

GaAs/GaAlAs HETEROYAPILARININ
X-IŞINI KIRINIM YÖNTEMİ İLE
YAPISAL KARAKTERİZASYONU
HABİBE SAYRAÇ

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
2011

CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GaAs/GaAlAs HETEROYAPILARININ
X-IŞINI KIRINIM YÖNTEMİ İLE
YAPISAL KARAKTERİZASYONU

HABİBE SAYRAÇ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

TEZ DANIŞMANI
PROF. DR. SEZAI ELAGÖZ
SİVAS

2011

Bu alıřma Cumhuriyet niversitesi Fen Bilimleri Enstits tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanmıř ve jrimiz tarafından Fizik Anabilim Dalı'nda yksek lisans tezi olarak kabul edilmiřtir.

Bařkan	Prof. Dr. Hseyin SARI	_____
ye	Yrd. Do. Dr. Yavuz TRKAY	_____
ye (Danıřman)	Prof. Dr. Sezai ELAGZ	_____

ONAY

Bu tez alıřması, 01/12/2011 tarihinde Enstit Ynetim Kurulu tarafından belirlenen ve yukarıda imzaları bulunan jri yeleri tarafından kabul edilmiřtir.

Prof. Dr. Mustafa DEĐİRMENCİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTS MDR

Bu tez Cumhuriyet Üniversitesi Senatosu'nun 24.09.2008 tarihli ve 7 sayılı toplantısında kabul edilen Fen Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Tez Yazım Kılavuzu adlı yönergeye göre hazırlanmıştır.

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

ÖZET	vii
ABSTRACT	viii
TEŞEKKÜR.....	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	x
ÇİZELGELER DİZİNİ	xii
SİMGELER DİZİNİ.....	xiii
KISALTMALAR DİZİNİ.....	xiv
1 GİRİŞ	1
2 YARIİLETKENLER.....	3
2.1 Saf ve Katkılı Yarıiletkenler	4
2.2 Doğrudan ve Dolaylı Geçişler	4
3 GaAs.....	5
3.1 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As Heteroyapısı.....	8
3.2 Külçe Büyütme	11
3.2.1 Bridgman Tekniği	12
3.2.2 Czochralski Tekniği.....	13
3.3 Epitaksiyel Büyütme.....	14
3.3.1 Moleküler Demet Epitaksi (MBE).....	15
3.3.2 Metal Organik Kimyasal Buhar Biriktirme (MOCVD).....	18
3.4 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As'ın Uygulama Alanları	20
4 YAPISAL KARAKTERİZASYON.....	22
4.1 Kristal Yapı Kusurları.....	22
4.1.1 Noktasal Kusurlar	22
4.1.2 Çizgisel Kusurlar	23
4.1.3 Kenar Dislokasyonları (Edge Dislocations)	24
4.1.4 Vida Dislokasyonları (Screw Dislocations).....	25
4.1.5 Karışım Dislokasyonlar (Mixed Dislocations)	26
4.2 Radyasyon–Malzeme Etkileşimi	27
5 X-IŞINLARI.....	29
5.1 X-Işınlmasının Tarihçesi	29
5.2 X-Işınlmasının Özellikleri	30

5.3	X-Işınlarının Üretimi.....	31
5.4	Sürekli Spektrum	32
5.5	Karakteristik Spektrum	34
5.6	X-Işını Kırınımı.....	35
5.7	SmartLab Yüksek Çözünürlüklü X-Işını Difraktometresi.....	38
6	GaAs/Ga _{1-x} Al _x As Heteroyapısının X-Işını Kırınım Metoduyla Yapısal Karakterizasyonu.....	39
6.1	Dik (Out-Plane) X-Işını Taramaları.....	41
6.1.1	θ - 2θ Taraması.....	41
6.1.2	Sallantı Eğrileri (Rocking Curve) ve Phi (Φ) Taraması	48
6.2	Asimetrik Taramalar	49
7	Dinamik Simülasyon Hesaplamaları.....	55
7.1	(002) için Simülasyon Çalışmaları	55
7.2	(004) için Simülasyon Çalışmaları	58
8	SONUÇ	63
	KAYNAKLAR	64
	ÖZGEÇMİŞ	66

ÖZET

GaAs/GaAlAs HETEROYAPILARININ X–IŞINI KIRINIM YÖNTEMİ İLE YAPISAL KARAKTERİZASYONU

Habibe SAYRAÇ

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ

2011, 81 sayfa

Bu çalışmada, Moleküler Demet Epitaksi (MBE) ile büyütülen GaAs/GaAlAs heteroyapısı x–ışınları kırınım yöntemi ile incelenecektir. Bu heteroyapıyı oluşturan yapılarda örgü uyumu her ne kadar iyi ise de yapının kalitesi cihaz performansını doğrudan etkilediği için bu yapıda büyütmenin istenilen şekilde olup olmadığı, tabaka kalınlıkları, alaşım oranı ve örgü uyumu gibi nicelikler belirlenecektir. Bu kapsamda elde edilen bilgiler simülasyon programı ile yorumlanacak ve böylelikle bu yapının yapısal karakterizasyonu yapılacaktır.

ANAHTAR KELİMELELER: Yapısal Karakterizasyon, X–Işını Kırınımı,
GaAs/GaAlAs

ABSTRACT

STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF GaAs/GaAlAs HETEROSTRUCTURES BY X-RAY DIFFRACTION METHOD

Habibe SAYRAÇ

MSc Thesis, Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ

2011, 81 pages

In this thesis, GaAs/GaAlAs heterostructure by grown Molecular Beam Epitaxy (MBE) will investigate by x-ray diffraction method. Eventhough lattice coherence suitable in these structures which bring into being this heterostructure, as device performance depends on directly quality of the structure. Structural properties such as layer thickness, alloy rate and lattice coherence in this heterostructure will be determined. The obtained information in this study will be commented by simulation programme and so structural characterization of this structure will be done.

KEY WORDS: Structural Characterization, X-Ray Diffraction, GaAs/GaAlAs

TEŞEKKÜR

Tez konumun saptanmasından sonuçlanmasına kadar desteğini hiçbir zaman esirgemeyen, engin tecrübelerinden ve bilgi birikiminden faydalandığım çok değerli hocam Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ'e çok teşekkür ederim.

Beni her zaman destekleyen, güvenen ve dualarını esirgemeyen anneme, babama ve kardeşim Emel'e çok teşekkür ederim.

Tezimin hazırlanması ve çalışmalarım sırasında her zaman yanımda olan eşim Muhammed SAYRAÇ'a verdiği destek ve gösterdiği sabırdan dolayı çok teşekkür ederim.

Nanoteknoloji Merkezindeki çalışma arkadaşlarım Nalân BARAZ, İsmail ALTUNTAŞ, Ahmet BULUT, İlkay DEMİR, Meryem YALLI, Deniz KARTAL ve Aliye Alev KIZILBULUT'a tüm kalbi duygularıyla teşekkür ediyorum.

Yardımlarından ve her zaman güler yüzlü davranışlarından dolayı Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğü çalışanlarına teşekkür ederim.

Lisansüstü eğitimime başlamada çok büyük katkısı bulunan TÜBİTAK Başkanlığına ve tüm çalışanlarına teşekkür ederim.

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 T=0 K sıcaklıkta saf bir yarıiletkenin bant yapısı.....	3
Şekil 3.1 GaAs'ın çinko sülfür örgüsü.....	5
Şekil 3.2 GaAs'ın birinci Brillouin bölgesi	6
Şekil 3.3 GaAs'ın şematik bant diyagramı	6
Şekil 3.4 Ga _{1-x} Al _x As'ın; (a) örgü sabiti, (b) enerji aralığının alaşım miktarı x'e bağlı olarak değişimi	8
Şekil 3.5 Bazı yarıiletkenlerin yasak enerji aralığı ve örgü sabitlerinin değişimleri.....	9
Şekil 3.6 GaAs için faz diyagramı	10
Şekil 3.7 Yatay Bridgman tekniğinin şematik gösterimi	12
Şekil 3.8 Czochralski tekniğinin şematik gösterimi	13
Şekil 3.9 MBE sisteminin şematik gösterimi.....	17
Şekil 3.10 MOCVD sisteminin şematik gösterimi	19
Şekil 4.1 Kristaldeki noktasal kusurların şematik gösterimi	23
Şekil 4.2 Kristaldeki kenar tipi dislokasyonların şematik gösterimi	24
Şekil 4.3 Vida tipi dislokasyonun şematik gösterimi	25
Şekil 4.4 Karışım dislokasyonların şematik gösterimi	26
Şekil 4.5 Enerjili ışımanın bir atom veya molekülle etkileşim çeşitleri	27
Şekil 5.1 Elektromanyetik spektrum.....	30
Şekil 5.2 X-ışınları üretim tüpünün şematik gösterimi	31
Şekil 5.3 Bakır hedef kullanılarak farklı voltaj değerleri için elde edilen x-ışınlarının şiddet–dalga boyu grafiği	32
Şekil 5.4 Bir atomdaki elektron geçişleri.....	34
Şekil 5.5 X-ışınlarının bir kristalin düzlemlerinden kırınımı: Bragg Kanunu	35
Şekil 5.6 Rigaku SmartLab yüksek çözünürlüklü x-ışını difraktometresi	38
Şekil 6.1 MBE ile büyütülmüş GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yapısının şematik gösterimi	39
Şekil 6.2 Dik (out-plane) θ -2 θ tarama geometrisi ve ters uzay	42
Şekil 6.3 (004) kristal düzleminin ters uzayda gösterimi	43
Şekil 6.4 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yapısının 0°–70° aralığındaki θ -2 θ taraması.....	44
Şekil 6.5 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yapısının (a) 0°–9°, (b) 30.5°–32.5° ile (c) 65.5°–66.7° aralığında normal çözünürlükle yapılan θ -2 θ taraması	45
Şekil 6.6 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yapısının yüksek çözünürlüklü (a) 0°–9°, (b) 30.5°–32.5° ile (c) 65.5°–66.7° aralığında yüksek çözünürlükle yapılan θ -2 θ taraması	47
Şekil 6.7 ω ve Φ taramalarının şematik gösterimi (Bulut, 2010)	48
Şekil 6.8 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yapısının 32.5°–33.5° aralığındaki ω taraması	49
Şekil 6.9 (202) kristal düzleminin ters uzayda gösterimi	50
Şekil 6.10 (202) kristal düzleminde yapılan θ -2 θ taramasının ters örgüdeki gösterimi .	50
Şekil 6.11 (202) düzleminde GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yapısının 44.8°–45.8° aralığındaki θ -2 θ taraması	51

Şekil 6.12 (202) düzleminde yapılan ω taramasının ters uzayda gösterimi.....	52
Şekil 6.13 (202) düzleminde GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yapısı için 22.1°–23.2° aralığındaki ω taraması	52
Şekil 6.15 GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yapısı için 0°–360° aralığındaki Φ taraması	54
Şekil 7.1 (002) piki için Çizelge 6.1’de verilen parametreler ile elde edilen simülasyon grafikleri	55
Şekil 7.2 Birinci simülasyon aşaması sonrasında elde edilen simülasyon grafikleri.....	56
Şekil 7.3 Çizelge 6.1’de verilen yapı için x-ışını tarama ve son simülasyon aşaması ile elde edilen simülasyon grafikleri	57
Şekil 7.4 Son simülasyon aşamasının 31.4°-31.9° arasındaki gösterimi	57
Şekil 7.5 (004) piki için Çizelge 6.1’de verilen parametreler ile elde edilen simülasyon grafikleri	59
Şekil 7.6 Birinci simülasyon aşaması sonrasında elde edilen simülasyon grafikleri.....	59
Şekil 7.7 (004) GaAs/Ga _{1-x} Al _x As yapısı için x-ışını tarama ve son simülasyon aşaması ile elde edilen simülasyon grafikleri	60

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 3.1 GaAs, AlAs ve $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 'ın oda sıcaklığındaki ($T = 300 \text{ K}$) bazı fiziksel parametreleri.....	7
Çizelge 6.1 GaAs alttaş üzerine büyütülmüş GaAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ süper örgü yapısı için büyütülmek istenen tabakaların kalınlık, katkılanma ve yapı içerisinde tekrarlanma değerleri.....	40
Çizelge 7.1 GaAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ yapısı için birinci adım simülasyon sonucunda elde edilen yeni parametreler.....	56
Çizelge 7.2 GaAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ yapısı için (002) pikeinde yapılan son simülasyon parametreleri.....	58
Çizelge 7.3 GaAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ yapısı için birinci adım simülasyon sonucunda elde edilen yeni parametreler.....	60
Çizelge 7.4 GaAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ yapısı için (004) pikeinde yapılan son simülasyon parametreleri.....	61
Çizelge 7.5 Son simülasyon parametreleri ile çizelge 6.1 de verilen ana parametrelerin karşılaştırılması	61

SİMGELER DİZİNİ

a	Örgü sabiti
$\text{\AA}$	Angstrom
d	Atomlar arası uzaklık
E_F	Fermi enerjisi
E_g	Band aralığı enerjisi
K_α	Karakteristik α ışıınımı
K_β	Karakteristik β ışıınımı
U_a	Kopan elektronları hızlandırmak için uygulanan potansiyel
U_h	Filamana uygulanan potansiyel
W_i	Soğutma suyu girişı
W_o	Soğutma suyu çıkışı
λ	X-ışını dalgaboyu
ν	Frekans
θ	Bragg açısı

KISALTMALAR DİZİNİ

AsH ₃	Arsin (Arsine)
CAR	Sürekli Dönen Tutucu (Continual Azimuthal Rotation)
CZ	Czochralski
FWHM	Yarı Yükseklikteki Tam Genişlik (Full-Width at Half Maximum)
GaAs	Galyum Arsenid (Gallium Arsenide)
GaAlAs	Galyum Alüminyum Arsenid (Gallium Aluminium Arsenide)
Hz	Hertz
IR	Kızıl ötesi (Infrared)
LDS	Düşük Boyutlu Yapı (Low Dimensional Structure)
LEC	Sıvı ile Sınırlandırılmış Czochralski (Liquid Encapsulated Czochralski)
LED	Işık Yayan Diyot (Light Emitting Diodes)
LPE	Sıvı Faz Epitaksi (Liquid Phase Epitaxy)
MBE	Moleküler Demet Epitaksi (Molecular Beam Epitaxy)
MOCVD	Metal Organik Kimyasal Buhar Biriktirme (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition)
MQW	Çoklu Kuantum Kuyusu (Multiple Quantum Well)
PH ₃	Fosfin (Phosphine)
QWL	Kuantum Kuyu Lazeri (Quantum Well Laser)
QWIP	Kuantum Kuyu Kızıl ötesi Fotodedektör (Quantum Well Infrared Photodetector)

RF	Radyo Frekans (Radio Frequency)
RHEED	Yüksek Enerji Yansımali Elektron Kırınımı (Reflection High-Energy Electron Diffraction)
SEM	Taramalı Elektron Mikroskobu (Scanning Electron Microscope)
SL	Süper Örgü (Super Lattice)
TEM	Geçiş Elektron Mikroskobu (Transmission Electron Microscope)
TMAI	Trimethyl Aluminium (Trimetil Alüminyum)
TMGa	Trimetil Galyum (Trimethyl Gallium)
XRD	X-Işını Kırınımı (X-Ray Diffraction)
UHV	Ultra Yüksek Vakum (Ultra High Vacuum)
VPE	Buhar Faz Epitaksi (Vapour Phase Epitaxy)
ZB	Çinko Sülfür (Zinc Blende)

1 GİRİŞ

Düşük boyutlu sistemler üzerinde süren çalışmalar neredeyse yarım yüzyıldır gittikçe artan bir hızla devam etmektedir. Başlangıçta ilkel sayılabacak deney düzenekleri ve giriş düzeyinde teorik çalışmalar yerini süper bilgisayarların üzerinde çalışan çeşitli karmaşık programlara ve teknoloji harikası makinelere bırakmıştır. Bu yapıların bu kadar önemli olmasının nedeni yüklü parçacıkları kuşatmak sureti ile akım taşımalarını kontrol ederek çok gelişmiş elektronik veya optoelektronik cihaz yapımına olanak tanımalarıdır. Örneğin günlük hayatta elimizden bırakamadığımız TV kumandalarından tutun arabamızın anahtarında yer alan uzaktan açma kapama işlevlerini yerine getiren IR LED'ler bu çalışmaların ürünleridir. Ancak bu cihazların büyütülmesi çok yüksek derecede hassasiyet gerektiren MOCVD veya MBE teknikleri ile mümkün olmaktadır. X-Işınları Kırınımı (X-Ray Diffraction, XRD) yöntemi ile kristal yapılarının incelenmesi, işte bu yapıların ne kadar düzgün büyütülebildiğinin kontrolünü sağlayan çok pratik ama bir o kadar da önemli bir yapısal karakterizasyon tekniğidir. Özellikle nano-heteroyapılar üzerinde çalışan temel bilim araştırmacıları ve mühendisler için epitaksiyel tek kristal büyütülerek elde edilen nanoaygıtların yüksek verimle çalışması için yapısal özelliklerinin detaylıca bilinmesi gereklidir.

Epitaksiyel kristal büyütme yöntemleri ile büyütülen ve daha sonra çeşitli litografi teknikleri ve ardışık kristal büyütme kullanılarak elde edilen nanoaygıtların çalışmaları tamamı ile büyütülen kristalin, istenilen kalınlıkta, düzgün tabaka kalınlığı (layer uniformity), tek kristal ya da polikristal gibi kristal kalitesini doğrudan etkileyen büyütme parametrelerine bağlıdır.

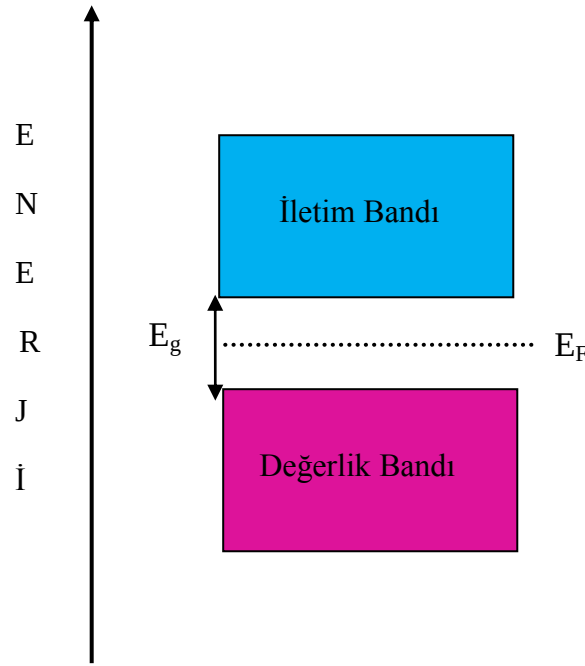
Bu ölçümleri gerçekleştirmek için gerekli alt yapı 2008 yılı içerisinde üniversitemiz nanoteknoloji merkezinde kurulmuştur. Bu kapsamda sistem ile yapılan ölçüm sonuçları sistem ile birlikte gelen bazı simülasyon programları kullanılarak yorumlanacak, bu programların yetersiz kaldıkları durumlar söz konusu ise, ek programlar kullanılarak veya yazılarak bu açık kapatılacaktır.

Bu tez (kapsamında) şu şekilde hazırlanmıştır: Birinci bölümde yarıiletkenlere genel bir giriş yapılmıştır. İkinci bölümde GaAs, AlAs ve $Ga_{1-x}Al_xAs$ 'ın fiziksel özelliklerine değinilmiş ve aynı bölümde büyütme tekniklerinden ve uygulama

alanlarından bahsedilmiştir. Üçüncü bölümde büyütmede karşılaşılan kristal yapı kusurları hakkında bilgi verilmiştir. Radyasyonun malzeme ile etkileşimi konusu açıklanmıştır. Dördüncü bölümde yapı kalitesi ve kristal kusurları incelemek amacı ile kullanılan x-ışınları, x-ışınları kırınımı ve Cumhuriyet Üniversitesi Nanoteknoloji Merkezi'nde kurulu bulunan Rigaku SmartLab x-ışını kırınımı cihazı anlatılmıştır. Beşinci bölümde GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs malzemesinin x-ışını kırınımı metoduyla yapısal analizi yapılmıştır. Altıncı bölümde ise deneysel sonuçlar üzerinde tartışılarak elde edilen veriler yorumlanmıştır.

2 YARIİLETKENLER

Elektrik iletkenliđi bakımından, iletken ile yalıtkan arasında kalan maddelerdir. Yarıiletken bant diyagramlarında dolu olan banda değerklik bandı boş olan banda iletim bandı denir. Yarıiletkenlerde $T=0$ K sıcaklıkta iletim bandı tamamen boş iken değerklik bandı tamamen doludur. $T=0$ K sıcaklıkta yarıiletkenin E_F Fermi enerjisi yasak enerji aralıđının tam ortasındadır (Kittel, 1986).



Şekil 2.1 $T=0$ K sıcaklıkta saf bir yarıiletkenin bant yapısı

Mutlak sıfırda yalıtkan olan bu maddeler, ısı, ışık, manyetik ya da elektriksel uyarmalar gibi dış etkiler altında bir miktar değerklik elektronlarının iletim bandına geçmesi sonucu elektriđi iletirler. Uygulanan bu dış etki ya da etkiler ortadan kaldırıldığında saf yarıiletkenler, yalıtkan hale geri dönerler. Oda sıcaklığında 10^{-2} ohmcm'den 10^9 ohmcm'ye kadar sıcaklıkla hızla değışen elektrik özdirençleriyle sınıflandırılırlar. Bir yarıiletkenin elektriksel iletkenliđi sıcaklıkla ters orantılıdır. Sıcaklık arttığında yarıiletkenin özdirencinin küçölmesi yarıiletkenin önemli bir özelliđidir. Yarıiletkende bilinçli bir şekilde yabancı madde konsantrasyonu artırılırsa (katkılama) özdirenç yine ters orantılı olarak küçölür (Kittel, 1986).

2.1 Saf ve Katkılı Yarıiletkenler

Saf bir yarıiletken içerisinde katkı atomu olmayan taşıyıcılarının sayısı eşit olan ideal bir yarıiletken olarak tanımlanabilir. Saf bir yarıiletkende elektriksel iletimin gerçekleşmesi, elektronların değerlik bandından herhangi bir etkenle (basınç, sıcaklık, ışık vb.) iletkenlik bandına geçmesi ile olur. Bir elektron değerlik bandından iletkenlik bandına geçtiğinde, arkasında bir boşluk bırakır ve bu boşluklara deşik (hole) denir. Bu boşluk (elektronu eksik olan yer) pozitif bir yük (+e) olarak görülür. Yarıiletkene elektrik alanı uygulandığında deşikler alan yönünde hareket ederken iletim elektronları alana zıt yönde hareket ederler. Bir saf yarıiletkende ilettime katılan elektron ve deşiklerin sayısı aynıdır (Sze, 2002).

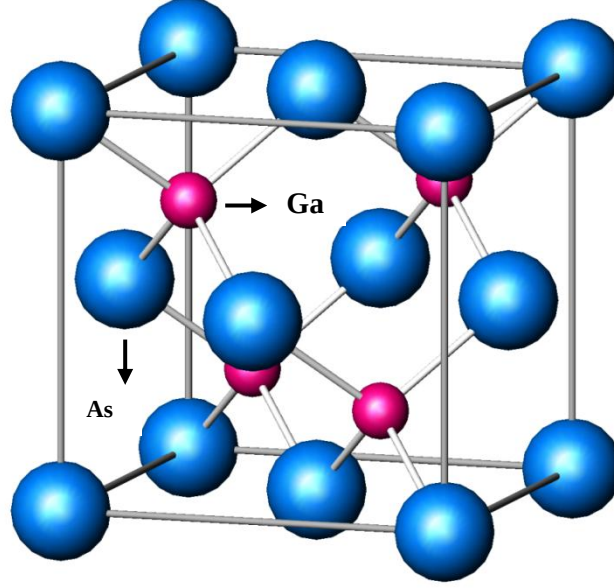
Bazı katkı maddeleri ve örgü bozuklukları bir yarıiletkenin özelliklerini çok şiddetli etkiler. Bileşik yarıiletkende bileşenlerden birinin atom eksikliği ya da fazlalığı da katkı maddesi gibi davranır; bunlara kusurlu yarıiletken denir. Bir yarıiletkene katkı atomları ekleme işine de aşılama (doping, katkılama) adı verilir (Kittel, 1986).

2.2 Doğrudan ve Dolaylı Geçişler

Γ , X ve L noktaları Brillouin bölgelerindeki önemli simetri noktalarıdır. Bu noktalar Brillouin bölgesinin merkezinde ve sınırlarında yer almaktadır. Bant yapılarının en belirleyici özelliği; değerlik ve iletkenlik bantlarının konumudur. İletim bandının minimumuna ($k=0$ durumunda) Γ vadisi denir. Değerlik bandı ile iletim bandı arasındaki geçişler sırasında geçiş iletim bandının minimumu Γ vadisi ile değerlik bandının en üst noktası arasında oluyorsa bu geçişe doğrudan geçiş denir. İletim bandının en alt noktası ile değerlik bandının tepesi arasındaki geçiş farklı k değerlerinde oluyorsa bu geçiş dolaylı geçiş olarak adlandırılır (Jaros, 1989).

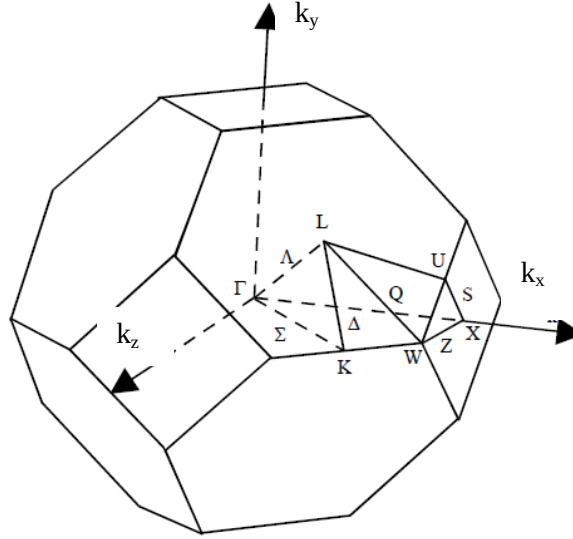
3 GaAs

Galyum arsenid (GaAs), galyum (Ga) ve arsenik (As) elementlerinin bileşiminden elde edilen bir yarıiletkenidir. GaAs çinko sülfür (zinc blende, ZB) kristal yapıdadır. İç içe geçmiş iki yüzey merkezli kübik (fcc) örgüden oluşur. Şekil 3.1’de gösterildiği gibi her bir Ga atomu dört As atomu ile dörtlü (tetrahedral) olarak bağlanır.



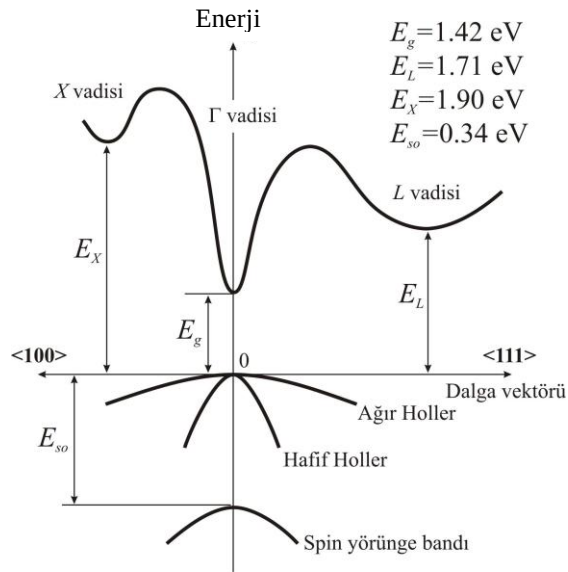
Şekil 3.1 GaAs’ın çinko sülfür örgüsü

Çinko sülfür yapısı elmas (diamond) örgüye benzerdir ama Ga ve As gibi farklı iki atom içermesi ile elmas örgüden ayrılır. Bir GaAs molekülünde bir atom $(0, 0, 0)$ da ve diğeri $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ de olmak üzere yüzey merkezli kübik (fcc, face centered cubic) öteleme simetrisine sahiptir. Ters uzayda GaAs yapısı cisim merkezli kübik (bcc, body centered cubic) simetridedir. GaAs’ın birinci Brillouin bölgesi Şekil 3.2’de gösterilmiştir.



Şekil 3.2 GaAs'ın birinci Brillouin bölgesi

GaAs; $a_{\text{GaAs}}=5.65325 \text{ \AA}$ örgü sabiti ve $E_g=1.424 \text{ eV}$ enerji aralığı ile doğrudan aralıklı bir yarıiletkenidir. GaAs'ın iletkenlik bandı minimumu ile değerlik bandının en üst noktası Brillouin bölgesinde Γ ($k=0$) noktasında yer alır. GaAs'ın enerji bant profili Şekil 3.3'de gösterilmiştir (Qi, 1995).



Şekil 3.3 GaAs'ın şematik bant diyagramı

GaAs, AlAs ve Ga_{1-x}Al_xAs malzemelerinin bazı fiziksel özellikleri Çizelge 3.1’de verilmektedir. Burada GaAs ve AlAs’ın örgü parametreleri arasındaki uyum dikkat çekmektedir.

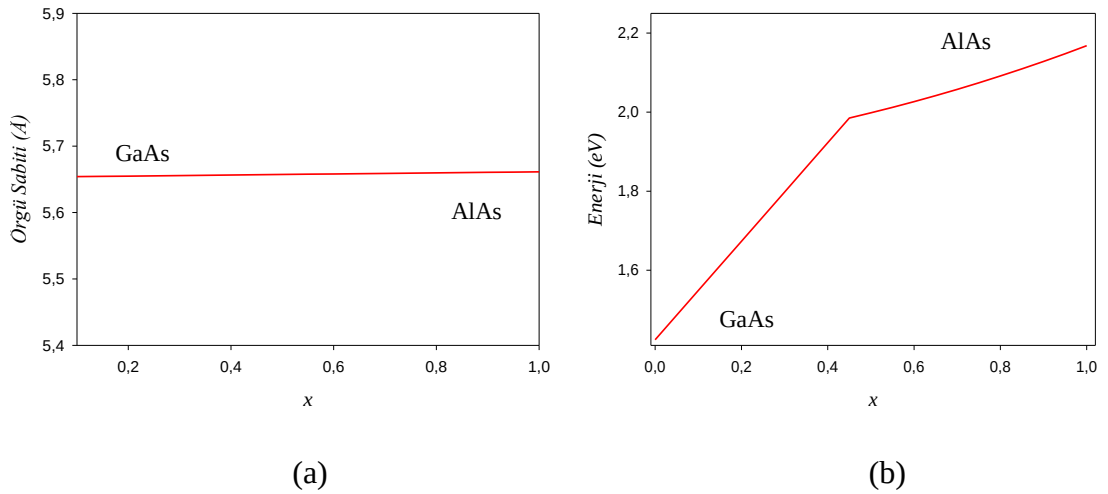
Çizelge 3.1 GaAs, AlAs ve Ga_{1-x}Al_xAs’ın oda sıcaklığındaki (T=300 K) bazı fiziksel parametreleri (Look, 1989) (Tolmatchev, 1995)

		GaAs	AlAs	Ga _{1-x} Al _x As
Kristal yapısı		Çinko Sülfür	Çinko Sülfür	Çinko Sülfür
Yasak bant aralığı (eV)		1.424	2.168	1.424+1.247x (x < 0.45) 1.9+0.125x+0.143x ² (x>0.45)
Örgü sabiti (Å)		5.65325	5.6611	5.65325 + 0.00809 x
Atom/cm³		4.42 * 10 ²²	4.25* 10 ²²	(4.42-0.17 x) * 10 ²²
Dielektrik sabiti	Statik	12.9	10.06	12.9-2.84 x
	Yüksek frekans	10.89	8.16	10.89-2.73 x
İletkenlik bandı efektif DOS (cm⁻³)		4.7 * 10 ¹⁷	1.5*10 ¹⁹	$N_c = (2.510 * 10^{19}) \left(\frac{m_e}{m_0}\right)^{\frac{3}{2}}$
Valans bandı efektif DOS (cm⁻³)		9 *10 ¹⁸	1.7 *10 ¹⁹	$N_v = (2.510 * 10^{19}) \left(\frac{m_h}{m_0}\right)^{\frac{3}{2}}$
Elektron etkin kütlesi (m_e / m₀)		0.063	0.146	$m_e = (0.063 + 0.083 x)$
Deşik etkin kütlesi (m_h / m₀)	Ağır m_{hh}	0.51	0.76	$m_{p,h} = (0.51 + 0.25 x)$ $m_{p,1} = (0.082 + 0.068 x)$
	Hafif m_{lh}	0.082	0.150	
Erime noktası (°C)		1240	1740	$T_s = (1240 - 58x + 558x^2)$ $T_l = (1240 + 1082x - 582 x^2)$
Termal genleşme katsayısı (10⁻⁶ °C⁻¹)		5.73	5.2	$\alpha_x = (5.73 - 0.53x)$
Elektron ilgisi (V)		4.07	3.5	4.07-1.1x (x < 0.45) 3.64-0.14x (x>0.45)

3.1 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs Heteroyapısı

GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs gibi yarıiletken heteroyapıları oluşturmada tabakalar üst üste büyütülür, birbirinin üzerine büyütülen materyallerin örgü parametreleri birbirine ne kadar yakınsa o derece kaliteli kristaller üretilebilir ve tabaka kalınlığı sıkıntısı yaşanmaz. Galyum arsenid (GaAs) ve alüminyum arsenid (AlAs)'ın örgü parametreleri birbirine çok yakındır. Örneğin; GaAs'ın örgü sabiti $a_{\text{GaAs}}=5.65 \text{ \AA}$ iken, AlAs'ın örgü sabiti $a_{\text{AlAs}}=5.66 \text{ \AA}$ 'dur. Yani bu iki yarıiletkenin örgü sabitinin hemen hemen aynı olması GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısının problemsiz bir şekilde büyütülmesine olanak sağlamıştır. Örgü sabitinin konsantrasyona bağlı değişimini gösteren Şekil 3.4 (a)'da bu durum açıkça görülmektedir (Singleton, 2003).

$$a_{\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}}(x)=5.65325 + 0.00809 x \text{ (\AA)} \quad [3.1]$$



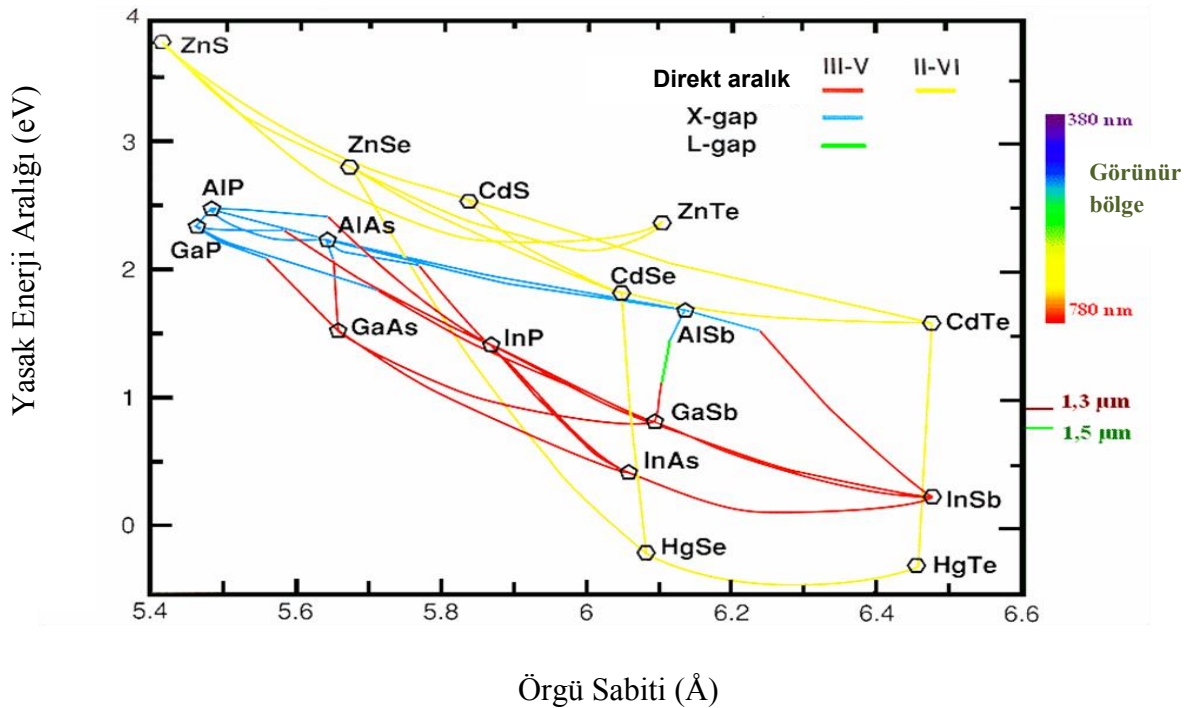
Şekil 3.4 Ga_{1-x}Al_xAs'ın; (a) örgü sabiti, (b) enerji aralığının alaşım miktarı x 'e bağlı olarak değişimi

GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısındaki bant aralıkları Ga_{1-x}Al_xAs yarıiletkenindeki 0 ile 1 arasında değişebilen Al oranı olan x değeri ile değiştirilebilir. Al konsantrasyonu x 'in artması Ga_{1-x}Al_xAs'ın bant aralığını aşağıda verilen [3.2] bağıntısına uygun olarak Şekil 3.4 (b)'de gösterildiği gibi artırır.

$$\begin{aligned} E_g(x) &= 1.424 + 1.247 x \text{ (eV)} & (0 \leq x \leq 0.45) \\ E_g(x) &= 1.9 + 0.125x + 0.143x^2 \text{ (eV)} & (0.45 \leq x \leq 1) \end{aligned} \quad [3.2]$$

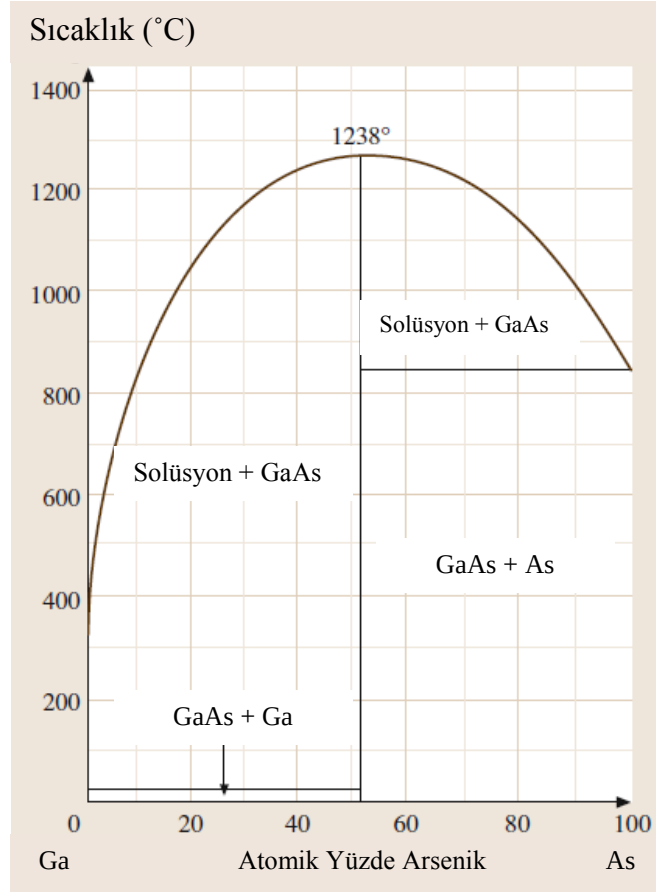
$Ga_{1-x}Al_xAs$ üçlü bileşiği % x (AlAs) ve % $(1-x)$ (GaAs)'tan oluşur. Yarıiletkendeki alüminyum (x) konsantrasyonunun $0 \leq x \leq 1$ arasında değişmesiyle, bant yapısı da doğrudan geçişliden dolayı geçişli olacak şekilde değişim göstermektedir. $Ga_{1-x}Al_xAs$ bant yapısı $x \leq 0.45$ değeri için doğrudan (direkt) bant aralıklı yarıiletken ve $x \geq 0.45$ değerleri için dolaylı (indirekt) bant aralıklı yarıiletken özelliği gösterir (Joachim, 2003). Şekil 3.5'de III-V tipi ve II-IV tipi yarıiletkenlerin kompozisyona bağlı olarak bant aralığı-örgü sabiti değişimi şematik olarak gösterilmiştir.

Şekil 3.5'den anlaşılabacağı gibi geniş bir bant aralığı bölgesinde GaAs/ $Ga_{1-x}Al_xAs$ yapısının örgü sabiti farklı Al konsantrasyonlarına karşın hemen hemen hiç değişim göstermemektedir. Şekildeki diğer malzemelerde böyle bir durum söz konusu değildir. Bu ise Al konsantrasyonunun değişimi ile malzemenin örgü sabitinin ve kristal özelliklerinin büyük oranda değişmemesi anlamına gelmektedir. Böylelikle kristal yapısı bozulmadan enerji aralığını değiştirerek bu malzemeleri büyütme mümkün hale gelmektedir.



Şekil 3.5 Bazı yarıiletkenlerin yasak enerji aralığı ve örgü sabitlerinin değişimleri

Şekil 3.6’da GaAs’in faz diyagramı verilmiştir. Ga ve As, karışım içinde eşit oranda oluncaya kadar yani GaAs bileşiği oluşuncaya dek karışımda bileşenlerden biri daha fazladır. Bu yüzden faz diyagramını ilk olarak Ga–GaAs ve ikinci olarak GaAs–As faz diyagramına ayırmakta fayda vardır.



Şekil 3.6 GaAs için faz diyagramı (Kasap & Capper, 2006)

Belirli bir seviyeden sonra, karışım içerisinde Ga ve As oranının eşit olduğu ideal çizgide, sıcaklık değişimiyle (yaklaşık olarak 1238 °C’ye kadar) herhangi bir kimyasal değişim olmadığından kararlı bir GaAs bileşiği oluşmaktadır (Fahrner, 2005). Bu ise GaAs’ın hem MBE hem de MOCVD yöntemi ile rahatlıkla büyütülebilmesi anlamına gelmektedir. Eğer faz diyagramının sol tarafında çalışılırsa oluşan karışımın içinde Ga damlacıklarının (*droplet*) bulunması kaçınılmazdır. Bu durum, karışımın galyumca zengin olmasını sağlayacaktır. Benzer şekilde faz diyagramının sağ tarafında çalışılırsa aynı durumlar As için geçerli olacaktır (Fahrner, 2005).

3.2 Külçe Büyütme

Kaliteli elektronik ve optoelektronik cihaz malzemesi üretmek için çeşitli yaygın epitaksiyel büyütme tekniklerine rağmen, külçe (bulk) kristal büyütme metotları hala her yıl onlarca hatta binlerce ton malzemeyi üretmede kullanılmaktadır. Büyütme tekniklerinde gelinen noktada bir atom kalınlığında tabakalar, neredeyse bir atomdan daha az kalınlıklı ara yüzey pürüzlülüğü ile elde edilebilmektedir. Bu şekilde elde edilen kristaller doğrudan cihaz üretiminde veya epitaksiyel büyütmede alttaş olarak kullanılmaktadır.

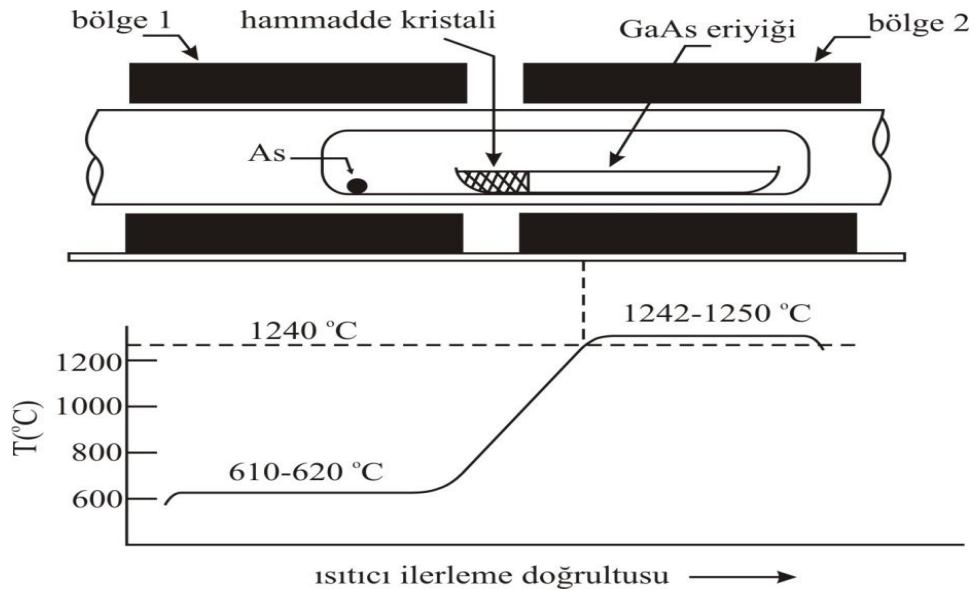
Külçe kristal büyütme tekniklerinin tarihi gelişimine bakılırsa; 18. ile 19. yüzyıllar arasında kristalleşmede aşırı soğutma, süperdoyum olaylarının, kristalleşme ısısının anlaşılması (Fahrenheit ve Lowitz), yarı kararlı bölgelerin tanımlanması, az soğutulmuş eriyik ve çözeltilerin varlığı gibi kavramlar oluşmuştur (Ostwald, Miers). 19. yüzyılın sonlarında teorik olarak kristalleşme ve termodinamik süreçler üzerinde çalışmalar (Gibbs, Arrhenius, van't Hoff), Ostwald ve Miers bölge genişliklerinin ve sürtünmenin kristalleşme üzerine etkisi (Young) çalışıldı. 20. yüzyılda çekirdeklenme ve kristal büyütme teorilerinin geliştirilmesi, taşınmanın kristal büyütme üzerindeki etkisinin anlaşılması gibi konular üzerinde durulmuştur. Günümüzde ise yılda yaklaşık yirmi bin ton kristal üretiliyor. Üretimin % 60'ını yarıiletken Si, GaAs, InP, GaP, CdTe ve bunların alaşımları oluşturmaktadır.

Bridgman, Czochralski, Float zone ve Lely tekniği gibi çeşitli külçe kristal büyütme yöntemleri vardır. Bu kısımda yatay Bridgman ve Czochralski tekniği ve bu yöntemler ile GaAs'ın büyütülmesi hakkında bilgi verilecektir.

3.2.1 Bridgman Tekniđi

Bahsedilecek olan ilk büyütme metodu yaygın olarak kullanılan yatay Bridgman (horizontal Bridgman) tekniđidir. Bu teknikte önemli şartlardan biri büyütme sırasında kullanılan potanın (Si, Mo ve grafit gibi) erimemesi ve buharlaşmamasıdır. Büyütme oranı saatte 0.1–30 mm aralığında olmalıdır.

Bridgman tekniđi ile GaAs büyütme için iki bölge fırın kullanılır. Fırının birinci bölgesi As'ın buharlaşabileceđi bir sıcaklıkta (610 °C civarında) tutulurken, ikinci bölge GaAs'ın erime sıcaklığının (1238 °C) hemen hemen üstünde tutulur. Buradaki tüp kuartzdan yapılmıştır.



Şekil 3.7 Yatay Bridgman tekniđinin şematik gösterimi

Başlangıçta çanak polikristal GaAs ile yüklenir ve kuartz tüpün diđer ucunda As bulunur. GaAs eriyince bir miktar As buharlaşacaktır. Eriyik miktarının dengede kalması için tüpe sol kısımda görüldüğü gibi As ilavesi yapılır. Fırın sola doğru hareket ettirildiğinde eriyik soğur. Genellikle tek kristal (arzu edilen) yönelimini koruyabilmek için çanağın sol ucuna bir çekirdek yerleştirilir. Eriğin soğuması esnasında çekirdekle teması sayesinde katı-sıvı ara yüzeyinde kristal oluşmasına olanak sağlar ve böylece GaAs'ın tek kristali büyütölmüş olur. Büyüme oranı (hızı) fırının çekilme hızına bağlıdır. Sonunda GaAs eriyiđinin tamamı çekirdekle aynı yönelim ile ve tek (single)

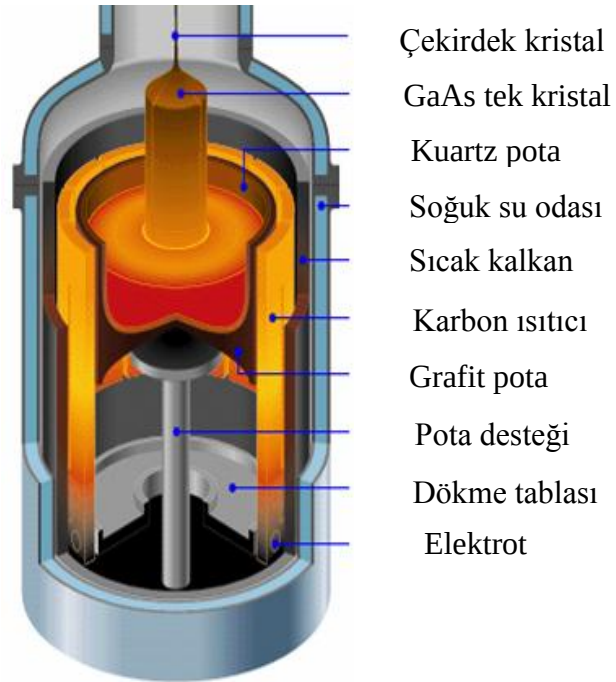
kristal olarak çekirdeğin üzerinde katılaşır. Sistemde ısıtıcı sabit, fırın hareketli ya da fırın sabit, ısıtıcı hareketli olabilir.

3.2.2 Czochralski Tekniği

Czochralski (CZ) tekniği, materyallerin tek kristallerinin büyütülmesi için kullanılan genel tekniklerden biridir. Başlangıçta metaller için kullanılan daha sonra yarıiletkenlerin büyütülmesi için geliştirilen eriyikten kristal oluşturma tekniğidir.

Taban olarak bilinen tek kristal materyalin bir kısmı eriyik içine daldırılır. Daha sonra yavaşça yukarıya doğru döndürülerek (homojenlik için) çekilir. Çekme işleminde çekirdek ve pota zıt yönlerde döndürülür. Bu dönmeyle bölgesel sıcak ve soğuk bölgelerin oluşması önlenmiş olur. Çekirdeğin bir kısmı eriyecek ve geriye kalan katı yüzey ile eriyik arasında sıvı–katı ara yüzeyi oluşacaktır. Yukarıya doğru çektikçe katılaşan kısım çekirdek yöneliminde tek kristal haline gelir. Bu çekme oranı dakikada birkaç milimetredir. Bu işlem sırasında argon gazı ya da azot gazı eriyik üzerine püskürtülerek eriyiğin temiz kalması sağlanır (Neamen, 2003).

Czochralski büyütme süreci şematik olarak Şekil 3.8’de gösterilmiştir.



Şekil 3.8 Czochralski tekniğinin şematik gösterimi

Czochralski tekniđi ile GaAs büyütme silikon (Si) büyütmeyle kıyaslandığında daha zordur. Çünkü arsenik gibi çok tehlikeli bir madde gaz halinde sistemden kaçarak hem kaliteyi düşürür hem de tehlike oluşturur. Buradaki kaçma problemini ortadan kaldırmak için bir sıvı ile örtme (LEC, Liquid Encapsulated Czochralski) metodu kullanılır. Bu sıvı erimiş boron oksit (B_2O_3) tabakasıdır. Bu tabakanın kalınlığı yaklaşık 1 cm'dir. Erimiş B_2O_3 , GaAs yüzeyine yayılır ve böylece eriyiđi koruyucu bir kap oluşturur. Bu boron oksit tabakası GaAs ile tepkimeye girmez ve arseniğin ortamdaki buharlaşarak uzaklaşmasını önler.

3.3 Epitaksiyel Büyütme

Epitaksi terimi köken olarak Yunanca *epi* “üstte” ve *taxis* “düzenli” anlamlarından türetilmiş ve tek kristal bir yarıiletken üzerine, kalınlık ve katkı miktarı kontrol edilerek, düzenli atomik tabakalar halinde yine tek kristal bir yapının büyütülmesidir. Başlıca iki temel sebepten dolayı epitaksiyel büyütmelelere başvurulur. Birincisi, alttaştan daha yüksek saflıkta istenen kalınlıkta, katkılama tipinde ve seviyesinde film tabakaları büyütürken düşük boyutlu yapılar (LDS) üretmektir. Bu yapılar, kuantum etkileri neticesinde çok önemli uygulama alanlarında kullanılmaktadır. İkincisi, külçe kristal büyütme teknikleriyle büyütülemeyen bileşik kristaller üretebilmek için kullanılır.

Alttaş ile büyütülen film arasındaki ilişkiye göre homoepitaksi ve heteroepitaksi olmak üzere iki çeşit epitaksi vardır. Her iki türünde oldukça geniş bir yelpazede pratik örnekleri bulunmaktadır.

- **Homoepitaksi**

Homoepitaksiste alttaş ve büyütülen film aynı malzemedendir, yani büyütülen film tamamıyla alttaş ile eşleşmektedir. En yaygın olarak kullanılan homoepitaksi formu, silisyum ve germanyumdur. Örneğin; Czochralski tekniđiyle elde edilen silisyum wafer (pul, hamyonga) bir dizi işleme tabi tutulduktan sonra çeşitli epitaksiyel büyütme teknikleriyle silikon alttaş üzerine arzulanan kalınlıkta, istenilen katkılama tipinde ve seviyesinde silikon tabakaları büyütülebilir. Benzer şekilde GaAs üzerinde homoepitaksiyel olarak GaAs da büyütülebilmektedir.

- **Heteroepitaksi**

Alttař üzerine farklı bir materyalin tek kristal tabakasının büyütölmesidir. Alttař ile film farklı malzemelerden olduđu için örgü parametrelerinde ve termal genleşme katsayılarında doğal olarak farklılıklar olmaktadır. Bu farklılıklara bađlı olarak büyütölen film tabakalarında gerilmeler veya gevşemeler söz konusu olmaktadır. İstenmeyen dislokasyonları azaltabilmek için, genellikle alttař üzerine uygun bir geçiş tabakası (buffer layer, nucleation layer) büyütöldükten sonra film tabakaları büyütölmeye başlanmaktadır.

Geniş bir yelpazede kullanılmakta olan, GaAs alttař üzerine çeşitli kompozisyonlarda $Ga_{1-x}Al_xAs$ biriktirmek suretiyle hazırlanan GaAs tabanlı lazerleri bu başlıkta verebiliriz. Bu yapının örgü parametreleri birbirine çok yakın olduđu için galyum atomlarının yerini alan alüminyum atomları önemli bir problem oluşturmazlar. Ancak GaN/AlN ve GaSb/InAs yapılarında durum böyle değildir ve büyütme sonucu kristal kalitesinde örgü uyumsuzluğu nedeniyle önemli yapı bozuklukları olmaktadır.

Sıvı faz epitaksi (LPE), buhar faz epitaksi (VPE), moleküler demet epitaksi (MBE), ve metal organik kimyasal buhar biriktirme (MOCVD) gibi çeşitli epitaksiyel büyütme teknikleri vardır. Bu kısımda GaAs büyütmede yaygın olarak kullanılan moleküler demet epitaksi (MBE), ve metal organik kimyasal buhar biriktirme (MOCVD) yöntemleri hakkında kısaca bilgi verilecektir.

3.3.1 Moleküler Demet Epitaksi (MBE)

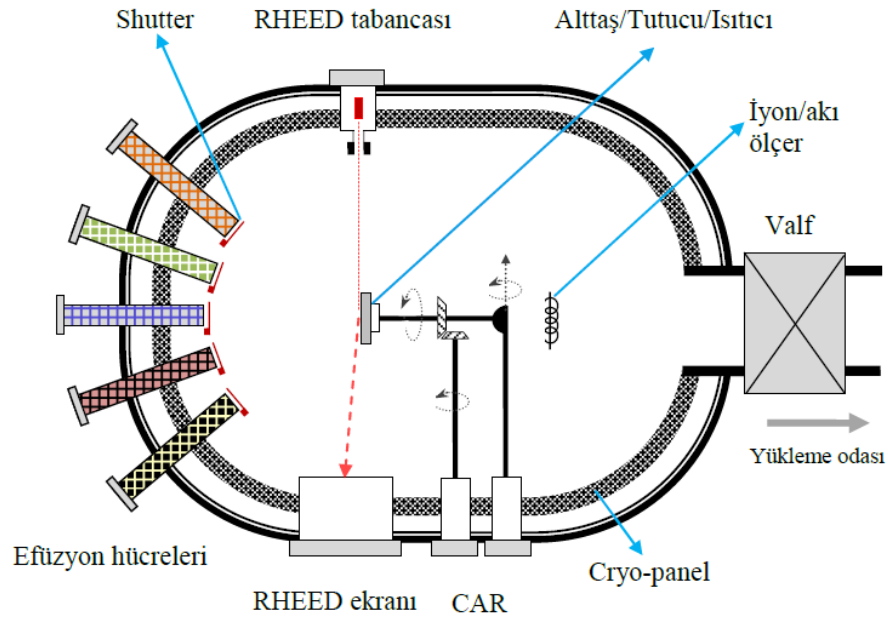
Moleküler Demet Epitaksi (MBE) yüksek kalitedeki ince filmlerin kristal alttař üzerine epitaksiyel olarak büyütölmesi için kullanılan bir kristal büyütme tekniğidir. MBE yönteminde molekül demetleri kullanılarak, tek kristal alttař üzerinde, alttařın yönelimini tekrarlayarak, düzgün sıralanmış tek kristal tabakalar büyütölür.

CAR (*Continual Azimuthal Rotation*) olarak bilinen dönel manyetik tutucuya alttař monte edilir ve sürekli döndürölerek büyüyen kristalin tekdüze (uniform) olması amaçlanır. Büyütme odası UHV (*ultra high vacuum*) ortamındadır, bu yüzden büyütölecek örnekler özel odalar (yükleme ve hazırlık odası) vasıtasıyla bu odaya aktarılır. Bu hücreler, büyütme odası kadar olmasa da uygun vakum altında

tutulmaktadır. Ayrıca bu odalar, uygun bir tarzda ısıtılarak kalıntı gazlardan arındırılır (degassing). Vakum sistemiyle birlikte sıvı azot soğutmalı cryo-panellerle CO₂ ve H₂O gibi istenmeyen gazlar yoğunlaştırılarak sistemden uzaklaştırılır.

Büyütülen film; alttaş sıcaklığı, demet akışlarının oranı, alttaş yüzeyinin saflığı gibi bazı kontrol edilebilir parametrelere bağlıdır. Büyüyen tabakanın kalınlığı, kompozisyonu ve katkılama seviyesi atomik demet akışlarının kontrol edilmesiyle çok hassas bir şekilde ayarlanır. Bu esnada kinetik reaksiyonların ilerlemesi için alttaş sıcaklığı son derece kritik öneme sahiptir. Eğer sıcaklık yeterli seviyede değilse; alttaş yüzeyine gelen atomlar yüzey üzerinde hareket edebilmeleri için gerekli kinetiği bulamayacaklardır. Bu durum büyütülen yüzeyin pürüzlü olmasına sebebiyet verecektir. Eğer sıcaklık yüksek ise alttaş ile büyütülen tabakalar arasında veya büyümüş tabakalar arasında olumsuz derece iç-difüzyon olacaktır. Bu durumda büyütülen yapı bulanıklaşarak mükemmellikten uzaklaşacaktır. Hatta çok yüksek sıcaklıklar alttaş yüzeyindeki atomların koparılmasına da yol açacaktır. Bu bağlamda, çalışılan sıcaklık seviyesi son derece büyük önem taşımaktadır. Bu seviye belirlenirken genellikle deneysel veriler temel alınır (İ.Demir, 2011).

MBE'nin diğer büyütme yöntemlerinden farkı, büyütme işleminin çok daha temiz koşullarda gerçekleşmesi, ultra yüksek vakuma ulaşılabilmesi (10^{-10} - 10^{-11} mbar), demet akışlarının (büyüme oranlarının) ve alttaş sıcaklığının kontrol edilebilmesidir. Bir mikron kalınlığındaki epitaksiyel tabaka yaklaşık olarak bir saatte büyütülmektedir (Jackson, 2004). Monotabaka boyutunda büyütme kontrolüne sahiptir. Böylece oldukça temiz koşullarda (ultra yüksek vakum, UHV), belirgin ara yüzeylere sahip GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs gibi farklı yarıiletken malzemeleri tabaka tabaka üretilebilir ve tabakaların katkılanması kontrol edilebilir.



Şekil 3.9 MBE sisteminin şematik gösterimi

GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs heteroyapılarının MBE’de büyütülmesi oldukça kalitelidir. GaAs ve AlAs için örgü uyumu % 0.1’den daha iyidir. Bu nedenle bu iki materyalin tabakaları kalınlık sınırlamasına gidilmeden herhangi bir bileşim miktarı için ardı ardına büyütülebilir. Büyütmenin birkaç kez onar saniyelik periyotlarla durdurulması ara yüzeyde önemli bir pürüzsüzlüğü getirir. Bu pürüzsüzlük yüksek enerji yansımali elektron kırınımı (RHEED) ile anlaşılabilir. Ancak durdurma ile oluşan ara yüzey pürüzsüzlüğü sadece yeterince düşük Al kompozisyonları için oluşur, yüksek Al bileşimleri için, büyütmenin durdurulması Ga_{1-x}Al_xAs yüzeyini keskin yapmaz.

Al içeren bileşiklerin büyütülmesindeki ana sorun, bu bileşenin oldukça reaktif olmasıdır. Zayıf UHV koşullarında, MBE Ga_{1-x}Al_xAs büyütme girişimi, artık gazlardan (CO, H₂O, O₂) gelen karbon ve oksijen kirlilikleri yüzünden elektriksel ve optiksel özelliklerinin kötüleştiği adi bir malzeme ile sonuçlanır. Büyütme sırasında, elektron mobilitesi sıcaklığa oldukça bağlıdır. Ga_{1-x}Al_xAs’ın (x≈0.3) büyütülmesi için en uygun (optimum) sıcaklık ~700 °C’dir. Bu sıcaklık değeri, morfolojik çalışmalar ve fotoluminesans çalışmalarına dayanmaktadır. Örneğin; yüksek kaliteli numune ve elektriksel özellikleri Morkoç ve arkadaşları tarafından 630 °C’lik alttas sıcaklığında rapor edilmiştir (M. Herman, 1996).

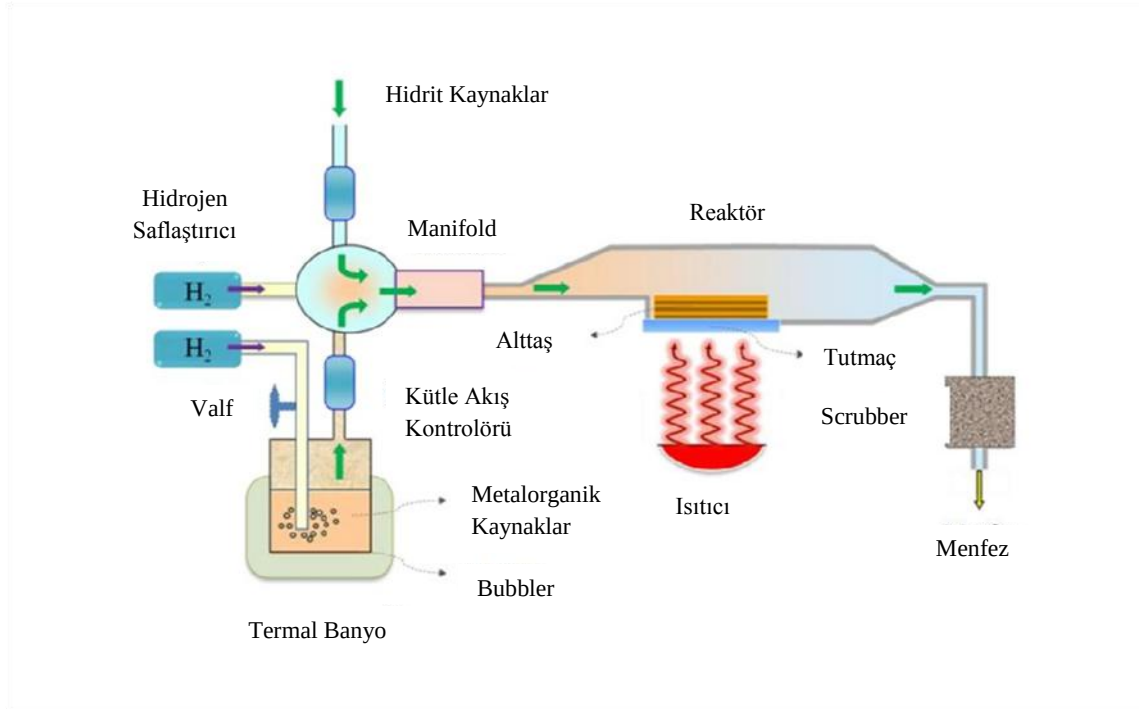
MBE sistemi UHV ortamında çalıştığı için fazlasıyla maliyetlidir. Kurulum maliyetine ek olarak, büyütme süresi yavaş olduğundan çalışma maliyeti de fazlasıyla pahalıdır ve bu MOCVD'ye göre ciddi bir dezavantajdır. Ayrıca InP ve InGaAsP gibi fosfor içeren alaşımların büyütülmesi oldukça zordur. Fosforun sistemden geri yansıdığı ve vakum pompalarında toplandığı anlaşılmıştır. Özellikle hem As hem de P içeren alaşımların büyütülmesi zordur (Ekinci, 2008).

3.3.2 Metal Organik Kimyasal Buhar Biriktirme (MOCVD)

Bahsedilecek epitaksiyel büyütme yöntemlerinden diğeri ise metal organik kimyasal buhar biriktirme (MOCVD) tekniğidir. MOCVD, buhar faz epitaksinin (VPE) gelişmiş bir üst modelidir. Bu teknik ile farklı konsantrasyonlu, farklı katkılama düzeyli ve hatta alttaştan farklı bir katkılama tipinde epitaksiyel tabakalar büyütülebilmektedir. Özellikle III–V grubu yarıiletken bileşikleriyle yüksek kaliteli epitaksiyel tabakalar, keskin arayüzeyler ve birkaç atom kalınlığında çok tabakalı yapılar üretebilmedeki avantajları bakımından kendini kanıtlamış önemli bir epitaksiyel büyütme tekniğidir.

III-V grubu bileşenlerini içeren tipik bir MOCVD sisteminde büyütme süreci, genellikle kuartz veya çelik olan bir reaktör içine kontrollü miktarda V grubu hidritleri ile III grubu alkileri alınarak başlatılır. Bu tüpün içinde bir ısıtıcı sistem (genellikle radyo frekansıyla (RF) ısıtılan bir karbon tutmaç (*susceptor*)) ve bunun üzerinde de bir alttaş (*substrate*) bulunmaktadır. Isınan alttaş önkaynakların ayrışmasında katalitik bir etkiye sahiptir, bu etkiyle gaz fazda ve katı yüzeyde ilgili türlerin kimyasal reaksiyonları sonucu epitaksiyel tabakaların üretilmesi gerçekleştirilir.

Kompozisyon geçişleri çok hassas bir şekilde anahtarlanarak (açma/kapama) yüksek kaliteli heteroyapılar, çoklu-kuantum kuyuları (MQW) ve süper örgüler (SL) üretilir. Büyütme süreci devam ederken reaktör odasındaki gaz kompozisyonun değişiminde yüksek derecede kontrol imkânı sunduğu için keskin ara yüzeyli homojen tabakalar büyütebilme kabiliyeti, düşük arka plan katkılama yoğunluğu, büyütme hızlarının MBE' den daha büyük olması ve seri üretim tekniklerine yatkın olması gibi bir takım üstünlükler bu tekniği cazip kılan diğer hususlardır.



řekil 3.10 MOCVD sisteminin řematik g sterimi

Trimetilgalyum ($(\text{CH}_3)_3\text{Ga}$, TMGa) ve arsin (AsH_3) kullanılarak GaAs b y t lmesi, MOCVD tekniğinde en  ok  alıřılmıř profillerden biridir. TMGa genellikle H_2 gazıyla biriktirme b lgesine tařınır. Genellikle b y tme ortamında alkil metallere kıyaslandığında, V grubu elementleri daha fazla bulunur (bu  rnekte As). Bunun nedeni řudur; V grubu hidritler, alkil metallere kıyasla daha d ř k yapıřma katsayısına sahiptir ve nispeten ayrıřması yetersizdir. İřte bu durumu dengeleyebilmek i in, b y tme ortamında fazlasıyla V grubu elementi bulundurulur (Kasap & Capper, 2006).

III–V grubu bileřikleri i inde en yaygın olarak kullanılan ve en iyi bilinen yapılardan biri olan, trimetilgalyum ($(\text{CH}_3)_3\text{Ga}$, (TMGa)) ve arsin (AsH_3) kullanılarak GaAs tabakasının b y me s recine iliřkin birka  adımı ele alalım:

- 1) Arsin ve TMGa' un tařıyıcı gaz (hidrojen) yardımıyla alttař  zerine yani sınır tabakasına tařınması
- 2) Isı etkisi ile TMGa'un baėlarının kırılarak metan ve galyum, benzer řekilde arsinin baėlarının kırılması ile metan ve arseniėin elde edilmesi

- 3) Atomik ve/veya moleküler yüzey difüzyonu ve kimyasal reaksiyonlar sonucu reaktantların alttaşa tutunarak GaAs örgüsüne birleşmesi
- 4) Bazı reaktantların alttaştan geri bırakılması
- 5) Yan ürünlerin alttaştan uzaklaştırılması

Bu adımlar oldukça basitleştirilmiştir. Aslında yüzey reaksiyonları ve GaAs çekirdeklenmesi çok daha karmaşıktır (Ekinci, 2008).

3.4 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs'ın Uygulama Alanları

GaAs ile AlAs arasındaki örgü uyumundan dolayı GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapıları çok yüksek kristal kalitesine sahip bir şekilde büyütülebilmektedir. Bu yapılar alüminyum katkılama oranı $x=0.45$ değerine kadar doğrudan bant aralığına sahiptir ve Al alaşımı ile band aralığı kontrol edilebilen yapılardır. Ayrıca MOCVD ve MBE gibi büyütme teknikleri ile mükemmele yakın biçimde heteroepitaksiyel olarak büyütülebilirler.

Sahip olduğu $E_g=1.42$ eV'luk band aralığı ile 8-12 μm dalga boyunda (kırmızı renkte) ışık yayıcı (LED, lazer) ve algılayıcı (dedektör) cihaz yapımında kullanılmaktadır. GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs güneş hücrelerinde, lazer diyotlarda, mikrodalga kullanımları için Gunn etkisine dayanarak çalışan diyotlarda ve çeşitli kapsamlı optoelektronik cihaz yapımında (kuantum kuyu lazerinde (QWL) ve kuantum kuyusu kızıl ötesi fotodedektörde (QWIP)) kullanılırlar (Yun, 2006). Ayrıca yüksek elektron mobiliteli transistörlerde, modülasyon katkılı alan etkili transistörlerde, heteroeklemli bipolar transistörlerde ve hesap makineleri, radyo, televizyon ve diğer cihazların bazı parçalarında kullanılır (Denizli, 2006).

Yaklaşık olarak bir kg galyum arsenidden 500.000 tane ışık yayan diyot yapılabileceği hesaplanmıştır. Galyum arsenidin başka yarıiletkenlere göre düşük güç tüketimi ile daha hızlı işlemler, ışımaya (radyasyon) daha iyi direnç ve elektrik sinyallerini optik sinyallere dönüştürme gibi belli avantajları vardır (Chakrabarti, 1992; Greber, 2003).

Telekomünikasyonda kullanılan fiberlerde de bu yapılar kullanılmakta ve böylece iletişime katkıda bulunmaktadır. Her ne kadar HgCdTe fotodiyotlara kıyasla kuantum

kuyulu GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs tabanlı fotodedektörün daha düşük kuantum verimine sahip olsalar da kızıl ötesi (IR) aralığındaki fotodedektörlerin yapımında daha kolay büyütülebilme ve büyütme parametrelerinin kontrol edilebilmeleri açısından tercih edilirler. Bu cihazlarda fotoelektrik uyarı kayıpları fotodedektörlü termal görüntüleme sisteminin t_{acc} birikme zamanının arttırılması ile yenilebilir (5-10 kat). Ek olarak GaAs'ın CdTe'e göre üstünlüğü daha büyük boyutlarda büyütülebilmesi ve mikro elektronik cihaz ve devre yapımında kullanılmasıdır (Bourgoin, 2001). Bu nedenle de çok tabakalı GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs kuantum kuyuları güncelliğini korumaktadır.

Büyütülen yapının örgü uyumu her ne kadar iyi ise de yapının kalitesi cihaz performansını doğrudan etkilemektedir. Bu nedenle GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs heteroyapısında büyütmenin istenilen şekilde olup olmadığı, tabaka kalınlıkları, alaşım oranı ve örgü uyumu gibi niceliklerin belirlenmesi önem kazanmaktadır. Bundan sonraki kısımda bu bilgilerin elde edilmesini sağlayan yapısal karakterizasyon ve x-ışınları kırınım yöntemine ait bilgiler verilecektir.

4 YAPISAL KARAKTERİZASYON

Yarıiletkenlerin fonksiyonel özellikleri onların atomik yapılarından meydana gelir. Gerçekten malzeme işleme (süreci), mikro yapısı ve fonksiyonel özellikleri arasındaki karşılıklı yakın ilişki yarıiletken bilim ve teknolojisinin kalbinde yer alır. Bu yüzden, eğer bir yarıiletkenin işleme geçmişinin (büyütme ve cihaz fabrikasyonunda kullanılan prosedürler) fonksiyonel özelliklere nasıl bağlı olduğu açıklanabilirse daha sonra bulk kristal, heteroyapı veya entegre cihaz yapısını veren analitik tekniklerin uygun bir kombinasyon uygulaması aracılığıyla yarıiletkenlerin mikro yapıları geliştirilir (Kasap & Capper, 2006). Böylece gelişen teknoloji yeni yapılar yapmamızı, yapılan yeni yapılar da teknoloji geliştirmeye sebep olarak, çağımızın en önemli çalışma alanlarını oluşturlar.

4.1 Kristal Yapı Kusurları

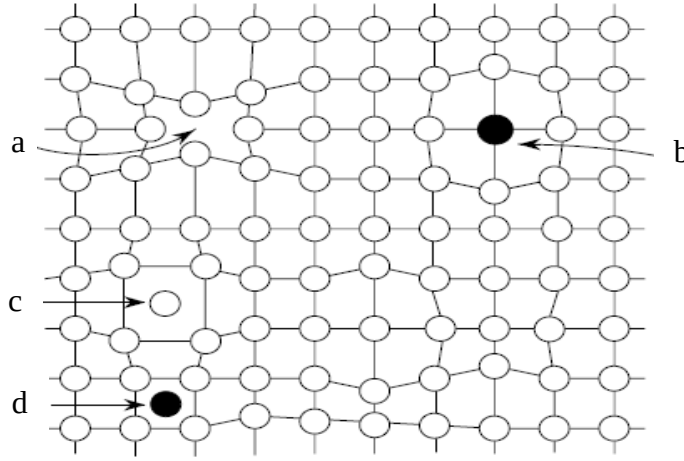
Doğada kristal yapı olarak kusursuz hiçbir malzeme olmadığı gibi, yarıiletken kristaller de mükemmel dizilime sahip değildir. Her ne kadar çok gelişmiş kristal büyütme teknikleri kullanılsa dahi büyütülen malzemelerde mükemmel dizilimden uzaklaşmalar olmaktadır. Kristallerde periyodiklikten sapmalara en genel adıyla kusur (*defect*) denmektedir. Yapılan cihazlarda bu kusurlardan dolayı istenmeyen saçılmalar oluşacağından cihaz performansı düşecektir. Bu nedenle bu kusurların incelenmesi çok önemlidir.

4.1.1 Noktasal Kusurlar

Kristallerde genel olarak gözlemlenen kusurlardan ilki noktasal kusurlar olarak adlandırılır. Bu kusurlar;

- Kristalde atomun olması gereken yerde olmaması (*vacany*),
- Atomun olması gereken yerde başka tür bir atomun olması (*substitutional*),
- Örgü düzlemleri arasına aynı tür bir atomun girmesi (*self interstitial*) ve
- Örgü düzlemleri arasına farklı tür bir atomun girmesi (*impurity interstitial*) olarak gruplandırılabilirler.

Noktasal kusurlar Şekil 4.1’de gösterilmektedir.



Şekil 4.1 Kristaldeki noktasal kusurların şematik gösterimi

Yabancı atom kristalin yüzeyinde ya da arada bir yerde bulunabilir. Atom, kristal yüzeyinde bir yerde ise Shottky tipi kusur ve atom arada bir yerde ise bu tip kusura da Frenkel tipi kusur denir. Bir kristalde nokta kusurları olup olmaması kristalin fiziksel özelliklerini değiştirir. Mesela katıların optik soğurma tayfları değişik olur. Elektriksel ve manyetik özellikleri değişir. Düzensiz kusurlu bir kristal yapı daha yüksek enerjidedir. Çünkü kusurun oluşması enerji gerektiren bir olaydır. Düzenli kusursuz bir kristal ise en kararlı haldedir ve enerjisi en azdır. Noktasal kusurların mekaniksel özelliklere etkisi önemsizdir, fakat elektriksel özellikleri önemli ölçüde etkiler.

4.1.2 Çizgisel Kusurlar

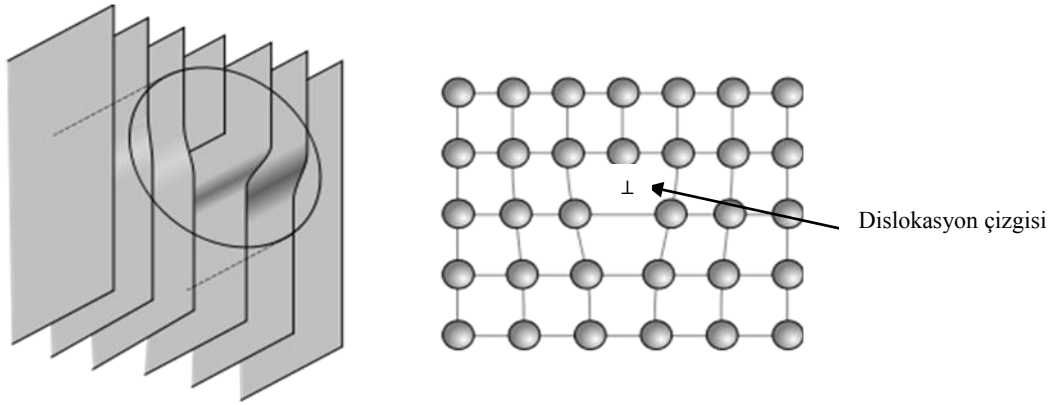
Diğer bir kusur şekli çizgisel veya düzlemsel kusurlar olarak adlandırılır ve bu tip kusurlar yanlış yerleşmeler de denilen dislokasyonlar (*dislocations*) olarak belirtilmektedir. Bu tip dislokasyonlar genel olarak kenar dislokasyonları (*edge dislocations*) ve vida dislokasyonları (*screw dislocations*) olmak üzere iki grup altında toplanmaktadır. Bir kristal malzeme kendisinden farklı örgü sabitine ve termal genleşme katsayısına sahip alttaş üzerine büyütülmeye çalışıldığında, doğal olarak gerilmeler altında kalmaktadır. Alttaşın örgü sabiti epitaksiyel olarak büyütülecek tabakanın örgü sabitinden büyük olduğunda baskı gerilimi, küçük olduğunda ise gevşeme gerilimi oluşmaktadır. Baskı gerilimi ve gevşeme gerilimi altında büyütülen yapılar büyümelerine iki türlü devam ederler. Bunlardan ilki gerilme altında fakat

dislokasyonsuz olarak büyümek, diğeri ise gerilme olmadan dislokasyonlar ile birlikte büyümeştir.

Eğer büyütülen yapıların kalınlıkları kritik kalınlık olarak adlandırılan kalınlıktan küçük ise büyüyen yapılar dislokasyonsuz fakat gerilme altındadır, fakat kritik kalınlık aşıldığı anda dislokasyon oluşumu başlar ve bu seviyeden sonra büyüyen yapı gerilmesiz ve kendi örgü sabiti ile büyür. Burada gerilme 0.03'den büyük ise gerilmeli epitaksi durumu oluşur ve yapı adacık şeklinde büyür (J. Singh, 2008). Kimi zaman bu durum tek boyutlu kuantum noktaları oluşturmak için özellikle istenmektedir.

4.1.3 Kenar Dislokasyonları (Edge Dislocations)

Kenar dislokasyonları kristal malzemenin herhangi bir düzlemine ekstra olarak bir yarım düzlemin gelmesiyle ya da kaybolmasıyla oluşan dislokasyon çeşididir.

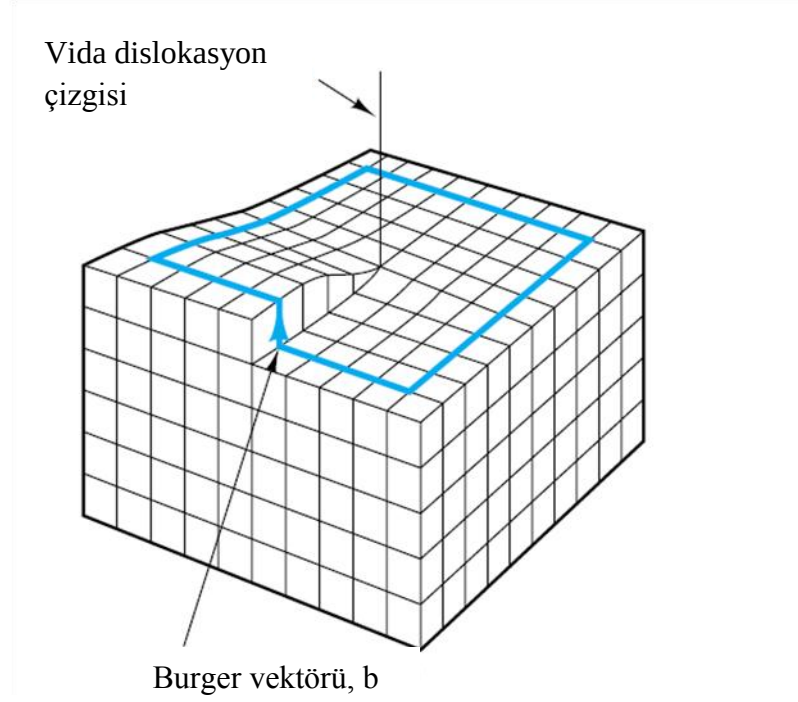


Şekil 4.2 Kristaldeki kenar tipi dislokasyonların şematik gösterimi

Kristalin örgü düzlemlerinde ortaya çıkan bu bozukluk fazladan gerilmeler ortaya çıkarmaktadır. Bu gerilmeler kayma düzlemi olarak adlandırabileceğimiz düzlemin altında gerilme gerilimi, üstünde ise sıkıştırma gerilimi biçiminde kendini göstermektedir.

4.1.4 Vida Dislokasyonları (Screw Dislocations)

Kristal malzemenin herhangi bir düzlem bölgesiyle ayrılan kısmının dönmesiyle ortaya çıkan dislokasyon şeklidir. Kristalin örgü düzlemlerinde ortaya çıkan bu bozukluk fazladan gerilmeler ortaya çıkarmaktadır. Bu gerilmeler kesme gerilmeleri olarak adlandırılmaktadır. Şekil 4.3'de vida tipi dislokasyonun şematik bir gösterimi verilmektedir.



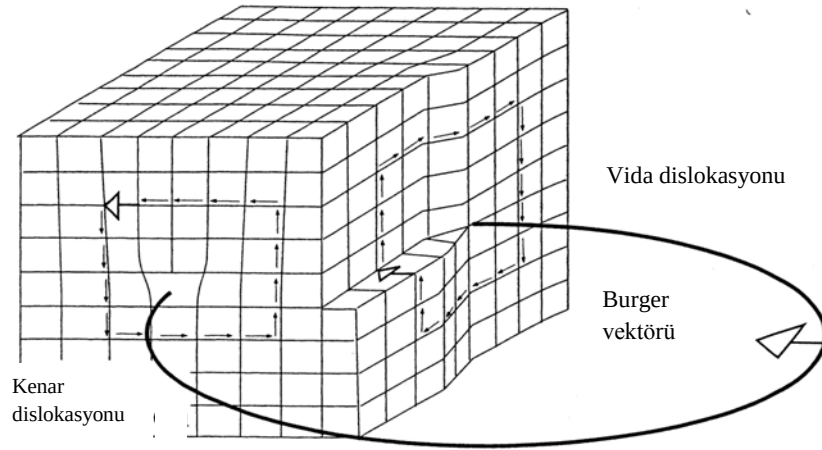
Şekil 4.3 Vida tipi dislokasyonun şematik gösterimi

Vida tipi dislokasyonlar büyütme sırasında atomlar için oldukça elverişli ortamlardır çünkü atomlar düz bir yüzeye yapışmaktansa enerjetik olarak iki yüzeye birden yapışmayı tercih etmektedirler ve bu durum kristal kalitesini olumsuz yönde etkilemektedir.

Kenar tipi dislokasyonların elektron saçılmasını önemli ölçüde artırdığı ve vida tipi dislokasyonların ise ışımsız birleşme merkezleri olarak davrandığı bilinmektedir. Her iki durumda da taşıyıcılar etkilendiğinden cihaz performansı düşmektedir.

4.1.5 Karışım Dislokasyonlar (Mixed Dislocations)

Gerçekte kristal malzemelerdeki dislokasyonlar ne saf olarak kenar tipi dislokasyondur ne de saf olarak vida tipi dislokasyondur. Genellikle bu iki tip dislokasyonun karışımı olan bu tip dislokasyonlara karışım dislokasyonlar (*mixed dislocations*) denmektedir ve Şekil 4.4’de şematik olarak gösterilmektedir.



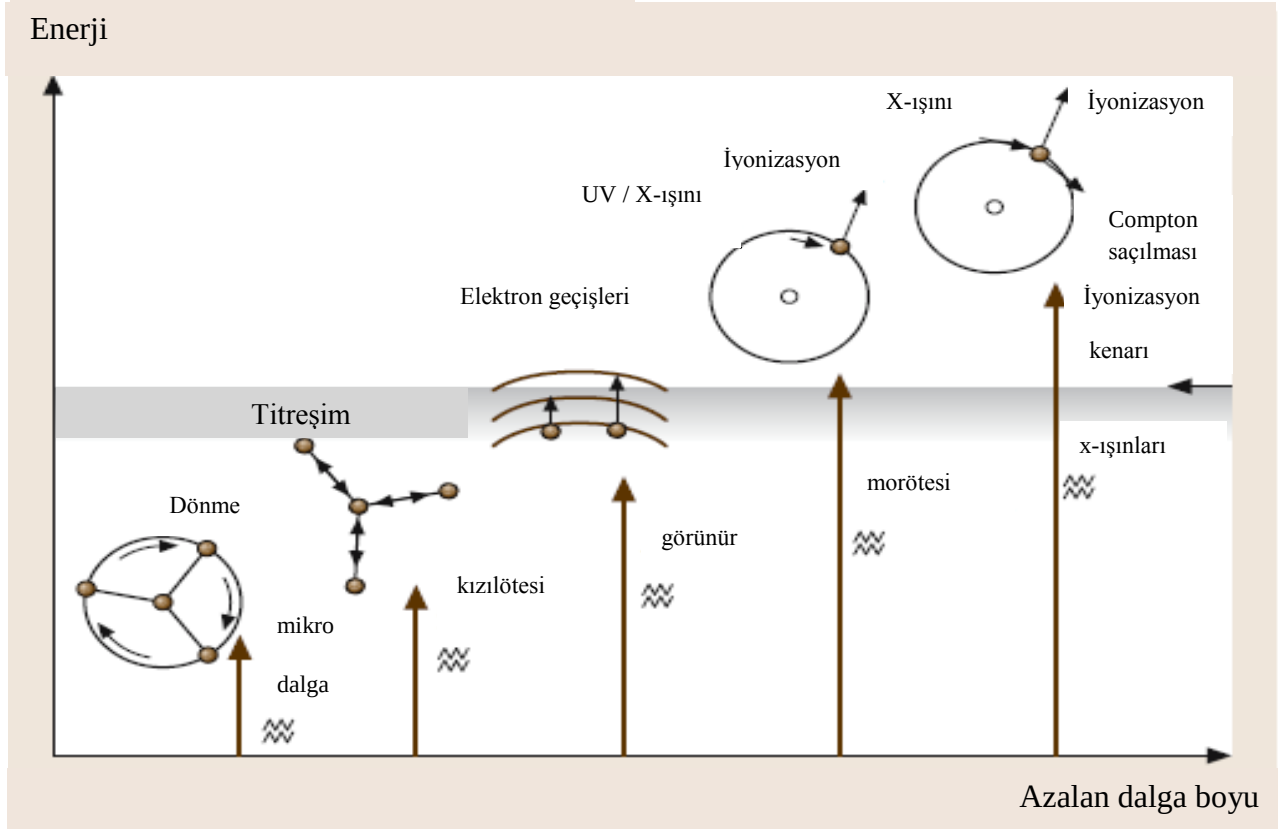
Şekil 4.4 Karışım dislokasyonların şematik gösterimi

Dislokasyonların karakteristiğini, düzlemlerdeki kaymanın yönünü ve büyüklüğünü belirlemede Burger vektörü kullanılmaktadır. Dislokasyon çizgisini kapsayacak şekilde bir atomdan başlayıp saatin dönme yönünde aynı adımlarla bir yol izlenerek başlangıç noktasına dönüldüğünde bitişten başlangıca doğru bir vektör çizdiğimizde ortaya çıkan vektör Burger vektörüdür. Burger vektörü dislokasyon çizgisine dik ise kenar tipi, paralel ise vida tipi dislokasyon mevcuttur.

Bu dislokasyonlar, tabaka kalınlığı ve bileşimi ile ara yüzey pürüzlülüğü x-ışını kırınımı (XRD) veya elektron mikroskobu (SEM veya TEM) teknikleri ile tespit edilebilmektedir (Fewster, 2004). Elektron mikroskobu numunenin belirli bir parçası hakkında bilgi verirken x-ışını kırınım metodu geneli hakkında bilgi verir ve elektron mikroskobu gibi numuneye zarar vermez.

4.2 Radyasyon–Malzeme Etkileşimi

Elektromanyetik spektrumun farklı kısımları frekans ve dalga boylarına bağlı olarak malzemenin enerji durumlarına göre farklı yollarda madde ile etkileşir, izin verilen soğurma veya iyonizasyon etkileri oluşur. Çeşitli radyasyon–malzeme etkileşimi önemli özellikleri Şekil 4.5’de özetlenmiştir.



Şekil 4.5 Enerjili ışımın bir atom veya molekülle etkileşim çeşitleri
(Kasap & Capper, 2006)

Örneğin; mikrodalga enerjisi yaklaşık olarak $10 \mu\text{eV}$ ile 1 meV arasında yaklaşık olarak 1 m ile 0.01 mm arasında bir dalga boyuna karşılık gelen elektromanyetik dalgalardır. Mikrodalga ışıma numune için ısı üretimine yol açar, moleküler dönme ve bükülme kuantum durumları ile etkileşir.

Kızıl ötesi, enerjisi meV-eV boyutunda, 1 mm–1 μ m arasında dalga boyuna sahip elektromanyetik dalgadır. Moleküler titreşim kuantum durumlarıyla etkileşir ve bu yüzden ısı üretimine yol açar.

Görünür ışık yaklaşık olarak 4000 ile 7000 Å arasında dalga boyuna sahip 1-4 eV enerjili elektromanyetik dalgadır. Görünür ışığın fotonunun soğurulması ile elektron daha yüksek enerji seviyelerine geçiş yapar. Görünür ışık ısınmaya sebep olur ancak iyonizasyon oluşturmaz.

Mor ötesi ışık, 10 nm ile 100 nm arasında kısa dalga boyuna ve 0.1-2 keV arasında enerjiye sahip elektromanyetik dalgadır. Mor ötesi ışımının madde ile etkileşimi ise iyonizasyon olarak bilinen maddeden elektronun serbest bırakılması ve x–ışını floresans (XRF) ışıması şeklinde gerçekleşmektedir.

Gama ışınlarının (γ -ışını) enerjileri tipik olarak 0.1-10 MeV arasında olup çekirdek durumları arasındaki enerji farkı mertebesinde. Gama ışınları elektromanyetik spektrumun en kısa dalga boylu (0.1 Å) ve en fazla enerjili olanlarıdır, yüksek enerjilerinden dolayı madde içerisinde yol alabilirler, ışık hızı ile yayılırlar ve iyonlaştırıcı özellikleri vardır.

X–ışını 0.1–100 Å dalga boylu ve 100 eV ile 100 keV arasında enerjiye sahip elektromanyetik dalgadır (He, 2009). Tipik olarak x–ışını kırınımında kullanılan x–ışınlarının dalga boyu 1 Å mertebesinde ve bu değer kristaldeki atomlar arası mesafeye denk gelmektedir. X–ışını malzeme ile frenleme ışınları, dış yörüngelerdeki elektronlardan Compton saçılması ve iç yörünge elektronları ile karakteristik ışınlar ve iyonizasyon biçiminde etkileşir. Ancak bunlardan sadece karakteristik x–ışınları koherent olması sebebiyle kırınım meydana getirir (Kasap & Capper, 2006).

Şekil 4.5’de verilen ışıma-malzeme etkileşimlerinden x–ışınları detaylıca incelenecektir.

5 X-IŞINLARI

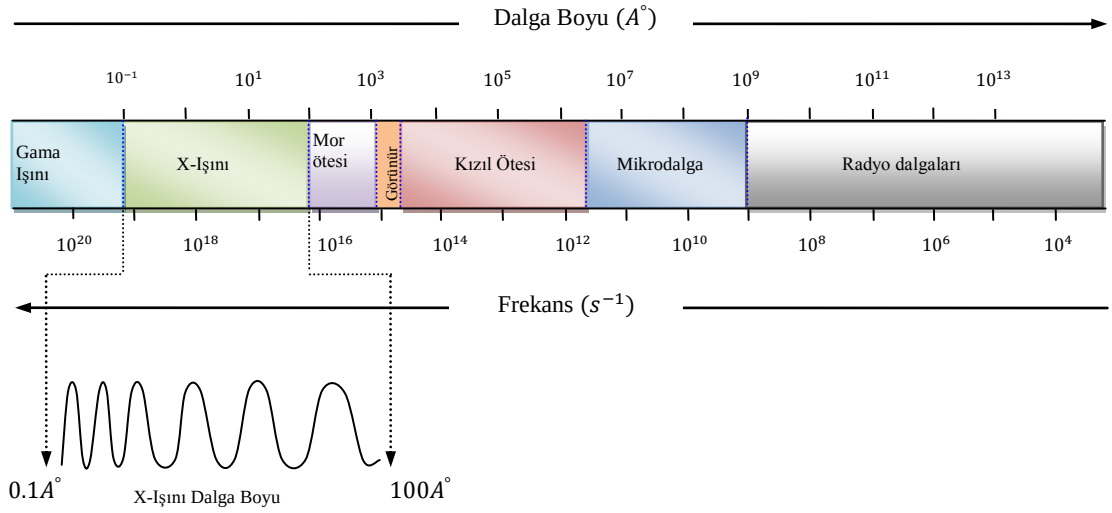
5.1 X-Işınlarnının Tarihçesi

X-ışınları 8 Kasım 1895'te, Alman bilim adamı Wilhelm Conrad Röntgen tarafından keşfedilmiştir. Bu yüzden bu ışınlara Röntgen ışınları da denir. Röntgen, havasının çoğu boşaltılmış bir vakum lambasının içinden geçirdiği elektrik akımıyla deney yaparken, akım geçişi sırasında vakum lambasında garip bir ışınımın oluştuğunu buldu. Deneyi yaptığı tezgâhın üzerinde, lambanın yakınlarında, baryum platinosiyânür bileşiğiyle kaplı bir ekran vardı; lamba siyah kâğıtla kaplı olduğunda bile bu ekranın üzerinde bir flüorışma oluşuyordu. Röntgen bu ışımaya, lamba üzerindeki yeşil flüorışma bölgesinden siyah kâğıdı geçip gelen ışınların yol açtığı sonucunu çıkardı. Ayrıca, lamba ile ekran arasında yer alan cisimlerin gölgelerinin de ekranın üzerine düştüğünü fark etti ve buradan da bu ışınların bazı maddelerden siyah kâğıttaki kadar kolay geçmediği sonucuna ulaştı. Bu çalışmasıyla 1901'de ilk Nobel Fizik Ödülü'nü kazanan Röntgen, bu yeni ve gizemli ışınlara x-ışını adını verdi. Röntgen, katottan gelen ışınların çarptığı herhangi bir katı cismin x-ışınları saldığını da buldu. Katot ışınlarının, elektron adı verilen çok küçük parçacıkların akışı olduğu daha sonra ortaya çıkarıldı. Lambaya katot ışınlarının akış yolu üzerine metal bir hedef yerleştirildiğinde, hareket halindeki elektronların aniden durdurulması sonucunda oluşan x-ışınlarının miktarı, bu elektronların yalnızca lambanın çeperlerine çarpmasıyla ortaya çıkan x-ışınlarının miktarından çok daha fazla olduğu da sonradan bulundu.

X-ışınlarının elektromanyetik enerji dalgaları olduğu ancak 1912'de kanıtlandı. Işık ya da radyo dalgalarına benzemekle birlikte, x-ışınlarının dalga boyu diğer elektromanyetik ışınım biçimlerinininkinden çok daha kısadır.

5.2 X-Işınlarnın Özellikleri

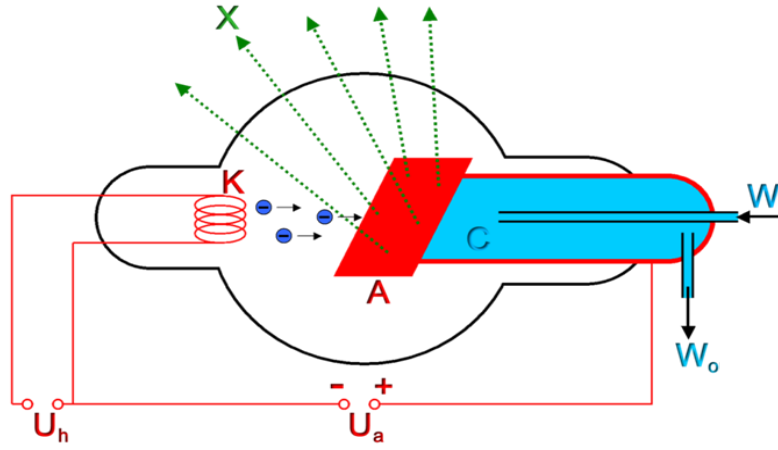
X-ışınları, dalga boyu katı içindeki atomik boyutlarla kıyaslanabilen, incelenen örneğe zarar vermeyen, görünür ışıktan daha kısa dalga boyuna sahip (yüksek frekanslı), görünür bölgede olmadığından gözle görünmeyen, yüksek giriciliği olan elektromanyetik dalgadır. X-ışınları elektromanyetik tayfın morötesi ışınları ile gama ışınları arasında kalan kesiminde yer alırlar. Dalga boyu yaklaşık 10^{-8} m den 10^{-11} m ye kadardır ve bu da yaklaşık 3×10^{16} Hz den yaklaşık 3×10^{19} Hz frekans aralığına karşılık gelir. Dalga boyunun kısa olması, x-ışını fotonlarının daha fazla enerji ile yüklü olması demektir.



Şekil 5.1 Elektromanyetik spektrum

5.3 X-Işınlarnın Üretimi

X-ışınları yeteri derecede kinetik enerjiye sahip yüklü parçacığın hızlı bir şekilde yavaşlatılmasıyla elde edilir (Fewster, 2003). Bu amaç için genellikle elektronlar kullanılır. X-ışınları tüpü vakumlanmış bir cam tüp içerisinde katot ve anot olarak isimlendirilen iki elektrottan oluşur. Katotta, bir ampulünkine benzeyen ve akkor haline geldiğinde elektron bulutu salan tungstenden yapılmış bir filaman vardır. Anot genellikle bakır gibi ısıyı iyi ileten bir malzemeden yapılır ve ucunda farklı bir malzemeden genellikle tungstenden yapılmış, x-ışını hedefi olarak adlandırılan bir bölüm bulunur.



Şekil 5.2 X-ışınları üretim tüpünün şematik gösterimi

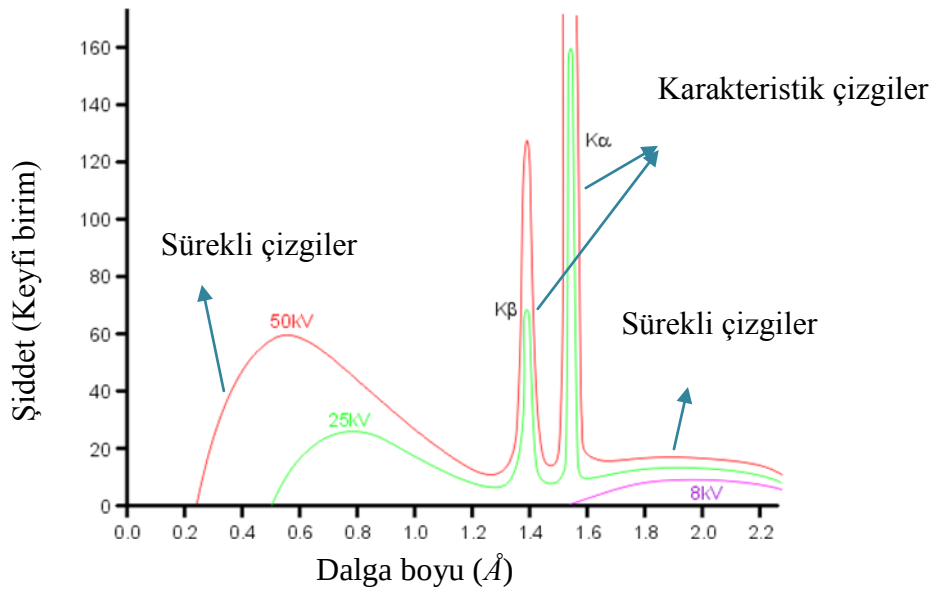
Katot ile anot arasına, genellikle 25 kV-150 kV yüksek gerilim uygulandığında elektronlar filamandan hedefe doğru ivmelenirler. Çok hızlanan bu elektronlar hedefe çarptığında tüm kinetik enerjilerini kaybederler. Bu kinetik enerjinin birçoğu ısıya dönüşür ve sadece yaklaşık % 1'lik kısmı kullanışlı x-ışınına dönüştürülür. Hedeften çıkan x-ışınları farklı dalga boylarının bileşimidir ve şiddetteki bu değişim ise tüp voltajına bağlıdır.

X-ışınları sürekli ve karakteristik spektrum olmak üzere iki spektrumda incelenir.

5.4 Sürekli Spektrum

Frenleme x-ışınları diye bilinen x-ışınları, yeterli kinetik enerjiye sahip elektriksel olarak yüklü parçacıkların (genellikle elektronlar) aniden frenlenmesi ile oluşur. Sürekli spektrumu oluşturan bu frenlemenin esası şudur: Elektrik alanında hızlandırılmış yüklü parçacık hedef metalin atomlarının çekirdeği civarında bu atomun (ya da atomların) elektrik alanından etkilenir ve yavaşlar, yani negatif bir ivme ile hareket eder, bu nedenle de ışıma yapar. İşte bu yavaşlamanın nedeni ile oluşan ışınlara frenleme ışınları anlamında Bremstrahlung ışıması denir.

Bakır (*Cu*) hedefe uygulanan hızlandırma voltaj şiddetinin hedef tarafından yayılan x-ışını dalga boyuna karşılık çizilen grafiği Şekil 5.4’de gösterilmektedir. Şiddet kısa dalga boyu (λ_{min}) olarak adlandırılan belirli (kritik) dalga boyuna kadar sıfırdır ve bir maksimuma kadar hızlıca artar, daha sonra daha uzun dalga boylarında yavaş yavaş azalır. Tüp voltajı arttığında tüm dalga boylarının yoğunluğu artar ve hem kısa dalga boyu limiti (λ_{min}) hem de maksimumun konumu daha kısa dalga boylarına kayar. Şekilde gösterilen eğri heterokromatik, beyaz veya sürekli ışıma olarak adlandırılır.



Şekil 5.3 Bakır hedef kullanılarak farklı voltaj değerleri için elde edilen x-ışınlarının şiddet-dalga boyu grafiği (D. K. Bowen, 1998)

$$eV = hv_{max} \quad [5.1]$$

$$\lambda_{swl} = \lambda_{min} = \frac{c}{v_{max}} = \frac{hc}{eV} \quad [5.2]$$

$$\lambda_{swl} = \frac{12400}{V} \quad [5.3]$$

e : Elektronun yükü ($-1.6 * 10^{-19}C$)

V : Uygulanan voltaj (volt)

h : Planck sabiti ($6.626 * \frac{10^{-34}m^2kg}{s}$)

v_{max} : Büyük frekans limiti (1/s)

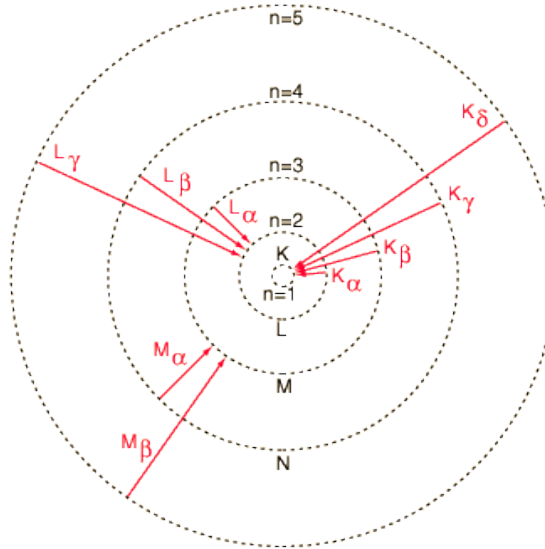
λ_{swl} : Kısa dalga boyu limiti (Å)

[5.6] denklemini uygulanan voltaja göre kısa dalga boyu limitini verir. Böyle bir etkiye maruz kalan elektron enerjisinin sadece bir bölümünü ışığa çevirir ve böylece hv_{max} 'dan daha küçük enerjiye sahip foton yayar ve x- ışını dalga boyu λ_{swl} 'den daha uzun bir dalga boyuna karşılık gelir. Bu dalga boylarının tümü sürekli spektruma neden olur. Birim zaman başına toplam x-ışını enerjisi eğrinin altındaki alan tarafından verilir ve hedef materyalin atom numarası (Z) ve tüp akımına (i) bağlıdır (Cullity, 1978).

$$I_{sürekli\ spektrum} = AiZV^m \quad [5.4]$$

5.5 Karakteristik Spektrum

X-ışını tüpünün gerilimi, belli bir kritik değerin üzerine çıkarılırsa, sürekli spektrumun üzerine binmiş tarzda, belli dalga boylarında keskin şiddette maksimumlar (keskin pikler) oluşur (Şekil 5.3). Çok dar oldukları ve dalga boyları kullanılan hedef metalin karakteristikleri oldukları için karakteristik çizgiler olarak adlandırılırlar. Hedef olarak kullanılan metalin karakteristik spektrumunu birlikte oluşturan tüm bu çizgiler, artan dalga boyuna göre K, L, M, ... olarak adlandırılan farklı gruplara ayrılırlar. Şekil 5.4’de bir atomdaki elektron geçişlerinin şematik gösterimi verilmiştir (Cullity, 1978).



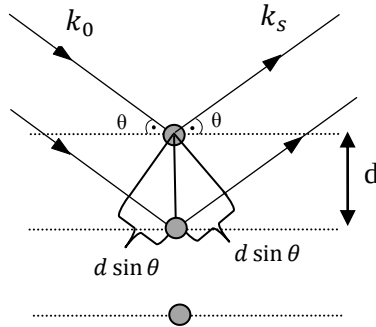
Şekil 5.4 Bir atomdaki elektron geçişleri

Atom merkezi bir çekirdek ile bu çekirdeği çevreleyen $K, L, M \dots$ olarak belirlenmiş farklı yörüngelerdeki elektronları içerir. Bu yörüngeler $n = 1, 2, 3 \dots$ gibi temel kuantum sayılarına denk gelir. Yeterli büyüklükte kinetik enerjiye sahip bir elektron hedefe çarptığında K yörüngesinden bir elektron koparabilir ve böylelikle atom uyarılmış duruma geçer. Boş kalan konum dış yörüngedeki elektronlardan biri tarafından doldurulur ve bu durumda enerji yayımlanır. Bu karakteristik K ışınımına karşılık gelir (Benzer şekilde L yörüngesindeki boş durum diğer yörüngelerdeki

elektronlar tarafından doldurulduğunda L karakteristik ışıınımı oluşur.). Bitişik yörüngeler arası geçişler α geçişi ve bitişik olmayan yörünge geçişleri β geçişi olarak adlandırılır. Böylece K yörüngesi, L yörüngesi tarafından doldurulmuşsa K_α ışıması ve M yörüngesi tarafından doldurulmuşsa K_β ışıması adını alacaktır. Aynı yörünge içersindeki elektronlar arasında bile enerji farklılıkları olduğundan karakteristik ışıınım çizgileri 1, 2, 3, ... alt indisleri tarafından belirlenmektedir (örneğin $K_{\alpha_1}, K_{\alpha_2}$ ve K_{β_1} gibi).

5.6 X-Işını Kırınımı

Malzemenin yapısı ve kırınım deseni arasındaki ilişki hakkında birçok teori ve eşitlik vardır. Bragg yasası bir kristalin x-ışıını kırınımını tanımlamadaki basit yollardan biridir.



Şekil 5.5 X-ışınlarının bir kristalin düzlemlerinden kırınımı: Bragg Kanunu

$$n \lambda = 2d \sin \theta \quad [5.5]$$

n : Tamsayı

λ : Dalga boyu (Å)

d : Atomlar arası mesafe (Å)

θ : Kırınım açısı (°)

Bragg bir kristalde kırınımın olabilmesi için kristal üzerine gelen koherent monokromatik x-ışınları demetini kullanmıştır. Ardışık saçılma merkezlerinin x-ışınlarını yansıtan veya kıran paralel düzlem takımları ile temsil edilebileceğini kanıtlamıştır. Saçılan x-ışınlarının yapıcı girişimi için ardışık düzlemlerden yansıyan demetlerin kristal yüzeyini terk ettikten sonra, aynı fazda olmaları gerekir. Bragg yasası yalnızca, d düzlemler arası mesafe olmak üzere, $\lambda \leq 2d$ olması halinde söz konusudur.

Bragg yansımasında kırınım deseninde ardışık düzlemlerden yansıyan dalgalar arasındaki faz farkı 2π 'nin tam katları olunca saçılan ışınlar birbirini kuvvetlendirir ve maksimum şiddette kırınım oluşur. Bir örgüde farklı düzlem takımlarında düzlemler arasındaki mesafeler farklı yönelimler için farklı olabilir. Uzaklıkları büyük olan düzlemlerin indisleri küçüktür. X-ışını kırınım (XRD) deseni her bir malzeme için tek olan bir nevi parmak izi gibi düşünülebilir (Aydoğan, 2011).

Kübik kristal sistemleri için örgü düzlemleri arasındaki uzaklık;

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad [5.6]$$

Ayrıca kübik kristaller için izinli ve izinli olmayan kristal düzlemleri

$$F_{hkl} = \sum_{i=1}^N f_i e^{-2\pi i(hu_i + kv_i + lw_i)} \quad [5.7]$$

Yapı faktörü olmak üzere f_i atomik yapı faktörü u , v , w ise atomların pozisyonlarıdır. Kübik kristaller için temel atom $(0, 0, 0)$ merkezde ve diğer atomların pozisyonları $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ olduğundan yapı faktörü

$$F_{hkl} = f \{ 1 + e^{-\pi i(h+k)} + e^{-\pi i(k+l)} + e^{-\pi i(h+l)} \} \quad [5.8]$$

şekline gelir ve burada h , k ve l 'nin belirli değerlerinde yapı faktörü terimi sıfır değerini alır. Yapı faktörünün sıfır olması da kristalden kırınım deseninin gözlemlenemeyeceği anlamına gelmektedir. Burada asıl incelenen yapı faktörü değil karesi olduğundan;

$$F_{hkl}=4f, F_{hkl}^2=16f^2$$

$$F_{hkl}=0, F_{hkl}^2=0$$

h, k, l nin hepsi tek veya hepsi çift ise
diğer durumlarda

denklemleri elde edilmektedir. Buradan da ilk şartı sağlayan düzlemlerden en şiddetli kırınım deseni oluşacağı son şartı sağlayanlarda ise kırınım deseni oluşmayacağı anlaşılmaktadır. Burada h, k, l Miller indisleridir.

5.7 SmartLab Yüksek Çözünürlüklü X-Işını Difraktometresi

Tez çalışması kapsamında kullanılan deney sistemi Cumhuriyet Üniversitesi Nanoteknoloji Merkezinde bulunan Rigaku SmartLab x-ışını difraktometresidir (Şekil 5.6). Cihaz ince filmlerin, toz ve külçe numunelerin yapısal analizini yapmaktadır. Ayrıca cihazda;

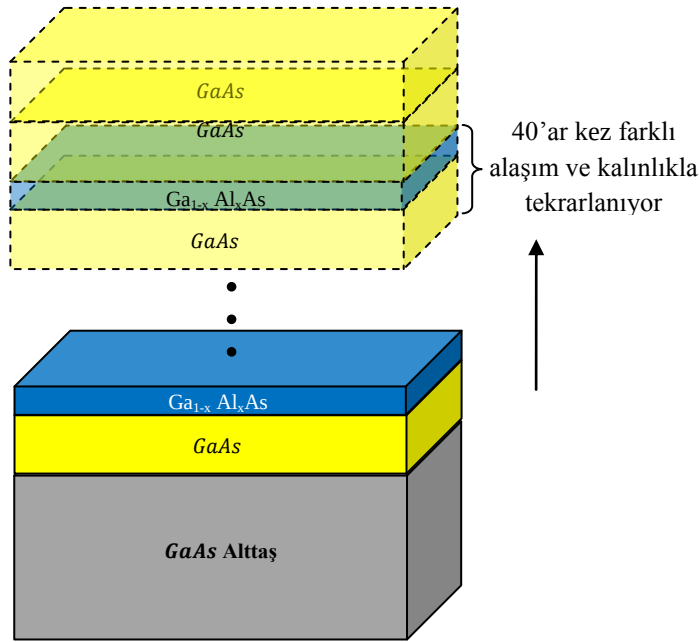
- ✓ X-ışını kaynağı olarak döner anodlu bakır (Cu) hedef kullanılmakta,
- ✓ Üretilen karakteristik x-ışınlarının dalgaboyu $K_{\alpha 1}=0.154059$ nm ve gücü 9 kW (max voltaj 45 kV, max akım 200 mA),
- ✓ Cu kaynak, 4-kristalli Ge (022) yönelimli monokromatör kullanılmakta ve
- ✓ Monokromatörün çözünürlüğü (002) yönelimli Si alttaş için $0,003^\circ$ olarak ayarlanmıştır.



Şekil 5.6 Rigaku SmartLab yüksek çözünürlüklü x-ışını difraktometresi

6 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs Heteroyapısının X-Işını Kırınım Metoduyla Yapısal Karakterizasyonu

Cumhuriyet Üniversitesi Nanoteknoloji Merkezinde bulunan Rigaku Smartlab XRD sistemi ile şu ana kadar çeşitli x-ışınları analizleri yapılmış ve bu çalışmalar üç yüksek lisans tezi olarak toplanmıştır. Bu çalışmalarda sistemin detaylı tanıtımı ve özellikleri yapılabilen tarama türleri açıklandığından bu çalışmada tekrar niteliğindeki bu bilgiler verilmemiş sadece kısa özet verilmiştir. Şu ana kadar yapılan çalışmalarda Co/Cr metalik çok tabakalı yapılar, GaN/AlN iki tabakalı yapısı detaylıca incelenmiştir. Bu tez çalışması kapsamında ise moleküler demet epitaksi (MBE) epitaksiyel tekniği ile büyütülmüş (001) kristal yönelimli toplam kalınlığı 635 μm olan örgü uyumlu değişken alaşımlı toplamda 40 adet tekrarlanan GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs tabakası içeren ve yapı detayı Şekil 6.1’de gösterilen GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs süper örgü (superlattice) yapısıdır.



Şekil 6.1 MBE ile büyütülmüş GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısının şematik gösterimi

Çizelge 6.1’de her bir tabakanın kalınlık ve konsantrasyon bilgisi verilmiştir. Burada özetlemek gerekirse, alttaş üzerine olası yüzey kusurlarını düzeltmek ve düzgün bir yüzey elde etmek için 1500 nanometre (nm) kalınlığında bir tampon (buffer layer) tabakası büyütülmüş üzerine sırası ile %35, 30, 24 ve 21 olan dört ayrı Al alaşımında tekrar eden GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs süper örgüleri büyütülmüştür. Büyütülme 1000 nm kalınlığında GaAs tabakası ile sonlandırılmıştır. Söz konusu yapı QWIP yapımı için büyütülmüştür.

Çizelge 6.1 GaAs alttaş üzerine büyütülmüş GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs süper örgü yapısı için büyütülmek istenen tabakaların kalınlık, katkılanma ve yapı içerisinde tekrarlanma değerleri

Tabaka	Grup	Tekrarlanma	Katkılanma Oranı (%)	Tabaka Kalınlığı (nm)
GaAs				1000
GaAs	1	10		50
Ga _{1-x} Al _x As	1		21.0	40
GaAs	1			5.5
Ga _{1-x} Al _x As	1		24.0	40
GaAs	1			5
Ga _{1-x} Al _x As	1		30.0	40
GaAs	1			4
Ga _{1-x} Al _x As	1		35.0	40
GaAs				1500
GaAs (alttaş)				

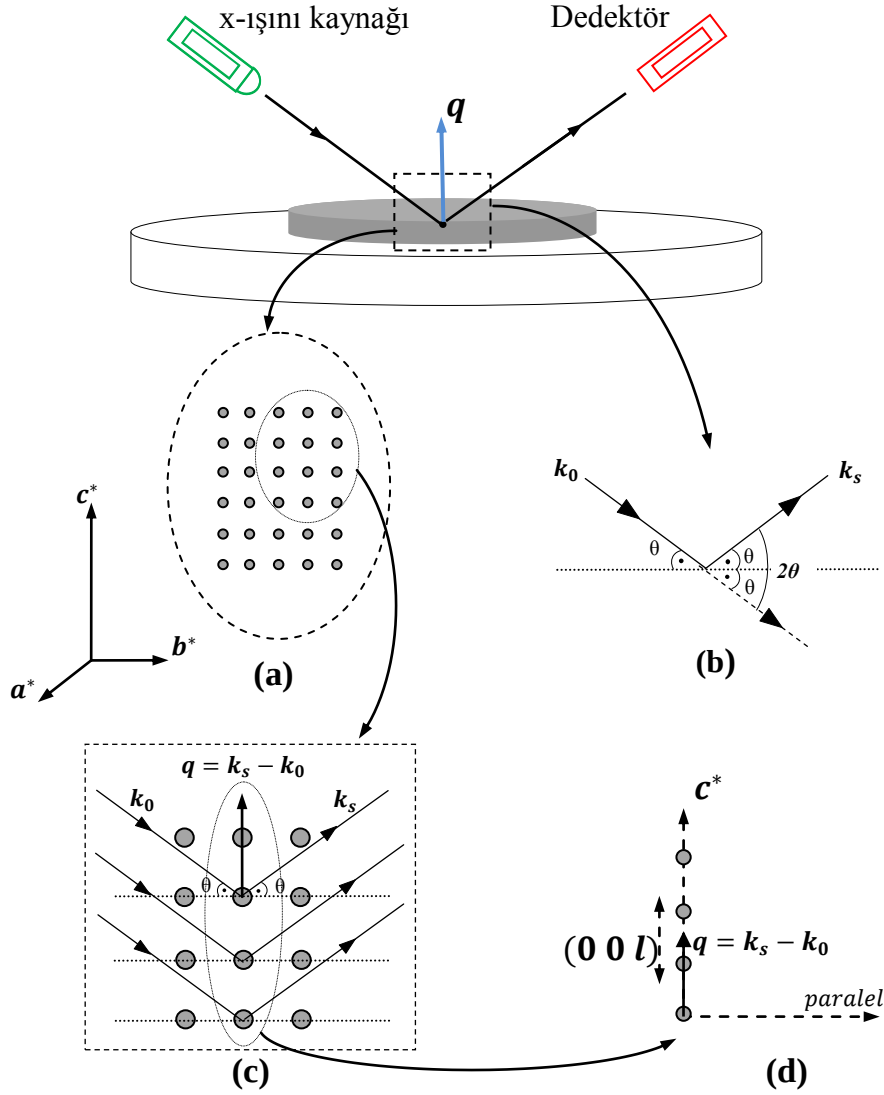
Bu kesimin kalan kısmında kısaca x-ışını taramaları ve bu taramalar ile elde edilecek sonuçlar hakkında bilgiler verilecektir.

6.1 Dik (Out-Plane) X-Işını Taramaları

Bu tarama çeşidinde momentum geçiş vektörü taranan numune düzlemine diktir, yani büyütme doğrultusundadır. Geliş açısının değişimi ile momentum geçiş vektörünün yönünü değiştirmeksizin büyüklüğü değiştirilebilir. Böylece, yapılan x-ışını taraması büyütme eksenini boyunca çok tabakalı yapıyı araştırır. Bu tip taramanın kırınım şekillerinden, ince çok tabakalı yapının periyodu, katman kalınlığının değişimi, ara yüzlerin keskinliği, katmanlar arasındaki yayınım, dik zorlanma ve materyallerin kristalografik yönelimi hakkında bilgi elde edilir.

6.1.1 θ - 2θ Taraması

Kalın bir alttaş üzerine büyütülen ince filmler için bu taramalar genellikle yansıma geometrisinde oluşturulur ve bazen (001) taramaları olarak da isimlendirilirler. Şekil 6.2’de θ - 2θ taraması şematik olarak gösterilmektedir. İlk şekilde tez kapsamında kullanılan x-ışını tarama sisteminin x-ışını kaynağı, dedektörü, numune tutucu üzerine kabaca çizilmiş ve tutucu üzerinde numune gösterilmiştir. Şekil 6.2 (b)’de ters uzayda tek bir örgü noktasından yansıma, (c) ve (d)’de ise taramanın ters uzayda örgü noktaları üzerinde nasıl gerçekleştiği göstermiştir.



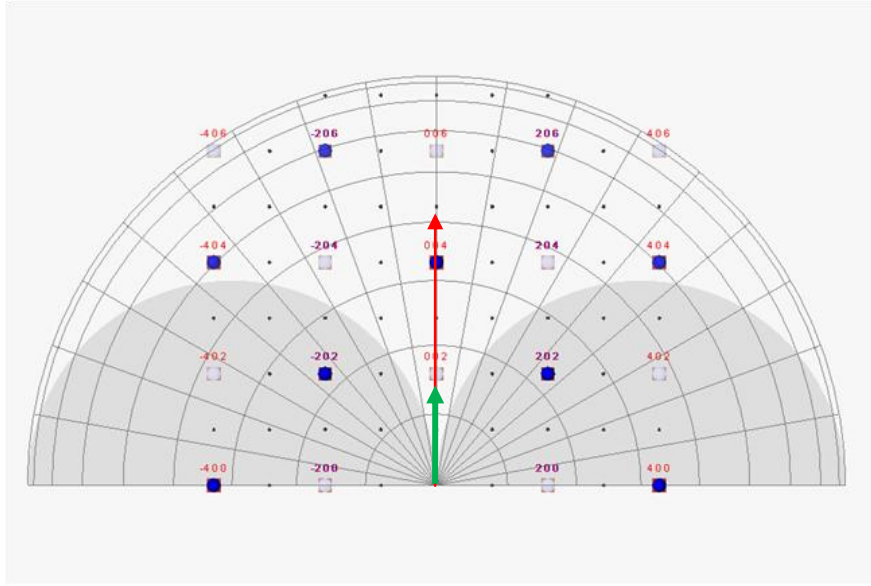
Şekil 6.2 Dik (out-plane) θ - 2θ tarama geometrisi ve ters uzay

Bu radyal taramalar büyütme doğrultusuna paralel numune düzlemlerini taramamızı sağlar. Bu tarama ters örgü gösterimi düşünülerek daha güzel anlaşılabilir. Şekil 6.2 (d)'de gösterildiği gibi momentum geçiş vektörünün ucu ters uzayın orijinden geçen bir çizgi boyunca c^* yönelimini tarar.

Genel olarak dikey x-ışını taramalarını iki bölgeye ayırmakta fayda vardır. Bunlar küçük açı x-ışını taraması bölgesi (**SAXS**, small angle x-ray scattering veya **GAXS**, grazing angle x-ray scattering) ve büyük açı (veya geniş açı) x-ışını taraması bölgesidir (**LAXS**, **WAXS**). SAXS $2\theta \leq 8^\circ$ bölgesine karşılık gelirken WAXS, daha büyük açı değerleri için yapılan tarama tipidir. Bu tarama ile kristalografik yönelimleri,

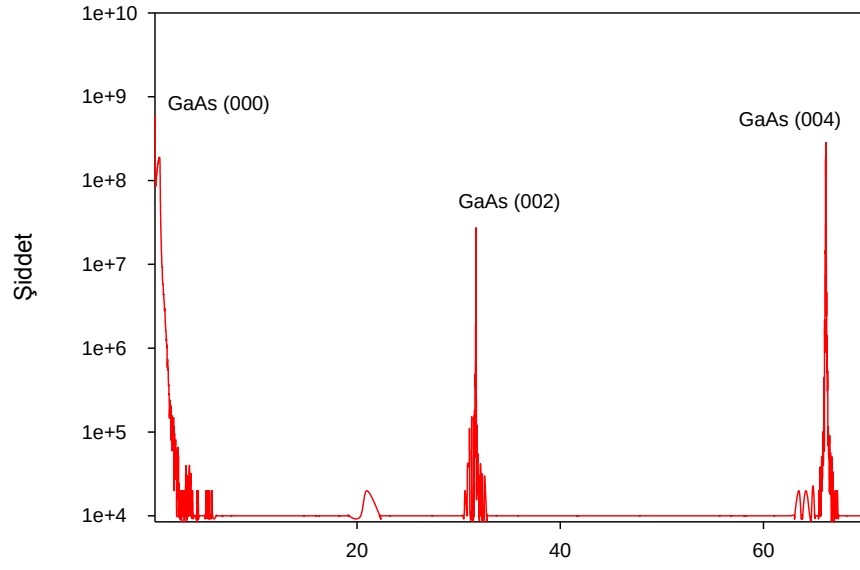
kristallik durumu ve gerilme-büzölme derecesi gibi katmanlarının yapısal detayları hakkında hassas bir bilgi alınır.

Rigaku SmartLab yüksek çözünürlüklü x-ışını difraktometresi kullanılarak, (001) yönelimli GaAs alttaşı üzerine büyütülmüş GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısının gözlenen (004) kristal düzlemi için ters uzay geometrisi Şekil 6.3’de gösterilmektedir. Şekildeki kırmızı kutucuklar AlAs, mavi daireler ise GaAs’a karşılık gelmektedir ve (004) düzleminde GaAs ve AlAs tam olarak üst üste gelmişlerdir.



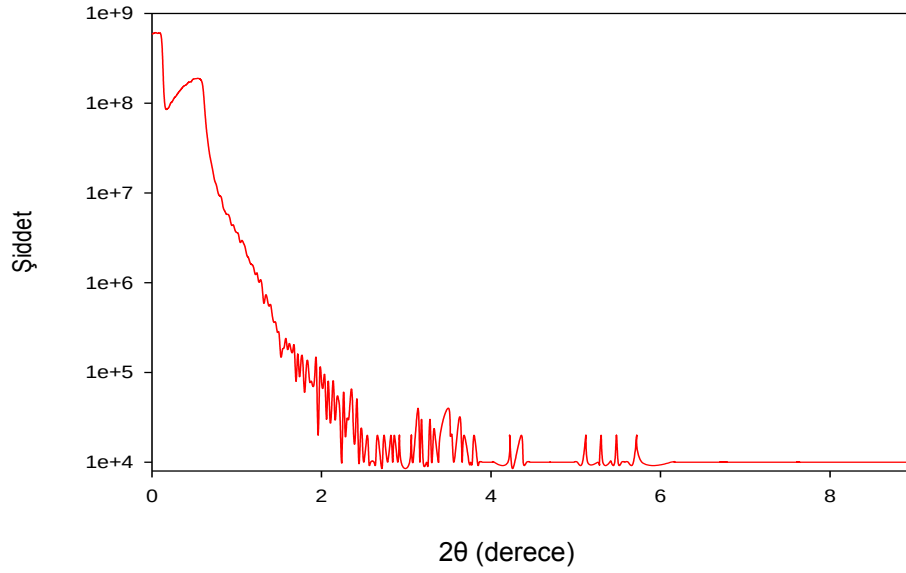
Şekil 6.3 (004) kristal düzleminin ters uzayda gösterimi

Rigaku SmartLab yüksek çözünürlüklü x-ışını difraktometresi kullanılarak, (001) yönelimli GaAs alttaşı üzerine büyütülmüş GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs heteroyapısının 0°–70° aralığında normal çözünürlüklü θ -2 θ taraması Şekil 6.4’de gösterilmektedir.

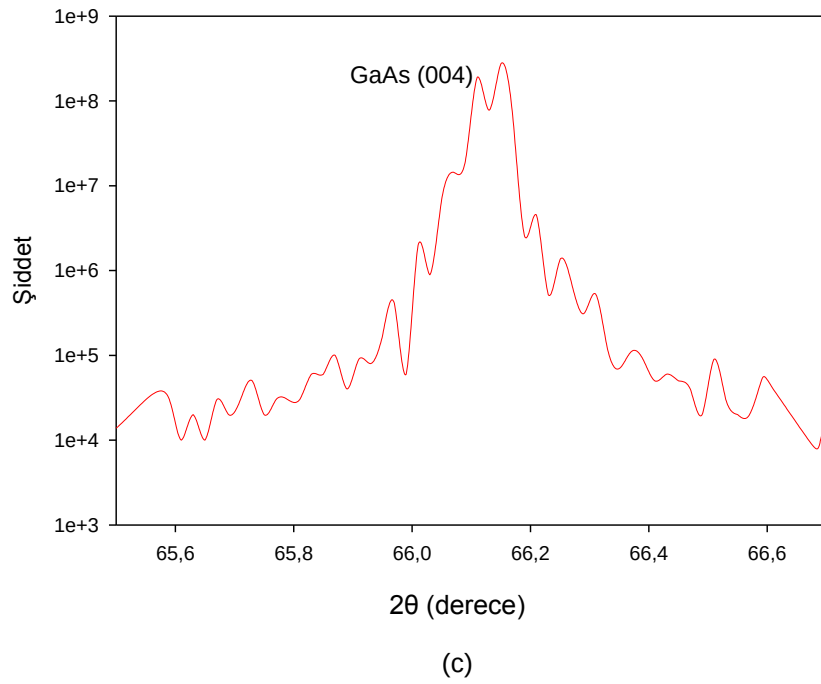
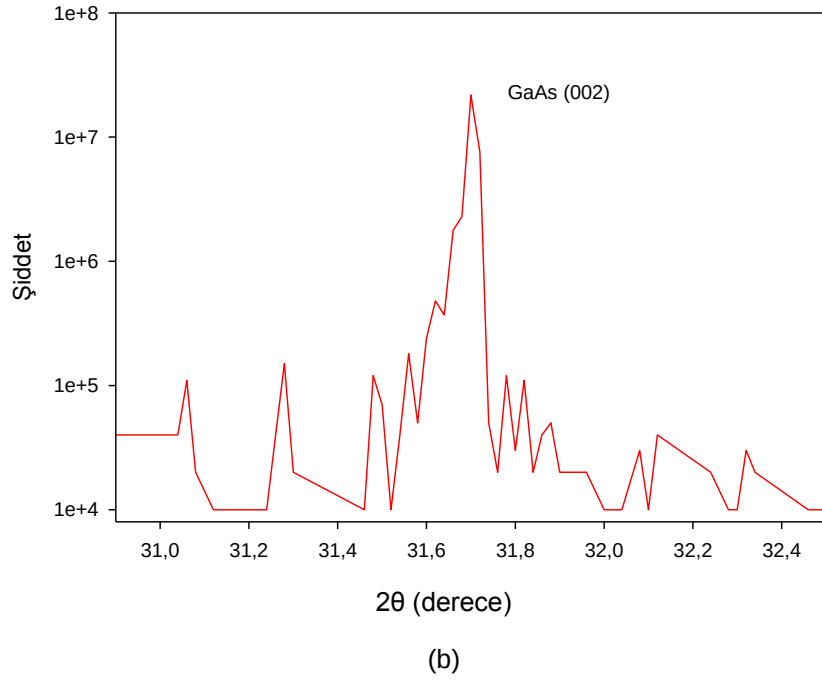


Şekil 6.4 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısının 0°–70° aralığındaki θ -2 θ taraması

Bu taramanın üç farklı bölgesi Şekil 6.5’de gösterilmektedir.

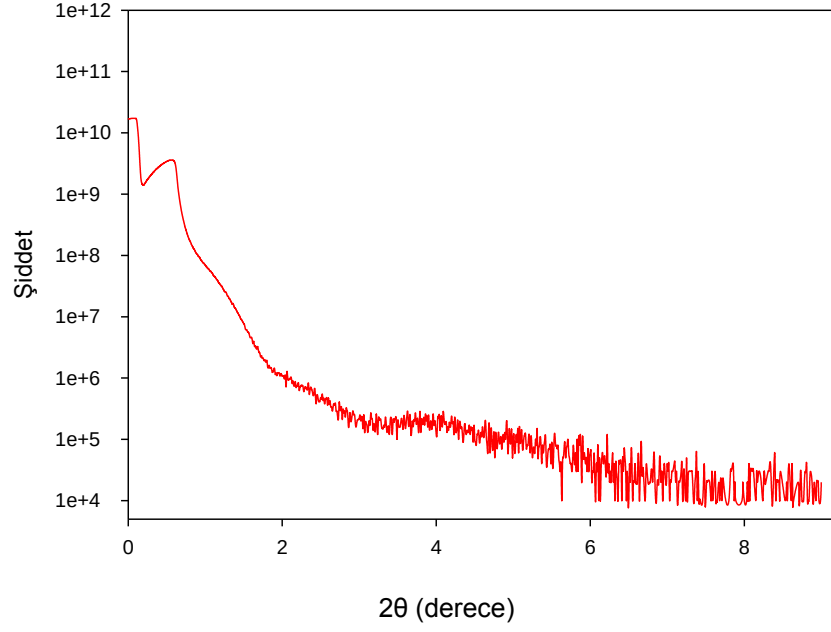


(a)

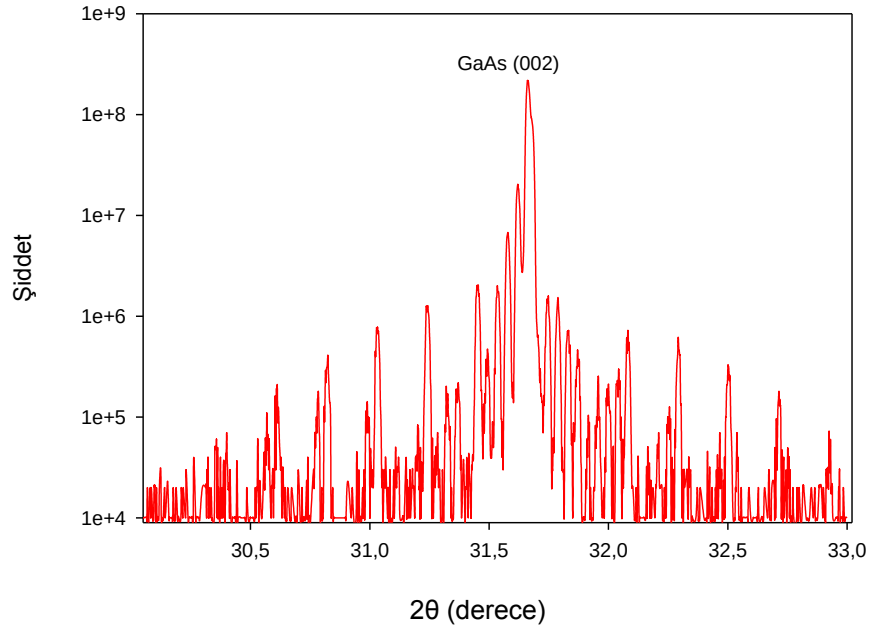


Şekil 6.5 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısının (a) 0° – 9° , (b) $30,5^\circ$ – $32,5^\circ$ ile (c) $65,5^\circ$ – $66,7^\circ$ aralığında normal çözünürlükle yapılan θ - 2θ taraması

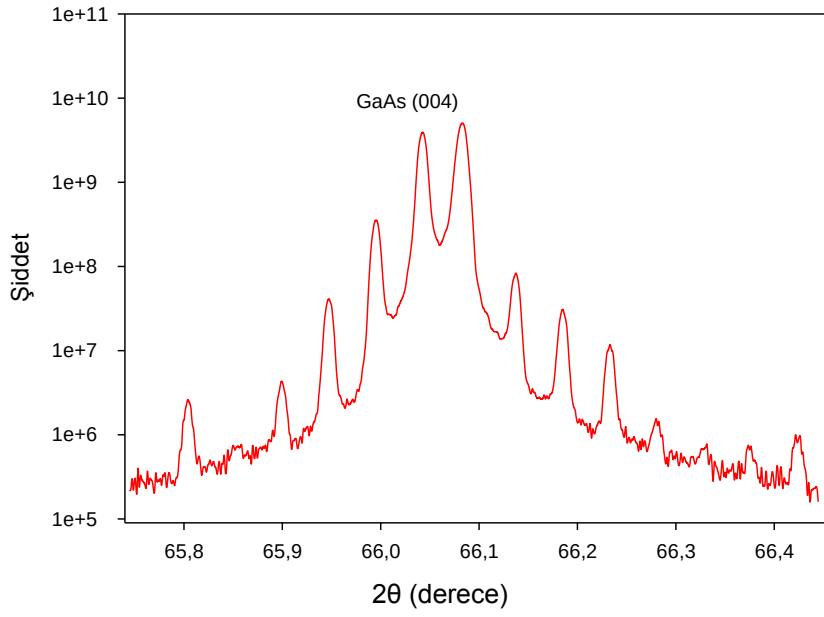
Açıkça görüldüğü gibi (002) ve (004) GaAs pikleri gözlenmektedir, ancak daha detaylı bilgi için taramanın yüksek çözünürlükle ve uzun süreli bir şekilde yapılması gerekmektedir. Yüksek çözünürlüklü taramaların sonuçları Şekil 6.6'da verilmiştir.



(a)



(b)



(c)

Şekil 6.6 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısının yüksek çözünürlüklü (a) 0°–9°, (b) 30.5°–32.5° ile (c) 65.5°–66.7° aralığında yüksek çözünürlükle yapılan θ -2 θ taraması

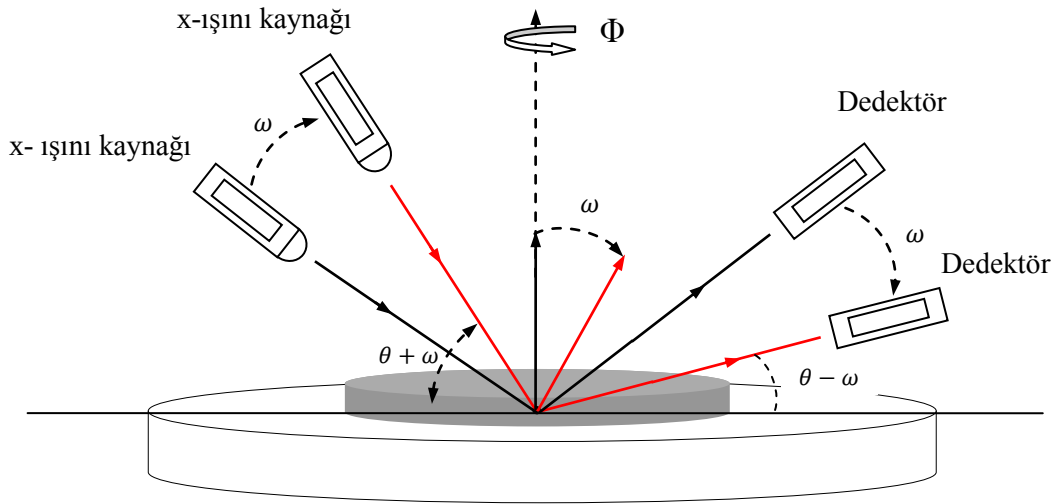
Geniş açılı içeren out-plane (dikey) taramalarında sadece alttaşı piki değil aynı zamanda süper örgü pikleri de net bir şekilde gözlemlenmiştir. Piklerde yarımaların olmaması ve şiddetlerinin de en az ilk dört uydu (stallite peaks) pikleri için merkezden dışa doğru azalan yönde olması yapı kalitesinin oldukça iyi olduğunun açık göstergesidir. İlk grafiklerle verilen küçük açı taramaları ile de yapının kompozisyonu hakkında bilgi almak mümkündür ancak bunun için daha çok numune üzerinde tarama yapılması ve simülasyon çalışmaları yapılması gereklidir. Bu çalışmalar da yapılmaktadır ancak bu tez çalışması kapsamında yeterli veri olmamasından dolayı (bunun için gerekli SAXS kiti ve numune tutucuların alımı yapılarak bu çalışmaların da yapılması mümkün olacaktır) bu çalışmalara yer verilmemiştir.

Geniş açı taramalarından yapıdaki GaAs alttaşı örgü sabiti hesaplanarak gerçek örgü sabiti ile arasındaki farklar hesaplanmıştır. Grafikten GaAs (004) için Bragg açısı alınıp Denklem [5.1] ve [5.2] yardımıyla ve $h=0$, $k=0$, $l=4$ Miller indisleri yerine yazılıp gerekli değerlerin eklemesi ile, örgü sabiti $a_{\text{GaAs}}=5.6539 \text{ \AA}$ olarak bulunmuştur. GaAs'ın literatürde verilen örgü sabiti değeri ise $a_{\text{GaAs}}=5.65325 \text{ \AA}$ 'dur. Burada hesaplanan örgü sabiti ile literatürde bulunan değerler arasındaki bağıl hata % 0.011'dir. Bu da sistemin çok güvenilir bir şekilde veri aldığının güzel bir göstergesidir. Bu noktada eğer süper

örgü değil de kalın bir GaAs ve $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ tabakası olsa idi kinematik kırınım sonuçları kullanılarak alttaş pikinin sağında beklenen $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ piki bulunarak x değeri hesaplanabilirdi. Bu şekilde $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ piki alınarak yapılan hesaplama sonucunda bulunan Al konsantrasyonu $x=0.534$ 'dir. Bu değer açıkça yanlıştır. Bunun sebebi çok katmanlı yapılarda ardışık saçılmalar nedeni ile oluşan uydu piklerinin konumlarından alaşım değeri x 'i bulmak için dinamik saçılma hesaplamalarını yapılması gerekliliğidir.

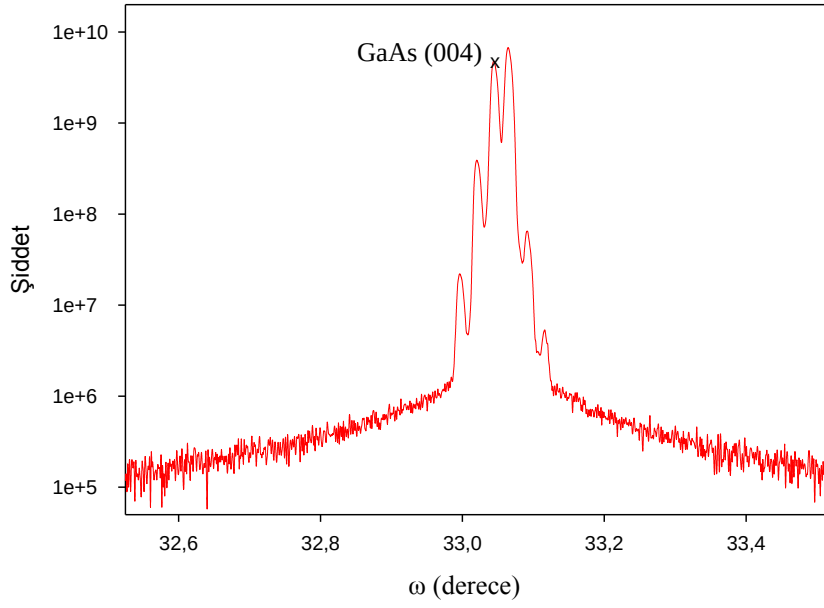
6.1.2 Sallantı Eğrileri (Rocking Curve) ve Phi (Φ) Taraması

Phi (Φ) taraması out-plane geometride yüzeye dikliğin, alttaş ve film eğriliğinin incelenmesidir. Dik sallantı eğri (rocking curve) taramaları (ω) ara yüzlerdeki pürüzlülüğü (roughness) ve paralel (in-plane) tutarlı uzunluk (coherence length) hakkında bilgi verir. Şekil 6.7'de ω ve Φ taramaları şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 6.7 ω ve Φ taramalarının şematik gösterimi (Bulut, 2010)

İncelenen numunede epitaksiyel büyütmenin kontrol edilebilmesi için in-plane ve phi taramaları yapılmalıdır. Ancak numunenin direk in-plane taramasına izin vermeyecek kadar kalın olması sebebiyle in-plane geçiş taraması yapılmamıştır. Bu durumda numune inceltirilerek tarama yapılabilirdi, ancak asimetrik taramalar yardımı ile aynı sonuç elde edildiğinden in-plane taramalarına gerek kalmamıştır.



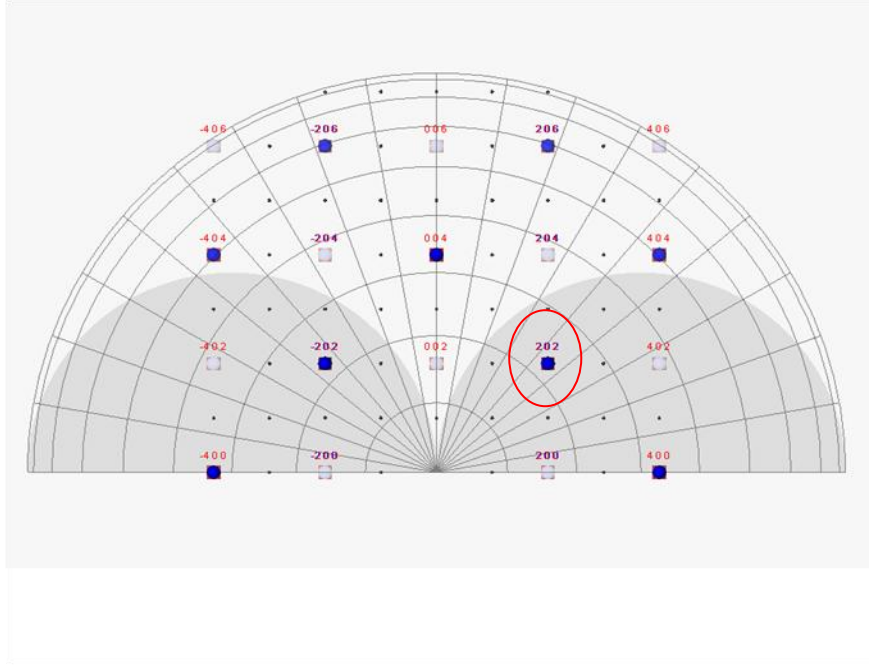
Şekil 6.8 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısının 32.5°–33.5° aralığındaki ω taraması

GaAs piki alınarak yapılan hesaplar sonucu yarı yükseklikteki maksimum genişlik (FWHM) 0.01 ve yanal tutarlı uzunluk (lateral coherence length) 1611 nm değerinde bulunmuştur.

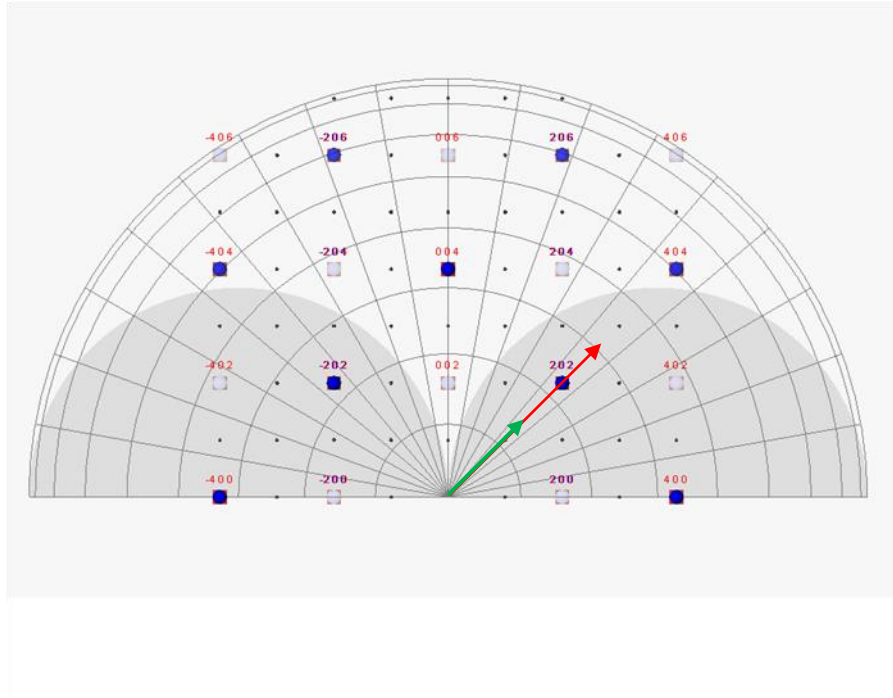
6.2 Asimetrik Taramalar

Saçılma vektörünün düzlemde ya da düzleme dik olmadığı tarama çeşitleridir, kısaca Miller indisleri h , k ve l 'nin en az ikisinin sıfırdan farklı olduğu durumlar asimetrik kristal düzlemlerini temsil etmektedirler ve bu düzlemlerin x-ışını kırınımı taramalarına asimetrik taramalar denmektedir.

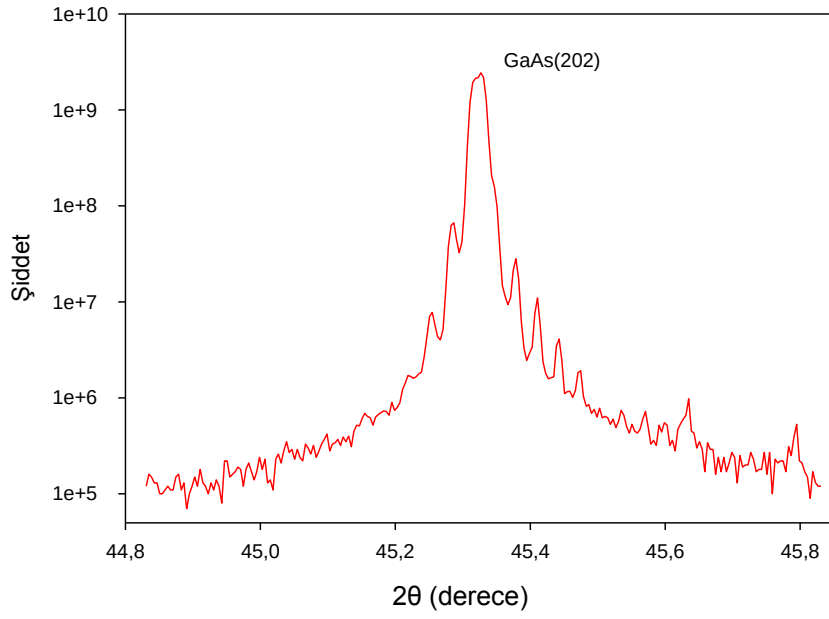
GaAs yapısı için (202) şiddeti yüksek asimetri tarama noktalarından birisidir. Şekil 6.9'da bu pik ters örgü uzayında gösterilmiş burada gerçekleştirilen tarama ise Şekil 6.10'da geometrik olarak gösterilmiştir. Bu bölgedeki taramalar out-plane göre daha zayıf şiddete sahip olmasına rağmen örgülerin hem in-plane hem de out-plane özelliklerinin ölçülmesine olanak vermektedir. Şekil 6.11'de bu taramanın sonucu gösterilmiştir.



Şekil 6.9 Süper örgü yapısının ters uzayda gösterimi ((202) işaretlenmiştir)



Şekil 6.10 Ters uzayda (202) doğrultusunda yapılan asimetric θ - 2θ taraması

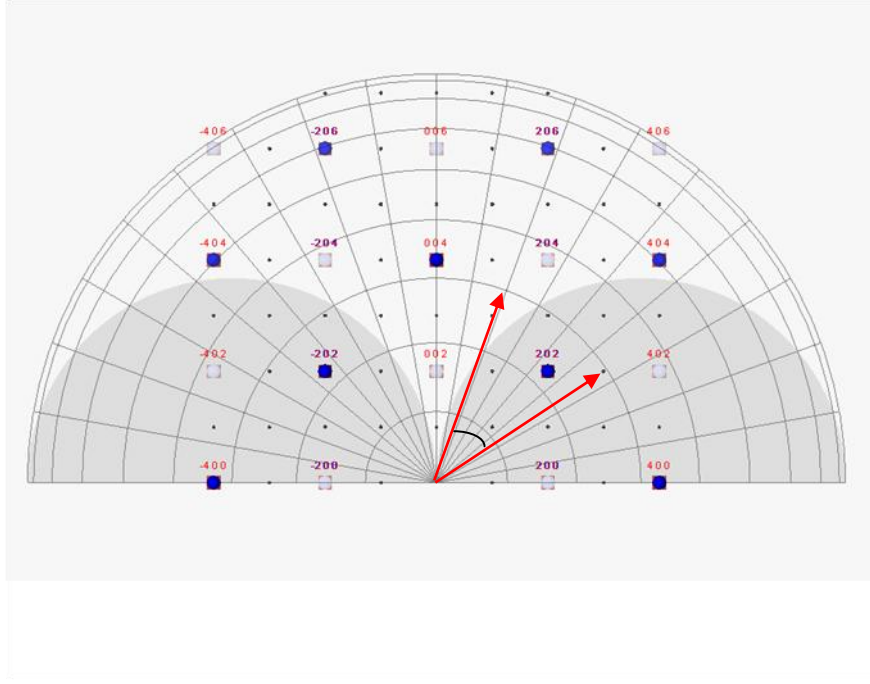


Şekil 6.11 (202) düzleminde GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısının 44.8°–45.8° aralığındaki θ -2 θ taraması

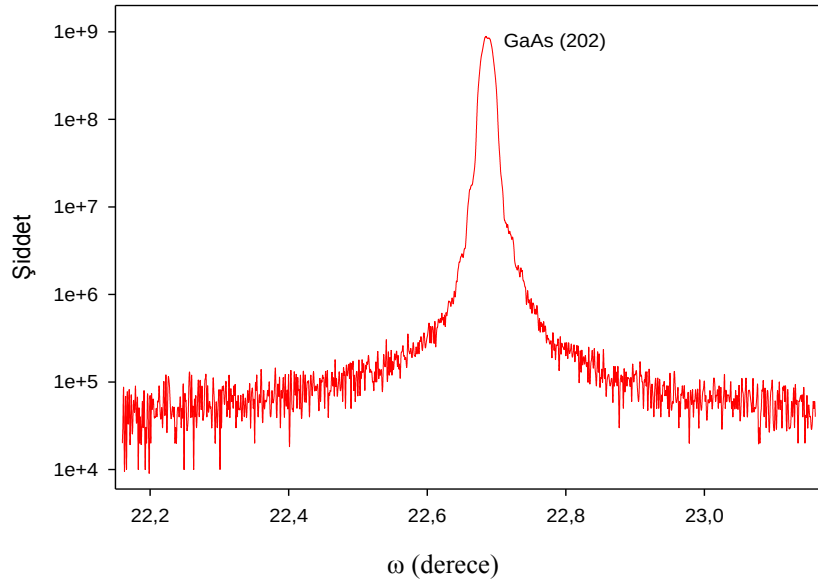
Bu tarama yardımıyla yapıdaki GaAs kristalinin örgü sabiti hesaplanarak gerçek örgü sabiti ile arasındaki farklar hesaplanmıştır. GaAs (202) düzlemi için örgü sabiti hesabı yapılacak olursa, grafikten Bragg açısı alınıp Denklem [5.1] ve [5.2] yardımıyla $h=2$, $k=0$, $l=2$ Miller indisleri yerine yazılıp gerekli değerlerin eklemesiyle $a_{\text{GaAs}}=5.6554$ Å bulunmaktadır. Bu değer GaAs'ın literatürdeki örgü sabiti ile kıyaslandığında yapılan hata % 0.038 civarındadır.

Simetrik ve asimetrik taramalar sonucu hesaplanan örgü sabitleri hem birbirlerine hem de literatürdeki değere oldukça yakındır. Bu ise büyütmenin uyumlu bir şekilde gerçekleştiği anlamına gelmektedir.

Epitaksiyel kristal büyütmenin önemli bir kontrolü de altaş ve büyütülen numunenin in-plane pik pozisyonlarının aynı olmasıdır. Burada in-plane yerine (202) asimetrik pikleri ile epitaksiyi kontrol edeceğiz. Öncelikle Şekil 6.12'de (202) piki için ters örgü uzay görüntüsü pozisyonu ve Şekil 6.13'de bu taramanın sonucu verilmiştir.



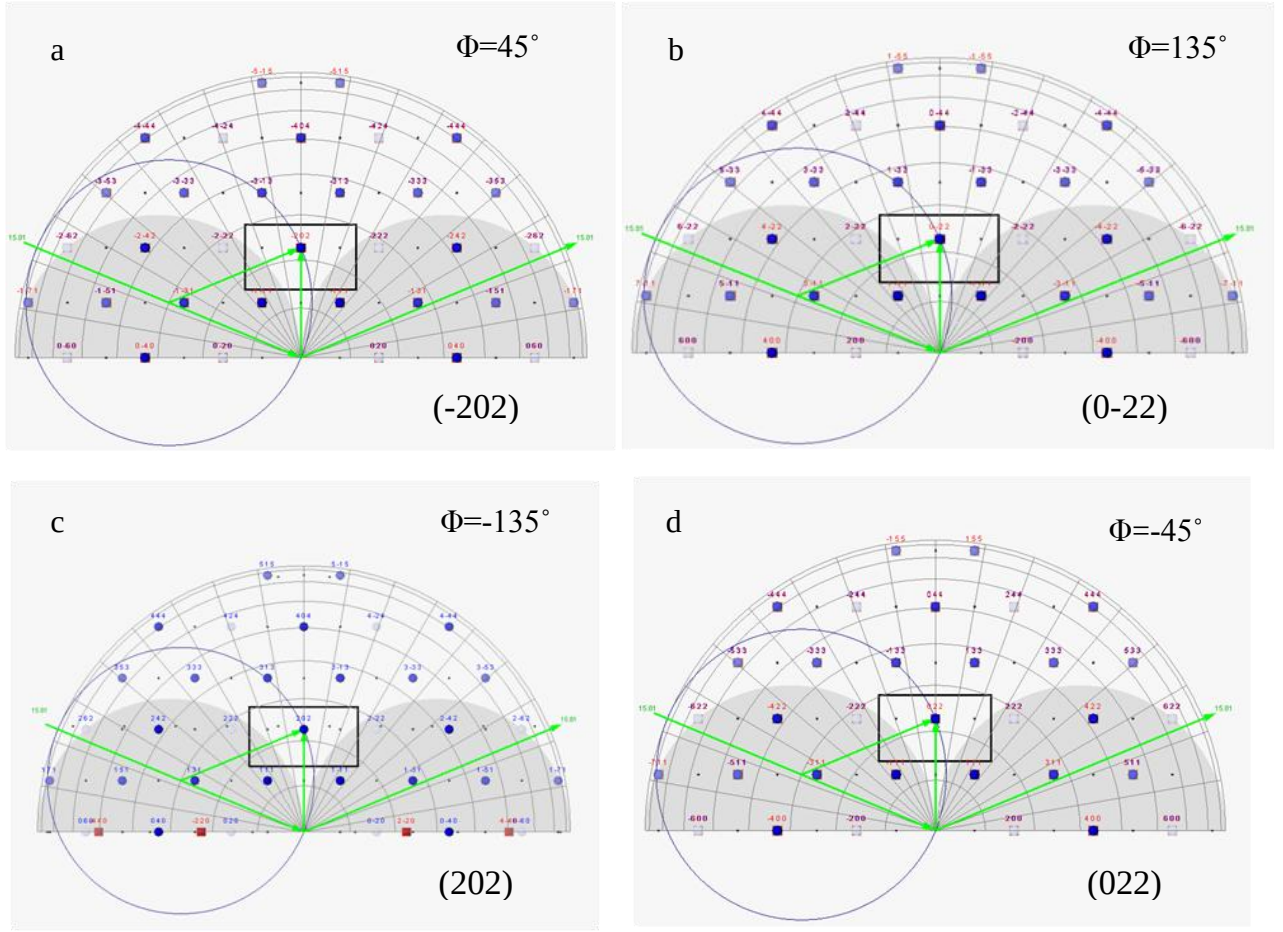
Şekil 6.12 (202) düzleminde yapılan ω taramasının ters uzayda gösterimi



Şekil 6.13 (202) düzleminde GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısı için 22,1°–23,2° aralığındaki ω taraması

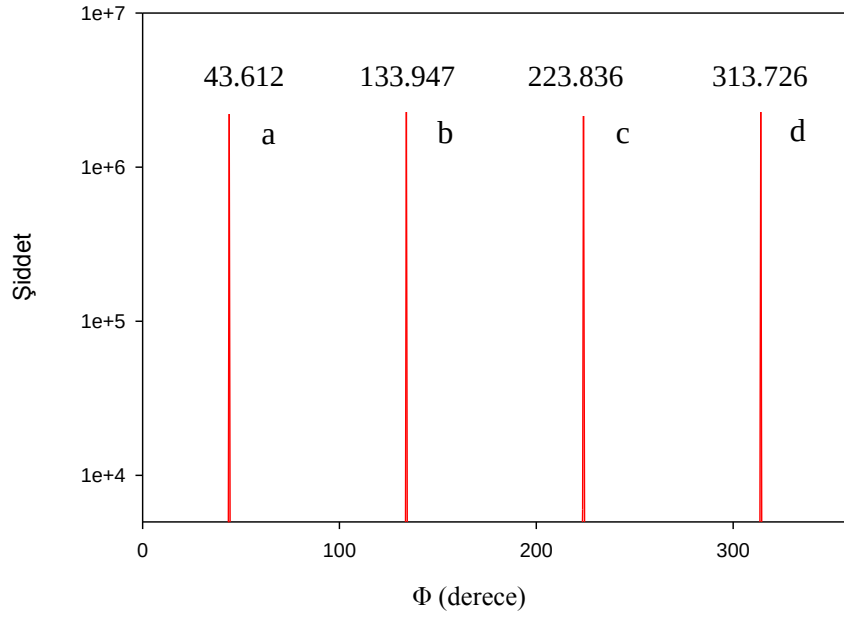
Yapılan hesaplamalar sonucunda GaAs (202) piki için yarı yükseklikteki tam genişlik (FWHM) 0.018 ve yanıl tutarlı uzunluk 1174 nm değeriinde bulunmuştur.

Şimdi (202) pikinin 90 derece simetrilerinde (-202), (0-22) ve (022) pikleri olmalıdır. Bu durum ter örgü uzayında Şekil 6.14 ile gösterilmiştir.



Şekil 6.14 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısı için yapılan Φ taramasının ters uzaydaki gösterimi

Bu tarama ile aynı zamanda kümelenme (stacking) ile ilgili bilgi elde edilir. Başka bir deyişle, asimetrik Φ taraması numunenin kristal yapısının hegzagonal ya da kübik (zinc blende) yapılardan hangisine sahip olduğu hakkında bilgi verir. Elde edilen taramalarda pikler 60° de bir kendini tekrarlıyorsa numune hegzagonal yapıya eğer pikler 90° de bir kendini tekrar ediyorsa numune kübik yapıya sahiptir denir. Tez kapsamında x-ışını kırınımı taramaları yapılan GaAs numunesi için Φ taraması Şekil6.15’de verilmiştir.



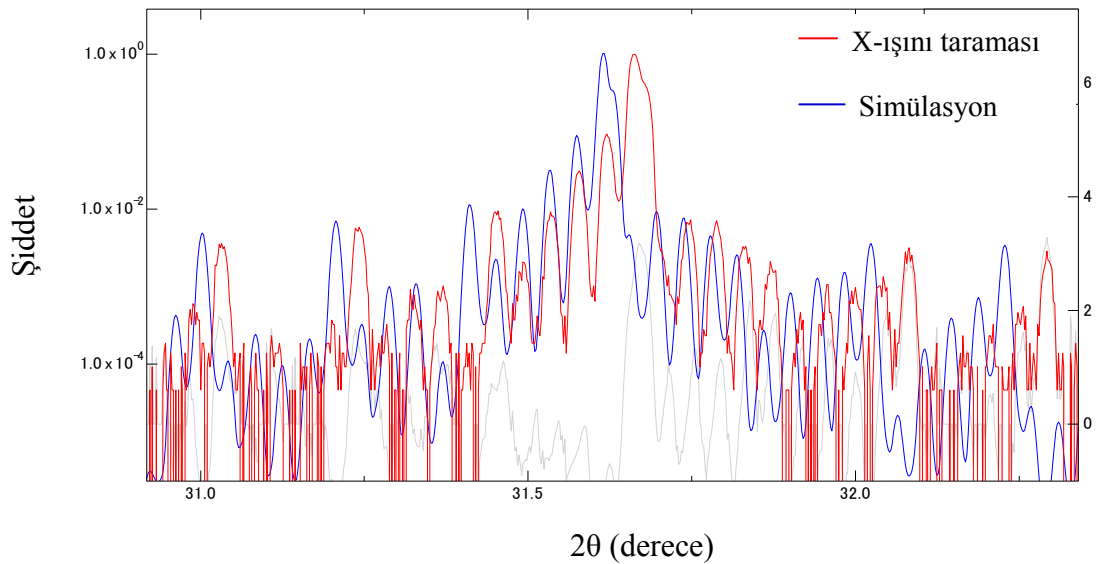
Şekil 6.15 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısı için 0°–360° aralığındaki Φ taraması

Taramadan açıkça görüldüğü gibi Φ taramasında kırınım deseni her 90° de bir kendini tekrarlamaktadır, bu da GaAs kristalinin çinko sülfür yapıda olduğu ve büyütmenin epitaksiyel olarak gerçekleştiği anlamına gelmektedir. Asimetrik Φ taramasındaki piklerin yüksekliklerinin aynı olmasından ise kullanılan Rigaku SmartLab x-ışını difraktometresinin çok hassas olması ve büyütmenin iyi yapıldığı sonucu çıkarılabilir.

7 Dinamik Simülasyon Hesaplamaları

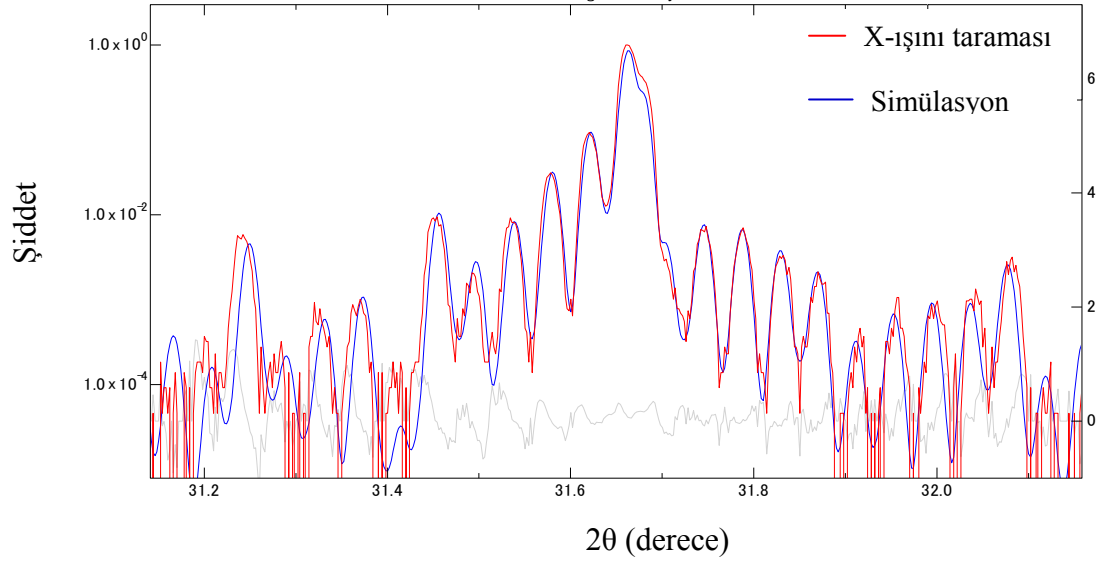
7.1 (002) için Simülasyon Çalışmaları

Bu kısımda daha önce bahsedilen MBE ile büyütülen (001) yönelimli GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs süper örgü yapısı için simülasyonlar verilecektir. Çizelge 6.1’de büyütülmesi hedeflenen yapının her bir tabakasının kalınlık ve konsantrasyon bilgisi verilmiştir. Şekil 7.1’de ise (002) piki için büyütmek istenilen parametreler ile elde edilen bir simülasyon verilmiştir.



Şekil 7.1 (002) piki için Çizelge 6.1’de verilen parametreler ile elde edilen simülasyon grafikleri

Buradaki uyumsuzluklar açıkça görülmektedir. Bu yüzden elde edilen sonuçlar gerçek data ile uyum sağlayana kadar parametreler değiştirilerek simülasyona devam edilir ve en iyi fit eden değerini veren parametreler bulunur ve bu parametreler kullanılarak büyütülen yapı hakkında yorum yapılır. Numune için yapılan simülasyonun ilk adımı Şekil 7.2’de verilmiştir.



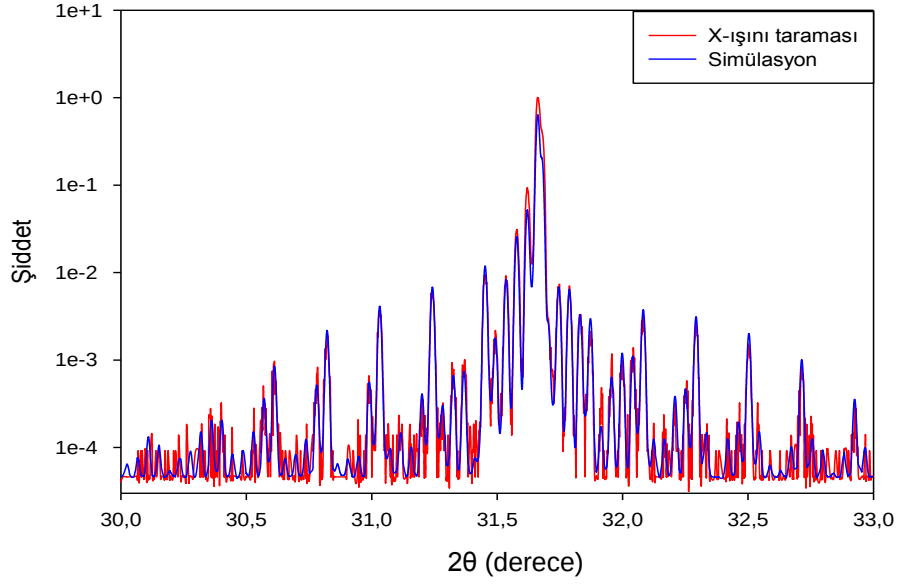
Şekil 7.2 Birinci simülasyon aşaması sonrasında elde edilen simülasyon grafikleri

$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ tabakaları için katkılama yüzdelerinde yapılan değişiklikler ile grafiklerin daha iyi üst üste oturduğunu görüyoruz. Yapılan bu işlem sonucu ile elde edilen yeni parametreler Çizelge 7.1’de verilmiştir.

Çizelge 7.1 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ yapısı için birinci adım simülasyon sonucunda elde edilen yeni parametreler

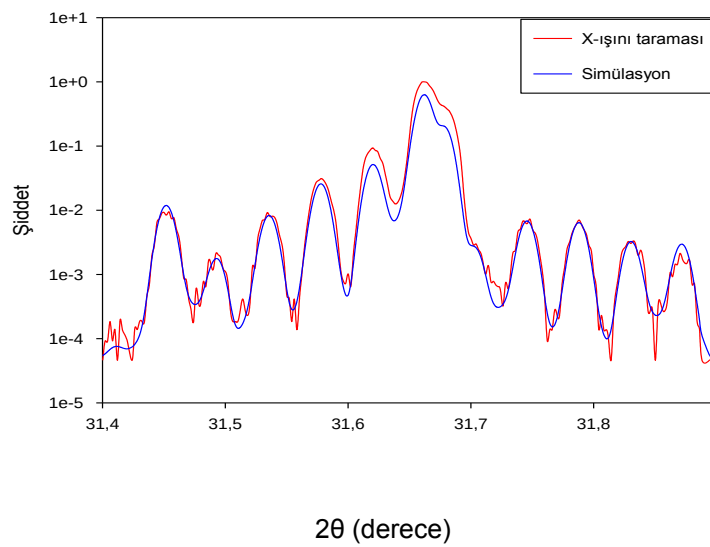
Tabaka	Tekrarlanma	Katkılanma Oranı (%)	Tabaka Kalınlığı (nm)
GaAs			1155
GaAs	10		49.43
$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$		33.9	37.4
GaAs			6.9
$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$		24.4	36.95
GaAs			5.7
$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$		40.7	38.16
GaAs			3.9
$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$		27.7	39.75
GaAs			375
GaAs (alttaş)			Sonsuz

Kalınlıklar, katkılama oranları ve offsetler değiştirilerek simülasyonlar devam ettirilmiştir. Elde edilen en iyi simülasyon Şekil 7.3’de verilmiştir.



Şekil 7.3 Çizelge 6.1’de verilen yapı için x-ışını tarama ve son simülasyon aşaması ile elde edilen simülasyon grafikleri

Aynı simülasyon grafiğinin 31.4-31.9° arasındaki gösterimi Şekil 7.4’de verilmiştir.



Şekil 7.4 Son simülasyon aşamasının 31.4°-31.9° arasındaki gösterimi

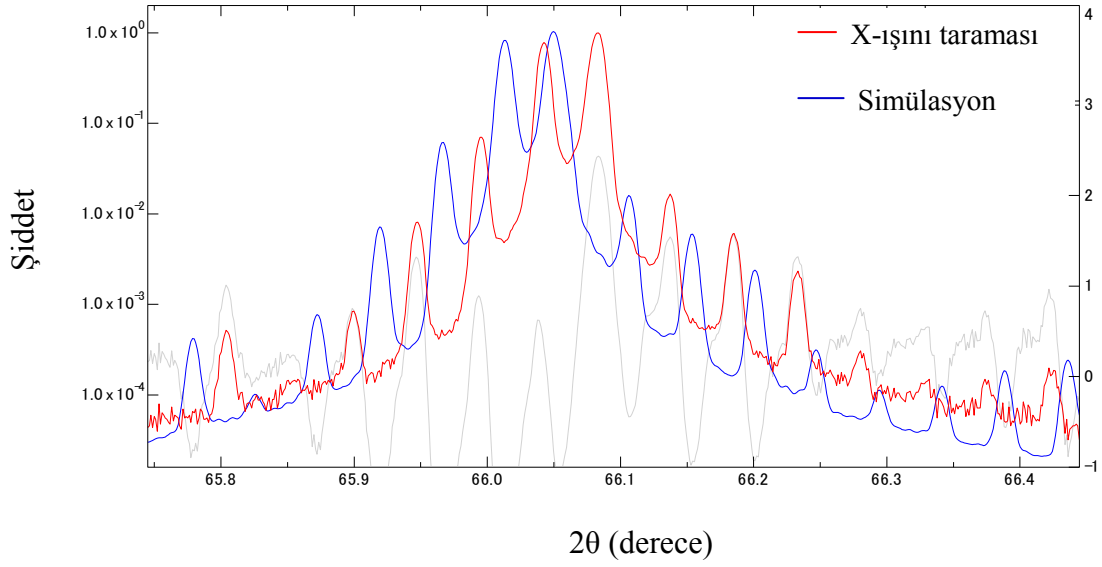
Görülen grafik sonuç açısından oldukça önemlidir. Şekle bakıldığında mavi ile çizilen simülasyon grafiğın x-ışını taraması ile elde edilen grafik ile çok iyi bir şekilde örtüştüğü açık olarak görülmektedir. Elde edilen bu şekil için simülasyon dataları (Çizelge 7.2) bize gerçekte büyütülen yapının aslında büyütölmek istenen yapıdan ne kadar farklı olduğunu gösterir.

Çizelge 7.2 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısı için (002) pikiinde yapılan son simülasyon parametreleri

Tabaka	Tekrarlanma	Katkılanma Oranı (%)	Tabaka Kalınlığı (nm)
GaAs			1162
GaAs	10		49.8
Ga _{1-x} Al _x As		31	37.3
GaAs			6.4
Ga _{1-x} Al _x As		22.1	36.8
GaAs			6.4
Ga _{1-x} Al _x As		40	37.5
GaAs			5.2
Ga _{1-x} Al _x As		30	38.8
GaAs			375
GaAs (alttaş)			Sonsuz

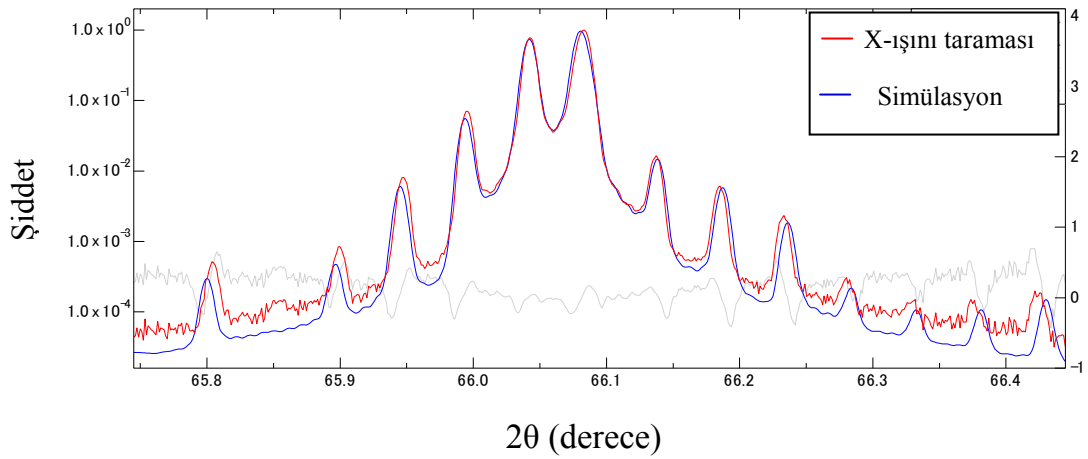
7.2 (004) için Simülasyon Çalışmaları

Bu kısımda MBE ile büyütölen GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs süper örgü yapısının (004) piki için simülasyonlar verilecektir. Şekil 7.5’de ise (004) piki için büyötmek istenilen parametreler ile elde edilen bir simülasyon verilmiştir.



Şekil 7.5 (004) piki için Çizelge 6.1’de verilen parametreler ile elde edilen simülasyon grafikleri

Burada hedeflenen parametreler ile elde edilen parametreler arasındaki farklar açıkça görülmektedir. Bu yüzden en iyi uyum sağlanana kadar parametreler değiştirilecektir. Numune için yapılan simülasyonun ilk adımını Şekil 7.6’de verilmiştir.



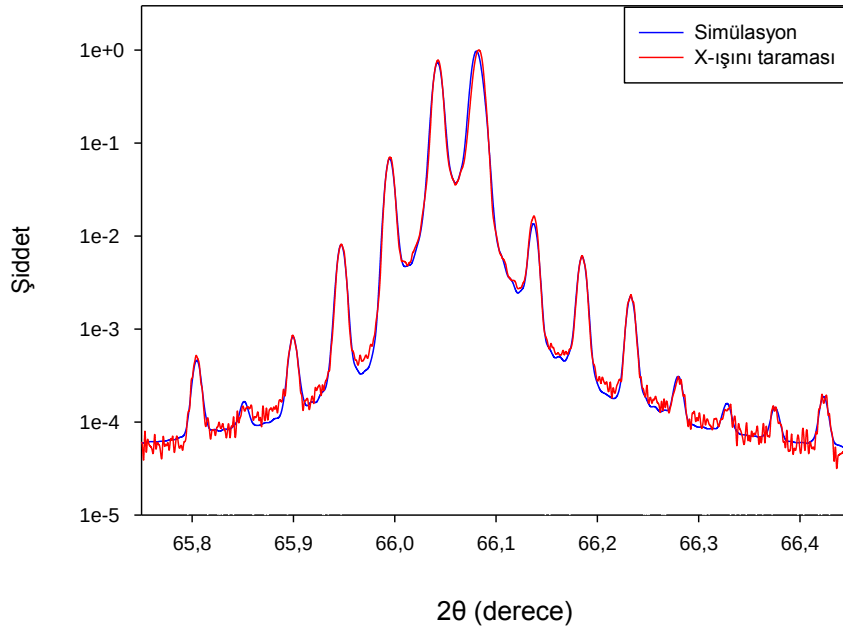
Şekil 7.6 Birinci simülasyon aşaması sonrasında elde edilen simülasyon grafikleri

$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ tabakaları için katkılama yüzdelерinde yapılan değışiklikler ile grafiklerin daha iyi uyum sağladığını ancak farklılıklar da barındırdığını görüyoruz. Yapılan bu işlem sonucu ile elde edilen yeni parametreler Çizelge 7.3’de verilmiştir.

Çizelge 7.3 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısı için birinci adım simülasyon sonucunda elde edilen yeni parametreler

Tabaka	Tekrarlanma	Katkılanma Oranı (%)	Tabaka Kalınlığı (nm)
GaAs			1052
GaAs	10		49.4
Ga _{1-x} Al _x As		28.4	37.3
GaAs			5.1
Ga _{1-x} Al _x As		23.1	42.1
GaAs			2.8
Ga _{1-x} Al _x As		35	38.1
GaAs			2.5
Ga _{1-x} Al _x As		28.8	39.9
GaAs			750
GaAs (alttaş)			Sonsuz

Kalınlıklar, katkılama oranları ve offsetler değiştirilerek simülasyonlar devam ettirilmiştir. Elde edilen en iyi simülasyon Şekil 7.7’de verilmiştir.



Şekil 7.7 (004) GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısı için x-ışını tarama ve son simülasyon aşaması ile elde edilen simülasyon grafikleri

Şekil 7.7’de simülasyon grafiğinin x-ışını taraması sonucu elde edilen grafik ile çok iyi bir şekilde örtüştüğü görülmektedir. Elde edilen bu şekil için simülasyon dataları Çizelge 7.4’de gösterilmektedir.

Çizelge 7.4 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısı için (004) pikiinde yapılan son simülasyon parametreleri

Tabaka	Tekrarlanma	Katkılanma Oranı (%)	Tabaka Kalınlığı (nm)
GaAs			1054
GaAs	10		49.5
Ga _{1-x} Al _x As		26.5	38.2
GaAs			6.2
Ga _{1-x} Al _x As		21	42
GaAs			3.6
Ga _{1-x} Al _x As		42	35
GaAs			2
Ga _{1-x} Al _x As		26.8	45
GaAs			750
GaAs (alttaş)			Sonsuz

Büyütülmek istenilen yapı ile elde edilen yapının parametrelerinin karşılaştırılması Çizelge 7.5’de verilmiştir.

Çizelge 7.5 Son simülasyon parametreleri ile çizelge 6.1 de verilen ana parametrelerin karşılaştırılması

	Büyütülmek İstenen		Büyütülen				Katkılanma Oranı Ortalama (%)	Tabaka Kalınlığı Ortalama (nm)
Tabaka	Katkılanma Oranı (%)	Tabaka Kalınlığı (nm)	(002)		(004)			
			Katkılanma Oranı (%)	Tabaka Kalınlığı (nm)	Katkılanma Oranı (%)	Tabaka Kalınlığı (nm)		
GaAs		1000		1162		1054		1108
GaAs		50		49.8		49.5		49.6
Ga _{1-x} Al _x As	21.0	40	31	37.3	26.5	38.2	29	37.7
GaAs		5.5		6.4		6.2		6.3
Ga _{1-x} Al _x As	24.0	40	22.1	36.8	21	42	21.5	39.4
GaAs		5		6.4		3.6		5
Ga _{1-x} Al _x As	30.0	40	40	37.5	42	35	41	36.3
GaAs		4		5.2		2		3.6
Ga _{1-x} Al _x As	35.0	40	30	38.8	26.8	45	28.5	41.8
GaAs		1500		375		750		562.5
GaAs (alttaş)		Sonsuz		Sonsuz		Sonsuz		Sonsuz

Çizelge 7.5’de (002) ve (004) pikleri için elde edilen tabaka kalınlıkları ve katkılanma oranları ve bunların ortalamaları büyütölmek istenilen parametreler ile karşılaştırılması verilmiştir. Burada kalınlıklar arası çok farklılıklar görölmese de alışıın oranlarında farklar görölmektedir. Bu ise yapının hedeflenen biçimde şekillenmediğı anlamına gelmektedir ve bu durum dolayısıyla istenilen cihaz verimi elde edilemeyecektir.

8 SONUÇ

Bu çalışmada MBE kristal büyütme tekniği ile (001) kristal yönelimli GaAs alttaş üzerine epitaksiyel olarak büyütülen dört farklı alaşım oranı ile ve her bir tabakası onar kez tekrarlanan GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs süper örgü yapısı incelenmiştir. Yapısal analiz sırasında ultra yüksek çözünürlüklü x-ışını kırınımı sistemi (ultra high resolution xrd) kullanılmıştır. Ağırlıklı olarak dik (out-plane) θ -2 θ taraması yardımıyla GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısı incelenmiş ve büyütülmek istenen yapı ile gerçekte büyütülen yapının farklılıkları gösterilmiştir.

Alttaş pikinin değeri güzel bir referans olduğundan bu değere göre kalibre edilen taramaların sonuçları incelenerek yapının tek kristalliği, epitaksiyel büyütülmüş olması, herhangi bir ikizleme (twinning) oluşmadığı ve son olarak da dinamik simülasyonlar sayesinde yapı kalınlık ve alaşım oranları elde edilmiştir.

Yapılan asimetrik (202) ailesi Φ taramalarından piklerin 90° de bir kendini tekrar etmesi dolayısı ile GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs süper örgüsünün kübik yapıya sahip olduğu ve taramaların pik şiddetlerinin birbirine eşit olmasından dolayı da kristal düzgünlüğünün (uniformity) iyi olduğu gösterilmiştir.

Özellikle yapılan dinamik x-ışını kırınımı hesaplamaları sonucunda tabaka kalınlıklarında istenenden farklı sonuçların olduğu, ancak bundan daha önemlisinin Al konsantrasyonunun istenildiği gibi değişmediği, tasarlanan QWIP yapısında x'in yukarı doğru azalması yani geniş bandın altta kalması gerekirken, oluşan yapıda düzgün bir sıralama olmadığından cihaz performansının iyi olmayacağı açıkça ortaya konulmuş, böylece çok pahalı olan cihaz yapımı aşamalarına geçilmeden yapının tekrar büyütülmesi gerektiği sonucuna ulaşılmıştır. Bu da x-ışın kırınım yönteminin gerçekten de ne kadar önemli bir karakterizasyon yöntemi olduğunun altını çizmektedir.

Sonuç olarak MBE ile GaAs alttaş üzerine büyütülmüş GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs yapısının XRD tekniği ile yapısal analizi sonucu her ne kadar kristal kalitesi iyi ise de istenilen cihaz yapısı için alaşım oranlarının ve sıralanmasının uygun olmadığı ortaya çıkarılmıştır.

KAYNAKLAR

- Aydoğan, Ş. (2011). *Katıhal Fiziği*. Ankara: Nobel.
- Başer, P. (2007). *Düşük Boyutlu Sistemlerin Elektronik Özellikleri Dış Manyetik Alan Etkisinde $Ga_{1-x}Al_xAs$ /GaAs Silindirik Kuantum Telinde Hidrojenik Safsızlıklar ve Eksitonların Bağlanma Enerjileri*. İstanbul.
- Bourgoin, J. (2001). A new GaAs material for X-ray imaging. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 159-164.
- Bulut, A. (2010). *Epitaksiyel Tek Kristal İnce Filmlerin XRD Yöntemi ile İncelenmesi*. Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Cullity, B. (1978). *Elements of X-ray Diffraction*. Massachusetts: Addison-Wesley.
- D. K. Bowen, B. K. (1998). *High Resolution X-ray Diffractometry and Topography*. Bristol, PA: Taylor & Francis Inc.
- Denizli, T. (2006). *GaInP/GaAs Kuantum Kuyulu Yapılarda Alaşım Düzensizliği ve Arayüzey Pürüzlülüğü Saçılması*. Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Ekinci, H. (2008). *Metal Organik Kimyasal Buharlaştırma Yöntemi ile Kristal Büyütme (MOCVD) Sisteminin İncelenmesi*. Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- Fahrner, W. (2005). *Nanotechnology and Nanoelectronics Materials, Devices, Measurement Techniques*. Springer.
- Fewster, P. (2004). Advances in the structural characterization of semiconductor crystals by X-ray scattering methods. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, 245-273.
- Fewster, P. (2003). *X-Ray Scattering From Semiconductors 2nd Edition*. PANalytical Research Center.
- Gümüş, H. (2005). *$Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ /GaAs (100) Nanoyapısının Büyütülmesi ve I-V Özelliklerinin İncelenmesi*. Gazi Üniversitesi.
- He, B. (2009). *Two-Dimensional X-Ray Diffraction*. J. Wiley.
- Howes, M. (1985). *Gallium Arsenide*. New York: J. Wiley.
- İ.Demir. (2011). *Safir Alttaşı Üzerine Büyütülen GaN Epitaksiyel Tek Kristal İnce Filmlerin XRD Yöntemi İle İncelenmesi*. Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü.
- J. Singh, K. M. (2008). *Semiconductor Device Physics and Design*. Springer.
- Jackson, K. (2004). *Kinetic Processes*. Weinheim, Germany: Wiley-VCH.

- Jaros, M. (1989). *Physics and Application of Semiconductor Microstructure*. New York: Oxford University Press.
- Joachim, P. (2003). *Semiconductor Optoelectronic Devices Introduction to Physics and Simulation*. Academic Press.
- Kasap, S., Capper, P. (2006). *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*.
- Kittel, C. (1986). *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons, Inc.
- L. Qi, X. K. (2010). *China Physics Letter*, 28.
- Look, D. (1989). *Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices*. Chichester, New York, Brisbane, Toronto, Singapore: John. Wiley and Sons.
- M. Herman, H. S. (1996). *Molecular Beam Epitaxy*. Germany: Springer.
- Neamen, D. (2003). *Semiconductor Physics and Devices Basic Principles, 3rd edition*. New York: Mc Graw Hill.
- Qi, J. (1995). *Nonlinear Optical Spectroscopy of Gallium Arsenide Interfaces*. University of Pennsylvania.
- Singleton, J. (2003). *Band Theory and Electronic Properties of Solids*. Great Britain: Oxford University Press.
- Sze, M. (2002). *Semiconductor Devices Physics and Technology*. John Wiley & Sons.
- Tolmatchev, A. (1995). *Electronic Archive New Semiconductor Materials, Characteristics and Properties*. Prentice-Hall, Inc.
- Yun, F. (2006). Effect of growth-interrupted method on quality of AlGaAs/GaAs multiple quantum wells prepared by MBE. *Trans. Nonferrous Material Society of China*, 183-186.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı	Habibe SAYRAÇ
Doğum Yeri ve Tarihi	Kangal, 30/05/1988
Medeni Hali	Evli
Yabancı Dil	İngilizce
İletişim Adresi	Cumhuriyet Üniversitesi, Fen Fakültesi Fizik Bölümü, 58140-Sivas
E-posta Adresi	habibesayrac@gmail.com

Eğitim ve Akademik Durumu

Lise	Sivas Atatürk Lisesi, 2005
Lisans	Cumhuriyet Üniversitesi, 2009
Yüksek Lisans	Cumhuriyet Üniversitesi, 2011

Ödüller, Teşvikler ve Üyelikler

Cumhuriyet Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü İkinciliği, 2009

TÜBİTAK Yurt İçi Yüksek Lisans Bursu, 2010