttırdığı görülmüştür.



Şekil 4.34: {110} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 90^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).



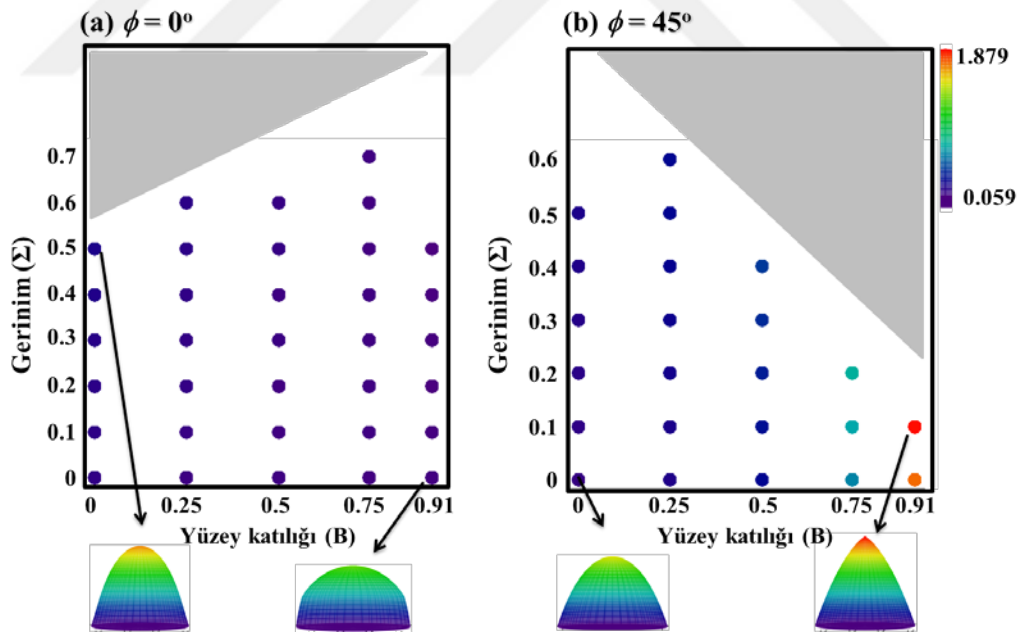
Şekil 4.35: {100} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 45^\circ$ durumları için en boy değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).

Şekil 4.35'te KN tepe eğriliklerinin kristal eğim açısının 0° (a) ve 90° (b) olduğu iki durumda gerinim kuvvetleri ve yüzey katılığı parametreleriyle nasıl kontrol edilebileceğini gösteren diyagram verilmiştir. Şekil 4.31'teki en boy oranları diyagramındaki benzer şekilde, kristal eğim açısının 0° olduğu durumda, KN tepe eğriliği de yüzey katılığının artışı ile azalmakta, kristal eğim açısının 90° olduğu

durumda ise artmaktadır. Gerinim kuvvetinin, her iki durumda da KN tepe eğriliklerini arttırdığı görülmüştür.

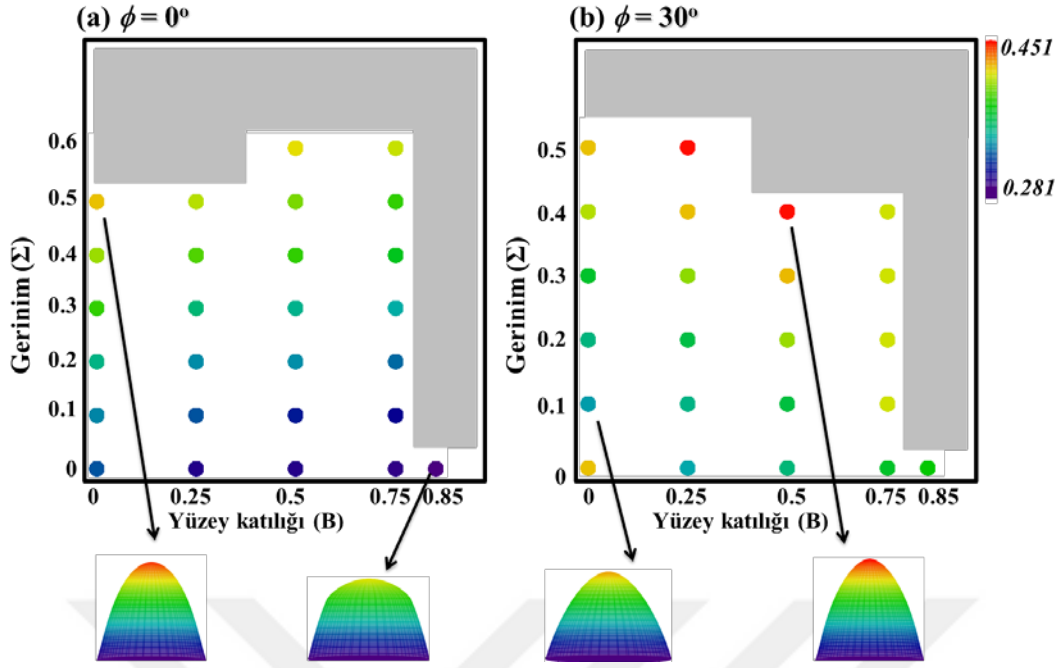
Şekil 4.36'da $\{100\}$ yüzeyinde kristal eğim açılarının $\phi = 0^\circ$, $\phi = 45^\circ$ olduğu durumlarda, gerinim kuvvetleri ve yüzey katılığı parametreleriyle KN tepe eğriliklerinin nasıl kontrol edilebileceğini gösteren diyagram verilmiştir. Kristal eğim açısının $\phi = 0^\circ$ olması durumunda, en yüksek tepe eğrilikleri, izotropik ($B=0$) durumda elde edilmektedir. Yüzey katılığının artışıyla, tepe eğrilikleri azalmaktadır. Gerinim kuvvetlerinin artışı ile tepe eğrilikleri artmaktadır. (b) incelendiğinde, (a)'nın tersine en yüksek tepe eğriliği yüzey katılığının maksimum değerinde elde edilebilmektedir.

Burada bir diğer önemli nokta da, fasetli yüzeylere sahip KN oluşumlarının kristal eğim açısı ve yüzey katılığı parametreleriyle kontrol edilebileceğinin gösterilmesidir. Şekil 4.24 (a) ve (b)'de, yüzey katılığının maksimum olduğu bölgelerde elde edilen KN'ler fasetli yüzeylere sahip olacaktır. Kristal eğim açısı ise bu fasetli yüzeylerin oluşum kinetiğini ve nihai morfolojiyi kontrol etmektedir.

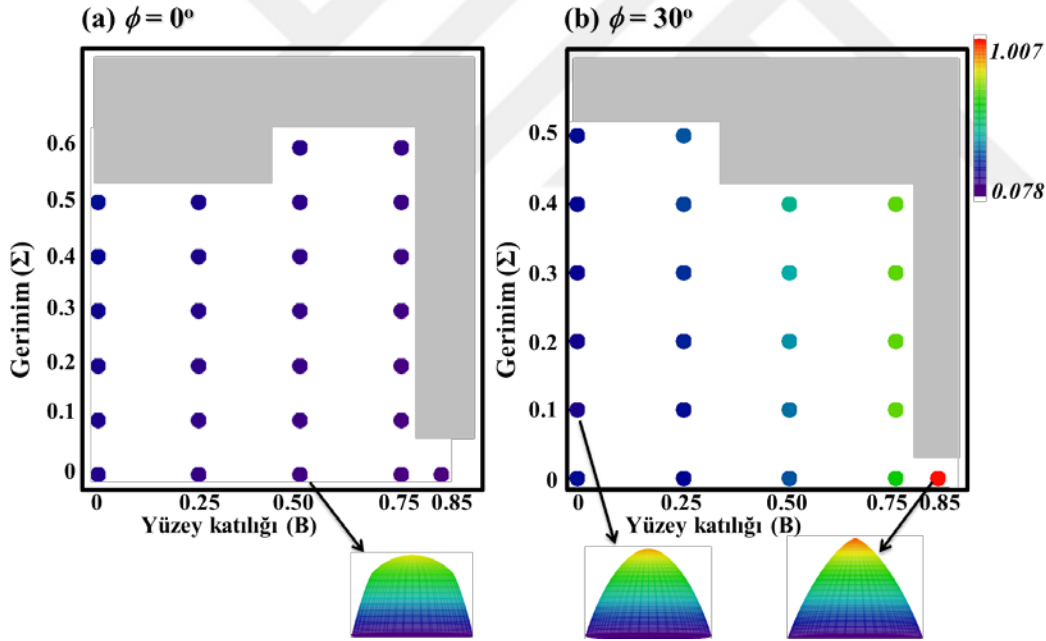


Şekil 4.36: $\{100\}$ yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 45^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).

$\{111\}$ yüzeyi için, kristal eğim açıları $\phi = 0^\circ$ ve $\phi = 30^\circ$ için, KN en boy oranlarını ve tepe eğriliklerinin kontrol edilebilirliğini araştırmak üzere, deneyler yapılmış ve Gerinim-yüzey katılığı diyagramları oluşturulmuştur.



Şekil 4.37: {111} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 30^\circ$ durumları için en boy oranlarının değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).



Şekil 4.38: {111} yüzeyi için (a) $\phi = 0^\circ$, (b) $\phi = 45^\circ$ durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı ($\theta_{eq}=45^\circ$).

Şekil 4.37’de {111} yüzeyinde kristal eğim açılarının $\phi = 0^\circ$ (a), $\phi = 30^\circ$ (b) durumları için en boy oranlarının değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı verilmiştir. {110} ve {100} yüzeylerindeki farklı kristal eğim açılarında gördüğümüz davranışlara benzer bir şekilde, (a) ve (b)’de birbirine zıt etkiler tekrar karşımıza çıkmaktadır. Kristal eğim açısının, $\phi = 0^\circ$ olduğu durumda (a), artan yüzey

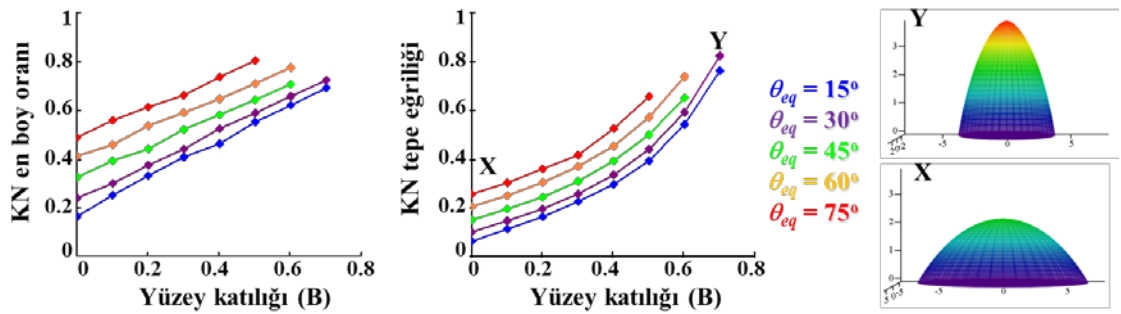
katılığı ile KN en boy oranları azalmakta, $\phi = 30^\circ$ olduğu durumda (b), yüzey katılığının artmasıyla en boy oranları artmaktadır.

Şekil 4.38'de {111} yüzeyinde kristal eğim açılarının $\phi = 0^\circ$ (a), $\phi = 30^\circ$ (b) durumları için tepe eğriliklerinin değişimini gösteren gerinim-yüzey katılığı diyagramı verilmiştir. Tepe eğriliklerinin en yüksek değerleri, (a)'da düşük yüzey katılığı değerlerinde gerinim kuvvetinin uygulanmasıyla, (b)'de ise maksimum yüzey katılığı değerlerinde elde edilmiştir. (b)'de gerinim kuvvetlerinin artışıyla tepe eğriliklerinde önemli bir fark elde edilememiştir.

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

4.2.4 Yön-bağımlı sistemlerde denge ıslatma açısının etkileri

İzotropik sistemde yaptığımız deneyler sonucu, denge ıslatma açısının KN'lerin en boy oranlarını kontrol ettiği, birim alandaki adacık sayısı için kritik değerleri değiştirdiği anlaşılmıştı. Anizotropik bir sistemde, en boy oranları ve tepe eğrilikleri yapılan deneyler sonucu, kristal eğim açısı, yüzey katılığı ve gerinim kuvvetleri ile kontrol edildiği görülmüştür. Denge ıslatma açısının en boy oranları ve tepe eğriliklerini nasıl değiştirdiğini anlamak için {110}, {100} ve {111} yüzeylerinde farklı denge ıslatma açıları için araştırılmıştır. Şekil 4.39 {110} için, Şekil 4.40 {100} için, Şekil 4.41 {111} için yapılan deney sonuçlarını göstermektedir.

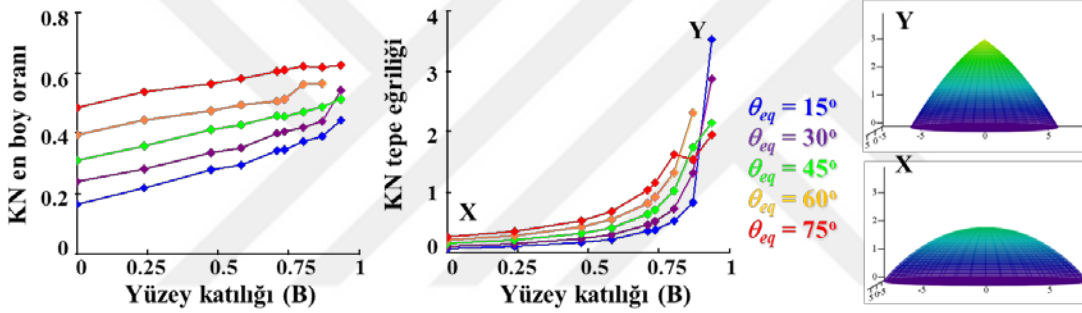


Şekil 4.39: Farklı denge ıslatma açılarında en/boy oranının ve tepe eğriliğinin anizotropi şiddetine bağlılığı ($\phi=90^\circ$).

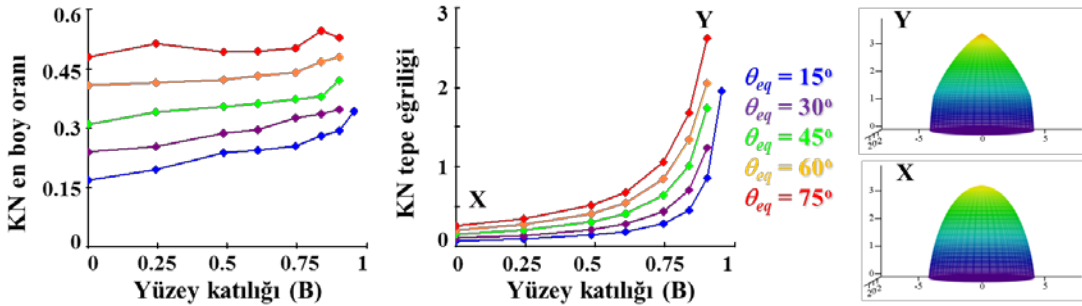
Şekil 4.39'de YMK yapıda bir damlacığın (110) yüzeyi yönünde altlık üzerine yerleştiği ve $\phi=90^\circ$ döndürüldüğü durumda oluşan denge şekillerinin en/boy oranının

(a) ve tepe eğriliğinin (peak curvature) (b) yüzey katılığına bağlı olarak artışı gözlenmektedir. (a) incelendiğinde, en boy oranlarının artan yüzey katılığı ile arttığı ve en yüksek en boy oranlarının $\theta_{eq}=75^\circ$ 'de elde edildiği görülmektedir. (b)'de tepe eğriliğinin değişimi incelendiğinde ise tüm denge açılarında, yüzey katılığının artmasıyla tepe eğriliğinin arttığı fakat en yüksek tepe eğriliğine sahip sistemin $\theta_{eq}=30^\circ$ 'de elde edildiği görülmektedir. X ve Y ile şeklin sağ tarafında elde edilen sistemler görülmektedir.

Şekil 4.40'de YMK yapıda bir damlacığın (100) yüzeyi yönünde altlık üzerine yerleştiği ve $\phi=45^\circ$ döndürüldüğü durumda oluşan denge şekillerinin en/boy oranının (a) ve tepe eğriliğinin (peak curvature) (b) yüzey katılığına bağlı olarak artışı gözlenmektedir.



Şekil 4.10: Farklı denge ıslanma açılarında en/boy oranının ve tepe eğriliğinin anizotropi şiddetine bağlılığı ($\phi=45^\circ$).



Şekil 4.41: Farklı denge ıslanma açılarında en/boy oranının ve tepe eğriliğinin anizotropi şiddetine bağlılığı ($\phi=30^\circ$).

Şekil 4.41'de YMK yapıda bir damlacığın (111) yüzeyi yönünde altlık üzerine yerleştiği ve $\phi=30^\circ$ döndürüldüğü durumda oluşan denge şekillerinin en/boy oranının (a) ve tepe eğriliğinin (peak curvature) (b) yüzey katılığına bağlı olarak artışı gözlenmektedir. (a) incelendiğinde, en boy oranlarının artan yüzey katılığı ile arttığı ve en yüksek en boy oranlarının (110) ve (100) yüzeylerindeki gibi $\theta_{eq}=75^\circ$ 'de elde

edildiği görülmektedir. (b)'de tepe eğriliklerinin değişimi incelendiğinde ise tüm denge açılarında, yüzey katılığının artmasıyla tepe eğriliklerinin arttığı fakat en yüksek tepe eğrilğine sahip sistemin bu durumda $\theta_{eq}=75^{\circ}$ 'de elde edildiği görülmektedir. X ve Y ile şeklin sağ tarafında elde edilen sistemler görülmektedir.

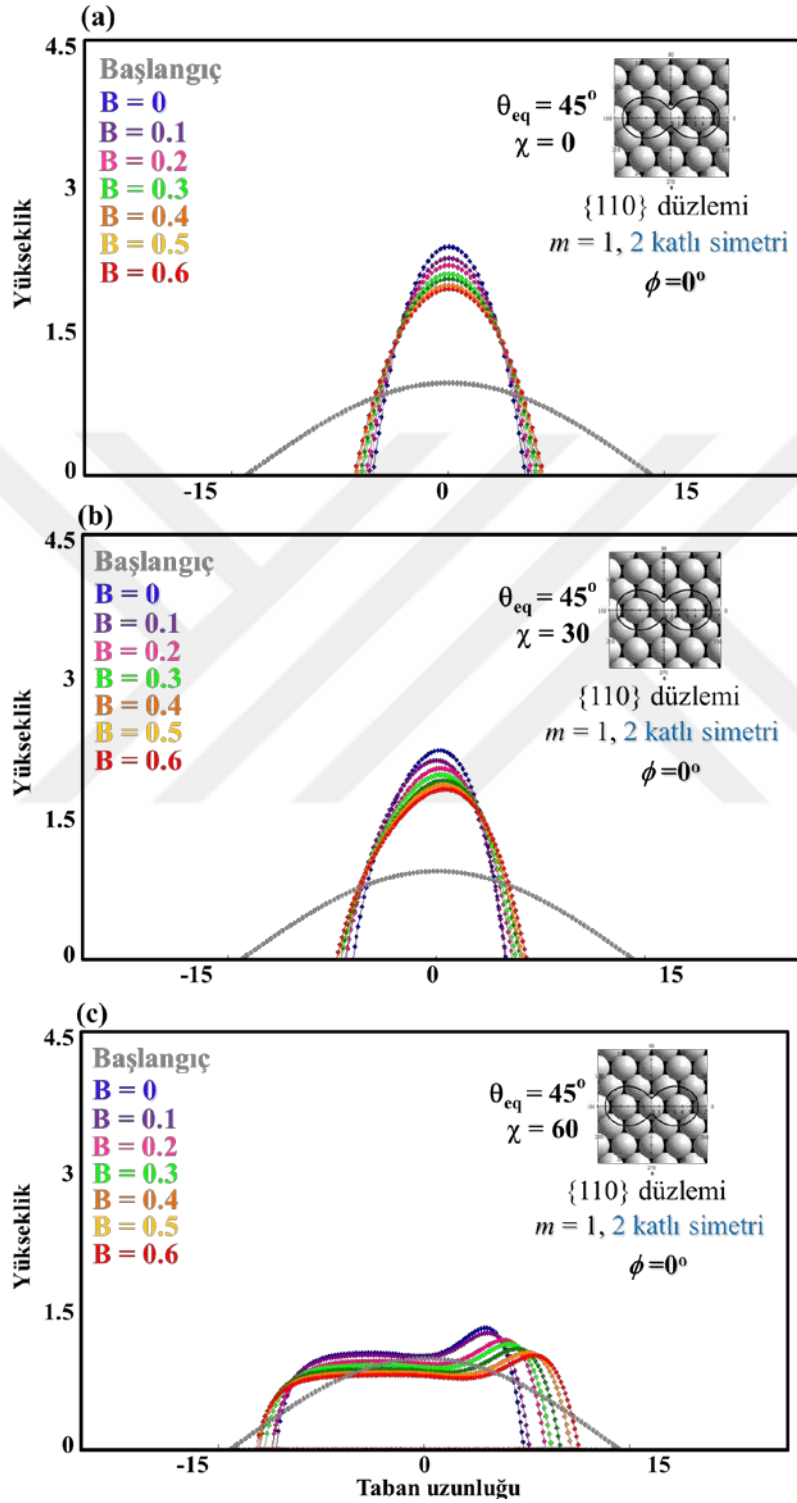
(110), (100) ve (111) yüzeylerinde yapılan deneyler incelendiğinde, en boy oranlarının yüzey katılığı ile değişimde, denge açılarının etkileri incelendiğinde, en yüksek en boy oranlarının en yüksek denge ıslatma açısına sahip sistemde elde edildiği görülmüştür. Tepe eğriliklerinin yüzey katılığı ile kontrolünde farklı ıslatma açılarının etkileri araştırıldığında ise, en yüksek tepe eğrilğine sahip KN'lerin farklı kristal yönlere sahip sistemlerde farklı denge ıslatma açı değerlerinde elde edildiği görülmüştür. Yapılan deney sonuçları her sisteme göre düzgün bir kristal yönü ve denge ıslatma açısı seçilmesiyle istenilen özellikte kuantum noktaların elde edilebileceğini göstermektedir.

4.2.5 Yön-bağımlı sistemlerde elektrik alan ve kristal eğim açısının etkileri

Kristal eğim açısının KN morfolojilerini, yüzey katılığı etkisini kontrol ederek nasıl değiştirdiği Şekil 29, 30, 31'de incelenmişti. Sistemin simetri derecesine göre değişerek, KN'lerin sağa veya sola yaslı (hızalı), veya simetrik bir şekilde elde edilebilmesi kristal eğim parametresiyle ayarlanabilmektedir. Elektrik alan kuvveti uygulanmasıyla KN morfolojilerinin kontrol edilip edilemeyeceğini araştırmak için farklı yüzey katılığı değerlerindeki KN'ler üzerinde yapılan deneylerin sonuçları aşağıda irdelenmiştir.

Öncelikle kristal eğimin sıfır olduğu sistem incelenecektir. Şekil 4.42'de $\{110\}$ düzleminde KN'lerin, farklı yüzey katılığı değerleri için (a)'da $\chi=0$, (b)'de $\chi=30$ ve (c)'de $\chi=60$ şiddetinde elektrik alan uygulanmasıyla elde edilen denge morfolojileri verilmiştir. (a) incelenirse, yüzey katılığı değerlerinin artmasıyla KN'lerin yüksekliklerinin düştüğü görülmektedir. (b)'de elektrik alan uygulanan KN'lerin hafif sağa yaslı bir morfolojiye ulaştıkları görülmektedir. Elektrik alan kuvvetleri altında yüzey katılığının etkisinin, elektrik alanın olmadığı (a)'daki ile aynıdır. En düşük yüzey katılığına sahip KN, en fazla yüksekliğe sahip, en yüksek yüzey katılığı değerinde ise en düşük yükseklikteki KN'ler oluşmaktadır. (c) 'de elektrik alan şiddeti $\chi=60$ 'a çıkartılmıştır. Artan elektrik alan şiddeti ile KN morfolojileri film oluşturmaya başlamaktadır. Oluşan filmler incelendiğinde ise (a)

ve (b) ile benzer şekilde, düşük yüzey katılığı değerlerinde daha fazla yüksekliğe sahip film, yüksek yüzey katılığı değerlerinde daha düşük kalınlığa sahip fakat daha uzun film elde edilmektedir.



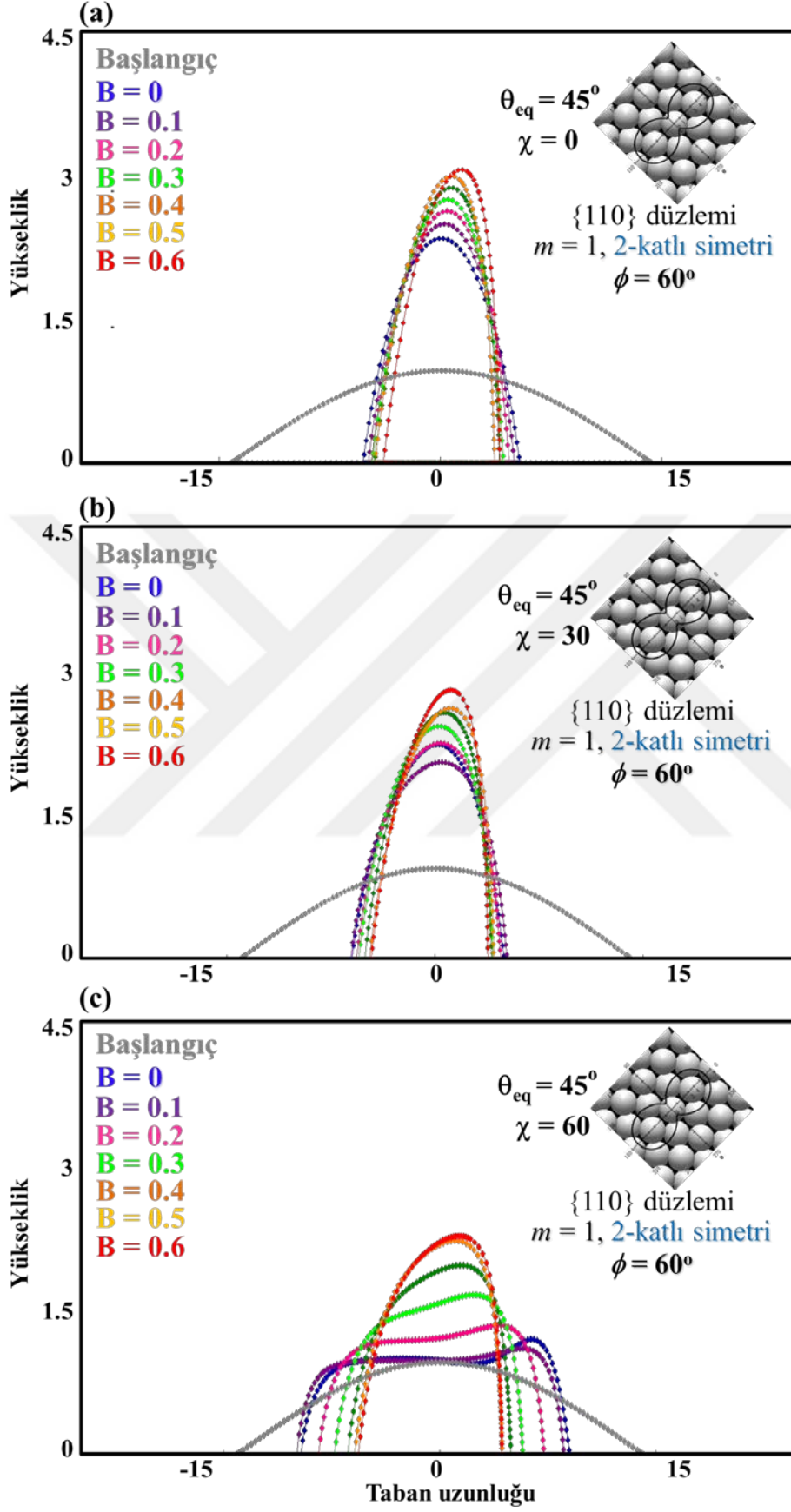
Şekil 4.42: $\phi=0^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.

Kristal eğim açısının farklı alınması durumunda simetrisi ve hizalanışı farklı olan KN'lerin elde edildiği belirlenmişti. Kristal eğim açısının değişimiyle elde edilen hizalı/bir tarafa yaslı KN'lerin uygulanacak elektrik alan ile kontrol edilip edilemeyeceği, farklı yüzey katılığı değerlerine sahip KN sistemi için araştırılmıştır. Bunun için kristal eğim açısının $\phi = 60^\circ$ (Şekil 4.43), ve $\phi = 120^\circ$ (Şekil 4.44) olduğu durumlar incelenmiştir.

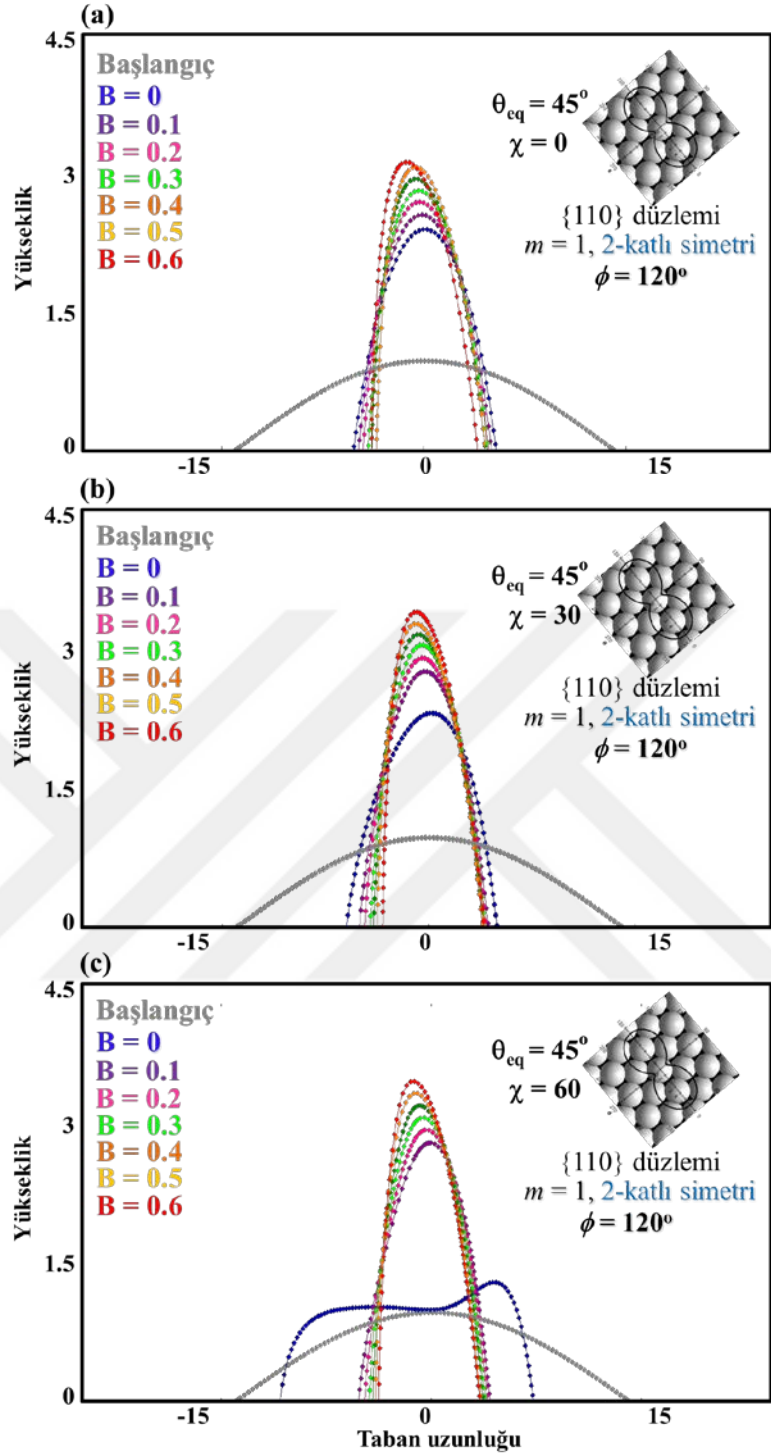
Şekil 4.43'de $\phi = 60^\circ$ durumunda, başlangıçta elektrik alanın olmadığı (a)'da farklı yüzey katılığı değerlerine sahip, hafif sağa yaslı/yönelimli KN'ler elde edilmiştir. Kristal eğim açısının ve yüzey katılığının etkisiyle eğimli KN'lerin, yönelimlerinin (b) $\chi = 30^\circ$ 'a çıkıldığında, arttırılabildiği görülmektedir. (c) ise, $\chi = 60^\circ$ 'a çıkarıldığında, düşük yüzey katılığına sahip KN'lerde filme geçiş görülürken ($B=0$, $B=0.1$, $B=0.2$), daha yüksek yüzey katılığına sahip KN'lerin yönelimlerinin arttığı görülmektedir.

Şekil 4.44, $\phi = 120^\circ$ durumunda, (a)'da farklı yüzey katılığı değerlerine sahip, hafif sola yaslı/yönelimli KN'ler elde edilmiştir. Kristal eğim açısının ve yüzey katılığının etkisiyle yönelimli elde edilmiş KN'lerin, yönelimlerinin (b) $\chi = 30^\circ$ 'a çıkıldığında, arttırılabildiği görülmektedir. (c) ise, $\chi = 60^\circ$ 'a çıkarıldığında ise yönelimdeki artış devam etmiştir. $\phi = 60^\circ$ 'den farklı olarak $\chi = 60^\circ$ 'de filme geçiş sadece $B=0$ (izotropik durum)'da görülmüştür.

Şekil 4.42, Şekil 4.43 ve Şekil 4.44 birlikte değerlendirildiğinde, kristal eğim parametresinin ve elektrik alanın KN morfoloji kontrolündeki rolü anlaşılmaktadır. Sistemde elektrik alanın uygulanmadığı durumda, $\{110\}$ yüzeyinde birbirlerinin simetriği olan $\phi = 60^\circ$ ve $\phi = 120^\circ$ açıları KN'lerin belirli bir yönde yönelimli büyütülebilmesini sağlamaktadır, bu yönelimin arttırılması ise sisteme elektrik alan uygulanmasıyla elde edilmektedir.



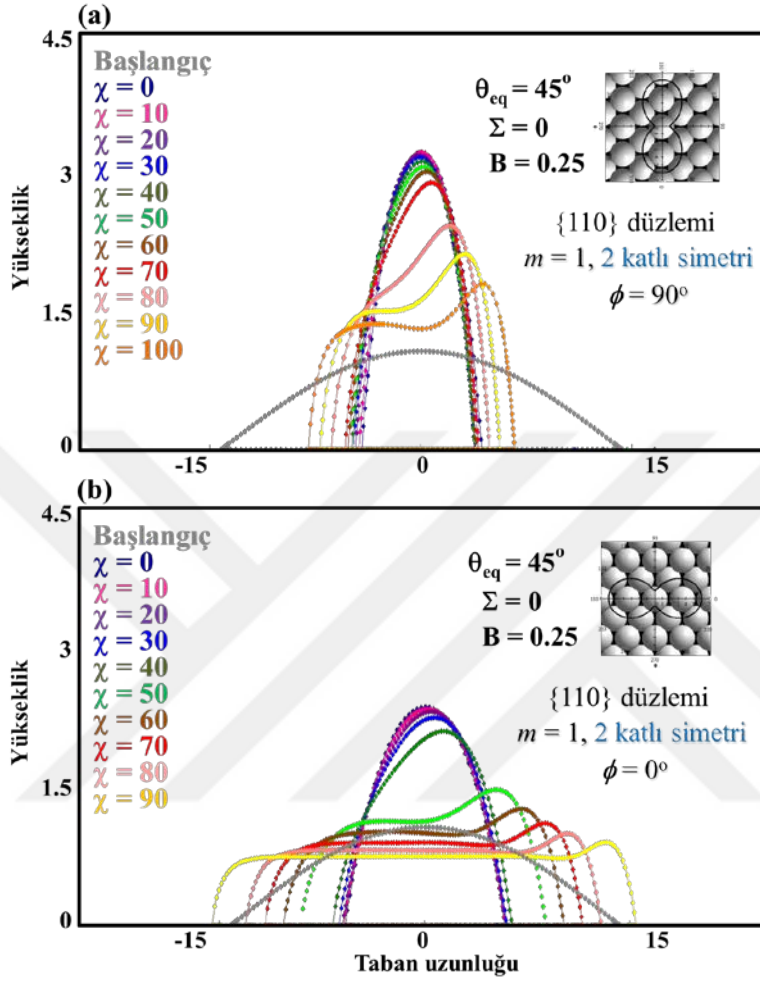
Şekil 4.43: $\phi=60^\circ$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.



Şekil 4.44: $\phi=120^0$ durumunda elektrik alan ile KN morfolojilerinin kontrolü.

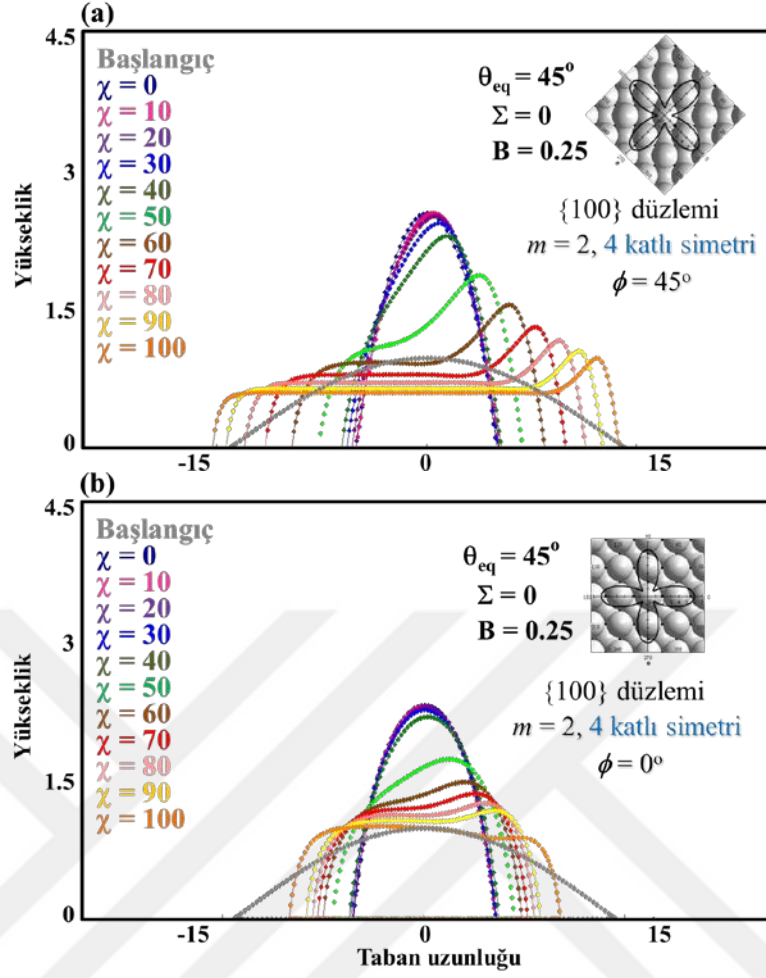
Kristal eğim açısı önceki bölümlerde anlatıldığı gibi, KN'lerin yönelimli morfolojilerinin oluşmasında rol oynayan ve sistemdeki yüzey katılığı etkisini kontrol eden önemli bir parametredir. Bir önceki bölümde, kristal eğim açısının sağladığı yönelimin elektrik alan uygulanarak arttırılabileceği gösterilmişti. Kristal eğim açısının değişimiyle, elektrik alan kuvvetlerinin KN morfolojilerini kontrol

edebilirliğinin daha iyi anlaşılması için seçilen iki farklı kristal eğim açısı için $\{110\}$, $\{100\}$, $\{111\}$ yüzeylerinde, düşük şiddetteki yüzey katılığı değerleri için elektrik alan sisteme uygulanarak oluşan KN morfolojileri incelenmiştir.



Şekil 4.45: $\{110\}$ yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.

Şekil 4.45, $\{110\}$ yüzeyinde kristal eğim açısının 90° (a) ve 0° (b) olduğu iki durumda düşük şiddette yüzey katılığı durumunda KN morfoloji değişimlerini göstermektedir. (a)'da kristal eğim açısının 90° olduğu durum, daha önce de bahsedildiği gibi (Şekil 4.28), görece yüksek KN en boy oranlarının elde edilmesini sağlamaktadır. Artan elektrik alan şiddeti ile KN'ler öncelikle sağa yaslı bir morfolojiye doğru gitmektedir $\chi = 70$ değerinden sonra sağa yaslı tepecikli, filme doğru giden bir ara faz oluşmaktadır. (b)'de ise, kristal eğim açısının 0° alınmasıyla, başlangıçta daha düşük en boy oranlarına sahip olan KN'ler uygulanan elektrik alan şiddetinin artmasıyla kristal eğim açısının 90° olduğu duruma göre daha düşük elektrik alan değerlerinde film oluşumuna gitmiştir.

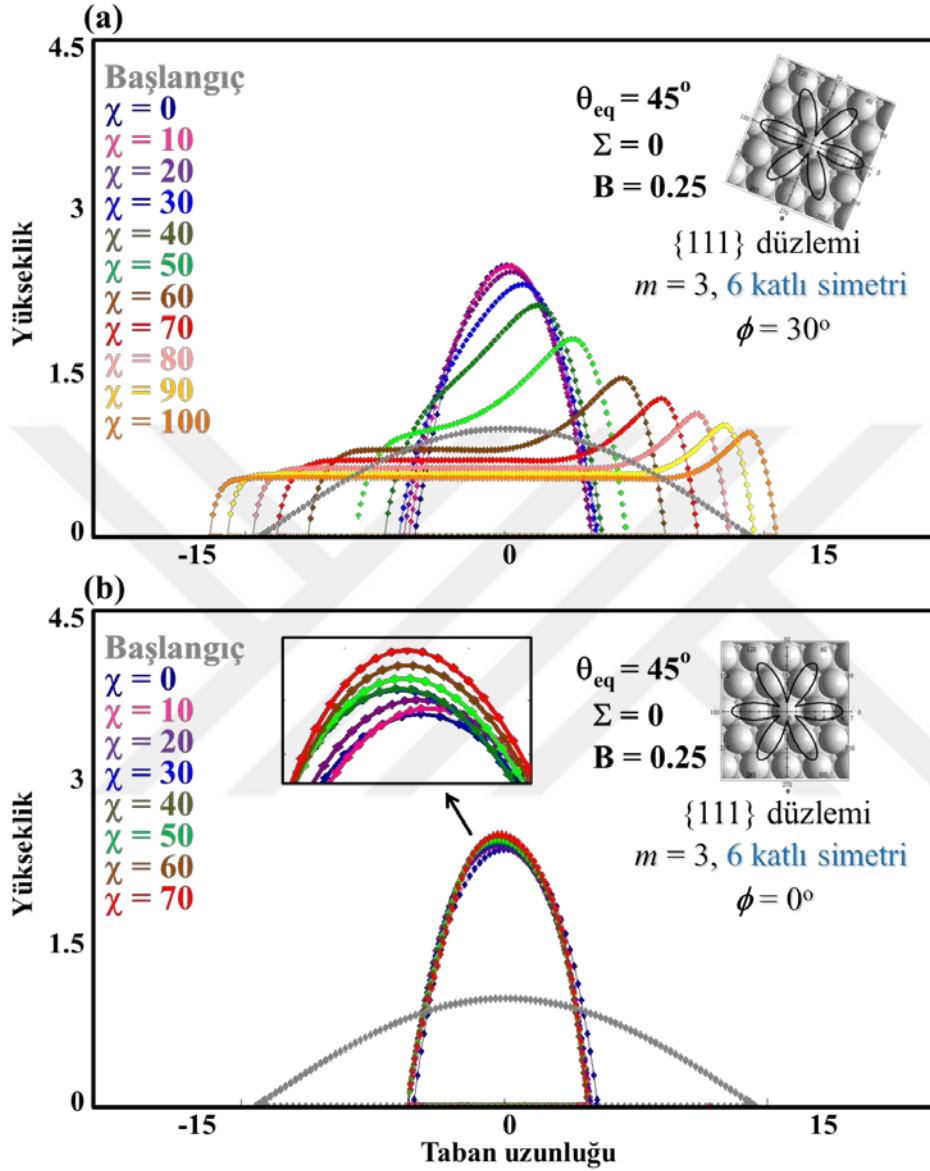


Şekil 4.46: $\{100\}$ yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.

Şekil 4.46'de $\{100\}$ yüzeyinde kristal eğim açısının 45° (a) ve 0° (b) olduğu iki durumda düşük şiddette yüzey katılığına sahip sistemde KN morfoloji değişimlerini göstermektedir. (a)'da, kristal eğim açısının 45° olduğu durumda, elektrik alan şiddetinin artışı, KN'lerin filme geçişlerini sağlamaktadır. (b)'de kristal eğim açısının 0° olduğu durumda, KN'lerin elektrik alanın artmasıyla, KN'lerin tamamen film oluşturmadan KN-film arasında bir fazda kaldığı, görülmektedir. Aynı şekilde $\{111\}$ düzleminde elektrik alan şiddetinin artırılmasıyla düşük şiddetteki yüzey katılığı değerlerinde farklı kristal eğim açıları için, KN morfolojilerinin kontrol edilebildiği test edilmiştir.

Şekil 4.47'de $\{111\}$ yüzeyinde, kristal eğim açısının 30° (a) ve 0° (b) olduğu iki durumda, elektrik alan şiddetinin artmasıyla KN morfoloji değişimleri verilmiştir. Kristal eğim açısının 30° (a)'da $\{100\}$ yüzeyine benzer şekilde uygulanan elektrik alanın artmasıyla, KN'ler filme doğru geçiş yapmaktadır. (b)'de ise

uygulanan elektrik alan şiddetinin artmasıyla, $\chi=80$, $\chi=90$ ve $\chi=100$ dedi ara fazlar dışında, KN olarak kalmışlar ve yükseklik uygulanan elektrik alan şiddetiyle artmıştır.



Şekil 4.47: {111} yüzeyinde farklı kristal eğim açıları ile KN morfolojilerinin kontrolü.

Şekil 4.45, 4.46 ve 4.47 birlikte değerlendirildiğinde, kristal eğim açılarının elektrik alan kuvvetleri altında, KN-film geçişlerinin kontrolünün sağlanabildiği fakat bu etkilerin sistemlere göre değiştiği görülmektedir. Bu grafikler, uygulamalarda kullanılacak KN'lerin elde edilmesi veya film oluşumu isteniyorsa, film elde edilmesi için gereken malzeme özelliklerini, kristal yönelimlerini ve uygulanacak elektrik alan şiddetinin nasıl ayarlanması gerektiğini göstermektedir.

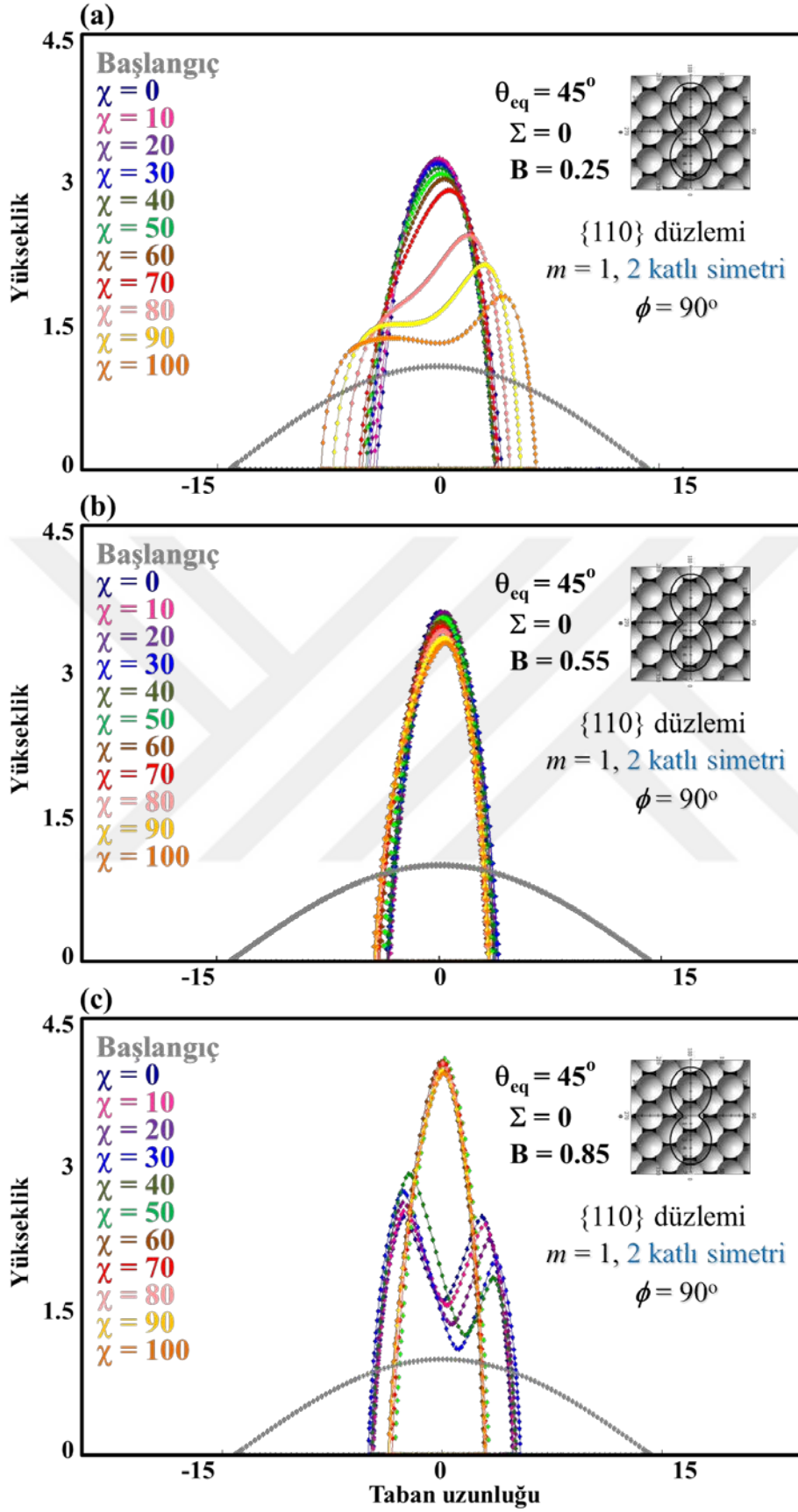
4.2.6 Yön-bağımlı sistemlerde elektrik alan ve yüzey katılığı etkisi

Yüzey katılığı, KN'lerin, en boy oranlarını ve tepe eğriliklerini kontrol etmektedir. Bu etki ise, malzemenin depozit edileceği yön ayarlanarak kristal eğim parametresiyle ayarlanabilmektedir. Elektrik alan kuvvetlerinin farklı yüzey katılığı değerlerinde sistemi kontrol edebilirliğini araştırmak için {110}, {100} ve {111} yüzeylerinde düşük, orta ve yüksek şiddette yüzey katılığı değerlerindeki sistemler için elektrik alan kuvvetleri sisteme uygulanmıştır. Kristal eğim açısının, yüzey katılığı etkisini kontrol ettiği gösterilmiştir (Şekil 4.26).

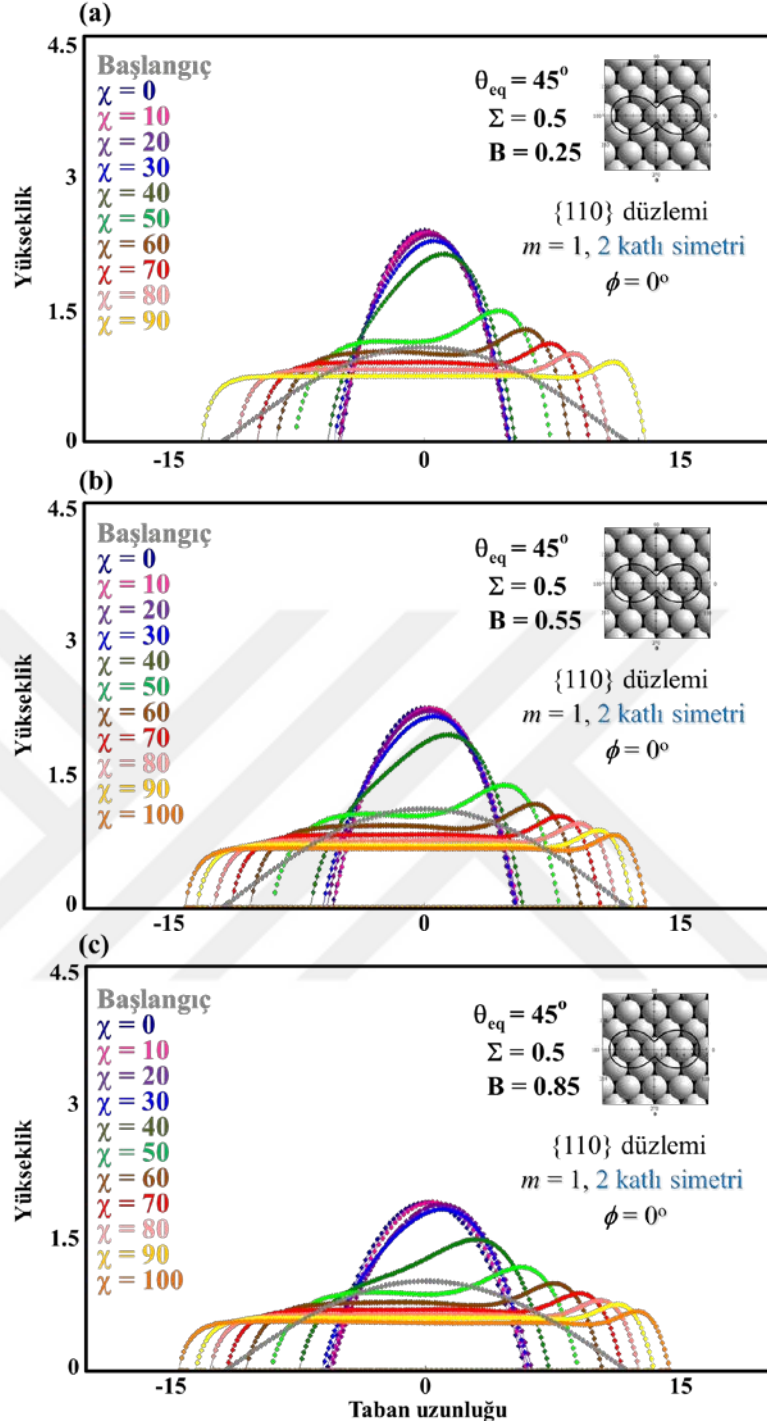
Birbirinden farklı etkiler yaptığını önceki deneylerimizden gördüğümüz iki farklı kristal eğim açısı için $\phi = 0$ olduğu durum ve kristalografik yönler için simetri açısının tam yarısındaki değerlerini ({110} için $\phi = 90$, {100} için $\phi = 45$ ve {111} için $\phi = 30$) de yaptığımız deneylerle araştırdık.

Şekil 4.48 (a)'da, düşük şiddetteki yüzey katılığı değerine sahip sistemde, elektrik alan uygulandıkça KN'ler filme geçiş yapacak ara faz morfolojilerine doğru ilerlemektedirler. Bu sonuç, izotropik sistemde düşük denge açılına sahip sistemlerde gördüğümüz davranışlarla paraleldir. (b)'de yüzey katılığının orta şiddette olduğu durumda, KN'lerde elektrik alan şiddeti arttıkça filme geçiş görülmemektedir. Bu bize, yüzey katılığı şiddetinin düşük veya orta şiddette olduğu sistemler seçilerek elektrik alan etkisinin kontrol edilebileceğini göstermektedir. (c)'de ise yüzey katılığı şiddetinin yüksek olduğu sistemde elektrik alan değerinin düşük olduğu durumlarda film oluşumu yerine 2 tepeli kuantum nokta oluşumunu sağladığı, yüksek elektrik alan şiddeti değerlerinin ise fragmente olmamış tek KN oluşumunu sağladığı görülmüştür.

Şekil 4.49, {110} yüzeyinde, düşük (a), orta (b) ve yüksek (c) şiddetteki yüzey katılığı değerlerine sahip sistemde kristal eğim açısı $\phi = 0^\circ$ dir. Üç durumda da ortak olarak elektrik alan şiddetinin artışı KN'lerin filme dönüşmesini sağlamaktadır. Oluşan filmler incelendiğinde, yüzey katılığının artışıyla, oluşan filmlerin uzunluğunun arttığı görülmektedir. Şekil 4.47, şekil 4.48 ile karşılaştırıldığında, kristal eğim açısının $\phi = 0^\circ$ ve $\phi = 90^\circ$ olduğu iki durumda elektrik alan etkilerinin de birbirinden farklı olduğunu, $\phi = 0^\circ$ durumunda film oluşumuna, $\phi = 90^\circ$ durumunda ise KN morfolojisinde kalmaya ve fragmentasyona sebep olduğu görülmüştür.



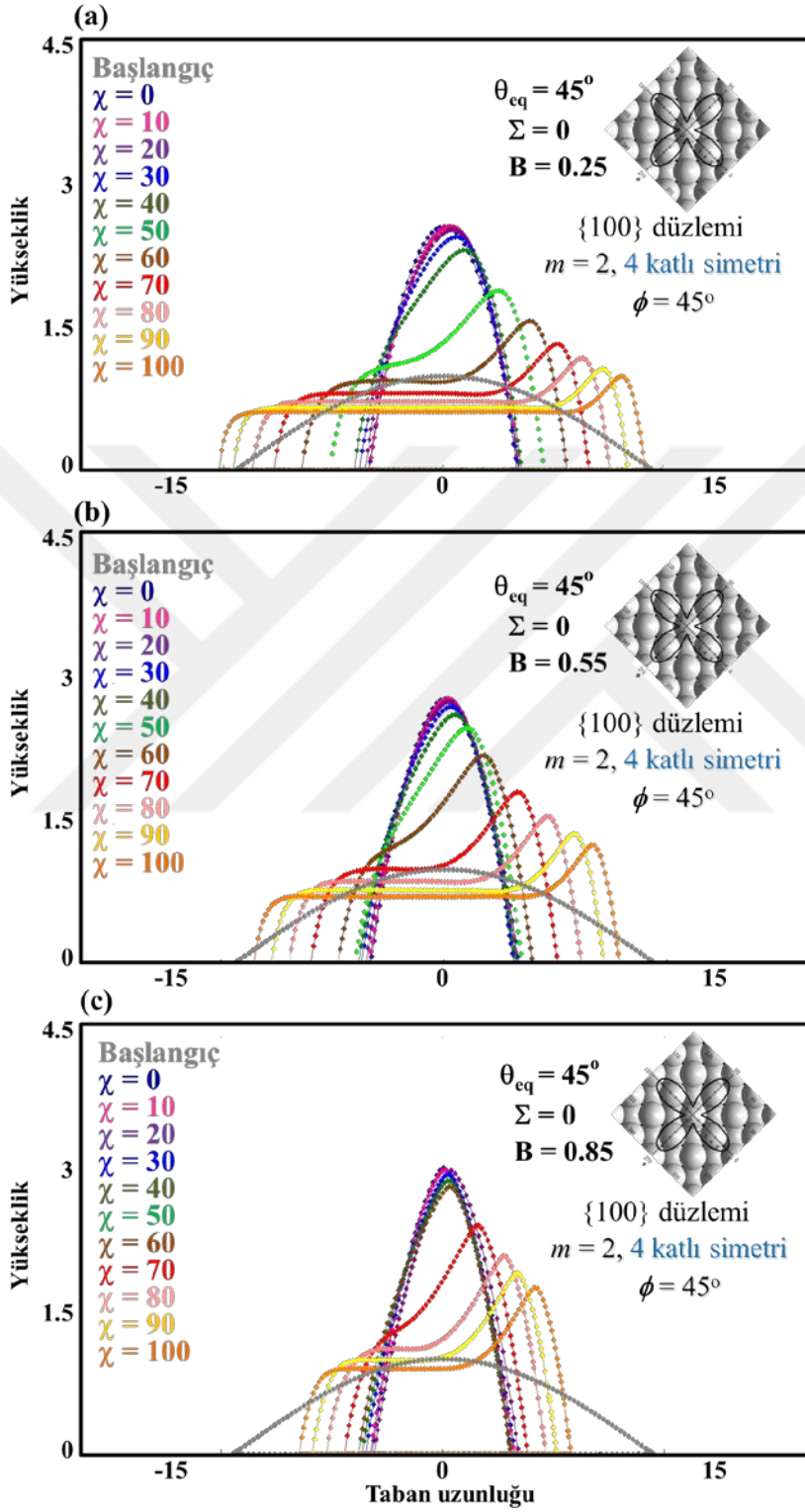
Şekil 4.48: {110} yüzeyinde farklı yüzey katlılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).



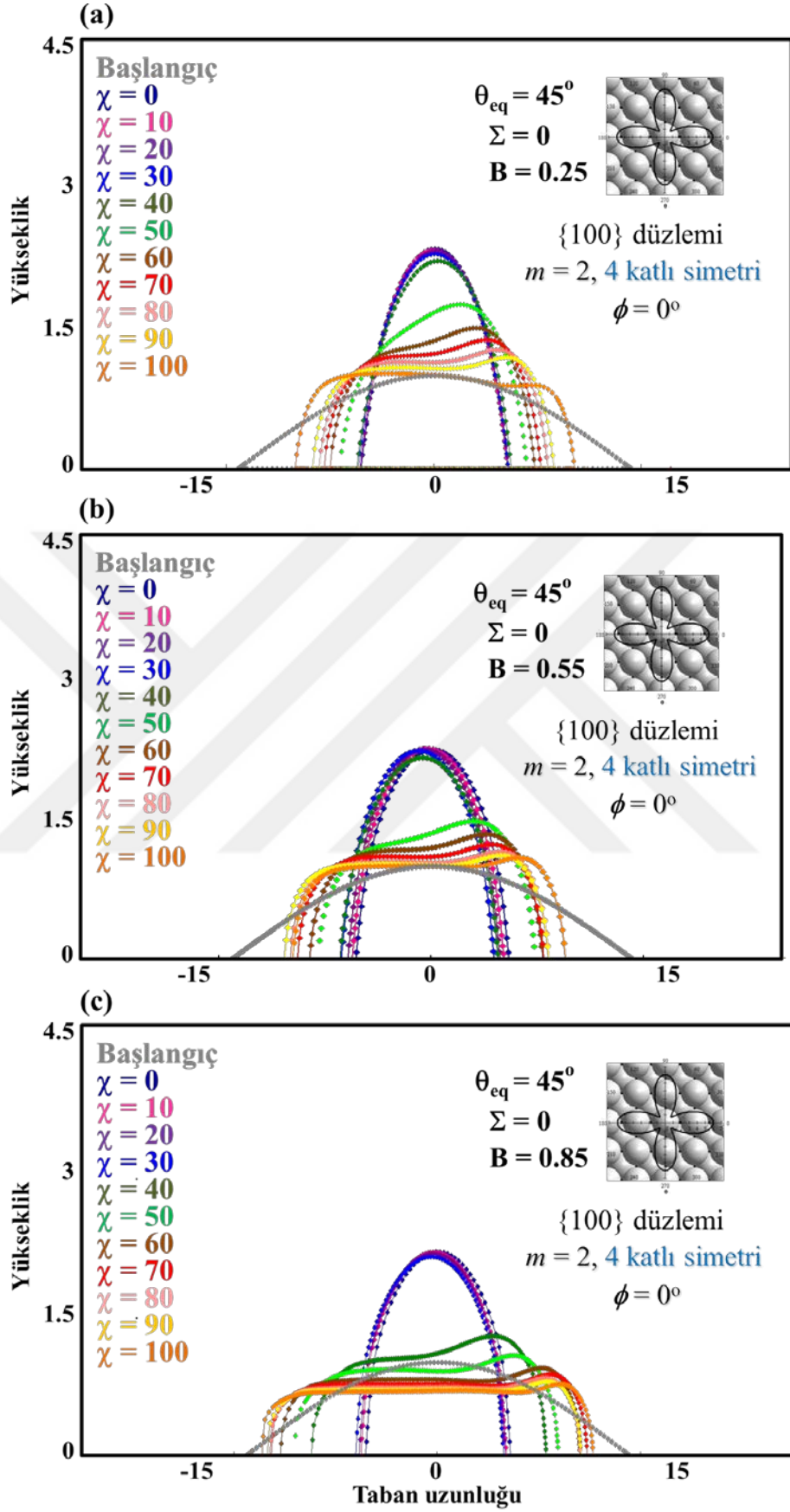
Şekil 4.49: {110} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.50'de {110} yüzeyinde, düşük şiddette yüzey katılığı değerinde elektrik alan şiddetinin artmasıyla KN'den bir tarafı sola yaslı adacıklarla ara fazlar oluşturarak film oluşumuna doğru gitmektedir. (b) ve (c)'de yüzey katılığının artışıyla, filme geçiş için daha yüksek elektrik alan şiddeti gerekmektedir. Örneğin, düşük şiddetteki yüzey katılığındaki sistem olan (a)'da elektrik alan değerinin 60 olduğu (kahverengi) morfolojinin filme doğru geçiş yaptığı görülürken, (b)'de aynı elektrik alan

değerindeki morfolojinin KN ve film arasında bir geçiş fazı, (c)'de yüzey katılığının artmasıyla KN olduğu görülmektedir.



Şekil 4.50: {110} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).



Şekil 4.51: {100} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.51’de {100} yüzeyinde, düşük (a), orta (b) ve yüksek (c) şiddetteki yüzey katılığı değerlerine sahip sistemde kristal eğim açısı $\phi=0^\circ$ dir. (a)’da elektrik alan değerinin artışıyla KN ve film morfolojileri arasında geçiş fazları elde edilmektedir. (b)’de artan yüzey katılığı değerleri için bu geçiş devam etmektedir. (c)’de ise ara fazların filme doğru geçiş yaptığı görülmektedir. $\chi=50$ incelenirse (açık yeşil), (a)’da, geçiş morfolojisindeyken, (c)’de filme geçiş yapmıştır.

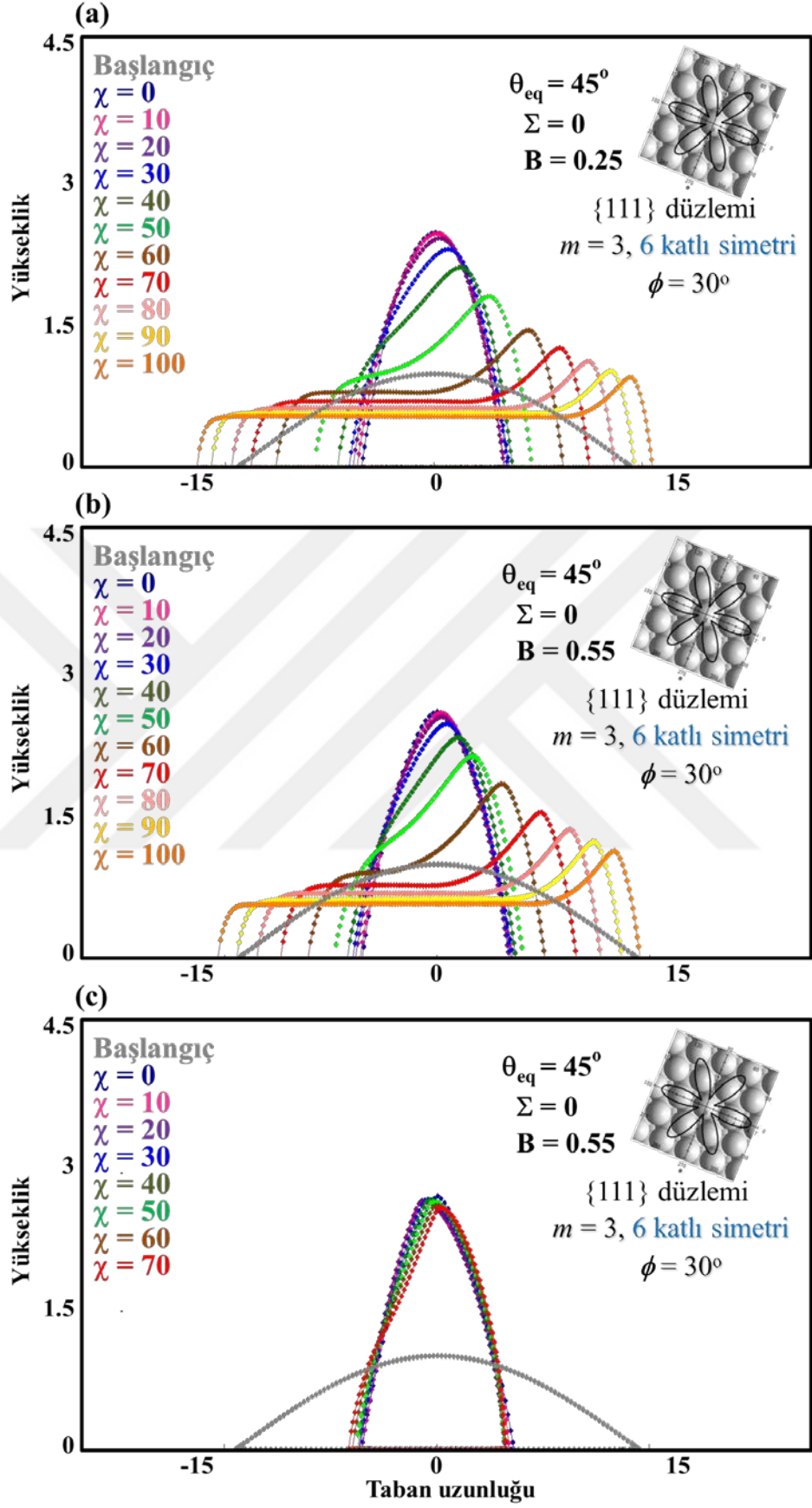
Şekil 4.50, elektrik alan kuvvetlerine maruz bırakılan bir sistemde yüzey katılığı değiştirilerek sistemde film elde edilebileceğini göstermektedir. Şekil 4.49 ve Şekil 4.50’den edindiğimiz bilgiler, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ ve $\phi=45^\circ$ olduğu iki durumda, elektrik alan etkisinin sistemi farklı şekilde etkilediğini göstermektedir. Bu sonuç, önceki bölümlerde KN’lerin enboy oranlarının ve tepe eğriliklerinin kontrolünde kristal eğim açısında gördüğümüz etkilerle paraleldir.

Şekil 4.52’de {111} yüzeyindeki sistemde düşük şiddetteki yüzey katılığı değerine sahip (a)’da, elektrik alanın artışı ile KN’den filme geçiş sağlanmıştır. Düşük (a) ve orta şiddetteki (b) morfolojiler kıyaslandığında, orta şiddetteki yüzey katılığı değerlerinde oluşan filmlerin uzunluklarının kısaldığı görülmektedir. Ek olarak filme geçiş yapılan elektrik alan değeri artmıştır. $\chi=60$ incelendiğinde, (a)’da film oluşumu görülürken, (b)’de film ve KN arasında bir geçiş fazında olduğu, (c)’de ise KN olarak kaldığı görülmektedir. (c)’de yüksek yüzey katılığı değerlerinde, film oluşumu gerçekleşmemiş, KN morfolojileri elde edilmiştir.

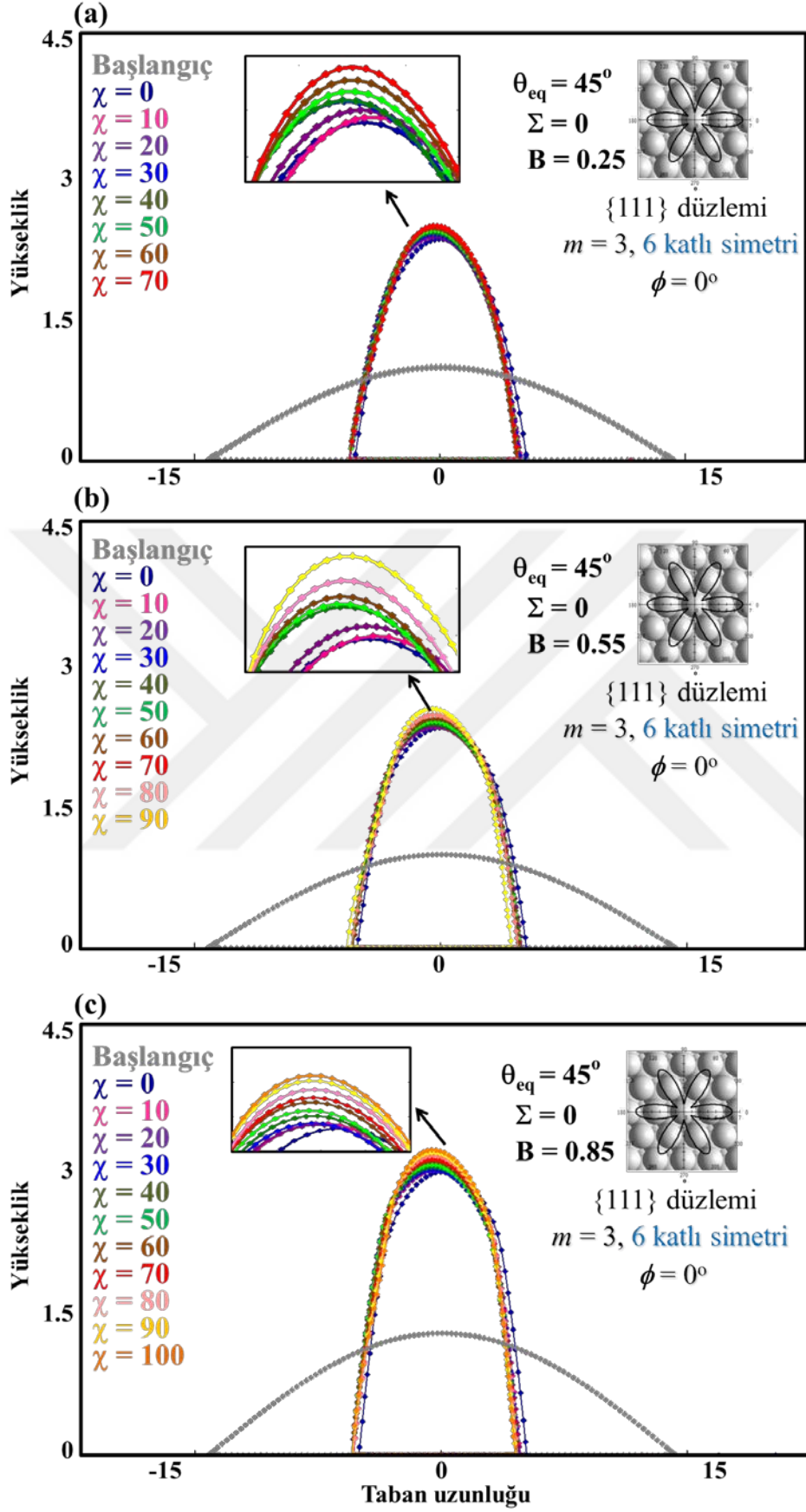
Şekil 4.53’de {111} yüzeyinde, düşük (a), orta (b) ve yüksek (c) yüzey katılığına sahip ve kristal eğim açısı $\phi=0^\circ$ için, KN’lerin elektrik alan ile değişen morfolojilerini gösteren grafikler verilmiştir.

4.2.7 Yön-bağımlı sistemlerde elektrik alan ve gerinim etkisi

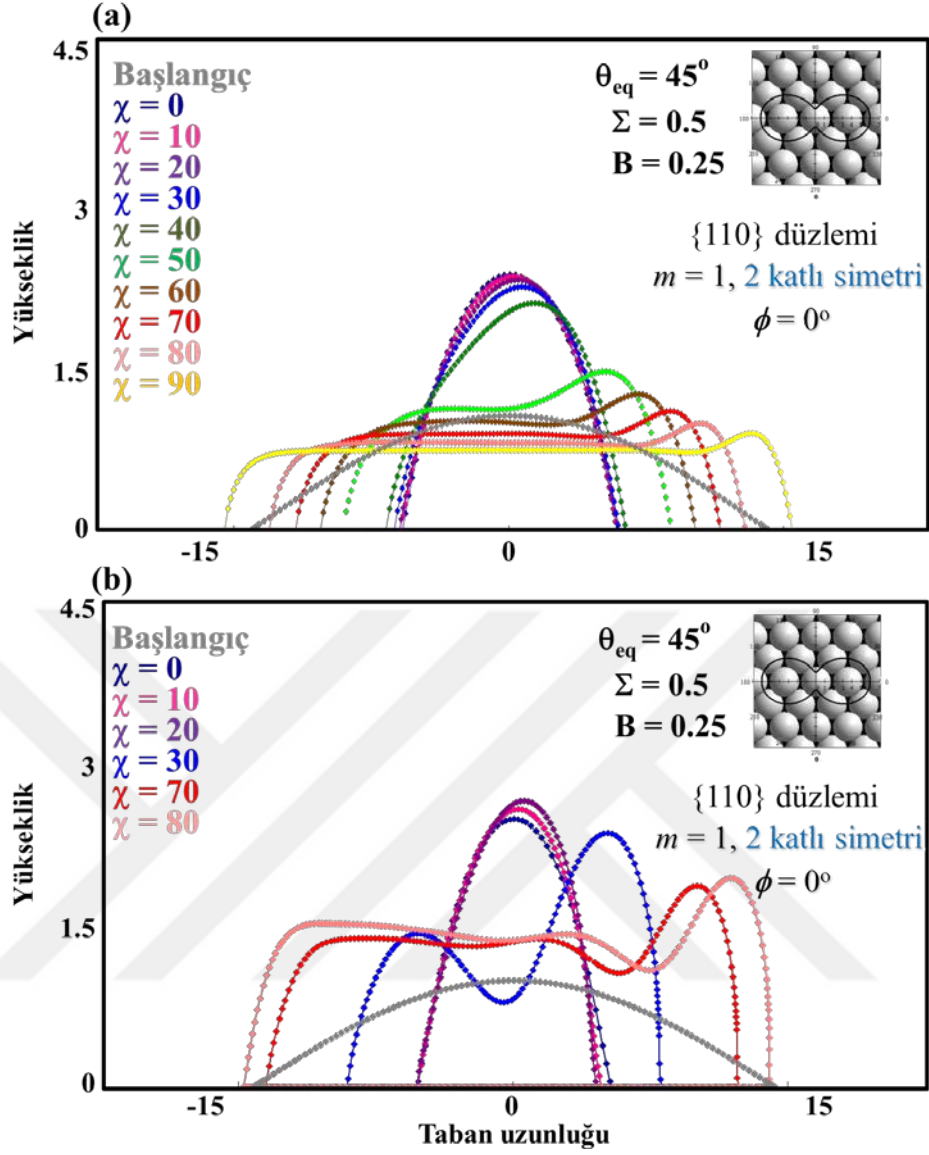
Kristal eğim açısı ve yüzey katılığı parametrelerine ek olarak uygulanan gerinim kuvvetlerinin KN morfolojilerini nasıl etkileyeceğini anlamak için, düşük şiddette gerinim kuvvetleri, {110}, {100} ve {111} yüzeylerine uygulanmıştır. Gerinim kuvvetlerinin elektrik alan altındaki etkilerinin daha kapsamlı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



Şekil 4.52: {111} yüzeyinde farklı yüzey katlılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).



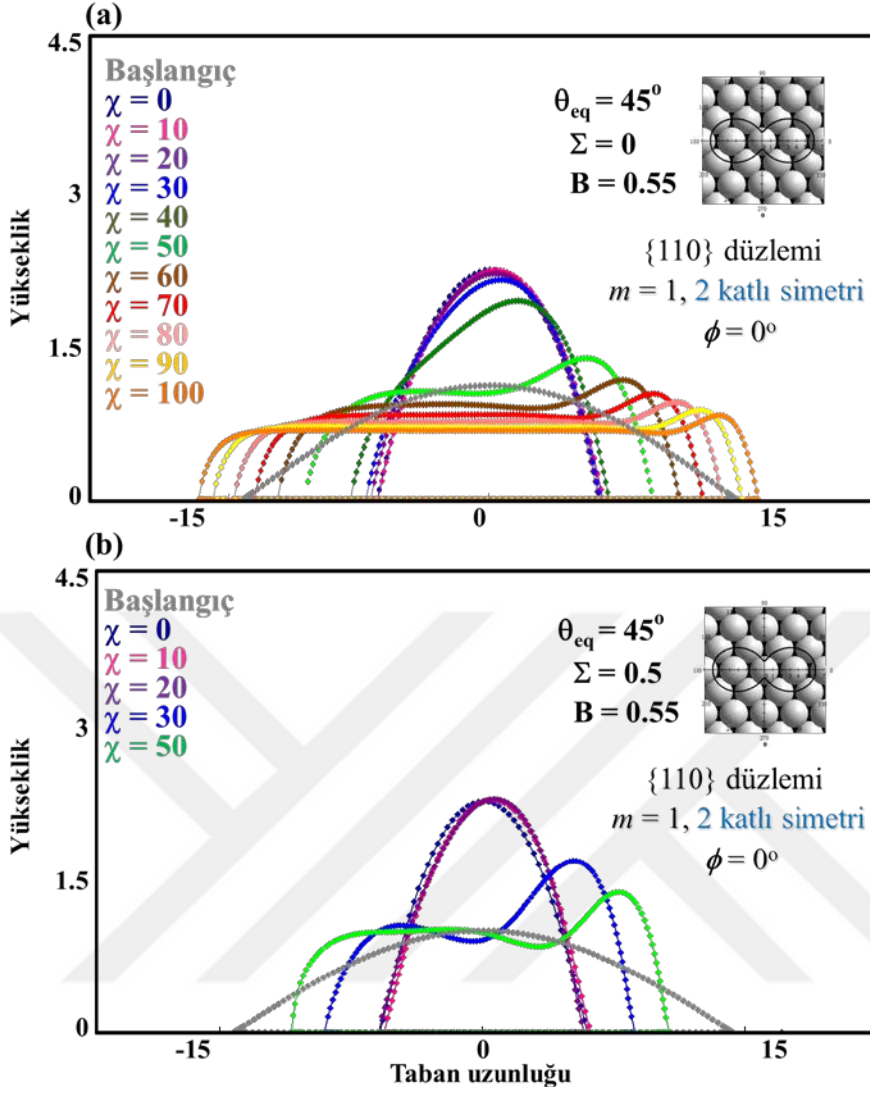
Şekil 4.53: {111} yüzeyinde farklı yüzey katılığı değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).



Şekil 4.54: {110} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

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

Şekil 4.55’de, kristal eğim açısının, $\phi=0^\circ$ olduğu durumda orta şiddetteki yüzey katılığındaki sistem için, gerinim kuvvetinin $\Sigma=0$ (a) ve $\Sigma=0.5$ (b) olması durumunda, elde edilecek KN yapıları verilmiştir.

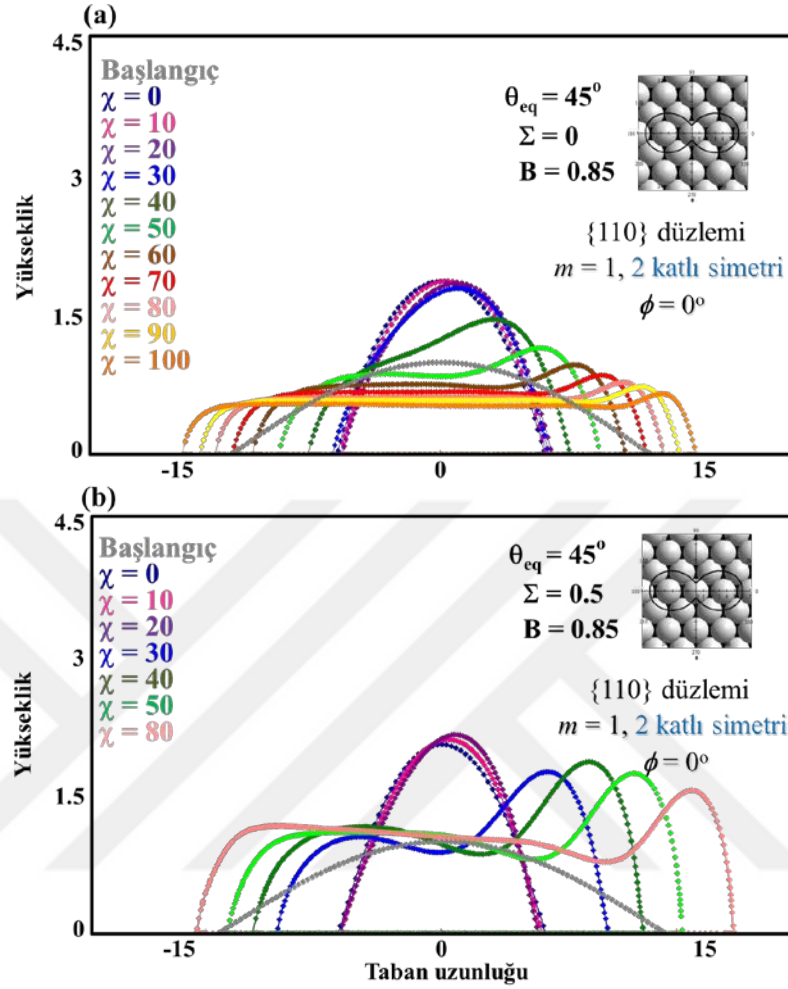


Şekil 4.55: {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.55 (a)'da, stresin olmadığı durumda, fragmentasyon görülmeden elektrik alan etkisiyle KN'lerden filme geçiş vardır. (b) incelendiğinde ise, $\chi=0-20$ arası en boy oranı artan KN'ler elde edilmiştir. $\chi=30$ 'da KN fragmente olmuştur. Elektrik alan şiddetinin artmasıyla ise, fragmente olan KN'ler uzayarak kalınlığı, stresin olmadığı (a) ile kıyaslandığında daha kalın ve sağ tepeciği daha büyük ikili ara-geçiş sistemleri oluşturmuşlardır.

Orta şiddetteki yüzey katılığı değerlerindeki sistemde elde edilen sonuçlar ise Şekil 4.55'de elde edilmiştir. Orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde, (a)'da, gerinim kuvvetlerinin olmadığı durumda elektrik alan etkisiyle filme geçiş görülürken, (b)'de gerinim etkisiyle daha kalın ve sağ tepeciği daha büyük filmler oluşturmuşlardır.

Yüksek şiddeteki sistemde yapılan deneylerde, Şekil 4.56'de verilen sonuçlar elde edilmiştir.



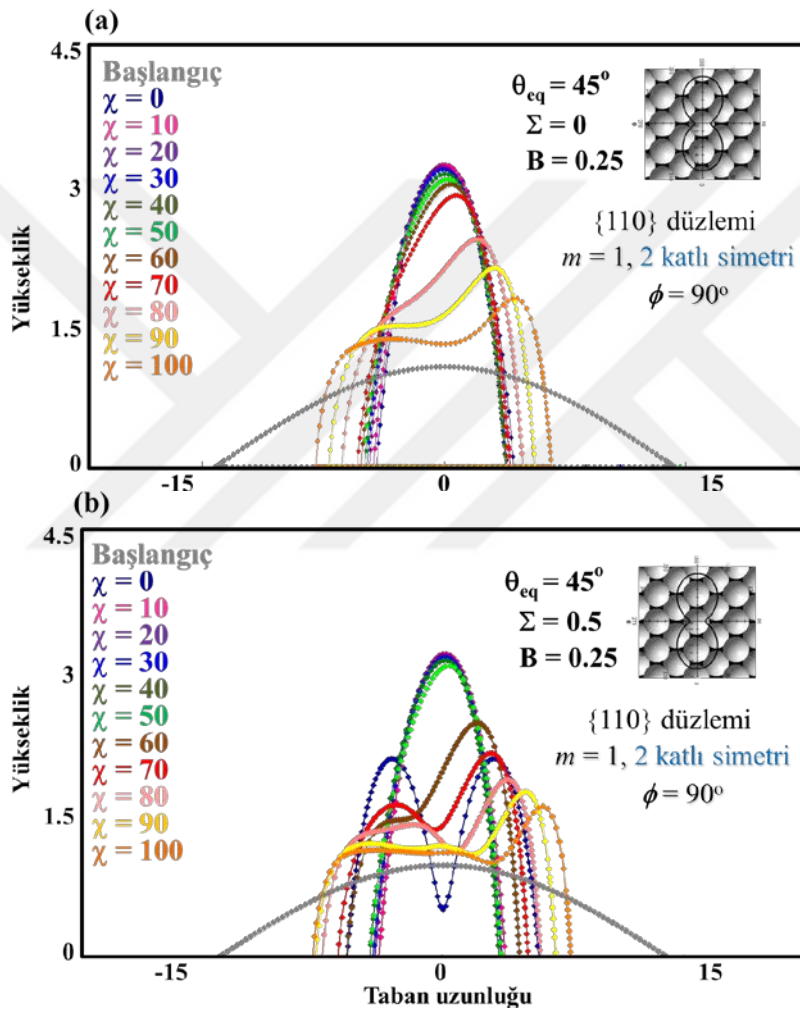
Şekil 4.56: $\{110\}$ yüzeyinde yüksek şiddeteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.56'de düşük ve orta şiddeteki yüzey katılığı değerlerinde olduğu gibi, yüksek yüzey katılığına sahip sistemde de gerinim kuvvetinin sistemde olması daha büyük tepelikli ve kalın, film benzeri yapılar oluşturmaktadır. Bunun sebebi, adacıkların gerinim kuvveti etkisiyle fragmente olurken elektrik alana maruz kalmalarıdır.

Şekiller 4.54, 55 ve 56'da kristal eğim açısının 0° olması durumundaki, düşük, orta ve yüksek şiddeteki yüzey katılığına sahip sistemlerde, genel olarak, gerinim kuvvetleri KN'lerin en boy oranlarını arttırarak, daha sonra da fragmente olmasını sağlayarak sistemi yönetmektedir. Bu sisteme elektrik alan uygulandıyındaysa, oluşan filmin özellikleri değişmektedir. Örneğin, $\chi=30$ incelenirse, gerinim olmayan durumda, KN iken (a), gerinim kuvveti altında (b) filme doğru geçiş yapmıştır. Bu sonuç bize sabit bir elektrik alan altında, uygulanan gerinim kuvvetiyle KN'den

filme geçiş sağlanabileceğini göstermektedir. Başka bir örnek olarak, $\chi=80$ incelendiğinde, her iki durumda da film oluşumu görülmekle birlikte, gerinim olmadığında daha düz ve ince bir film oluşurken, gerinim kuvveti ile kalınlığı daha fazla ve sağ tarafı tepecikli bir morfoloji elde edilmektedir.

Kristal eğim açısının değiştirilmesinin bu yönelimler üzerindeki etkilerini anlamak için kristal eğim açıları 90° alınarak aynı deneyler tekrarlanmış ve sonuçlar, Şekiller 4.57, 58 ve 59'da verilmiştir.

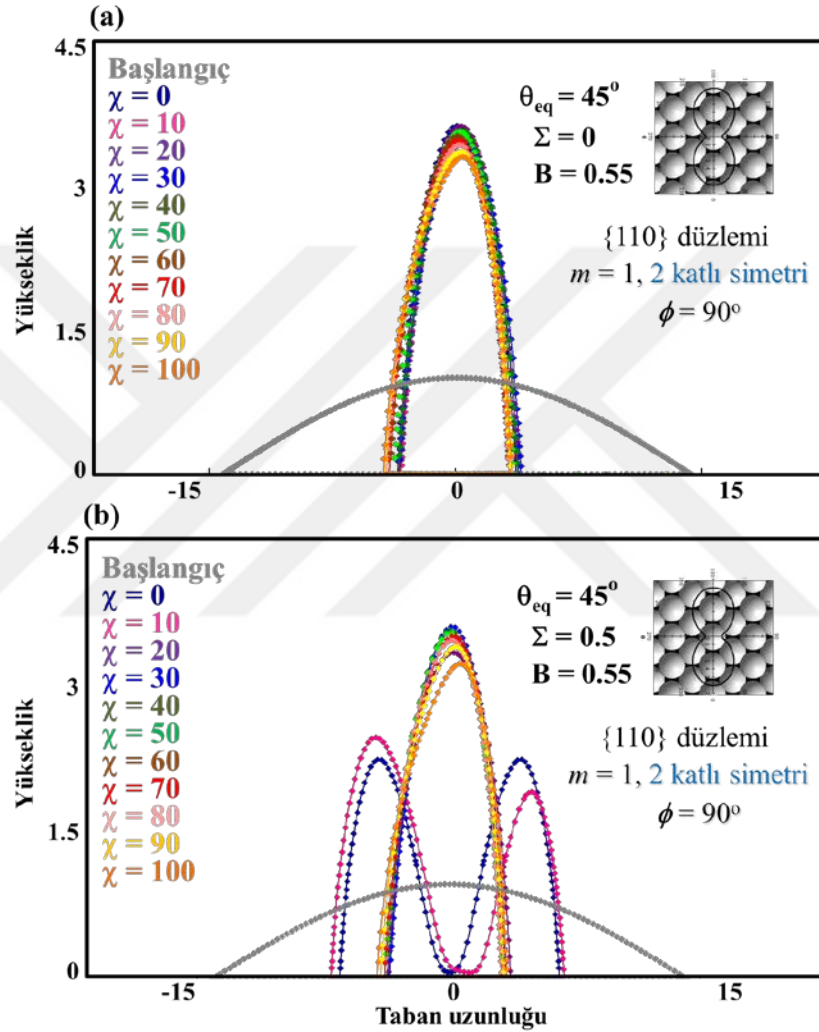


Şekil 4.57: {110} yüzeyinde düşük şiddeteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).

Şekil 4.57 (a)'da gerinim kuvveti düşük yüzey katılığına sahip sistemde, gerinim kuvvetlerinin $\Sigma=0$ (a) ve $\Sigma=0.5$ değerleri için karşılaştırma grafiği verilmiştir. Gerinim etkisiyle elektrik alanın $\chi=0$ değerinde gerinim kuvvetiyle fragmentasyon görülmektedir. (b)'de gerinim kuvveti, $\chi=70$ ve $\chi=80$ değerlerinde de biri diğerinden büyük iki KN oluşumunu sağlamıştır. $\chi=90$ ve $\chi=100$ değerlerinde ise elektrik alan

etkisiyle KN'ler (a)'da bir geçiş morfolojisindeyken sağ tarafı tepeli film oluşuma doğru gittiği görülmüştür. Şekil 4.55'de gördüğümüz gibi sabit elektrik alan altında gerinim kuvvetinin KN'lerden filme geçişini sağlayabileceği sonucu tekrar karşımıza çıkmaktadır.

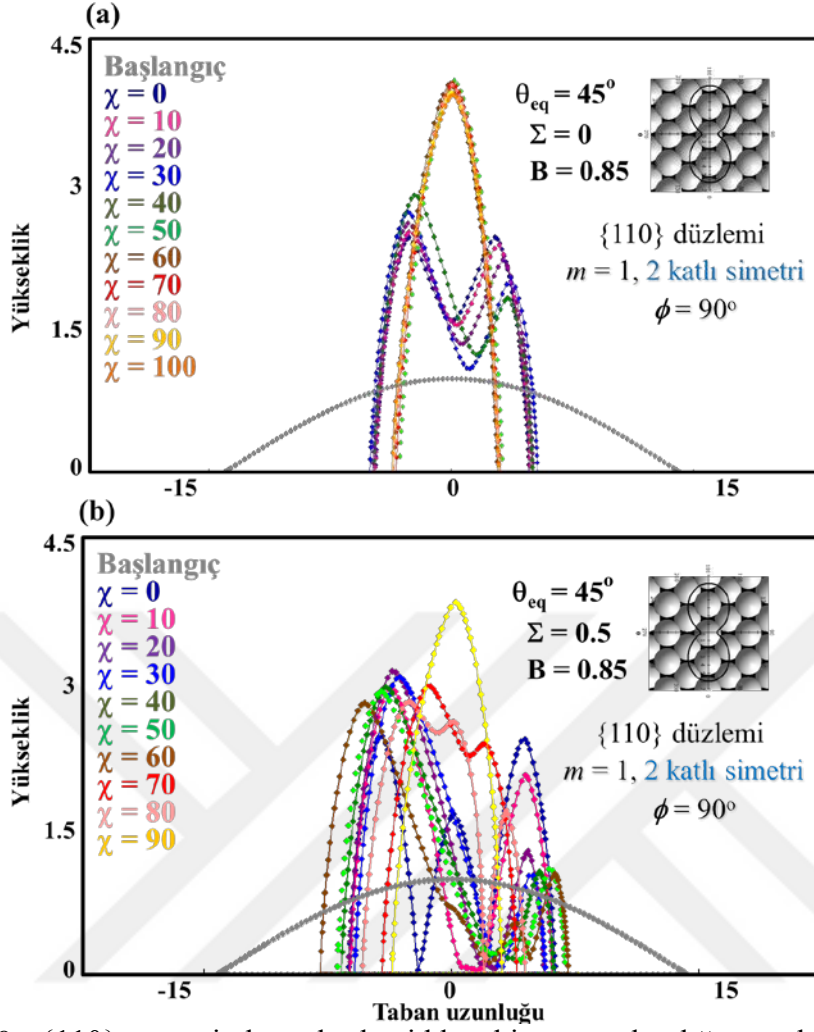
Orta şiddette yüzey katılığına sahip sistemde yapılan deneyler sonucu Şekil 4.58'de verilmiştir.



Şekil 4.58: {110} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).

Şekil 4.58'de orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde, gerinim kuvvetinin $\Sigma=0$ (a) ve $\Sigma=0.5$ (b) olduğu iki durum karşılaştırılmıştır. Burada gördüğümüz durum, gerinim kuvvetlerinin elektrik alanın olmadığı ya da çok küçük ($\chi=10$) değerlerinde KN'lerin fragmentasyonuna sebep olmasıdır.

Yüksek şiddetteki yüzey katılığı değerine sahip sistemler incelendiğinde elde edilen sonuçlar Şekil 4.59'da verilmiştir.

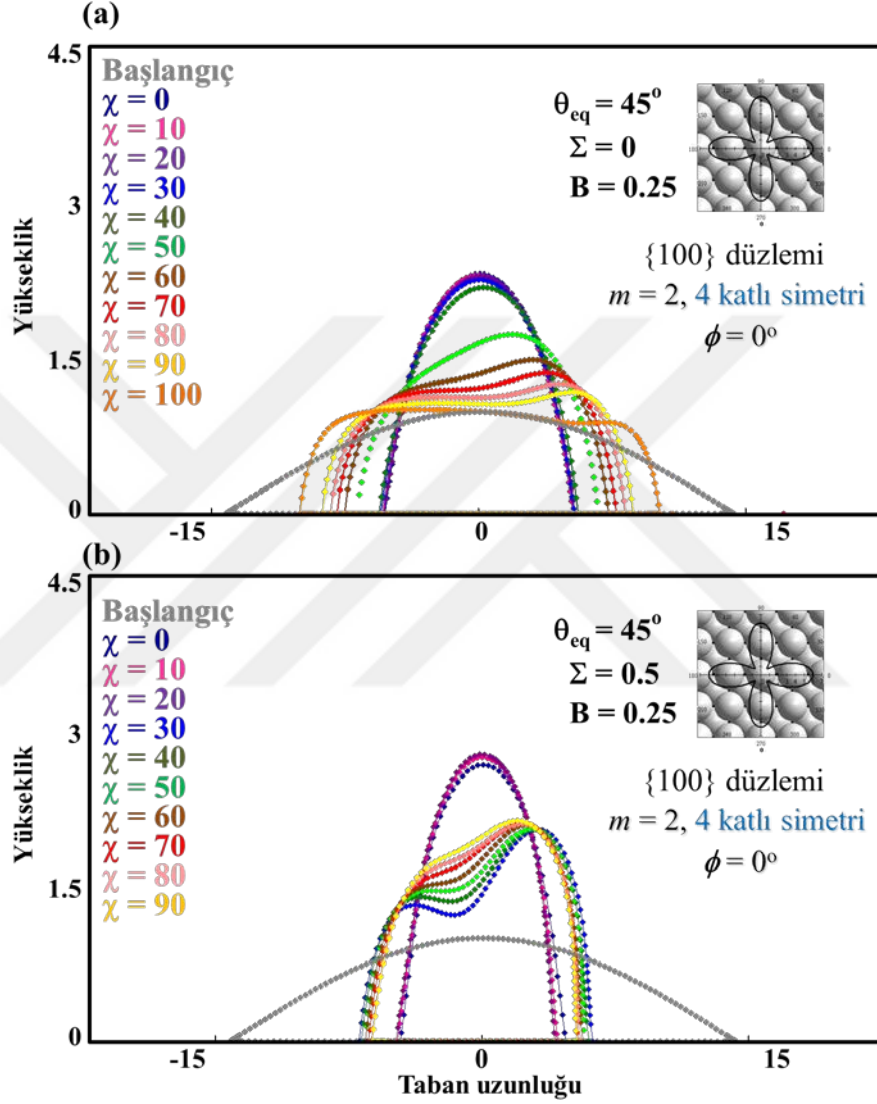


Şekil 4.59: {110} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=90^\circ$).

Şekil 4.59, kristal eğim açısının $\phi=90$ olduğu {110} yüzeyinde gerinim kuvvetinin etkisi (a) ve (b)'de karşılaştırılarak verilmiştir. (a)'da düşük elektrik alan değerlerinde, fragmente olmuş, daha yüksel elektrik alan değerlerine çıkıldıkça KN'ler elde edilmiştir. (b)'de ise gerinim kuvvetinin etkisiyle, (a)'daki KN'ler ($\chi=50, 60, 70, 80, 90, 100$) fragmente olmuştur ($\chi=90$ dışında). Burada, (b)'de gördüğümüz düşük elektrik alan değerinde fragmente olan adacıklar en yüksek değer olan $\chi=90$ 'da fragmente olmamıştır. Bu deney sonucu bize, adacıkların fragmentasyonunun böyle bir sistemde yüksek elektrik alan uygulanarak engellenebileceğini göstermektedir.

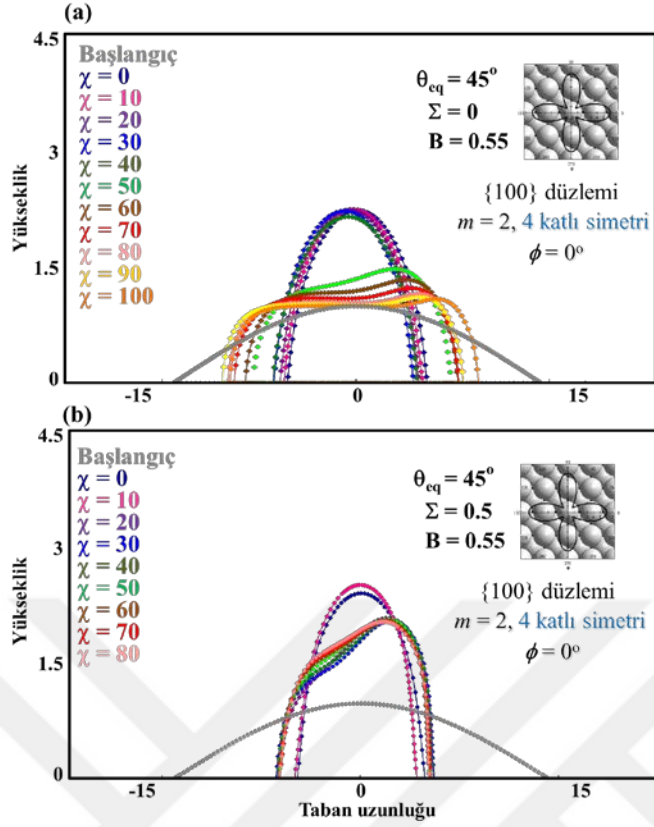
Sonuç olarak, Şekil 4.57 ve Şekil 4.58, kristal eğim açısının değişimiyle elektrik alan ve gerinim kuvvetlerinin KN morfolojilerini nasıl kontrol edebileceğini göstermektedir.

Şekil 4.60 kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu $\{100\}$ yüzeyinde gerinim kuvvetinin etkisi (a) ve (b)'de karşılaştırılarak verilmiştir. (a)'da gerinimsiz sistemde, elektrik alan etkisiyle, KN'den kalınlığı $\{110\}$ sisteminde görülen filmlerden görece yüksek filmler elde edilirken, (b)'de gerinim kuvvetlerinin etkisiyle, filmler ara bir geçiş fazında görülmektedir.

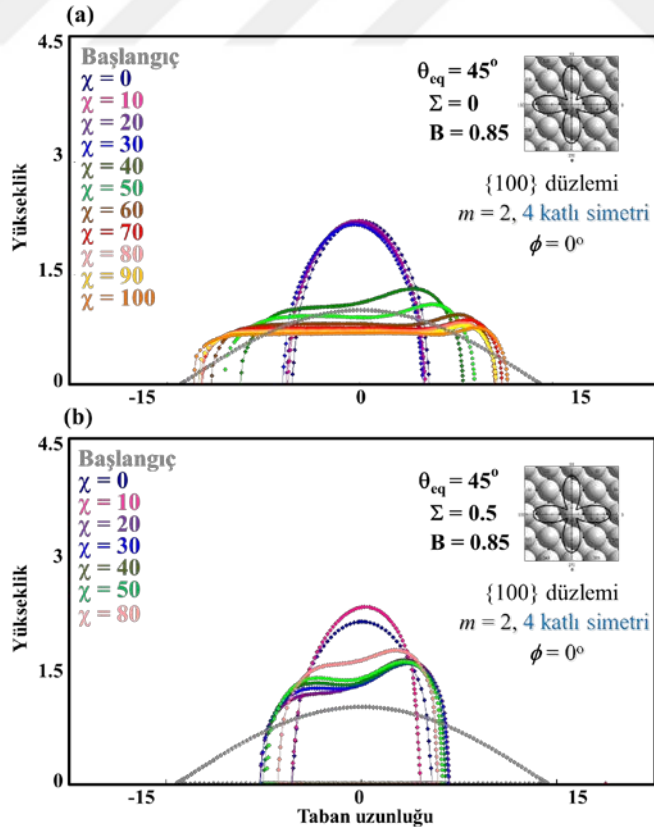


Şekil 4.60: $\{100\}$ yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.61'de ise, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu $\{100\}$ yüzeyinde orta şiddette yüzey katılığı değerine sahip sistemde gerinim kuvvetinin etkisi (a) ve (b)'de karşılaştırılarak verilmiştir. (a)'da gerinimsiz sistemde, elektrik alan etkisiyle, KN'den filme geçiş görülürken, (b)'de gerinim kuvvetlerinin etkisiyle, filmler ($\chi=50, 60, 70, 80$), KN morfolojisine doğru giden bir geçiş fazı oluşturmuşlardır. Aynı etki yüksek yüzey katılığı değerindeki sistemde de görülmüştür (Şekil 4.62).



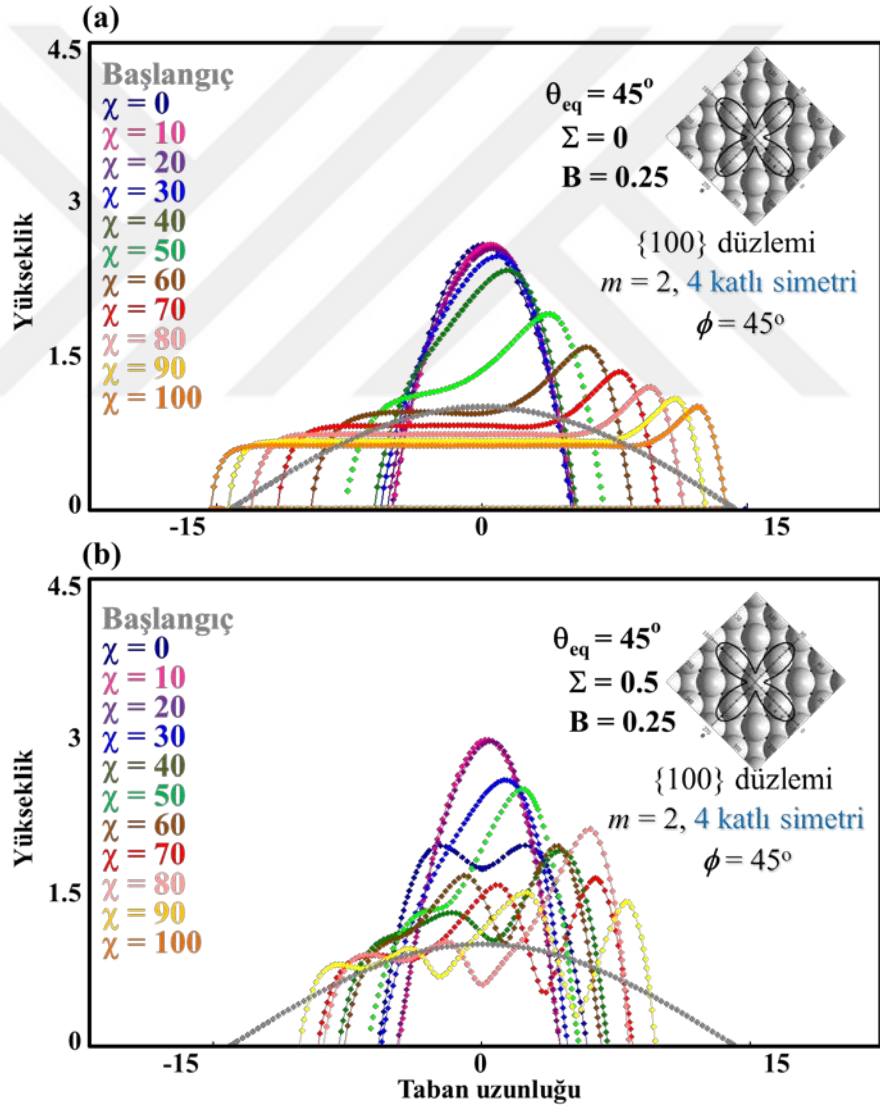
Şekil 4.61: {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).



Şekil 4.62: {100} yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

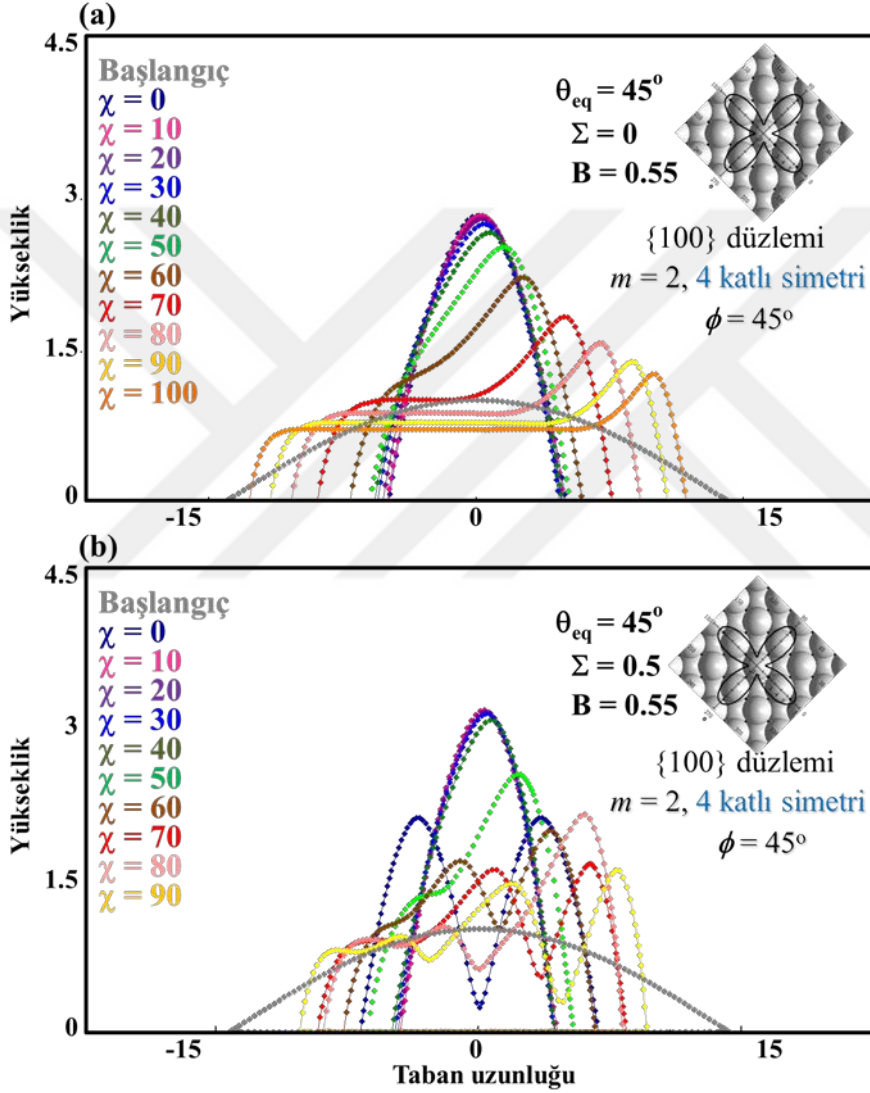
Şekil 4.63’de, kristal eğim açısının $\phi=45^\circ$ olduğu $\{100\}$ yüzeyinde düşük şiddette yüzey katılığı değerine sahip sistemde gerinim kuvvetinin etkisi (a) ve (b)’de karşılaştırılarak verilmiştir. (a)’da gerinimsiz sistemde, elektrik alan etkisiyle, KN’den filme geçiş görülürken, (b)’de gerinim kuvvetlerinin etkisiyle, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu sistemden farklı olarak fragmente olan KN film arası geçiş fazları oluşmuştur. Aynı etki orta şiddetteki yüzey katılığı değerlerine sahip sistemde de görülmüştür (Şekil 4.64).

Buradan, kristal eğim açısının farklı alınması durumunda gerinim etkisinin, elektrik alan ile farklı şekillerde kontrol edilebileceği sonucu çıkmaktadır.



Şekil 4.63: $\{100\}$ yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).

Yüzey katılığı değerlerinin farklı alınması durumunda farklı KN'lerin elde edilebileceği, Şekil 4.65, Şekil 4.63 ve Şekil 4.64 ile karşılaştırılarak incelendiğinde görülmektedir. Şekil 4.63 ve Şekil 4.64'de düşük ve orta şiddette yüzey katılığına sahip sistemlerde gerinim ve elektrik alan etkileriyle fragmente olmuş KN yapıları elde edilirken yüzey katılığı şiddetinin artmasıyla Şekil 4.65'de fragmentasyonun engellendiği ve elektrik alan şiddetinin artmasıyla boyları azalan KN'ler oluştuğu görülmektedir.

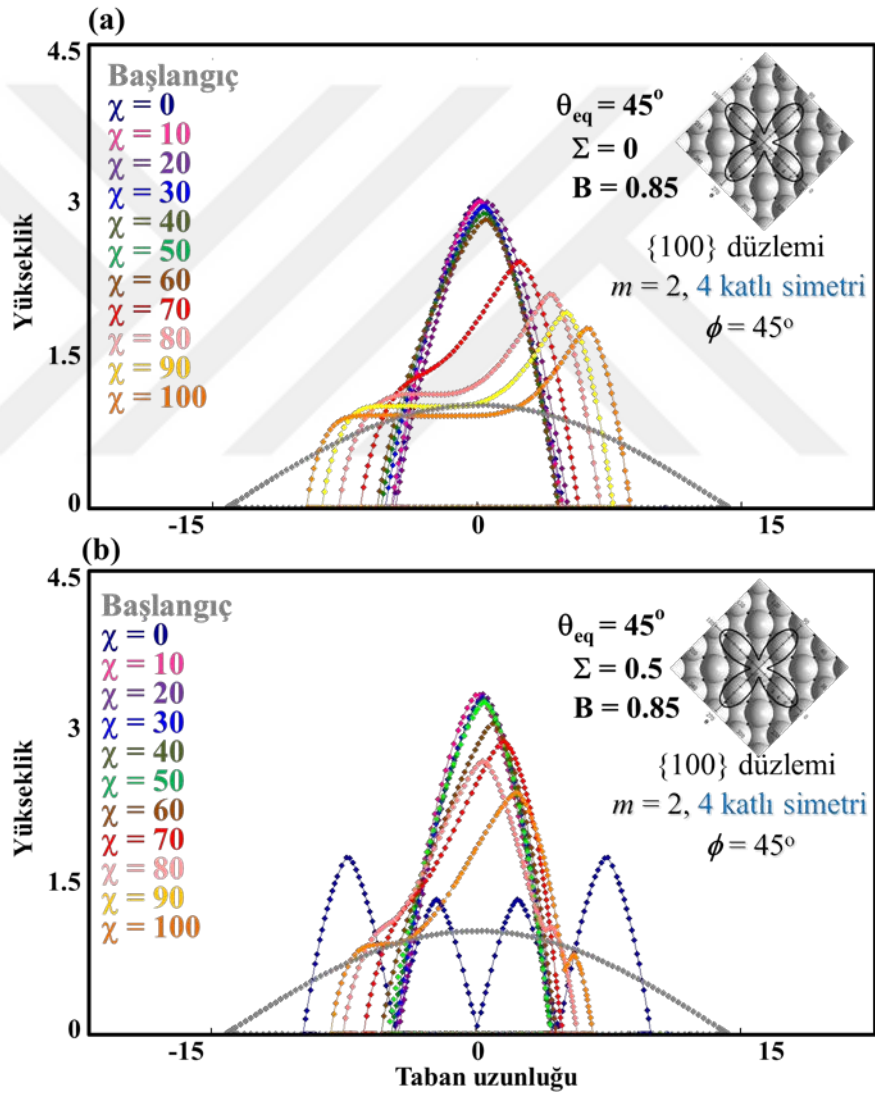


Şekil 4.64: {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).

Şekil 4.66'da {111} yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde gerinim olmayan (a) ve gerinim kuvvetleri uygulanan (b) durumlar verilmiştir. Gerinim olmayan durumda, elektrik alan $\chi=80$ değerine kadar, elektrik alan şiddeti arttıkça KN yüksekliklerinin arttığı görülmektedir. Sisteme gerinim uygulandığında,

elektrik alan şiddeti arttıkça yükseklik artışı elektrik alan $\chi=70$ değerine kadar, devam etmektedir. Bu değerden sonra KN'ler fragmente olmaktadır.

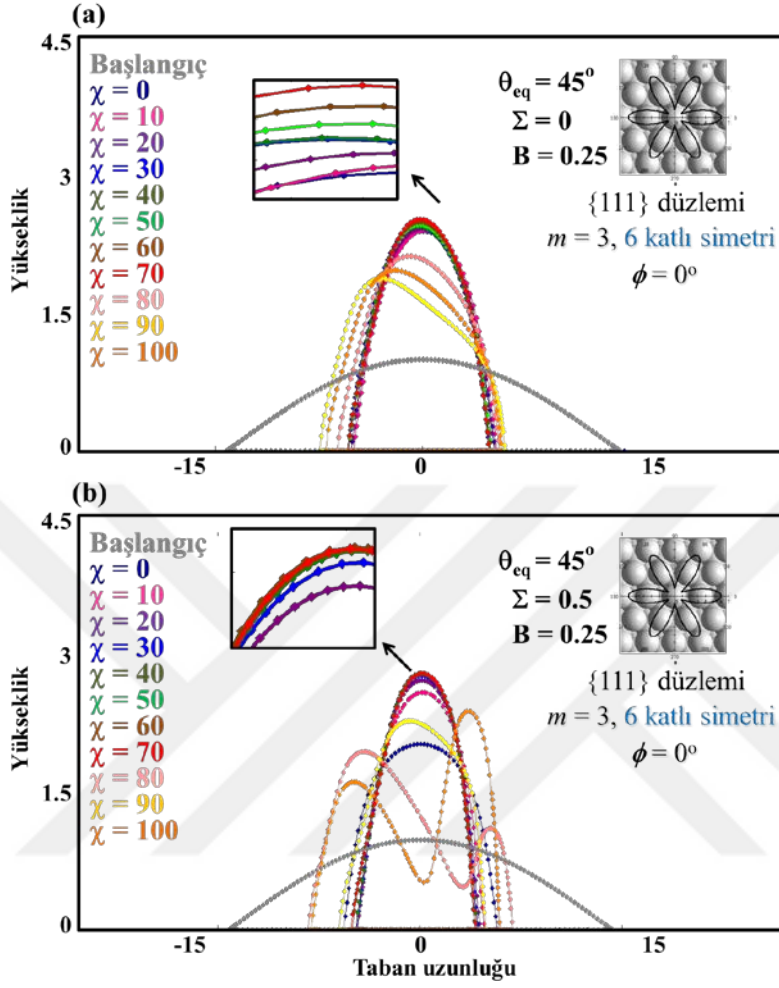
Şekil 4.67'de $\{111\}$ yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde gerinim olmayan (a) ve gerinim kuvvetleri uygulanan (b) durumlar verilmiştir. Gerinim olmayan durumda, elektrik alan şiddeti arttıkça KN yüksekliklerinin arttığı görülmektedir. Gerinim altında ise düşük elektrik alan şiddetinde fragmentasyon gözlenirken elektrik alan şiddetinin artması ile birlikte fragmentasyon önlenmekte aynı zamanda oluşan KN'lerin en-noy oranlarının arttığı gözlenmektedir.



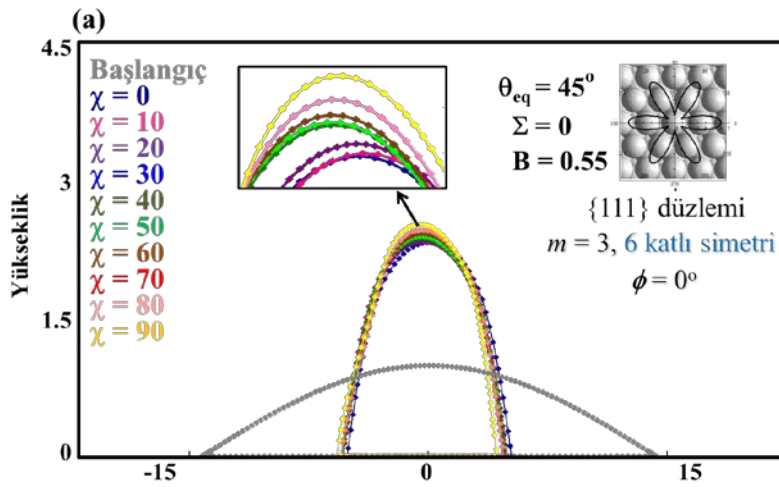
Şekil 4.65: $\{100\}$ yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).

Şekil 4.68'de $\{111\}$ yüzeyinde yüksek şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde gerinim olmayan (a) ve gerinim kuvvetleri uygulanan (b) durumlar verilmiştir.

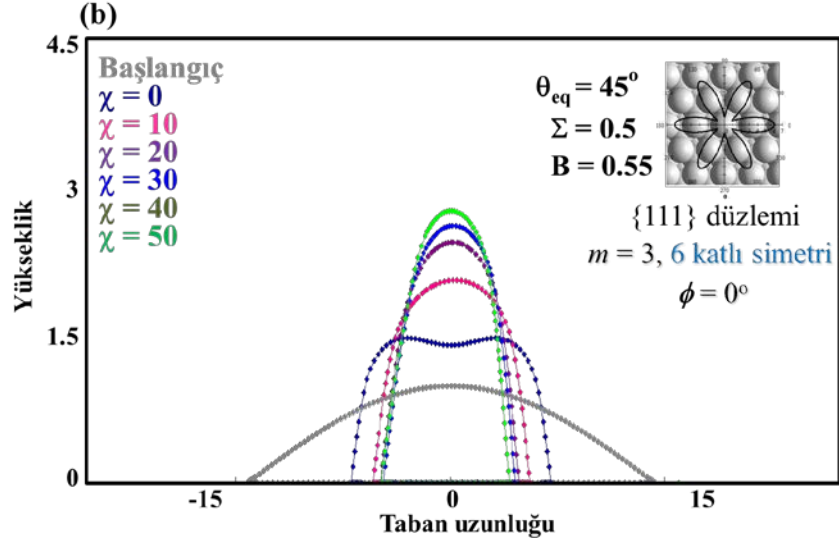
Gerinim olmayan durumda, elektrik alan şiddeti arttıkça KN yüksekliklerinin arttığı görülmektedir.



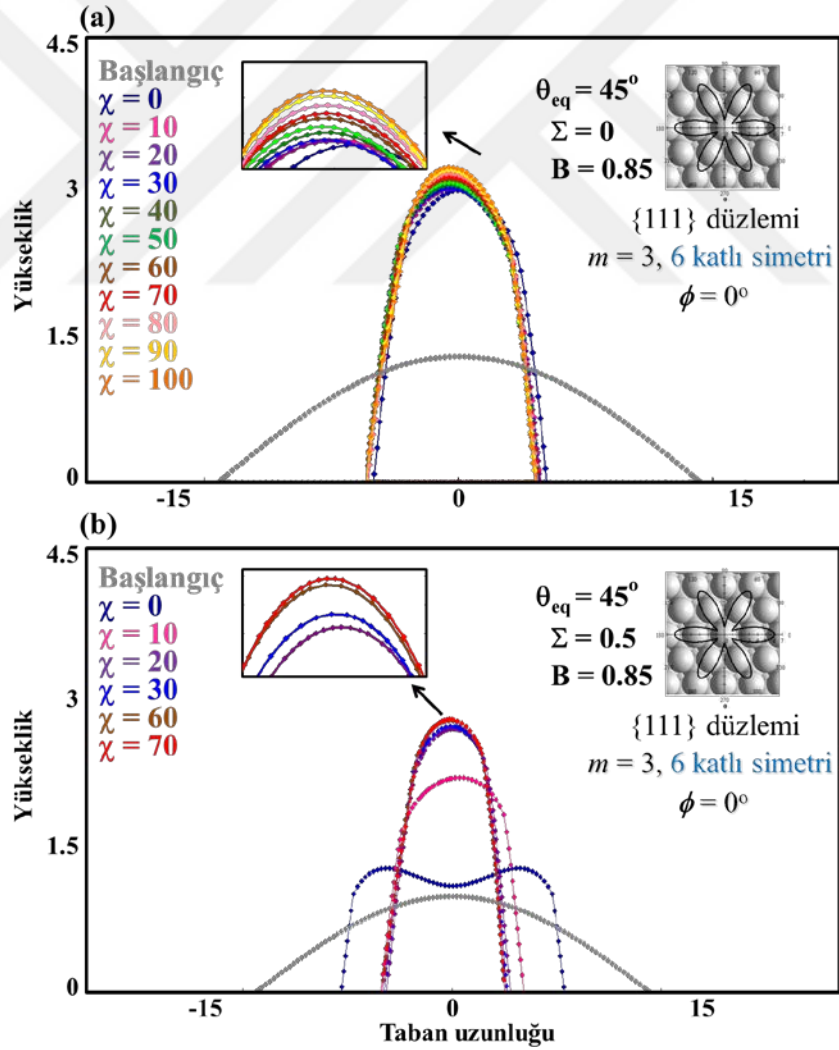
Şekil 4.66: {111} yüzeyinde düşük şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=45^\circ$).



Şekil 4.67: {111} yüzeyinde orta şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).



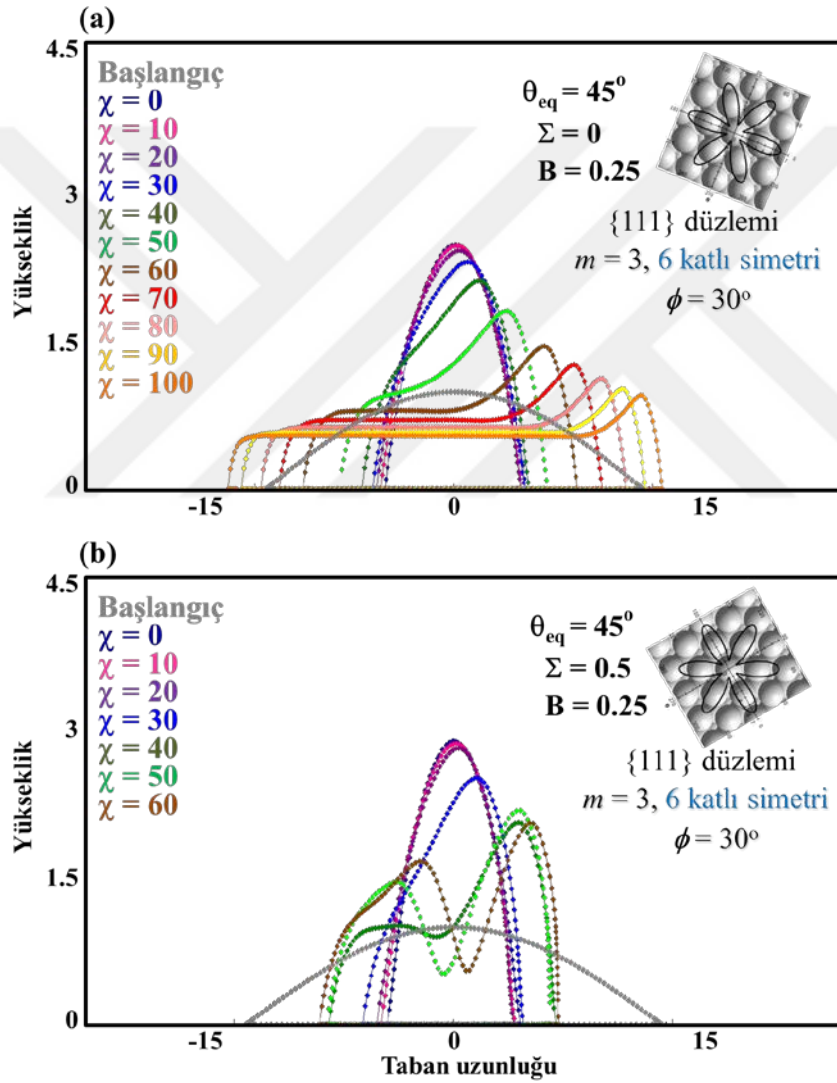
Şekil 4.67: {111} yüzeyinde orta şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$) (devamı).



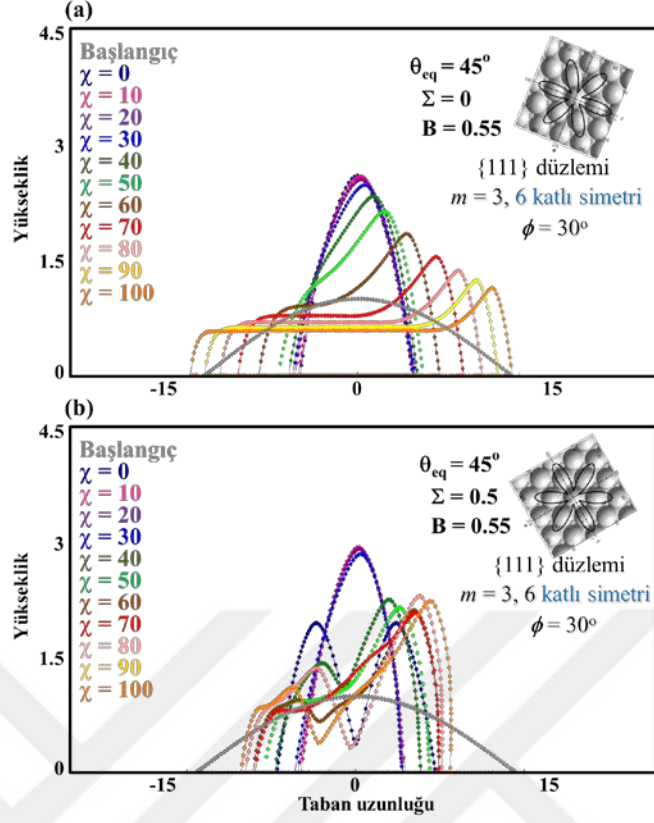
Şekil 4.68: {111} yüzeyinde düşük şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.69, Şekil 4.70 ve Şekil 4.71’de ise $\{111\}$ yüzeyi altlık ile 30° açı yapacak şekilde büyütülürse farklı şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemler gerinim olmayan ve gerinim kuvvetleri altında incelenmişlerdir.

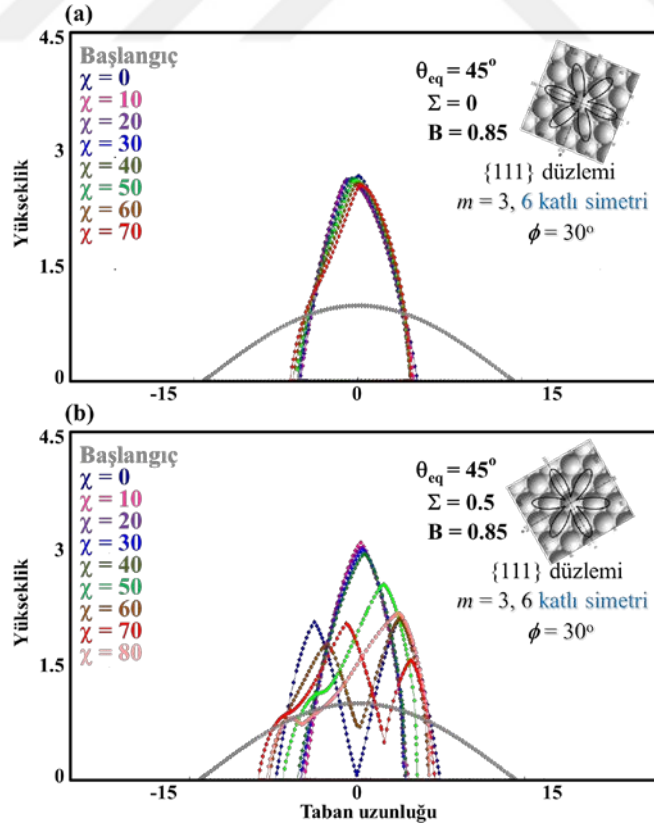
Gerinim olmayan durumda, düşük ve orta şiddetteki yüzey katılıpına sahip sistemlerde elektrik alan şiddeti arttıkça KN yüksekliklerinin azalarak sistemde film oluşumu gözlenmektedir. düşük ve orta şiddetteki yüzey katılıpına sahip sistemlerde yüksek yüzey katılıkları ise gerilimsiz sistemde asimetrik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



Şekil 4.69: $\{111\}$ yüzeyinde düşük şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.25$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).



Şekil 4.70: {111} yüzeyinde orta şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.55$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).

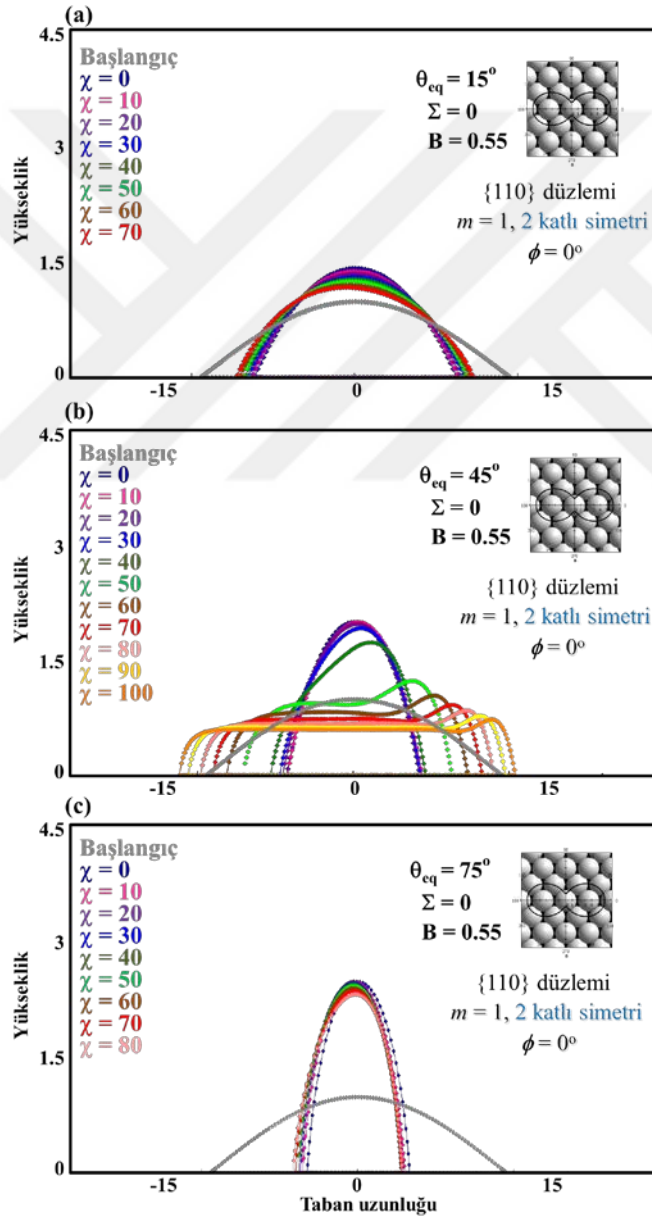


Şekil 4.71: {111} yüzeyinde yüksek şiddetdeki yüzey katılığına sahip sistemde ($B=0.85$) farklı gerinim kuvveti değerleri ile KN morfolojilerinin kontrolü ($\phi=30^\circ$).

Gerinim altında ise her üç durumda da artan elektrik alan şiddeti ile birlikte fragmentasyon gözlenmektedir. Düşük elektrik alan altında ise özellikle yüzey katılığının çok yüksek olduğu durumlarda (Şekil 4.71 b) yüksek tepe eğriliğine sahip simetrik kuantum noktalar elde edilebilmektedir.

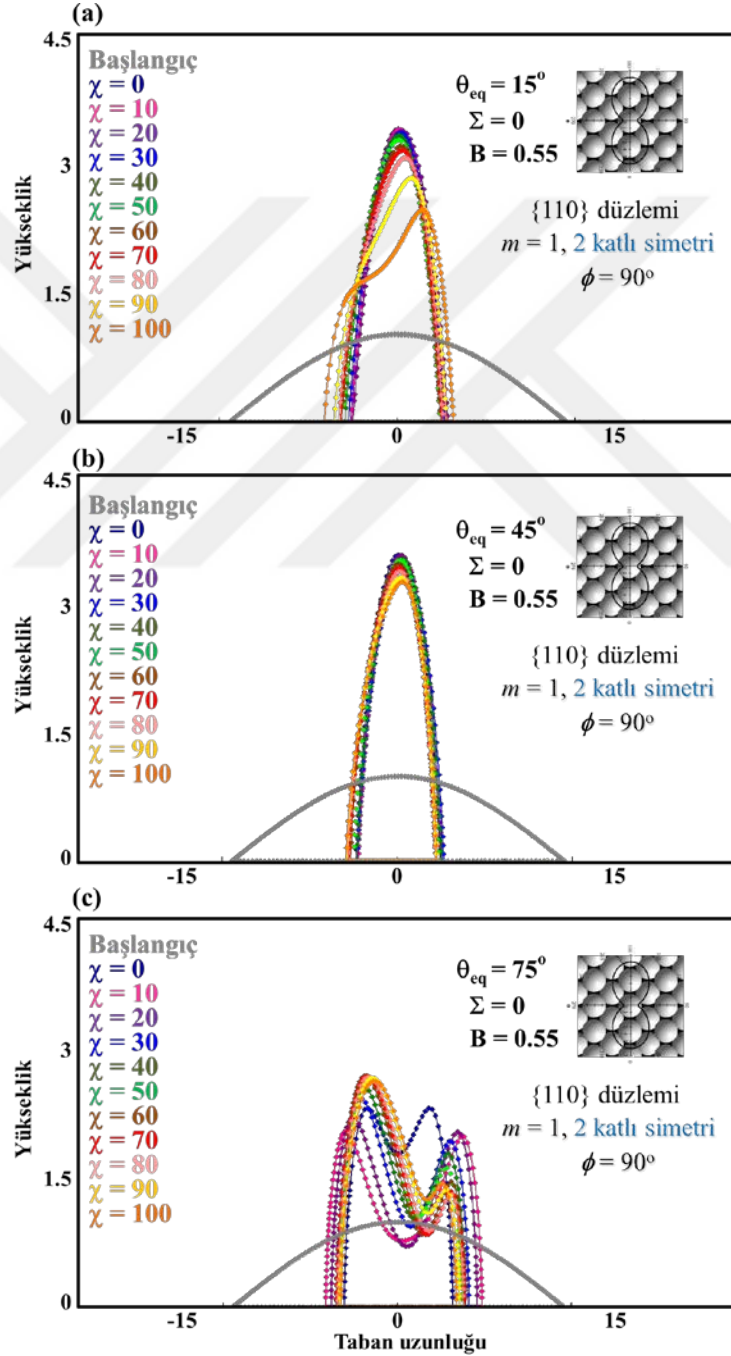
4.2.8 Yön-bağımlı sistemlerde elektrik alan ve denge ıslatma açısının etkileri

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



Şekil 4.72: $\{110\}$ yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).

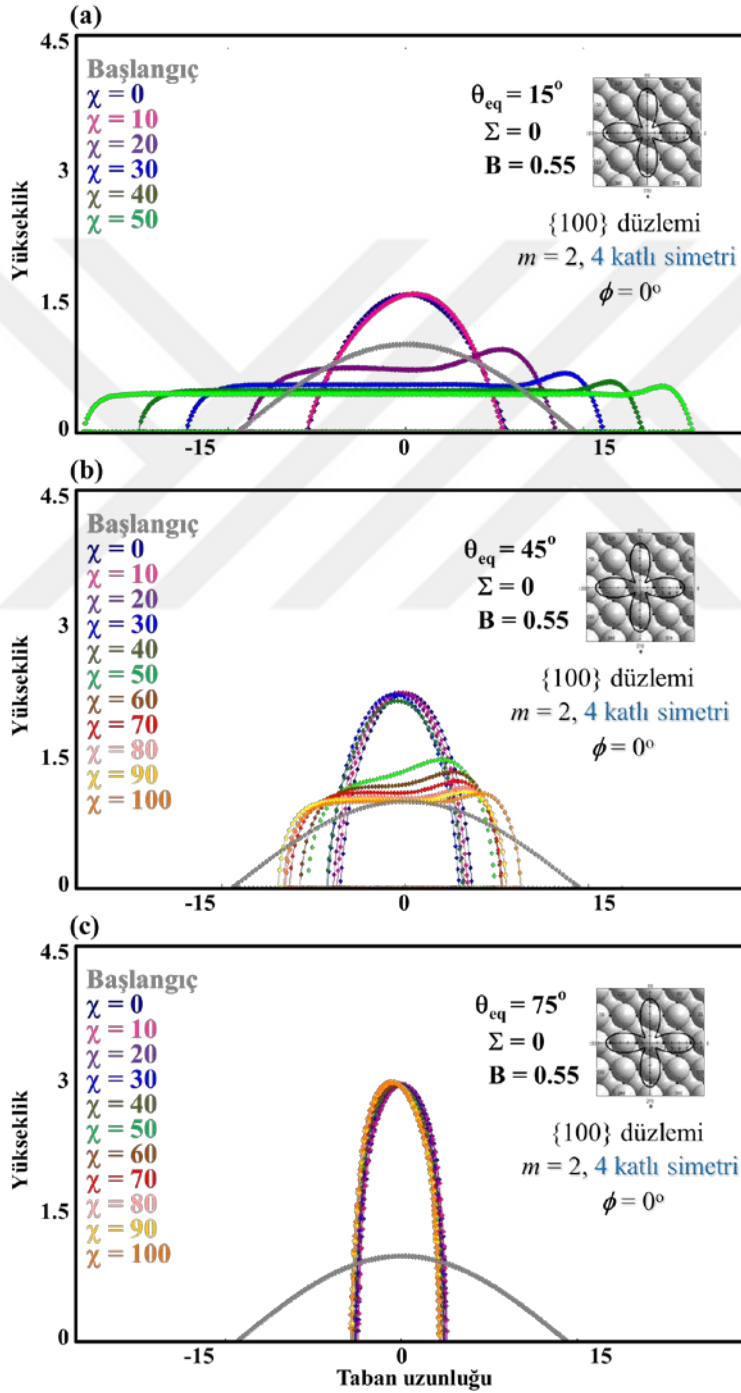
Şekil 4.72’de, $\{110\}$ düzlemi ($B=0.55$), gerinimsiz ortamda, farklı denge ıslatma açı değerlerine sahip sistemlerde elektrik alan kuvvetlerinin KN morfolojilerini nasıl kontrol ettiğini göstermektedir. $\theta_{eq}=15^\circ$ durumunda (a), boyları uygulanan elektrik alan şiddetinin artmasıyla azalan, KN’ler görülmekteyken, $\theta_{eq}=45^\circ$ olan (b)’de ise artan elektrik alan ile, KN’den filme geçiş yapan morfolojiler elde edilmiştir. $\theta_{eq}=75^\circ$ olan (c)’de ise, $\theta_{eq}=15^\circ$ ’deki gibi yükseklikleri azalan ama görece uzun ve daha yüksek en-boy oranlarına sahip KN oluşumu dikkat çekmektedir.



Şekil 4.73: $\{110\}$ yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=90^\circ$).

Şekil 4.73’de $\theta_{eq}=15^\circ$ (a)’da elektrik alan şiddetinin yüksek olduğu değerlerde elde edilen sağa eğimli KN’ler dikkat çekmektedir. $\theta_{eq}=45^\circ$ (b), $\theta_{eq}=15^\circ$ (a) ile kıyaslandığında, sağa eğimli KN’lerin ortadan kalktığı görülmektedir. $\theta_{eq}=75^\circ$ (c)’de ise elektrik alan artışıyla KN’lerin fragmente oldukları görülmüştür.

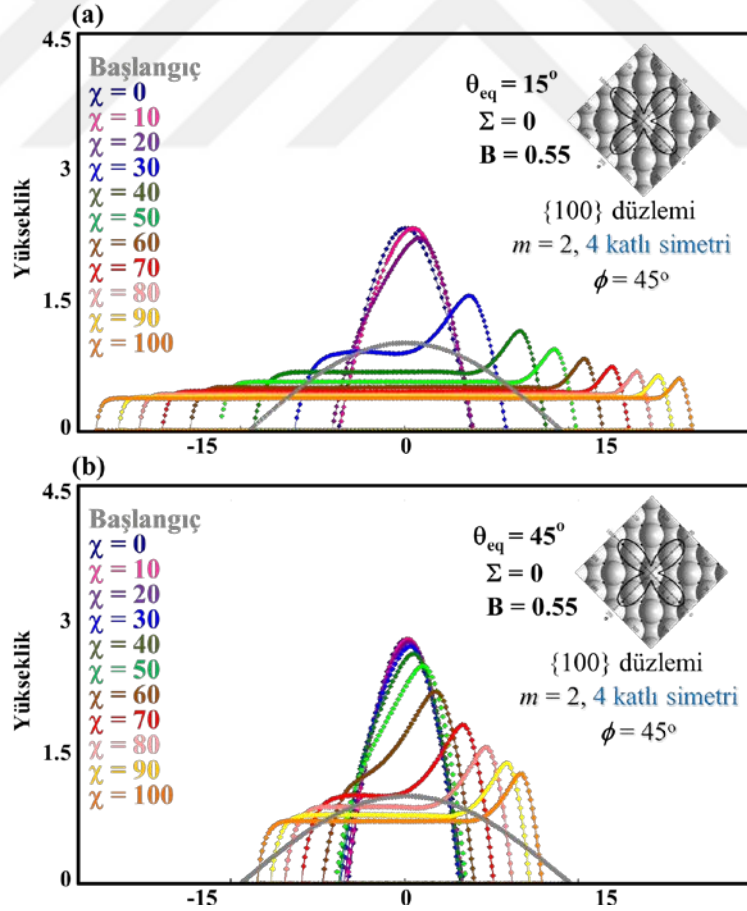
Farklı kristal yönelime $\{100\}$ ve $\{111\}$ sahip sistemlerdeki etkilerde sistematik bir biçimde incelenerek sırası ile Şekil 4.74 ve Şekil 4.75’te sonuçlar verilmiştir.



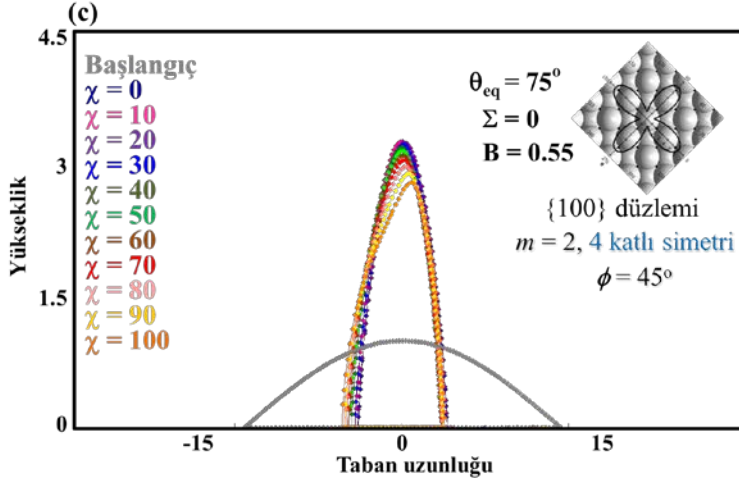
Şekil 4.74: $\{100\}$ yüzeyinde orta şiddeteki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).

Şekil 4.74' de kristal eğim açısı $\phi=0^\circ$ olduğu sistemlerde elektrik alan şiddeti artışı ile morfolojilerde meydana gelen değişimler incelendiğinde KNn'lerden filme geçiş ile oluşan filmlerin kalınlıklarının ve uzunluklarının kontrol edilebildiği görülmektedir.

Şekil 4.75'de kristal eğim açısı $\phi=45^\circ$ olduğu sistemde ise elektrik alanın KN morfolojilerine etkilerini gösteren grafikler verilmiştir. Denge ıslatma açısının $\theta_{eq}=15^\circ$ (a) durumunda elektrik alan şiddetinin artmasıyla KN'lerden film oluşumuna doğru geçiş görülmektedir. Ancak bu geçiş için uygulanması gereken kritik elektrik alan şiddeti değeri (a)'da $\chi=30$ iken, (b)'de $\chi=70$ olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu durum bize elektrik alan altında KN'lerden filme geçiş için kritik elektrik alan şiddeti değerinin denge ıslatma açısıyla belirlendiğini göstermektedir. Denge ıslatma açısının yüksek olduğu durumlarda ise (c), film oluşumu görülmemiş, elektrik alanın artışıyla yükseklikleri daha az olan hafif sağa eğimli asimetrik KN'lerin elde edildiği görülmektedir.

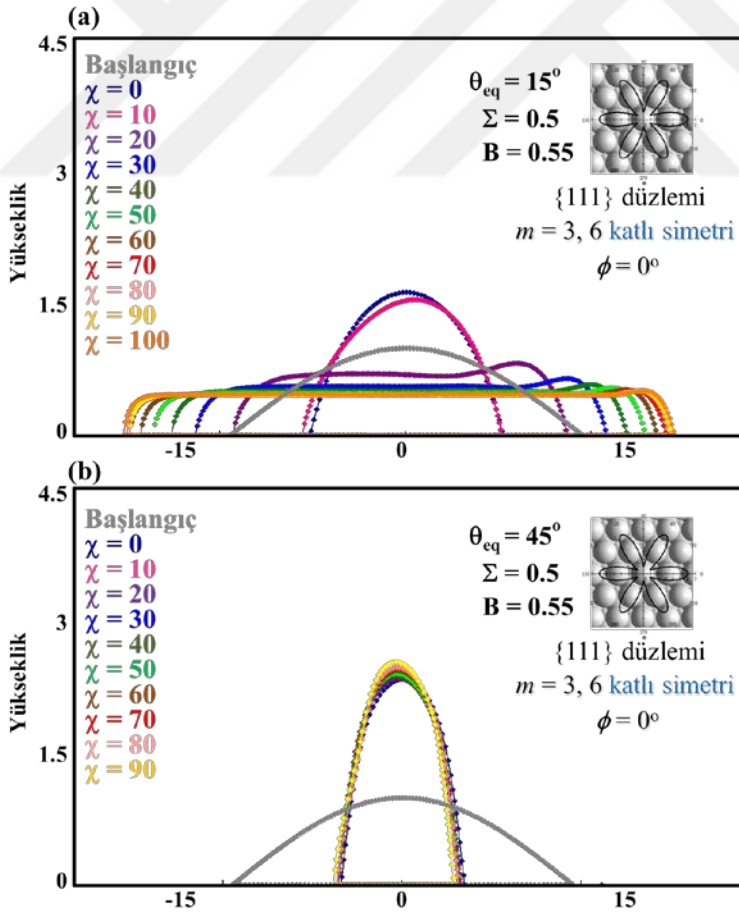


Şekil 4.75: {100} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=45^\circ$).

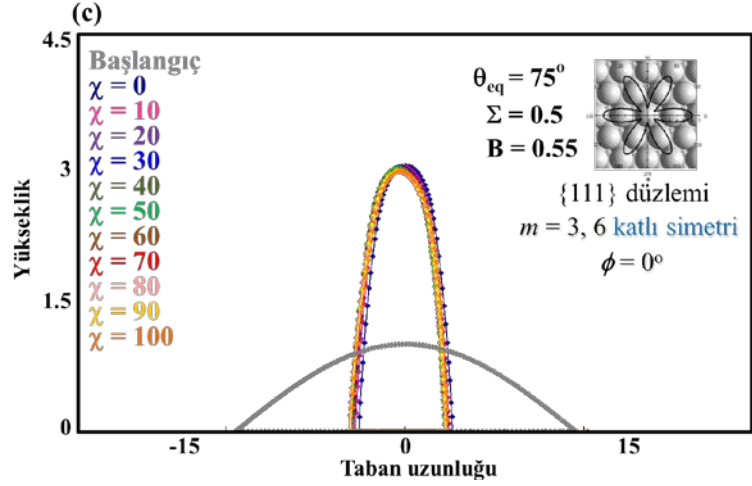


Şekil 4.75: {100} yüzeyinde orta şiddetdeki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=45^\circ$).

{111} yönünde, orta şiddette yüzey katılığına sahip sistemde, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ ve $\phi=30^\circ$ olduğu iki sistem için farklı denge ıslatma açısına sahip sistemlerde yapılan deneyler Şekil 4.76 ve Şekil 4.77’de verilmiştir.

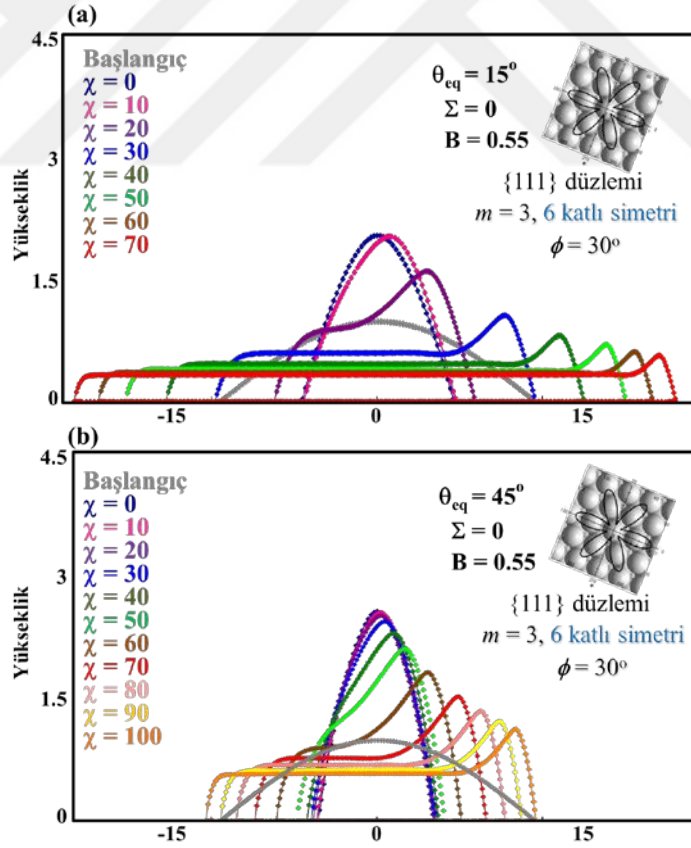


Şekil 4.76: {111} yüzeyinde orta şiddetdeki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$).

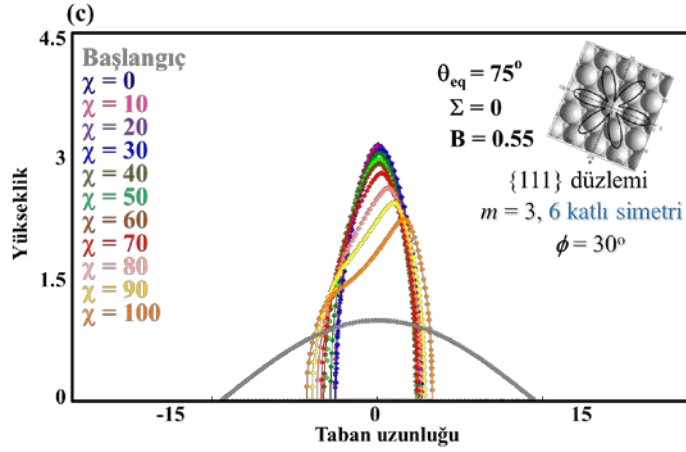


Şekil 4.76: {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=0^\circ$) (devamı).

Şekil 4.76'da {111} yüzeyinde kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu durumda, farklı denge ıslatma açı değerlerinde elektrik alanın KN morfolojileri üzerindeki etkileri verilmektedir.



Şekil 4.2: {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=30^\circ$).



Şekil 4.77: {111} yüzeyinde orta şiddetteki yüzey katılığında ($B=0.55$) farklı denge ıslatma açıları için değişen KN morfolojileri ($\phi=30^\circ$) (devamı).

Şekil 4.77’de {111} yüzeyinde kristal eğim açısının $\phi=30^\circ$ olduğu durumda (a) ve (b)’de, sisteme uygulanan elektrik alan şiddetinin artmasıyla, KN’lerden filme geçiş olmaktadır. Düşük denge ıslatma açısına sahip (a)’da oluşan filmlerin (b)’dekilere oranla daha uzun ve kalınlıklarının daha az olduğu görülmektedir. KN’lerden filme geçiş için gereken kritik elektrik alanı şiddeti değeri, (a)’da $\chi=20$ iken (b)’de bu değer $\chi=60$ ’a çıkmaktadır. Bu durum şekil 4.76’da da gördüğümüz gibi elektrik alan altında KN’lerden filme geçiş için kritik elektrik alan şiddeti değerinin denge ıslatma açısıyla belirlendiğini göstermektedir.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez kapsamında kuantum nokta ve dizilerinin heteroepitaksiyel ortamlarda oluşum dinamikleri, evrimi ve kararlılığı gerinim ve elektrik alanları altında eş zamanlı olarak ilk kez modellenerek incelenmiştir. Bu tezde, Ogurtanı vd. (2010a; 2010b; 2014) tarafından geliştirilen KN morfolojik evrimi ve ıslatma katmanının oluşumunu yöneten diferansiyel denklemler temel olarak alınmıştır. Bu diferansiyel denklemler, yüzey sürüklenme difüzyonu ve büyümesinin hem gerinim hem de elektrik alanları altındaki formülasyonu içererek nanoyapıların morfolojik gelişimlerinin modellenmesi için, Ogurtanı ve Oren (2001; 2005) tarafından geliştirilen, içlerinde üçlü kavşakları da bulunduran yüzey ve arayüzeyler için, geri dönüşümsüz (irreversible) termodinamiğin mikroayrık formülasyonu temel alınarak geliştirilmiştir. Gerçekçi sınır koşulları ile birlikte, bu diferansiyel denklemler sayısal çözümlenme yöntemleri ile Mathcad ortamında iki boyutlu sistemler için çözülmüş, algoritmalar C++ kullanılarak program haline getirilmiştir. Yapılan simülasyonlar sonucunda kristal yapı/yerleşim, difüzyon ve yüzey katılığı şiddeti ve anizotropisi, yüzey enerjileri gibi malzeme özellikleri ile uygulanan dışsal elektrik ve gerinim alanlarının etkileri eş zamanlı olarak ilk kez incelenmiştir.

Kuantum noktaların boyutları 50 nm'nin altında olup, bu boyutlarda karşılaştığımız kuantum sınırlama etkisi sebebiyle, enerji seviyeleri iyi tanımlanmış bant aralıklarına sahiptir. Bu enerji seviyeleri ise, KN'lerin boyut, şekil belirli bir bölgedeki dizilim/yoğunluk ve malzeme kompozisyonu ayarlanarak kontrol edilebilmektedir. Bunlarla birlikte, dislokasyon gibi kusurları içermeyen ve birbirlerine ince bir ıslatma katmanı ile bağlı KN'lerin üretimini sağlayan Stranski-Krastanov ince film büyümesi metodu, KN'lerin fotovoltailer tek elektron transistörler, lazerler ve güneş panelleri gibi elektronik, fotonik ve manyetik birçok yeni cihazın üretilmesi/geliştirilmesi için kullanılabilmesinin önünü açmıştır. Bu tez çalışması sonucunda elde edilen bilgilerin, istenilen kullanım alanları için gerekli optimum özelliklere sahip kuantum nokta nanoyapıların tasarımına yardımcı olması amaçlanmıştır.

Deneysel çalışmalar, oluşan KN'lerin şekil ve büyüklüklerinde; başlangıç film kalınlığı, kristal yapı/yönelim, difüzyon, yüzey katılığındaki anizotropi, ıslatma katmanının özellikleri, denge ıslatma açısı, sistemde bulunan uyumsuzluk gerinimleri ve uygulanan elektrik alanın yönü/şiddeti gibi faktörlerin önemli etkilerinin olduğunu göstermektedir. Literatürdeki bu bilgilerden de yararlanılarak KN'lerin boyutlarının kontrol edilebilmesi için bu tez çalışmasında, kristal yapı/yönelim, difüzyon, yüzey katılığındaki anizotropi, denge ıslatma açısı, sistemde bulunan uyumsuzluk gerinimleri ve uygulanan elektrik alanın etkileri araştırılmıştır. Deneyler, yön bağımsız ve yön bağımlı sistemlerde yapılmış ve elde edilen bulgular aşağıda özetlenmiştir.

Yön bağımsız izotropik sistemlerde, oluşan KN'lerin en boy oranları, sisteme uygulanan gerinim kuvvetleriyle kontrol edilebilmektedir. Gerinim kuvveti belirli bir değere kadar en boy oranlarını arttırmakta olup, belirli bir kritik değerden sonra ise KN'ler bölünerek (fragmente olarak) en boy oranlarını düşürmektedir. KN'lerin fragmentasyonu, farklı denge açılarına sahip sistemlerde araştırılmış ve KN'lerin fragmente oldukları kritik gerinim değerlerinin denge ıslatma açılarıyla değiştiği anlaşılmıştır. Bu bilgi aynı zamanda bize en boy oranlarında denge ıslatma açılarının da etkili olduğunu göstermektedir. Düşük denge açılarından yüksek denge açılarına çıkıldığında, en boy oranları artmaktadır. KN'lerin boyutsal özelliklerini kontrol etmek, aynı zamanda enerji bant aralıklarını kontrol etmek anlamına geldiğinden, bu bilgiler KN tabanlı cihaz tasarımları için çok önemlidir.

En boy oranlarının değişimine ek olarak, deneyler sonucu elde edilen farklı KN şekillerinde, tepe eğriliklerinin de değiştiği görülmüştür. Yapılan analizler, gerinim kuvvetlerinin ve denge ıslatma açılarının KN tepe eğriliklerini kontrol ettiğini göstermektedir. Fragmente olunan kritik gerinim değerine kadar, uygulanan gerinim kuvvetleri en boy oranlarıyla birlikte tepe eğriliklerini de arttırmıştır. Denge ıslatma açılarının düşük değerlerinden yüksek değerlere çıkıldıkça en boy oranlarıyla aynı şekilde tepe eğrilikleri de artmıştır. Nano yapıya sahip malzemelerde yüzey eğrilikleri, enerji seviyelerinde değişikliklere sebep olarak elektronik ve manyetik özellikleri etkilemektedir. Bu sebeple oluşan KN'lerin tepe eğriliklerinin kontrol edilebilmesi, KN'lerin elektronik ve manyetik özelliklerini kontrol edeceğinden önem taşımaktadır.

Denge ıslatma açıları ve gerinim kuvveti KN'lerin en boy oranlarını ve aynı zamanda KN fragmentasyonunu kontrol ederek birim alandaki adacık sayısını belirlemektedir. Bu deneylerin sonuçları, en boy oranlarını ve birim alandaki adacık sayılarını gösteren denge ıslatma açısı-gerinim diyagramları haline getirilerek, istenen en boy oranlarına veya istenen adacık sayılarına sahip sistemlerin elde edilmesi için gerekli koşulları ve filmlerin parçalanmaması için gereken sınırları da göstermektedir. En boy oranları, birim alandaki adacık sayıları ve film kırılmasını önleyen kritik değerlerin bilinmesi, yeni cihaz tasarımları ve KN'lerin daha kontrollü bir şekilde üretilmesi açısından önemlidir.

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

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

Gerinim kuvvetinin elektrik alan ile birlikte uygulandığı durumlarda, denge ıslatma açısına bağlı olarak farklı etkiler olduğu da gözlenmiştir. Düşük ıslatma denge ıslatma açısına sahip sistemlerde yapılan deneyler, elektrik alanın olmadığı durumda fragmente olan sistemlerin elektrik alan uygulanmasıyla önce bir tarafı tepeli bir tarafı düz film benzeri yapılara dönüştüğü, elektrik alan şiddetinin artırılmasıyla ise tamamen ince filme dönüştüğü görülmüştür. Oluşan filmler incelendiğinde ise sabit bir elektrik alan altında, film uzunluklarının gerinim kuvveti ile kontrol edilebileceği görülmüştür. Daha yüksek denge açılarında çıkıldığında, gerinim etkisiyle fragmentasyon gözlenmekte ve en boy oranları birbirinden farklı KN'ler elde edilebilmektedir. Farklı en boy oranlarına sahip KN'ler farklı enerji bant aralıklarına sahip olacağından, güneş panellerinde verim artışı için kullanılabilir.

Bu tez kapsamında ayrıca daha gerçekçi bir sistem olan anizotropik kristal yapıların davranışı, kristal yapı/yönelim, difüzyon, yüzey katılığındaki anizotropi, denge ıslatma açısı, sistemde bulunan uyumsuzluk gerinimleri ve uygulanan elektrik alanın etkileri açısından araştırılmıştır. Kristal yapı olarak, (110), (100) ve (111) yönlerindeki yüzey merkezli kübik yapılar incelenmiştir. Bu yönlerin, depozit edildiği yüzeyler ile yaptıkları açılar (kristal eğim açıları) değişimi durumunda ne tür değişiklikler oluştuğu araştırılmıştır. Yapılan deneyler sonucunda, yüzey katılığı etkilerinin, sistemdeki kristal eğim açısına bağlı olduğu görülmüştür. Bu, bize kristal eğim açısının KN morfoloji kontrolü için çok önemli bir parametre olduğunu göstermektedir. KN'lerin, kristal düzlemine (sistemdeki simetri derecesine) ve yönelimine (kristal eğim açısı) bağlı olarak çok zengin morfolojik yapılar oluşturabildiği görülmüştür, özellikle dönme açısı simetri derecesinin yarısına denk geldiğinde yönelimli olmayan simetrik KN'ler elde edilmektedir ve en yüksek en boy oranlarına ve tepe eğriliklerine sahip KN'ler de bu değerlerde oluşmaktadır. Bu değerlerde, yüzey katılığının artırılması ise KN en boy oranlarını ve tepe eğriliklerini ayrıca arttırmaktadır. Kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu durumlarda ise KN en boy oranları ve tepe eğrilikleri her üç kristalografik yön için de yüzey katılığının artışıyla azalmıştır. Bu da bize, KN en boy oranlarının ve tepe eğriliklerinin seçilen malzemenin anizotropi şiddetine bağlı olarak, malzeme biriktimesi sırasında ayarlanabilecek kristal eğim açısı ile kontrol edilebilirliğini göstermektedir.

Yüzey katılığı ve kristal eğim açılarının etkilerinin araştırıldığı sistemde gerinim kuvvetlerinin de etkileri incelenmiş ve (110), (100) ve (111) yönleri için gerinim-yüzey katılığı diyagramları farklı kristal eğim açı değerleri için oluşturulmuştur. Bu diyagramlarda hem kristal eğim açısı sebebiyle sistemde oluşan farklı etkiler, hem de yüzey katılığı ve gerinim kuvvetlerinin etkisiyle oluşabilecek farklı tipte KN morfolojileri gözlenmiştir. Örneğin, (110) yüzeyinde, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu, yüzey katılığının maksimum ($B=0.98$) ve gerinim kuvvetlerinin $\Sigma=0.1$ değerinde, lens tipi KN'ler oluşurken, $\phi=90^\circ$ olduğu, ($B=0.98$) ve gerinim kuvvetlerinin $\Sigma=0.1$ değerinde ise çan tipinde (en boy oranı ve tepe eğriliği görece yüksek) KN'ler elde edilmiştir. Aynı şekilde (100) yüzeyinde, $\phi=0^\circ$ olduğu, yüzey katılığının maksimum ($B=0.98$) ve gerinim kuvvetlerinin $\Sigma=0.1$ değerinde, fasetli yüzeylere sahip tepe eğriliği küçük olan kubbe tipi, $\phi=45^\circ$ olduğu, ($B=0.98$) ve gerinim kuvvetlerinin $\Sigma=0.1$ değerinde ise piramit şeklinde (en boy oranı ve tepe eğriliği görece yüksek) KN'ler elde edilmiştir. Gerinim kuvvetleri, yüzey katılığı ve kristal eğim açısının seçimi ile istenen özelliklere sahip çok farklı şekillerde KN'lerin elde edilebileceği gösterilmiştir. Bu bilgilerin, literatürde rapor edilen deneylerde karşılan çok farklı KN yapılarının oluşum nedenlerinin anlaşılmasına yardımcı olması beklenmektedir.

Yapılan deneyler, KN'lerin en boy oranlarının ve tepe eğriliklerinin yüzey katılığı, kristal eğim açısı, gerinim kuvvetlerine ek olarak aynı zamanda denge ıslatma açısıyla da kontrol edilebildiğini de göstermiştir. En yüksek en boy oranlarına sahip KN'ler, her üç kristal düzlem için de denge ıslatma açısının $\theta_{eq}=75^\circ$ olduğu sistemdir. Denge ıslatma açısı arttıkça daha yüksek en boy oranlarına sahip KN'lerin elde edilmesi, izotropik sistemde de karşımıza çıkan etkilerden biriydi. Tepe eğriliklerinde ise denge açılarına göre bazı farklılıklar bulunmuştur. (110) yüzeyi için en yüksek tepe eğriliklerinin elde edildiği denge ıslatma açı değeri, $\theta_{eq}=30^\circ$ iken, (100) yüzeyi için, $\theta_{eq}=15^\circ$, (111) yüzeyi için, $\theta_{eq}=75^\circ$ 'dir. Tepe eğriliklerinin kontrolü açısından denge açılarının etkileri kristalografik düzlem ve yönlere bağlıdır ve farklı kristal düzlemlere sahip sistemler için seçilecek denge ıslatma açı değerleriyle, istenen özelliklere sahip KN'lerin elde edilmesi mümkündür.

Anizotropik özellikler taşıyan farklı kristal düzlemler elektrik alan, kristal eğim açıları, yüzey katılığı şiddetleri, denge açıları ve farklı gerinim kuvvetleri altında incelenmiştir. Kristal eğim açılarıyla farklı yönelimlerde elde edilen KN'lerin

elektrik alan altında deęişimleri, bu yönelimlerin belirli deęerlere kadar arttırılabileceğini göstermiştir. Kristal düzleme ve denge açılarına baęlı olmakla birlikte, bu yönelim belirli bir deęerden sonra KN'leri film oluşumuna götürmüştür.

Yönelimli olmayan KN'lerde ise kristal eğim açısının etkisinin anlaşılması için yapılan deneylerde, üç kristal düzlem için de deneyler öncelikle kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu ve simetri derecelerinin yarı deęerlerinde araştırılmıştır, bu kristal eğim açısı deęerinin seçilmesinin sebebi en yüksek en boy oranlarına sahip KN'lerin bu durumda elde ediliyor olmasıdır. Düşük yüzey katılığı deęerlerine sahip sistemde, (110) yüzeyinde, $\phi=0^\circ$ 'da, elektrik alan etkisiyle yükseklikler azalmış ve film oluşumu gözlemlenmiştir. Kristal eğim açısının $\phi=90^\circ$ olduğu sistemde ise yükseklikler azalmış fakat film oluşumu gözlenmemiştir. Ara fazda, yönelimli KN'ler elde edilmiştir. (100) yüzeyinde $\phi=0^\circ$ 'da elektrik alan uygulanmasıyla KN yükseklikleri azalırken, kalın ve kısa filmler oluşmuştur (ara faz). $\phi=45^\circ$ 'de ise elektrik alan artışıyla KN yükseklikleri azalmış ve uzun ince filmler elde edilmiştir. (111) yüzeyinde, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ deęerinde, elektrik alan uygulamasıyla yükseklikler arttırılmıştır. $\phi=30^\circ$ 'da ise, yükseklikler elektrik alan ile azalmakta ve film oluşmaktadır. Deney sonuçlarından elde edilen bu bilgiler, KN'lerin morfolojilerinin kontrolünde elektrik alan kullanılabileceğini göstermektedir.

Yüzey katılığı etkisinin araştırılması için yapılan deneyler, 110 düzleminde, $\phi=90^\circ$ 'de düşük ve orta şiddette yüzey katılığı deęerlerinde artan elektrik alan şiddeti ile tek KN'lerin, yüksek deęerlerinde ise ikili KN sistemlerinin, kristal eğim açısının $\phi=0^\circ$ olduğu durumda ise artan elektrik alan şiddeti ile yükseklikleri azalan KN'ler ve filmler elde edilebileceğini göstermiştir. (100) yüzeyinde $\phi=45^\circ$ 'de, artan elektrik alan şiddeti ile yükseklikleri azalan KN'ler ve ince filmler elde edilmiştir. $\phi=0^\circ$ 'de de artan elektrik alan şiddeti ile yükseklikleri azalan KN'ler ve ince filmler elde edilmiştir, $\phi=45^\circ$ 'den farklı olarak film kalınlıkları, uzunlukları ve şekilleri deęişmektedir. (111) yüzeyinde ise kristal eğim açısının $\phi=30^\circ$ 'de düşük ve orta şiddette yüzey katılığı deęerlerinde artan elektrik alan şiddeti ile yükseklikleri azalan ve filme geçiş yapan KN'ler, yüksek yüzey katılığı deęerlerinde ise yönelimleri deęişen farklı şekillerde KN'ler, $\phi=30^\circ$ 'de ise yükseklikleri uygulanan elektrik alan şiddeti ile artan KN'ler elde edilmiştir.

Kristalografik yönlere, kristal eğim açlarına ve yüzey katılığı değerlerine göre yönelimleri, yükseklikleri, tepe eğrilikleri değişen KN'ler ve uzunlukları kalınlıkları ve şekilsel özellikleri değişen filmler elde edilmesi mümkündür.

Elektrik alan ve gerinim kuvvetlerinin KN morfolojilerini kontrol edilebilirliği araştırılmıştır. (110) yüzeyinde, $\phi=0^\circ$ 'de ve orta şiddetteki gerinim kuvvetleriyle yapılan deneylerde, elektrik alan sisteme uygulandığında, yüksek şiddetteki elektrik alan değerlerinde sistemin kararlı olmadığı görülmüştür. Gerinim kuvvetleri KN'lerin fragmente olmasını sağlamıştır. Uygulanan elektrik alan ile, bir tarafı tepeli ve gerinimsiz durumlarda oluşan tepeli filmlere göre daha yüksek tepelere sahip sistemler oluşmuştur. Gerinim KN'lerin yüksekliklerini elektrik alan etkisi altında arttırmıştır. $\phi=90^\circ$ 'de ise, orta şiddetteki yüzey katılığına sahip sistemde, düşük elektrik alan değerlerinde fragmente olmuş KN'ler görülürken elektrik alan şiddetinin artışıyla, tek KN'ler elde edilmiştir. Bu durum, elektrik alan uygulanarak KN'lerin fragmentasyonunun engellenebileceğini göstermektedir.

Anizotropik sistemlerde denge ıslatma açısının etkilerini görmek için yapılan deneyler, elektrik alanın farklı denge ıslatma açılarındaki sistemlerde KN morfolojilerinin farklı şekillerde elde edilebilmesi için kullanılabileceğini göstermiştir. Genel olarak düşük ıslatma açılarında KN'lere uygulanan elektrik alan ile KN yükseklikleri azalmakta ve film elde edilmekte, Yüksek denge açlarına çıkıldığında ise, elektrik alan etkisi ile filme geçiş olup olmaması ya da farklı özelliklere sahip KN'lerin elde edilmesi kristal yönlere, kristal eğim açlarına ve yüzey katılığı şiddeti değerlerine bağlı olarak belirlenmektedir.

Sonuç olarak bu tez kapsamında kuantum nokta ve dizilerinin heteroepitaksiyel ortamlarda oluşum dinamikleri, evrimi ve kararlılığı eş zamanlı gerinim ve elektrik alanları altında modellenmiş ve simülasyonlar ile incelenmiştir. Yapılan simülasyonlar sonucunda kristal yapı/yerleşim, difüzyon ve yüzey katılığı şiddeti ve anizotropisi, yüzey enerjileri gibi malzeme özellikleri ile uygulanan dışsal elektrik ve gerinim alanlarının etkileri eş zamanlı olarak incelenmiştir. Malzeme özellikleri ve uygulanan dışsal kuvvetlerin etkileri altında KN morfolojilerinin kontrol edilebilirliği araştırılmıştır. Elde edinilen bilgilerin KN tabanlı cihaz tasarımları açısından önem taşımaktadır.

Bu tez kapsamında yapılan deneyler ortaya ince film sistemlerinin gerilim ve elektrik altında davranışı ve kuantum noktaların oluşum mekanizmaları hakkında bilgiler vermekle birlikte hangi noktalarda eksiklikler olduğu ve gelecekte ne tür arařtırmaların yapılması gerektiđi hakkında da fikirler vermiřtir. Gelecekte yapılacak alıřmalarda: 1. Sisteme byme etkisi (film bymesi devam ederken sistemin modellenmesi) dahil edilmelidir; 2. Bu alıřmada sistemin iki boyutlu olduđu varsayılmıřtır,  boyutlu sistemler iin kodlar geliřtirilmeli ve daha gereki analizler yapılmalıdır. 3.  boyutlu modellerden elde edilecek Őekil, boyut, isel gerilim dađılımlarını kullanarak KN'lerin optik ve elektronik zelliklerinin hesaplanması sađlanabilir. Bu konu ile ilgili yapılabilecek bir diđer alıřma da  boyutta morfolojileri belirlenen QD ve QD dizilerinin enerji seviyeleri, dalga fonksiyonları (wave functions) ve optik dipol matris elemanları (optical dipole matrix elements) gibi elektrik tařınım zelliklerinin hesaplanması ve QD dizilerindeki ıřık-uyarımlı tařıyıcıların (photo excited carriers) tařınım zelliklerinin modellenmesidir.

KAYNAKLAR

- Abdelbar, M.F., Fayed, T.A., Meaz, T.M., Ebeid, E.M.,** (2016). Photo-induced interaction of thioglycolic acid (TGA)-capped CdTe quantum dots with cyanine dyes, *Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 168, 1-11.
- Akyıldız, O., Oren, E.E., Ogurtani, T.O.,** (2012). Grain Boundary Grooving in bi-crystal Thin Films Induced by Surface Drift-Diffusion Driven by Capillary Forces and Applied Uniaxial-Tensile Stresses, *Philosophical Magazine*, 92, 804-829.
- Aroutiounian, V., Petrosyan, S., Khachatryan, A.,** (2000). Quantum dot solar cells, *Journal of Applied Physics*, 89, 4, 2268-2271.
- Barth, J.V., Giovanni, C., Kern, K.,** (2005). Engineering atomic and molecular nanostructures at surfaces, *Nature*, 437, 671-679.
- Bawendi, M.G., Steigerwald, M.L., Brus, L.E.,** (1990). The quantum-mechanics of larger semiconductor clusters ("Quantum dots"), *Annual Review of Physical Chemistry*, 41, 477-496.
- Berbezier, I., Ronda, A., Portavoce, A.,** (2002). SiGe Nanostructures: new insights into growth processes, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14, 8283-8331.
- Bimberg, D., Pohl, U.W.,** (2011). Quantum dots: promises and accomplishments, *Materials Today*, 14, 9.
- Brichkin, S.B., Razumov, V.F.,** (2016). Colloidal quantum dots: synthesis, properties and applications, *Russian Chemical Reviews*, 85, 1297.
- Bualey, D.V., Geyler, V.A., Margulis, V.A.,** (2000). Magnetic response for an ellipsoid of revolution in a magnetic field, *Physical Review B*, 62, 17.
- Bualey, D.V., Geyler, V.A., Margulis, V.A.,** (2004). Effect of the surface curvature on the magnetic moment and persistent currents in two-dimensional quantum rings and dots, *Physical Review B*, 69, 195313.
- Dai, C.A., Wu, Y.L, Lee, Y.H., Chang, C.J., Su, W.F.,** (2006). Fabrication of 2D ordered structure of self-assembled block copolymers containing gold nanoparticles, *Journal of Crystal Growth*, 288, 1, 128-136.
- Dingle, R., Henry, C. H.,** (1976). *US Patent*, 3, 982, 207.
- Dixit, G.K., Ranganathan M.,** (2017). Modeling elastic anisotropy in strained heteroepitaxy, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29, 375001.

- Du, L., Maroudas D.,** (2017). Current-induced surface roughness reduction in conducting thin films, *Applied Physics Letters*, 110, 103103.
- Du, L., Maroudas, D.,** (2016). Theory of multiple quantum dot formation in strained-layer heteroepitaxy, *Applied Physics Letters*, 109, 023103.
- Eaglashman, D., Cerullo, M.,** (1990). Dislocation-Free Stranski-Krastanov Growth of Ge on Si (100), *Physical Review Letters*, 64, 1943.
- Eaglesham, D. J., Cerullo, M.,** (1990). Dislocation-free Stranski-Krastanow Growth of Ge on Si (100), *Physical Review Letters*, 64, 16, 1943-1946.
- Floro, J.A., Chason, E., Freund, L.B., Twesten, R.D., Hwang, R.Q., Lucadamo, G.A.,** (1999). Evolution of coherent islands in Si_{1-x}Gex/Si (001), *Physical Review B*, 59, 3.
- Henini, M.,** (2006). Properties and applications of quantum dot heterostructures grown by molecular beam epitaxy, *Nanoscale Research Letters*, 1, 32–45.
- Heyn, C., Stemmann, A., Schramm, A., Welsch, H., Hansen, W., Nemcsics, A.,** (2007). Faceting during GaAs quantum dot self-assembly by droplet epitaxy, *Applied Physics Letters*, 90, 203105 (a).
- Heyn, C., Stemmann, A., Schramm, A., Welsch, H., Hansen, W., Nemcsics, A.,** (2007). Regimes of GaAs quantum dots self-assembly by droplet epitaxy, *Physical Review B*, 76, 075317 (b).
- Holmström, P., Thylén, L., Bratkovsky, A.,** (2010). Dielectric function of quantum dots in the strong confinement regime, *Journal of Applied Physics*, 107, 064307.
- Hull, R. Gray J.L., Kammler, M., Vandervelde, T., Kobayashi, T., Kumar, P., Pernell, T., Bean, J.C., Floro, J., Ross, F.M.,** (2003). Precision placement of heteroepitaxial semiconductor quantum dots, *Materials Science and Engineering B*, 101, 1, 1–8.
- Khennar, M.,** (2017). Height transitions, shape evolution, and coarsening of equilibrating quantum nanoislands, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 25, 8, 085003.
- Kienzle, O., Ernst, F., Rühle, M., Schmidt, O.G., Eberl, K.,** (1999). Germanium ‘quantum dots’ embedded in Silicon: Quantitative study of self-alignment and coarsening, *Applied Physics Letters*, 74, 2, 269-274.
- Kirstaedter, N., Schmidt, O.G., Ledentsov, N.N., Bimberg, D., Ustinov, V.M., Egorov, A.Y., Zhukov, A.E., Maximov, M.V., Kopev, P.S., Alferov, Z.I.,** (1996). Gain and differential gain of single layer InAs/GaAs quantum dot injection lasers, *Applied Physics Letters*, 69, 9, 1226-1228.
- Kongkanand, A., Tvrđy, K., Takechi, K., Kuno, M.K., Kamat, P.V.,** (2008). Quantum Dot Solar Cells. Tuning Photoresponse through Size and Shape Control of CdSe-TiO₂ Architecture, *Journal of the American Chemical Society*, 130, 4007–4015.
- Kroutvar, M., Zrenner, A., Ducommun, Y., Finley, J.J., Abstreiter, G.,** (2003). Wavelength selective data storage in InGaAs–GaAs quantum dots, *Physica Status Solidi (b)*, 238, 2, 345– 348.

- Kumar, A., Dasgupta, D., Dimitrakopoulos, C., Maroudas, D.,** (2016). Current-driven nanowire formation on surfaces of crystalline conducting substrates, *Applied Physics Letters*, 108, 193109 (b).
- Kumar, A., Dasgupta, D., Maroudas, D.,** (2016). Surface nanopattern formation due to current-induced homoepitaxial nanowire edge instability, *Applied Physics Letters*, 109, 113106 (a).
- Ledentsov, N., Grundmann, M., Kirstaedter, N.,** (1994). Luminescence and Structural Properties of (In,Ga)As/GaAs Quantum Dots, *Proceedings of the 22th International Conference on the Physics*, 1994.
- Leon, R., Lobo, C., Clark, A.,** (1998). Different paths to tunability in III-V quantum dots, *Journal of Applied Physics*, 84, 248.
- Leonard, D., Krishnamurthy, M., Reaves, C.M., Denbaars, S.P., Petroff, P.M.,** (1993). Direct Formation of Quantum-Sized Dots from Uniform Coherent Islands of InGaAs on GaAs Surfaces, *Applied Physics Letters*, 63, 23, 3203-3205.
- Leonard, D., Pond, K., Petroff, P.M.,** (1994). Critical Layer Thickness for Self-Assembled InAs Islands on GaAs, *Physical Review B*, 50, 16, 1-9.
- Liao, X., Xiao, J., Ni, Y., Li, C., Chen, X.,** (2017). Self-assembly of islands on spherical substrates by surface instability, *American Chemical Society Nano*, 11, 2611–2617.
- Ma´rquez, J., Geelhaar, L., Jacobia, K.,** (2001). Atomically resolved structure of InAs quantum dots, *Applied Physics Letters*, 78, 2309.
- Moreels, I., Lambert, K., Muynck, D.D., Vanhaecke, F., Poelman, D., Martins, J.C., Allan, G., Hens, Z.,** (2007). Composition and Size-Dependent Extinction Coefficient of Colloidal PbSe Quantum Dots, *Chemistry of Materials*, 19, 6101–6106.
- Murray, C.B., Noms, D.J., Bawendi, M.G.,** (1993). Synthesis and Characterization of Nearly Monodisperse CdE (E = S, Se, Te) Semiconductor Nanocrystallites, *Journal of American Chemical Society*, 115, 8706-8715.
- Ogurtani T.O., Celik A., Oren E.E.,** (2010a). Morphological Evolution in a Strained-Heteroepitaxial Solid Droplet on a Rigid Substrate: Dynamical Simulations, *Journal of Applied Physics*, 108, 6, 063527, 1-16.
- Ogurtani T.O., Celik A., Oren E.E.,** (2010b). Generic role of the anisotropic surface free energy on the morphological evolution in a strained-heteroepitaxial solid droplet on rigid substrates, *Journal of Applied Physics*, 108, 103516
- Ogurtani T.O., Celik A., Oren E.E.,** (2014). Stranski-Krastanow islanding initiated on the stochastic rough surfaces of the epitaxially strained thin films, *Journal of Applied Physics*, 115, 224307.
- Ogurtani, T.O.,** (2006). Mesoscopic Nonequilibrium Thermodynamics of Solid Surfaces ve Interfaces with Triple Junction Singularities Under the Capillary and Electromigration Forces in Anisotropic Three-Dimensional Space, *The Journal of Chemical Physics*, 124, 14, 144706, 1-12.

- Ogurtani, T.O., Oren E.E.,** (2000). A computer simulation of void dynamics under the action of electromigration and capillary forces in narrow thin interconnects, *Advanced Metallization Conference*, 16, 483-487.
- Ogurtani, T.O., Oren E.E.,** (2005). Irreversible Thermodynamics of Triple Junctions During the Intergranular Void Motion Under the Electromigration Forces, *International Journal of Solids and Structures*, 42, 13, 3918–3952.
- Ogurtani, T.O., Oren, E.E.,** (2001). Computer Simulation of Void Growth Dynamics under the action of Electromigration and Capillary Forces in narrow thin Interconnects, *Journal of Applied Physics*, 90 3, 1564-1572.
- Ozkan, C.S., Nix, W.D., Gao, H.J.,** (1997). Strain relaxation and defect formation in heteroepitaxial Si_{1-x}Gex films via surface roughening induced by controlled annealing experiments, *Applied Physics Letters*, 70, 17, 2247-2249.
- Pang, X.H., Qi, J.N., Zhang, Y., Ren, Y.Y., Su, M.H., Jia, B.X., Wang, Y.G., Wei, Q., Du, B.,** (2016). Ultrasensitive photoelectrochemical aptasensing of miR-155 using efficient and stable CH₃NH₃PbI₃ quantum dots sensitized ZnO nanosheets as light harvester, *Biosensors and Bioelectronics*, 85, 142-150.
- Pang, X.H., Qi, J.N., Zhang, Y., Ren, Y.Y., Su, M.H., Jia, B.X., Wang, Y.G., Wei, Q., Du, B.,** (2016). Ultrasensitive photoelectrochemical aptasensing of miR-155 using efficient and stable CH₃NH₃PbI₃ quantum dots sensitized ZnO nanosheets as light harvester, *Biosensors and Bioelectronics*, 85, 142-150.
- Parhi, A.P., Iyer, S.S.K.,** (2016). Effect of External Electric Field on Morphology of Copper Phthalocyanine-Fullerene Blended Films during Annealing, *Electronic Materials Letters*, 12, 2, 260-269.
- Peng, X., Manna, L., Yang, W., Wickham, J., Scher, E., Kadavanich, A., Alivisatos, A.P.,** (2000). Shape control of CdSe nanocrystals, *Nature*, 404, 59-61.
- Plass, R.A., Bartelt, N.C., Kellogg, G.L.,** (2001). Self assembly in the Pb on Cu(111) surface system, *The American Chemical Society*, 222, U22-U22, 2.
- Pohl, K., Figuera, J., Bartelt, J.H., Hwang, R.Q.,** (1999). Thermal vibrations of a two-dimensional vacancy island crystal in a strained metal film, *Surface Science*, 433-435, 506-511.
- Popescu, V., Zunger, A.,** (2012). Three-dimensional assemblies of semiconductor quantum dots in a wide-gap matrix providing an intermediate band for absorption, *Journal of Applied Physics*, 112, 114320.

- Raffaella, R.P., Sinharoy, S., Andersen, J., Wilt, D., Bailey, S.G.,** (2006). Multi-Junction Solar Cell Spectral Tuning with Quantum Dots, *Proceedings of the IEEE World Conference on Photovoltaic Energy Conversion*, New York, 1, 162–166.
- Rastelli, A., Kanel, H.,** (2002). Surface evolution of faceted islands, *Surface Science Letters*, 515, 493-498.
- Rogach, A.L.,** *Semiconductor Nanocrystal Quantum Dots, Synthesis, Assembly, Spectroscopy and Applications*, Springer, (2008).
- Schaller, R.D., Klimov, V.I.,** (2004). High Efficiency Carrier Multiplication in PbSe Nanocrystals: Implications for Solar Energy Conversion, *Physical Review Letters*, 92, 186601.
- Sengül, M.Y.,** (2014). *Yön Bağımlı Yüzey Özelliklerinin Etkisi Altında Heteroepitaksiyel Gerginliğe Sahip Kuantum Noktaların Oluşumunun Bilgisayar Modellenmesi* (yüksek lisans tezi).
- Sfyris, G.I., Gungor, M.R., Maroudas, D.,** (2012). The effect of a compliant substrate on the electromigration-driven surface morphological stabilization of an epitaxial thin film, *Journal of Applied Physics*, 111, 2.
- Shklyaev, A.A., Budazhapova, A.E.,** (2017). Critical conditions for SiGe island formation during Ge deposition on Si(100) at high temperatures, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 57 18-23.
- Shockley, W., Queisser, H.J.,** (1961). Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells, *Journal of Applied Physics*, 32, 510–519.
- Srathongluan, P., Vailikhit, V., Teesetsopon, P., Choopun, S., Tubtimtae, A.,** (2016). Effective performance for undoped and boron-doped double-layered nanoparticles-copper telluride and manganese telluride on tungsten oxide photoelectrodes for solar cell devices, *Journal of Colloid and Interface Science*, 481, 57-68.
- Stangl, J., Holy, V., Bauer, G.,** (2004). Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures, *Reviews Of Modern Physics*, 76, 725-783.
- Stewart, M.D., Zimmerman, N.M.,** (2016). Stability of Single Electron Devices: Charge Offset Drift, *Applied Sciences-Basel*, 6, 7.
- Suman S.D., Ramaniah, L.M., Ruda, H.E., Nair, S.V.,** (2014). Electron states in semiconductor quantum dots, *The Journal of Chemical Physics*, 141, 204702.
- Surrente, A., Carron, R., Gallo, P., Rudra, A., Dwir, B., Kapon, E.,** (2016). Self-formation of hexagonal nanotemplates for growth of pyramidal quantum dots by metalorganic vapor phase epitaxy on patterned substrates, *Nano Research*, 9, 11, 3279–3290.
- Szweda, R.,** (2001). Trends in the market for diode laser substrates, *The Advanced Semiconductor Magazine*, 14, 9.
T. Wiebach, M. Schmidbauer, and M. Hanke, (2000). Strain and composition in SiGe nanoscale islands studied by x-ray scattering, *Physical Review B*, 61, 8, 5571–5578.

- Takahata, K.**, Advances in Micro/Nano Electromechanical Systems and Fabrication Technologies, *InTech*, (2013).
- Tang, M.C., Chen, S.M., Wu, J., Jiang, Q., Kennedy, K., Jurczak, P., Liao, M.Y., Beanland, R., Seeds, A., Liu, H. Y.**, (2016). Optimizations of Defect Filter Layers for 1.3- μ m InAs/GaAs Quantum-Dot Lasers Monolithically Grown on Si Substrates, *IEEE Journal Of Selected Topics In Quantum Electronics*, 22, 6.
- Tomic, S.**, Quantum Dot solar Cells, *Springer* (2014).
- Watanabe, S., Asahi, S., Kada, T., Hirao, K, Kaizu, T., Harada, Y., Kita, T.**, (2017). Two-step photocurrent generation enhanced by miniband formation in InAs/GaAs quantum dot superlattice intermediate-band solar cells, *Applied Physics Letters*, 110, 193104.
- Wei, C., Spencer, B.J.**, (2016). Asymmetric shape transitions of epitaxial quantum dots, *Proceedings of the Royal Society A* 472: 20160262.
- Zhang, Y.P., Yan, L., Xie, S.S., Pang, S.J., Gao, H.J.**, (2001). Formation of ordered Ge quantum dots on the Si(111)-(7X7) surface, *Applied Physics Letters*, 79, 20, 3317-3319.
- Zhao, C., Zhao, M., Wang, Y., Lv, A. J., Xing, G. J., Ma, Y. C.**, (2014). Atomic kinetic research of ordered quantum dot growth induced by dislocation on the substrate, *Modern Physics Letters B*, 28, 5.

ÖZGEÇMİŞ

Ad-Soyad : Nur Seda Aydın
Uyruđu : T.C.
Dođum Tarihi ve Yeri : 13.03.1992
E-posta : naydin@etu.edu.tr

ÖĐRENİM DURUMU:

- Lisans: 2014, Gaziosmanpařa Üniversitesi, Dođa Bilimleri ve Mühendislik Fakültesi , Biyomühendislik
- Yüksek lisans: 2017, TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Mikro ve Nanoteknoloji Anabilim Dalı

MESLEKİ DENEYİM VE ÖDÜLLER:

Yıl	Yer	Görev
2014-	TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi	Proje burslu yüksek lisans öğrencisi

YABANCI DİL: İngilizce

TEZDEN TÜRETİLEN YAYINLAR, SUNUMLAR VE PATENTLER:

Aydın, N.S., Sengul, M.Y., Oren, E.E., (2016). Design of quantum dots via adjusting the material and process properties in heteroepitaxial growth. IMRC 2016, Symposium A2: Bionanodesign, August 14-19, Cancun, Mexico.

Aydın, N.S., Oren, E.E., (2017). Design of Heteroepitaxially Grown Quantum Dots Under External Force Fields TMS, Symposium: Computational Approaches to Materials for Energy Applications, February 26-March 02, San Diego, CA, USA.

Aydın, N.S., Oren, E.E., (2017). Theory and Simulation of Quantum Dot Formation in Heteroepitaxially Grown Thin Films under External Forces” TMS 2017, Symposium: Computational Thermodynamics and Kinetics, February 26-March 02, San Diego, CA, USA.

DİĐER YAYINLAR, SUNUMLAR VE PATENTLER

Kayalı, E., Mercan, E., Sahin, M., Yener, H.T., **Aydın, N.S.**, Dođu, G.K., Oren, E.E., Buke, G.C., (2015). Investigation of catalyst effect on the formation of 1D carbon

nanostructures via low temperature vacuum decomposition of SiC, MRS Fall Meeting, Symposium Q: Nano carbon materials - 1D to 3D, November 29 - December 4, Boston, MA, USA.

Gokce, G., Candas, E., **Aydın, N.S.**, Oren, E.E., (2016). Forecasting antiviral drug resistance development among influenza viruses, IMRC, Symposium A2: Bionanodesign, August 14-19, Cancun, Mexico.

