



**NİTRİT TABANLI III-V GRUBU YARIİLETKENLERLE OLUŐTURULAN
ÇOKLU KUANTUM KUYULARININ YAPISAL, MORFOLOJİK VE BAZI
OPTİK ÖZELLİKLERİNİN SICAKLIĞA BAĞLI OLARAK
İNCELENMESİ**

Ahmet Kürőat BİLGİLİ

**DOKTORA TEZİ
FİZİK ANA BİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

EYLÜL 2019

Ahmet Kürşat BİLGİLİ tarafından hazırlanan “NİTRİT TABANLI III-V GRUBU YARIİLETKENLERLE OLUŞTURULAN ÇOKLU KUANTUM KUYULARININ YAPISAL, MORFOLOJİK VE BAZI OPTİK ÖZELLİKLERİNİN SICAKLIĞA BAĞLI OLARAK İNCELENMESİ” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Gazi Üniversitesi Fizik Ana Bilim Dalında Doktora Tezi olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

Fizik Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum.



Başkan: Doç. Dr. Hamit ALYAR

Fizik Ana Bilim Dalı, Karatekin Üniversitesi

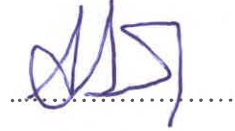
Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum.



Üye: Prof. Dr. Adem TATAROĞLU

Fizik Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum.



Üye: Doç. Dr. Barış KINACI

Fizik Ana Bilim Dalı, İstanbul Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum.



Üye: Doç. Dr. Beyza SARIKAVAK LİŞSEVDİN

Fizik Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum.



Tez Savunma Tarihi: 20/09/2019

Jüri tarafından kabul edilen bu çalışmanın Doktora Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum

.....

Prof. Dr. Sena YAŞYERLİ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

ETİK BEYAN

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

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

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



Ahmet Kürşat BİLGİLİ
20/09/2019

NİTRİT TABANLI III-V GRUBU YARIİLETKENLERLE OLUŞTURULAN ÇOKLU
KUANTUM KUYULARININ YAPISAL, MORFOLOJİK VE BAZI OPTİK
ÖZELLİKLERİNİN SICAKLIĞA BAĞLI OLARAK İNCELENMESİ

(Doktora Tezi)

Ahmet Kürşat BİLGİLİ

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Eylül 2019

ÖZET

Bu çalışmada, InGaN tabanlı güneş pili yapısı 300-500 °C sıcaklık aralığında 50 °C'lik adımlarla incelenmiştir. InGaN/GaN çoklu kuantumu kuyusu yapısı c- yönelimli safir alttaş üzerine metal organik kimyasal buhar biriktirme (MOCVD) yöntemiyle büyütülmüştür. Sıcaklık dışında tüm parametreler büyüme süreci boyunca sabit tutulmuştur. Farklı oranlarda In içeren InGaN/GaN güneş pili yapıları XRD tekniği ile incelenmiştir. Bu yapıların, yapısal, optik ve morfolojik özellikleri yüksek çözünürlüklü X-ışını kırınımı (HRXRD), Fourier dönüşüm spektroskopisi (FTIR), Fotoluminesans (PL), Geçirgenlik (%T), Atomik kuvvet mikroskopisi (AFM) ile analiz edilmiştir. FTIR ve PL spektrumlarına göre bant aralığı değerlerinin elektromanyetik spektrumda mavi bölgeye denk geldiği fark edilmiştir. Geçirgenlik ölçümlerinin sonuçlarında gönderilen ışığın 390 nm civarında büyük ölçüde absorbe edildiği görülmüştür. XRD tekniği kullanılarak, dislokasyon yoğunlukları ve gerilme hesaplanmıştır. X- ışını kırınımından elde edilen tam genişlik yarı maksimum (FWHM) değerleri alternatif bir metot olan Williamson Hall (WH) yönteminde kullanılmıştır. WH metodu kullanarak düşey ve yatay kristal uzunlukları ve eğim açıları belirlenmiştir. Yüzey pürüzlülük parametreleri AFM ile incelenmiştir. GaN ve InGaN'a ait farklı parametreler sıcaklığa bağlı olarak kıyaslanmıştır. AFM görüntülerine göre bu güneş pili yapıları yüksek yüzey pürüzlülüğü ve büyük kristal boyutuna sahiptir. XRD'den elde edilen verilerle örgü parametreleri de hesaplanmıştır. Çalışma sıcaklığa bağlı bir çalışma olduğundan sıcaklıkla örgü parametrelerindeki değişimden faydalanarak ısısal genleşme katsayıları da hesaplanmıştır. Ters uzay haritalaması tekniğinden faydalanarak örgü parametreleri, gerilme, zorlama gibi değişkenler tekrar hesaplanmıştır ve bu değerler birbirleri ile kıyaslanmıştır. Görülmüştür ki sözü edilen bütün metotlardan elde edilen sonuçlar daha önce farklı araştırmacılar tarafından yapılan çalışmalardakilerle uyum içinde olduğu görülmüştür.

Bilim Kodu : 20227

Anahtar Kelimeler : XRD, GaN, InGaN, Optik, Morfolojik, Yapısal

Sayfa Adedi : 161

Danışman : Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

INVESTIGATION OF STRUCTURAL, MORPHOLOGICAL AND SOME OPTICAL
PROPERTIES OF MULTI-QUANTUM WELLS, FORMED BY NITRIDE BASED III-V
GROUP SEMICONDUCTORS, DEPENDENT ON TEMPERATURE

(Ph. D. Thesis)

Ahmet Kürşat BİLGİLİ

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

September 2019

ABSTRACT

In this study, InGa_N based solar cell structures are investigated in 300-500 °C temperature range with steps of 50 °C. InGa_N/Ga_N multi-quantum well structure is deposited on sapphire wafer by metal organic chemical vapor deposition method (MOCVD). InGa_N/Ga_N solar cell structures containing different In ratio are investigated by X-ray diffraction (XRD) technique. Structural, optical and morphological properties of these solar cell structures are investigated by using high resolution X-ray diffraction (HRXRD), Fourier transform spectroscopy (FTIR), Photo luminescence (PL), Transmission (%T), Atomic force microscopy (AFM) techniques. Full width half maximum (FWHM) values gained from XRD technique are used in an alternative method Williamson Hall (WH). By using this WH method, lateral and vertical crystal lengths and tilt angles are determined. Surface roughness parameters are examined by AFM. According to AFM images these solar cell structures have high surface roughness and large crystal size. Because this study is dependent on temperature, thermal expansion coefficients are calculated by using the variation of lattice parameters with temperature. By using reciprocal space mapping technique (RSM), lattice parameters, strain, stress are calculated again and they are compared with the values gained from previous methods. It is seen that all the results gained from mentioned methods are in good accordance with literature.

Science Code : 20227

Key Words : XRD, Ga_N, InGa_N, Optic, Morphological, Structural

Page Number : 161

Supervisor : Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca hep yanımda olan, deneyimlerinden ve bilgisinden yararlandığım, sayın hocam Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK'e çok teşekkür ederim. Numunelerin hazırlanmasında yardımcı olan Bilkent Üniversitesi UNAM yöneticilerine ve çalışanlarına teşekkür ederim. Teknik ölçümlerin ve analizlerin yapılmasında bana yardımcı olan çok kıymetli arkadaşım Ömer AKPINAR'a teşekkür ederim. Çalışma boyunca her türlü yardımını esirgemeyen Gazi Üniversitesi Fotonik Araştırma Merkezi müdürü sayın Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK'e ve çalışanlarına teşekkür ederim. Manevi destekleriyle her zaman yanımda olan sevgili annem Emine BİLGİLİ, babam Mukim BİLGİLİ, canım eşim M. Güher'e, ikizlerim Selin ve Özgür'e teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	v
ABSTRACT.....	vi
TEŞEKKÜR.....	vii
İÇİNDEKİLER	viii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	xiii
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xvii
RESİMLERİN LİSTESİ	xx
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xxii
1. GİRİŞ.....	1
2. TEMEL BİLGİ.....	5
2.1. Büyütme Teknikleri	5
2.1.1. Sıvı faz epitaksi (LPE)	5
2.1.2. Moleküler demet epitaksi (MBE).....	5
2.1.3. Metal organik kimyasal buhar biriktirme (MOCVD)	6
2.1.4. Epitaksi.....	6
2.1.5. Homoepitaksi	6
2.1.6. Heteroepitaksi	7
2.1.7. Konfigürasyon.....	8
2.1.8. Kaynaklar	10
2.2. XRD (X Işınları Kırınımı).....	11
2.2.1. Kırınım ve ters uzay	11
2.2.2. Difraktometreler	16
2.3. Tarama Tipleri.....	17

	Sayfa
2.4. Girişim Saçakları ve X-Işını Yansımaları	24
2.5. Örgü Parametre Ölçümleri, Gerginlik ve Alaşım Bileşiği	27
2.5.1. Örgü parametresi için yaklaşık ve kesin ölçümler	27
2.5.2. Hızlı örgü parametre ölçümleri	28
2.5.3. Yaklaşıklıkların içeriği	29
2.5.4. Örgü parametrelerinin ölçümlerle kestirilmesi	29
2.5.5. Çift eksenli gerilme durumu	30
2.5.6. İki eksenli olmayan gerginliğin varlığı	32
2.6. III-Grubu Nitritlerde Örgü Parametrelerini Etkileyen Faktörler	32
2.7. Referans Örgü Parametreleri ve Gerilmenin Belirlenmesi	34
2.7.1. Homojen gerilme	35
2.7.2. Çoklu III-grubu nitrit tabakalarda gerilme ve gevşeme	37
2.7.3. Alaşımlarda gerilme ve bileşik belirlenmesi	38
2.8. Üçlü Alaşımlar (InGaN gibi)	38
2.8.1. Dörtlü alaşımlar	40
2.8.2. Referans Poisson denklemi ve esneklik sabiti değerleri	40
2.8.3. Alaşım filmlerde sıralama	41
2.9. Zorlama	42
2.9.1. Gerilme ölçümlerden stresin bulunması	42
2.9.2. Eğrilik ölçümlerinden stresin bulunması	43
2.10. Alttaş Kesimleri ve Eğim	44
2.11. c- Düzlemli GaN Filmlerde Dislokasyon Yoğunluğunun Belirlenmesi	45
2.12. Eğim	46
2.13. Burkulma	47

	Sayfa
2.13.1. Vida simetrik w taraması ölçümleri	47
2.13.2. ϕ ölçümleri	48
2.13.3. Doğrudan iç-düzlem ölçümleri	48
2.13.4. Extrapolasyon metotları ve burkulmanın belirleyicileri	49
2.13.5. Burkulma ve eğim için derinliğe duyarlı metotlar	50
2.13.6. Diğer genişleme faktörleri mevcutken eğim ve burkulmayı bulma.....	50
2.13.7. Pik genişliklerine bağlı metotlar	51
2.14. Ters Uzay Haritaları	53
2.14.1. Dislokasyon yoğunluklarının eğim ve burkulmadan bulunması.....	54
2.14.2. Dislokasyon yoğunlukları için basit denklemler.....	54
2.15. Pik Profili Analizi Metotları.....	57
2.15.1. Ters uzay haritalarının modellenmesi	57
2.16. Çoklu Tabakalar ve Kuantum Noktaları	57
2.16.1. Tek quantum kuyuları (SQWs)	58
2.16.2. Çoklu kuantum kuyuları.....	60
2.17. Diğer Süper Örgüler	64
2.18. Homojen Olmayan, Pürüzlü ve Kusurlu Tabakaların Analizi	64
2.19. Quantum Noktaları(QD'ler).....	66
2.19.1. Tabaka kalınlığı ve bileşik değerlerindeki hataların kaynakları	67
2.20. Polar Olmayan ve Yarıpolar III-Grubu Nitrit Filmler.....	68
2.20.1. Gerilme ve örgü parametreleri	69
2.20.2. Kusurlar.....	71
2.20.3. Quantum kuyuları	73
2.21. Kübik III- Grubu Nitritler	74

	Sayfa
2.21.1. Örgü parametreleri ve gerilme	75
2.21.2. Kübik ve heksagonal fazların hacim kesirleri	77
2.21.3. III-grubu nitritlerde kusur belirlenmesi.....	79
2.22. Optik Özellikler.....	80
2.22.1. Fotoluminesans (PL)	80
2.22.2. Geçirgenlik.....	81
2.22.3. FTIR	82
2.22.4. Raman	82
2.23. Morfolojik Özellikler	84
2.23.1. AFM	84
2.23.2. SEM	84
3. DENEYSEL YÖNTEM.....	85
4. DENEYSEL BULGULAR VE YORUMLAR.....	87
4.1. XRD Analizi.....	87
4.1.1. Gerilme.....	92
4.2. a-, c- Örgü Param., Gerilme Stres Analizleri ve Isısal Genleşme Katsayıları ..	93
4.2.1. Örgü parametreleri	94
4.2.2. Gerilme, stres ve kristal boyutu	97
4.2.3. Isısal genleşme katsayıları.....	99
4.3. Williamson Hall	103
4.3.1. Kenar ve vida dislokasyonları.....	107
4.4. Ters Örgü Uzay Haritası Kullanılarak Yapısal Özelliklerin Belirlenmesi.....	109
4.4.1. Ters uzay haritasından elde edilen örgü parametreleri	114
4.4.2. Gerilme, zorlama.....	114

	Sayfa
4.4.3. Dislokasyonlar	119
4.5. Optik Karakteristikler.....	121
4.5.1. Fotolüminesans	121
4.5.2. Geçirgenlik.....	123
4.5.3. FTIR	129
4.5.4. Raman spektroskopisi	130
4.6. Morfolojik Özellikler	133
4.6.1. AFM	133
4.6.2. SEM	134
5. SONUÇ	137
KAYNAKLAR	141
ÖZGEÇMİŞ	159

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 1.1. III- grubu Nitritlerin Özellikleri	1
Çizelge 2.1. MOCVD kaynak malzemeler	10
Çizelge 2.2. X-Işını kırınımında kullanılan parantezlerin anlamları	13
Çizelge 2.3. Yüksek çözünürlüklü difraktometrelerdeki tarama tipleri, w gelen ışınla numune yüzeyi arasındaki açıdır, 2θ gelen ve kırınıma uğramış ışınlar arasındaki açıdır [27]	20
Çizelge 2.4. Ters uzayda ters örgü noktalarının farklı yönlerde genişlemelerine neden olan faktörler. Farklı tarama tiplerinde görülen genişlemeler, farklı numune kusurlarının ters örgü noktalarını nasıl genişlettiği hesaba katılarak anlaşılabilir. Bu özel bir tarama tipinin noktayla hangi doğrultuda kesişeceği hesaba katılarak yapılır. Kusurlardan kaynaklanan zayıf difüze saçılmalar da görülebilir. Birkaç genişleme faktörü etkisi ters uzayda bir elipsoid oluşturmak için birleşebilir. Bu elipsoidin başlangıç eksenini aşağıda verilen yönlerden farklı bir yöndedir.....	23
Çizelge 2.5. Nominal olarak gerilmesiz AlN'in c/a oranları ve örgü parametreleri.....	33
Çizelge 2.6. Nominal olarak gerilmesiz GaN'in c/a oranları ve örgü parametreleri.....	33
Çizelge 2.7. Nominal olarak gerilmesiz InN'in c/a oranları ve örgü parametreleri	34
Çizelge 2.8. AlN için ölçülmüş veya hesaplanmış elastik sabitlerden elde edilen Poisson oranı değerleri(v).....	35
Çizelge 2.9. GaN için ölçülmüş veya hesaplanmış elastik sabitlerden elde edilen Poisson oranı değerleri(v).....	36
Çizelge 2.10. InN için ölçülmüş veya hesaplanmış elastik sabitlerden elde edilen Poisson oranı değerleri(v).....	36
Çizelge 2.11. AlN, GaN ve InN'in hesaplanmış ve ölçülmüş Young modülü değerleri. Bütün değerler GPa birimindedir	36
Çizelge 2.12. X ekseninin w açısıyla örtüştüğü taramaları temel alan boyut ve gerilmenin grafiksel analizini temel alan denklemler. Δs, ters uzay birimlerinin profilinde integral çarpanına işaret eder.(Δs=(2βcosθ)/λ w-2θ taramaları için ve Δs=βs, w taramaları için. B, ölçülen integral çarpanı ve θ Bragg açısıdır. Yanlış yönelim terimi α burkulma veya eğim için kullanılabilir	51
Çizelge 2.13. QW'lerin ve süper örgülerin w-2θ kırınım taramalarını ve küçük açılı yansıma taramalarını etkileyen faktörler.....	63

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.14. Polar olmayan ve yarıpolar III-grubu nitrit filmler için yığılma kusurlarını özetleyen bilgi. R yığılma kusuru yerdeğiştirme vektörüdür. Yığılma sıraları sıkı paketlenmiş [0001] yönünde verilmiştir. Her büyük harf III-N atomik çift tabakayı belirtir	71
Çizelge 2.15. Polar olmayan ve yarıpolar III-grubu nitrit filmlerde bulunan dislokasyonlar için özet bilgi. b dislokasyon Burgers vektörüdür	72
Çizelge 2.16. Kübik III-grubu nitritlerin esneklik sabitleri(hesaplamalardan).....	75
Çizelge 3.1. Büyütme Şartları	86
Çizelge 4.1. (101), (102), (106), (121) düzlemlerine karşılık gelen τ açıları	94
Çizelge 4.2. GaN için örgü parametreleri	95
Çizelge 4.3. InGaN için örgü parametreleri.....	95
Çizelge 4.4. GaN ve InGaN tabakalar için gerçek a- ve c- örgü parametreleri	96
Çizelge 4.5. GaN tabakalar için Kristal boyutu, gerilme ve stress değerleri	99
Çizelge 4.6 a)Örnek A için değişik sıcaklıklarda nm boyutunda c- örgü parametreleri b)Örnek B için değişik sıcaklıklarda nm boyutunda c- örgü parametreleri c) Örnek C için değişik sıcaklıklarda nm boyutunda c- örgü parametreleri d) (121) düzlemi için değişik sıcaklıklarda Örnek A, B ve C'nin nm boyutunda a ve c örgü parametreleri	99
Çizelge 4.7. Örnek A, B ve C için farklı düzlemlerde ısısal genleşme katsayıları.....	100
Çizelge 4.8. InGaN ve GaN tab. Eğim, Yanal uz., Düşey uzunluk değerleri.....	105
Çizelge 4.9. GaN ve InGaN tabakalar için sıcaklığa bağımlı olarak Vida ve Kenar dislokasyon yoğunlukları	109
Çizelge 4.10. Örnek A ve B için GaN ve InGaN tabakalarının (002) ve (105) düzlemlerinde pik pozisyonları	114
Çizelge 4.11. Örnek A ve B için GaN ve InGaN tabakalardaki (002) ve (105) düzlemlerinde örgü parametreleri.....	114
Çizelge 4.12 a) Örnek A için gerilme ve zorlama değerleri	116
Çizelge 4.12 b)Örnek B için gerilme ve zorlama değerleri	116
Çizelge 4.13. Örneklerin vida ve kenar tipi dislokasyon yoğunlukları.....	120
Çizelge 4.14. X değerleri, sönüm, soğurma katsayıları ve kalınlık	127

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.15. Örnek A ve B için Raman analizi	131
Çizelge 4.16. XRD ve Raman'dan elde edilen stress değerlerinin kıyaslanması	132

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. MOCVD büyütme tekniği işlem basamakları	8
Şekil 2.2. MOCVD transfer boruları şeması.....	9
Şekil 2.3. Yatay MOCVD sistemi şeması.....	9
Şekil 2.4. X-ışını demetinin kristal düzlemlerinden yansımaları.....	12
Şekil 2.5. Bragg yansımalarının ters uzayda oluştuğu 3D görüntü	13
Şekil 2.6. Mümkün olan kırınım geometrileri	14
Şekil 2.7. Farklı kusurlar yüzünden ters uzaydaki genişlemeler	16
Şekil 2.8. Toz kırınımı ve yüksek çözünürlüklü kırınım için örnek geometriler.....	17
Şekil 2.9. Ters uzaydaki probun hacminin gelen ışının sapmasına nasıl bağlı olduğunun gösterimi.....	18
Şekil 2.10. Rotasyon eksenlerini gösteren referans örnek çerçevesi	19
Şekil 2.11. Ters uzayda farklı tarama tipleri ile alınan yönelimler.....	22
Şekil 2.12. Safir alttaşa ait simetrik 006 yansımasının ters uzay haritası	24
Şekil 2.13. Numunedeki bileşiklerin yansıma taramalarının simule edilmiş hali.....	25
Şekil 2.14. Hızlı örgü parametresi belirlemenin basamakları.....	29
Şekil 2.15. Kesin örgü parametresinin belirlenmesi için bir metodun özeti.....	31
Şekil 2.16. Gerilmiş ve rahatlamış InGa _N tabakaları için ters uzay haritaları	37
Şekil 2.17. Artan gerilme durumunda alttaş ayrılımları.....	44
Şekil 2.18. Açılarının gösterimi	45
Şekil 2.19. Vida ve kenar dislokasyonlarından kaynaklanan yanlış yönelim.....	45
Şekil 2.20. Farklı dislokasyon yoğunluklarına sahip filmlerin FWHM değerlerinin χ açısına karşı grafiği	50
Şekil 2.21. Simetrik w taramaları için tipik bir grafiksel ayırma çizgisi metotta pik profiline Lorentzian ve Gaussian katkılarının oranı basit bir pik fiti ile bulunur	52

Şekil	Sayfa
Şekil 2.22. Eğim ve yatay korelasyon uzunluklarının yüzünden olan genişlemenin grafiksel ayrımı	54
Şekil 2.23. Ters uzaydaki kırınımın çoklu tabakalardaki şeması.....	59
Şekil 2.24. Analizör bir kristal kullanılarak elde edilmiş InGaN-GaN tekli kuantum kuyusuna ait w taraması	60
Şekil 2.25. Açık bir dedektörle elde edilen AlGaIn-GaN MQW' ye ait w taraması.....	61
Şekil 2.26. MQW'ler için açık dedektörle simülize edilmiş büyük açı w taramaları	65
Şekil 2.27. Süper örgülerde farklı gerilme veya rahatlama olasılıkları	65
Şekil 2.28. İlkel olmayan heksagonal hücre açısından, polar c düzlemi, yarıpolar r düzlemi ve polar olmayan a düzlemi yönelimleri	68
Şekil 2.29. Büyütme sürecinde ortaya çıkan mümkün ortorombik birim hücre ayrılımları.....	69
Şekil 2.30. Yarıpolar çoklu kuantum kuyusu yapısından küçük açılı X-ışını yansımaları [223]	74
Şekil 3.1. 6H-Al ₂ O ₃ alttaş üzerine büyütülen farklı tampon tabakalara sahip LT- GaN epitabakalar	85
Şekil 4.1. Örnek A, B ve C'nin (004) Miller yansıma düzleminde HR-XRD roking eğrileri	88
Şekil 4.2. (002) simetrik ve (102) asimetrik düzlemlerinde GaN ve InGaIn tabakalar için FWHM'nin sıcaklığa göre değişimi	90
Şekil 4.3. Örnek A, B ve C'nin a) InGaIn ve b) GaN tabakaları için (002), (101), (102), (004), (121), (006), (105) Bragg kırınım açılarına bağlı olarak FWHM değerleri.....	91
Şekil 4.4. GaN ve InGaIn'dan oluşan yapılar için çift eksenli gerilmenin sıcaklığa bağlı değişimi	93
Şekil 4.5. Örnek A, B ve C'deki GaN ve InGaIn tabakalar için $\cos 2\theta / \sin \theta$ 'nın örgü parametrelerine göre grafiği.....	96
Şekil 4.6. Örnek A, B ve C'deki GaN ve InGaIn tabakalar için $\sin \theta$ 'nın $\beta \cos \theta$ 'ya karşı grafiği	98

Şekil	Sayfa
Şekil 4.7. a), b) Örnek A'nın GaN tabakası için (002) ve (121) düzlemlerinde pik pozisyonlarındaki kayma c), d) Örnek B'nin GaN tabakası için (002) ve (121) düzlemlerinde pik pozisyonlarındaki kayma e), f) Örnek C'nin GaN tabakası için (002) ve (121) düzlemlerinde pik pozisyonlarındaki kayma ..	102
Şekil 4.8. a) (002), (004), (006) düzlemlerinde kenar mozaik blokları için Örnek A, B ve C'deki GaN tabakaların Williamson-Hall grafiği	104
Şekil 4.8. b) (002), (004), (006) düzlemlerinde kenar mozaik blokları için Örnek A, B ve C'deki InGaN tabakaların Williamson-Hall grafiği	104
Şekil 4.9. a) Örnek A, B ve C'nin GaN tabakaları için (002), (004), (006) düzlemlerinde düşey mozaik boyutunun Williamson-Hall grafiği	106
Şekil 4.9. b) Örnek A, B ve C'nin InGaN tabakaları için (002), (004), (006) düzlemlerinde düşey mozaik boyutunun Williamson-Hall grafiği	107
Şekil 4.10. a) Örnek A için (002) düzleminde sırasıyla χ 0, 0.4, -0.4 açılarında ters uzay haritaları b) Örnek A için (002) düzleminde software'den χ 0, 0.4, -0.4 açılarında 2θ dönüşüm ekranı c) Örnek A için (002) düzleminde χ 0, 0.4, -0.4 açılarında 2θ eğrileri	110
Şekil 4.11. a) Örnek A için (105) düzleminde sırasıyla χ 20.082, 20.482, 20.682 açılarında ters uzay haritaları b) Örnek A için (105) düzleminde software'den 20.082, 20.482, 20.682 χ açılarında 2θ dönüşüm ekranı c) Örnek A için (105) düzleminde χ 20.082, 20.482, 20.682 açılarında 2θ eğrileri	111
Şekil 4.12. a) Örnek B için (002) düzleminde sırasıyla χ 0, 0.4, -0.4 açılarında ters uzay haritaları b) Örnek B için (002) düzleminde software'den 0, 0.4, -0.4 χ açılarında 2θ dönüşüm ekranı c) Örnek B için (002) düzleminde χ 0, 0.4, -0.4 açılarında 2θ eğrileri	112
Şekil 4.13. a) Örnek B için (105) düzleminde sırasıyla χ 20.082, 20.482, 20.682 açılarında ters uzay haritaları b) Örnek B için (105) düzleminde software'den 20.082, 20.482, 20.682 χ açılarında 2θ dönüşüm ekranı c) Örnek B için (105) düzleminde χ 20.082, 20.482, 20.682 açılarında 2θ eğrileri	113
Şekil 4.14. InGaN/GaN yapıları için PL spektrumu	121
Şekil 4.15. InGaN/GaN yapısının geçirgenlik spektrumu	124
Şekil 4.16. Kırılma indisinin dalga boyuna göre değişimi.....	126
Şekil 4.17. Örnek A, B ve C için soğurma spektrumları	128
Şekil 4.16. InGaN aktif tabakanın FTIR titreşim spektrumu	129

Şekil	Sayfa
Şekil 4.17. Örnek A için Raman spektroskopisi	130
Şekil 4.18. Örnek B için Raman spektroskopisi	130
Şekil 4.19. Örnek C için Raman spektroskopisi	131
Şekil 4.20. InGaN/GaN güneş pilinin 3D AFM görüntüleri. a) Örnek A b) Örnek B c) Örnek C (oda sıcaklığında).....	133
Şekil 4.21. InGaN/GaN MQW yapıların SEM görüntüleri	135

RESİMLERİN LİSTESİ

Resim	Sayfa
Resim 2.1. HRXRD cihazı.....	12
Resim 4.1. Foto lüminesans ölçüm cihazı	80
Resim 4.2. Geçirgenlik ölçümlerinin yapıldığı cihaz	81
Resim 4.3. FTIR ölçümlerinin yapıldığı cihaz.....	82
Resim 4.4. Raman Spektroskopi Cihazı (Imaging Micropublisher 5.0 RTV).....	83

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklamalar
$\hbar$	İndirgenmiş Planck sabiti
μ	Elektron mobilitesi
v_s	Doyum sürüklenme hızı
σ_Y	Akma dayanımı
ΔE_c	İletkenlik bandı süreksizliği
ΔE_v	Valans bandı süreksizliği
$2\theta, \omega$	Kırınım-tarama açısı
a, c, u	Örgü parametreleri
Al	Alüminyum
Al ₂ O ₃	Safir
AlAs	Alüminyum Arsenit
AlGaAs	Alüminyum Galyum Arsenit
AlInGaP	Alüminyum İndiyum Galyum Fosfit
AlN	Alüminyum Nitrür
AlP	Alüminyum Fosfit
As	Arsenik
B	Bor
b	Burgers vektörü
Be	Berilyum
C	Karbon
Cd	Kadmiyum
CdSe	Kadmiyum Selenit
CH ₃	Metil
CH ₄	Metan
CP	Kritik nokta

Simgeler	Açıklamalar
Cp₂Mg	Bis (siklopentadienil) Magnezyum
C_{xy}	Elastik sabiti
d	Düzlemler arası mesafe
D	Vida tipi dislokasyon
E	Toplam enerji
E_A	Alıcı enerji düzeyi
E_C	İletkenlik bandı enerji seviyesi
E_D	Verici enerji düzeyi
E_{ds}	Elektronik deformasyon potansiyel
E_F	Fermi enerji seviyesi
E_g	Yasak enerji aralığı
E_v	Valans bandı enerji seviyesi
Ga	Galyum
GaAlAs	Galyum Alüminyum Arsenit
GaAlAsP	Galyum Alüminyum Arsenik Fosfit
GaAs	Galyum Arsenit
GaAsN	Galyum Arsenik Nitrür
GaAsP	Galyum Arsenik Fosfit
GaN	Galyum Nitrür
GaP	Galyum Fosfit
GaSb	Galyum Antimonit
Ge	Germanyum
H	Hamilton operatörü
h,k,l	Miller indisleri
H₂	Hidrojen gazı

Simgeler	Açıklamalar
He	Helyum
In	İndiyum
InAs	İndiyum Arsenik
InGaAs	İndiyum Galyum Arsenit
InGaN	İndiyum Galyum Nitrür
InN	İndiyum Nitrür
InP	İndiyum Fosfit
InSb	İndiyum Antimonit
K	Kelvin
k	Dalga vektörü, Termal iletkenlik
Kα_2, Kβ	Enerji seviyeleri arası geçişler
L$_{ }$	Yanal mozaik boyut uzunluğu
L$_b$	Bariyer genişliği
L$_z$	Kuantum kuyusunun genişliği
m*	Elektronun etkin kütlesi
M$_f$	Eksenli modül
Mg	Magnezyum
MgO	Magnezyum Oksit
MgS	Magnezyum Sülfid
MgSe	Magnezyum Selenit
N	Azot
N	Kenar tipi dislokasyon
n	Kırılma indisi
n, p	Katkılama tipi

Simgeler	Açıklamalar
N_2	Azot gazı
$NaCl$	Kaya tuzu
NH_3	Amonyak
Ni	Nikel
P	Fosfor
p	Penetrasyon derinliği
P	Momentum işlemcisi
R	Örgü rahatlaması
s	Saçılma vektörü
S	Kükürt
Sb	Antimon
Si	Silisyum
SiH_4	Silane
Si_2H_6	Dislane
SiC	Silisyum karbür
T	Kinetik enerji
T_g	Alttaş büyüme sıcaklığı
Ti	Titanyum
V	Kuantum kuyusunun yüksekliği
x	Alaşım kompozisyonu
x, y, z, Φ, ξ, χ	Ölçüm eksenleri
ZnS	Çinko Sülfid
$ZnSe$	Çinko Selenit
α	Burkulma açısı

Simgeler**Açıklamalar** α, β

Atomlar arası açılar

 α_a, α_c

Termal genleşme katsayıları

 β

Burgers vektör uzunluğu

 δ

Gelen ışın demetinin ıraksaklığı

 $\Delta a/a, \Delta c/c$

Termal genleşme katsayıları

 ΔH

Oluşum ısısı

 ϵ

Örgü uyuşmazlığı, örgü zorlaması, dielektrik sabiti

 θ

X-ışını demetinin düzleme gelme açısı

 λ

Dalgaboyu

 ρ

Öz direnç

 σ

İki eksenli gerilme

 τ

Örgü eğilme açısı

 ν

Poisson oranı

 Ψ

Dalga fonksiyonu

Kısaltmalar**Açıklamalar****2D**

İki boyutlu

3D

Üç boyutlu

AFM

Atomik kuvvet mikroskobu

CD

Kompakt disk

CIE

Renk oluşumu

cps

Sayım/saniye

CRI

Renksel geri verim

CVD

Kimyasal buhar birikimi

Kısaltmalar**Açıklamalar****DF**

Dielektrik fonksiyonu

DNA

Deoksiribo nükleik asit

DVD

Yazılabilir kompak disk

eV

Elektron volt

FTIR

Fourier kızılötesi spektroskopisi

FWHM

Yarı maksimumdaki tam genişlik

GB

Ciga bayt

hcp

Sıkı paketlenmiş altıgen

HEMT

Yüksek hızlı elektron mobiliteli tranzistör

HRXRD

Yüksek çözünürlüklü X-ışını kırınımı

Hz

Hertz

I-V

Akım-Voltaj

LD

Lazer diyot

LED

Işık yayan diyot

LO

Boyuna optik fonon enerjisi,

MBE

Moleküler demet epitaksi

MOCVD

Metal organik kimyasal buhar birikimi

MP

Mega piksel

MQW

Çoklu kuantum kuyusu

NANOTAM

Nanoteknoloji araştırma merkezi

P,Q,R,S

Sabit katsayılar

PL

Fotoluminesans

QW

Kuantum kuyusu

RF

Radyo frekansı

RGB

Kırmızı yeşil mavi

Kısaltmalar**Açıklamalar****RLU**

Ters uzunluk brimi

RMS

Kuadratik ortalama

SdH

Shubnikov de Haas etkisi

SL

Uydu piki

TD

Tedirgin edici dislokasyon

TMAI

Trimetilalüminyum

TMGa

Trimetilgalyum

TMI_n

Trimetilindiyum

UHV

Çok yüksek vakum

UV

Mor ötesi

W-H

Williamson-Hall

1. GİRİŞ

III- grubu nitritler geniş ve doğrudan bant aralıklarına sahiptir. Bant aralığı değerleri, indiyum nitrit için (InN) yaklaşık 0,7 eV, galyum nitrit (GaN) için 3,4 eV, alüminyum nitrit (AlN) için 6,2 eV'tur. Geniş bant aralıkları ve güçlü bağları yüzünden, ışık salan diyotlar (LED), yüksek sıcaklıklarda çalışabilen yüksek elektron mobiliteli transistörler, dedektörler ve güneş pilleri gibi çeşitli cihazların yapımında nitritler kullanılabilirler.

Çizelge 1.1. III- grubu Nitritlerin Özellikleri

Özellikler	GaN	InN	AlN
Kristal Yapı	Wurtsit	Wurtsit	Wurtsit
Erime Noktası (°C) [1]	2791	2146	3481
Isısal İletkenlik (W/cm/C)[2]	1,3	0,8	2
Bant Aralığı (eV@300 K)[1]	3,43	0,7	6,14
Elektron Mobilitesi (cm ² /V.s)[2]	900	4400	300
Hol Mobilitesi (cm ² /V.s)[2]	30	39	14
Spesifik Gravite (g/cc)[2]	6,1	-	1,95
Spesifik Isı (J/gmC)[2]	0,49	0,32	0,6
Termal Difüzelik (cm ² /s)[2]	0,43	0,2	0,47
Termal Genleşme Katsayısı[1]	$\alpha_c=3,2E-6$	$\alpha_c=3,8E-6$	$\alpha_c=5,3E-6$
	$\alpha_a=5,6E-6$	$\alpha_a=2,9E-6$	$\alpha_a=4,2E-6$
Örgü Parametresi 'a' (300 K)[1]	0,3189	0,3533	0,3112
Örgü Parametresi 'c' (300 K)[1]	0,5186	0,576	0,4982
Dielektrik Katsayısı ' ϵ_0 '[2]	9,5	8,4	8,5

III-grubu nitritlerin yapısal, elektriksel ve ısısal özellikleri Çizelge 1.1'de verilmiştir. Bu çizelgedeki veriler literatürden elde edilmiştir [1-6]. Nitrit tabanlı yarıiletkenler aşağıda listelendiği gibi birçok uygulamada kullanılabilirler.

- Işık salan diyotlar (LED'ler)
- Laser diyotlar (LD'ler)
- Yüksek sıcaklık ve yüksek güç için transistörler.
- UV deteksiyonu için foto dedektörler.
- Güneş pilleri.

Ticari olarak elde edilebilen yerli alttaşların azlığından dolayı, III-grubu nitritlerin büyütme sistemlerinde kullanılmak üzere alttaş geliştirebilmek için değişik çalışmalar yapılmıştır.

GaN, nitrit ailesinin üzerinde en çok çalışılan elemanıdır. GaN için birçok problem örgü uyumsuzluğu ve ısısal uyumsuzluktan kaynaklanır. GaN tabakalar, üretilen cihazın

epitaksiyel tabakalarında çatlama ve artan tedirgin edici dislokasyonları engellemek için aktif tabaka ve safir alttaş arasındaki büyük örgü uyumsuzluğu açısından önem taşır. Herhangi bir cihazı büyütmeden GaN tampon tabaka safir üzerine büyütülür. Bu işlem $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ve $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ gibi aktif tabakalar için, adapte olmuş uyumsuzluk ve gevşeme değerleri elde etmek için yapılır. Bu tür heksagonal tabakalar, kübik yapılara göre, noktasal, çizgisel ve hacimsel kusurlar içerebilir. Bu kusurlar ve safsızlıklar, büyütme koşullarından kaynaklanabilir. Bu iki tabakadaki kusur yoğunluğunun azaltılması, yüksek performanslı bir cihaz elde edebilmek için önemlidir. Bu amaçla, InGaN/GaN çoklu kuantum kuyusu (MQW) SC'lerin mikro yapısal özellikleri bu tezde incelendi.

GaN'ın ve safirin farklı ısısal genleşme katsayıları ve örgü sabitleri yüzünden, GaN tabakalarda $10^8\text{-}10^{10}\text{ cm}^{-2}$ mertebesinde tedirgin edici dislokasyonlar görülebilir [7]. Tampon tabakalardaki yüksek kusur yoğunlukları MQW'nin mikro yapısını önemli ölçüde etkiler. GaN tabakalar mozaik kristaller olarak büyütülür. Bu kristaller eğim ve burkulma açılarıyla karakterize edilir. Tabakalardaki yüksek tedirgin edici dislokasyonlar bu açılarla ilişkilidir ve GaN tabanlı MQW'lerin ömrü ve performansı üzerinde önemli etkiye sahiptir [8, 9]. Bu sebepten çoklu kompleks tabakalarla oluşturulmuş SC yapı, GaN tabakadakine benzer özellikler gösterir [10]. GaN tabanlı MQW LED'ler, endüstriyel üretimde büyük potansiyele sahip olduğu için, birçok araştırmacı optoelektronik cihazların güvenilirliğini artırmak için tabakaların kusur yoğunluğunu azaltarak homo epitaksiyel büyütme üstünde çalışmışlardır [11, 12].

Kusur çalışmalarında eğim, burkulma açıları ve tedirgin edici dislokasyonlar, tabakaların asimetrik ve simetrik piklerinin genişlemelerinden elde edilebilir. Genel olarak yarı yükseklikteki tam genişlik (FWHM), bu hesap için yeterlidir. Ama epitaksiyel tabakaları iyi kalitede inceleyebilmek için, yüksek çözünürlüklü X-ışını kırınımı (HRXRD) kullanılabilir. Bu yöntem büyütme koşullarından bile etkilenir. Mozaik kusurları çözümlemek için HRXRD uygun bir tekniktir. Çünkü bakır hedeften elde edilen tek renkli $K_{\alpha 1}$ piki yüksek şiddet ve çözünürlüğe sahiptir. Literatürde burkulma ve eğim açılarıyla ilgili sadece birkaç çalışma dikkat çekmiştir. Lafford ve arkadaşları, alaşımın içeriğinin ve ara tabaka kalınlığının $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ çoklu yapıların eğim ve burkulma açılarının üzerindeki etkilerini incelemiştir [13]. Wang ve arkadaşları, parçacık boyutunun eğim ve burkulma açılarına etkisini, GaN üzerine metal-organik kimyasal buhar biriktirme yöntemiyle (MOCVD) büyütülen InN'ın etkilerini araştırmışlardır [14]. Lafford ve arkadaşları, GaN

epitaksiyel tabakalardaki burkulmayı, büyüme sıcaklığının bir fonksiyonu olarak ölçmüşlerdir [15].

Bu tezde InGaN/GaN MQW numuneler c- düzlemlerinde safir üzerine büyütülmüştür. Büyütme işlemi MOCVD tekniği ile yapılmıştır. Numunelerin yüzey morfolojisi, zararsız HRXRD ve AFM (atomik kuvvet mikroskobu) ile yapılmıştır. Ayrılmış GaN tabakalar mozaik kristaller olarak açıklanmış, eğim ve burkulma açıları, yatay ve düşey koherens uzunlukları ile karakterize edilmiştir. (00.l) yansımalarının simetrik roking eğrileri, eğim açılarını belirlemek için kullanılmıştır. Öte yandan burkulma açıları asimetrik (hk.l)'nin w taramasından çıkarılmıştır. Bu işlem yapılırken Bragg yansımalarında sıfır olmayan h ve k kullanılmıştır. Mozaik yapı, (10.l) kristal yöneliminden analiz edilmiştir.

2. TEMEL BİLGİ

2.1. Büyütme Teknikleri

III-grubu nitritlerin büyütülmesi için en büyük problem uygun bir alt tabakanın bulunmasıdır. Çünkü III-grubu nitritlerin gövde olarak büyütülmesi, homo epitaksiyel alt tabaka üretilmesi için henüz geliştirilmemiştir. III-grubu nitritlerin epitaksiyel olarak büyütülmesi halen hetero epitaksiyel tabakalar üzerine yapılmaktadır. Bu tabakalarda büyütülen tabaka ve alt tabaka arasında, örgü ve ısısal uyumsuzluk mevcuttur. III-grubu nitritlerin büyütülmesi için en alışılmış alt tabakalar SiC ve safirdir. SiC, III-grubu nitritlerde daha uyumlu olmasına rağmen, az bulunan bir malzeme olması ve yüksek maliyeti yüzünden, safir bu malzemeye göre daha çok kullanılır.

Büyütülen III-grubu nitritler ve diğer alt tabakalar arasındaki büyük uyumsuzluktan dolayı, III-grubu nitritlerden oluşan cihaz uygulamaları için iyi çözümler bulunmalıdır. Sıvı faz epitaksi (LPE), moleküler demet epitaksi (MBE) ve metal organik kimyasal buhar biriktirme (MOCVD) metotları III-grubu nitritlerin büyütülmesi için epitaksiyel metotlardır [16].

2.1.1. Sıvı faz epitaksi (LPE)

LPE büyütmesinde, ince film tabakalar, kendi ana malzemelerinden yapılan bir çekirdek kristal veya katı alt tabakalar üzerine büyütülürler. Büyütme oranı soğutma sürecine bağlıdır. LPE süreci, hızlı büyütme oranı ve düşük maliyete sahiptir. Öte yandan karmaşık malzemelerden oluşan sistemlerin büyütülmesi zordur. Çünkü aynı büyütme sistemi içinde farklı ana malzeme kaynakları gerekir ve alt tabaka bu ana malzeme kaynakları arasında transfer edilmelidir. Bu büyütme tekniği 1 mm'den küçük film kalınlıkları için uygun değildir.

2.1.2. Moleküler demet epitaksi (MBE)

MBE büyütmesinde, epitaksi 10^{-8} Pa gibi yüksek vakumda gerçekleşir ve kaynaklar ayrı ayrı ısıtılır. Her kaynağın sıcaklığı ayrı ayrı hassas bir şekilde kontrol edilebilir. MBE sistemi yardımıyla çok saf malzemeler büyütülebilir. Yüksek vakum seviyeleri, üretimin maliyetini

yükseltir. Düşük büyütme oranı ve yüksek işlem maliyeti yüzünden MBE sistemleri kitle üretimi için uygun değildir.

2.1.3. Metal organik kimyasal buhar biriktirme (MOCVD)

Malzemelerin büyütülebilmesi için farklı MOCVD sistemleri vardır. (Nitrit tabanlı, As tabanlı, P tabanlı vb.) Büyütülmek istenen malzeme sistemi sistemin konfigürasyonunu belirler. Bu konfigürasyonda, kaynaklar ve reaktör tasarımı gibi olaylar yer alır. Trimetilgalyum (TmGa), trietilgalyum (TEGa), trimetilaliminyum (TmAl), trimetilindiyum (TMIn), silan (SiH_4) gibi metal organik kaynaklar vardır. Bunlar hidrojen ve nitrojen gibi taşıyıcı gazlarla taşınır. Bu taşıma iyi planlanmış bir pompalama sistemiyle yapılır. Bu pompalama sisteminde bir reaktör vardır ve gazlar alt tabakanın üzerine gönderilir. Bu işlem den önce tam bir karıştırma ve ısıtma işlemi yapılır. MOCVD büyütme metodu, kitle üretimi için uygundur. Yüksek saflıkta malzemeler büyütülebilir ve aynı anda birden çok alt tabaka üzerine büyütme yapılabilir. Kitle üretimi, sistemin çalışma maliyetini düşürür.

2.1.4. Epitaksi

Epitaksi yunanca kökenli bir kelimedir. Epi üstüne, taksii hazırlama anlamına gelir. Epitaksiyel büyütme terimi, kristal bir alt tabaka üzerine sıralı bir şekilde büyütülen filmin atomik düzeninin, alt tabakaninkiyile en iyi uyum sağlayacağı biçimde büyütülmesi anlamına gelir. Diğer bir deyişle, tek kristal bir filmin tek kristal bir alt yapı üzerine büyütülmesi anlamına gelir. Epitaksiyel büyütme farklı optoelektronik cihazların üretilmesinde önemli bir tekniktir. Bu özel cihazlar değişik içerikli, farklı stokrometre ve kalınlığa sahip bir dizi ince filmler içerir.

2.1.5. Homoepitaksi

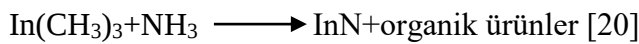
Kristal film aynı malzemeden yapılmış bir alt tabaka üzerine büyütülür (Si/Si gibi).

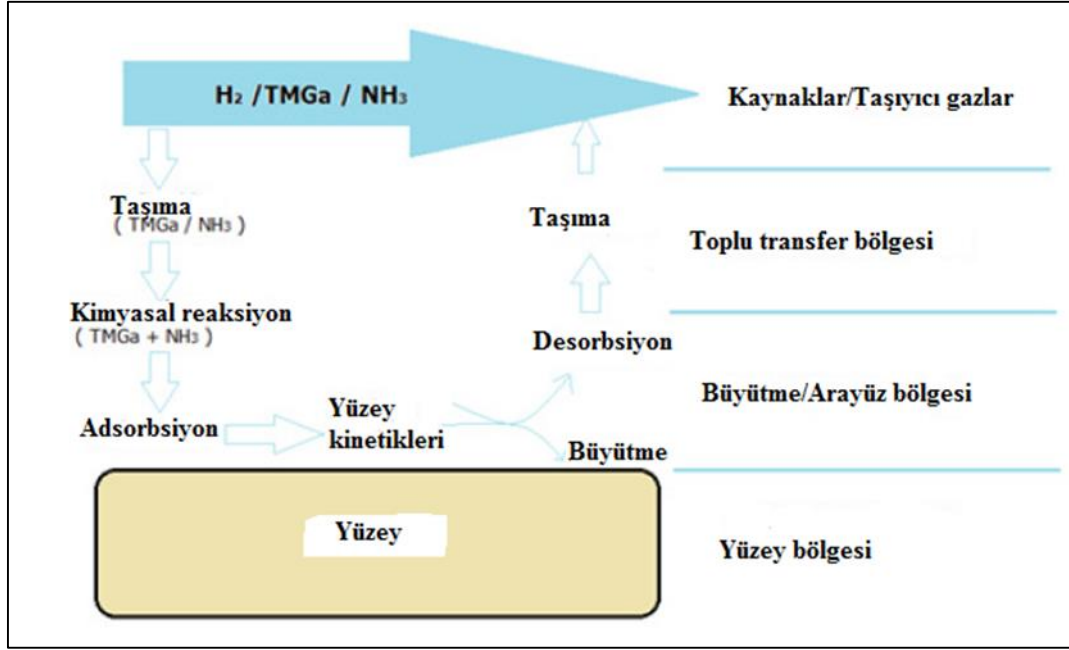
2.1.6. Heteroepitaksi

Kristal filmin malzemesi ve alt tabakanın malzemesi farklıdır. (GaN gibi). MOCVD büyütme tekniği otuz yılı aşkın bir süredir, epitaksiyel ince filmlerin büyütülmesi için kullanılmaktadır. As/P tabanlı, SiC tabanlı ve GaN tabanlı malzemeler MOCVD tekniği ile büyütülebilmektedir. As/P tabanlı malzeme sistemi için büyütme sıcaklığı 850 °C civarındadır [17]. GaN tabanlı malzeme sistemi ise 1100 °C gibi daha yüksek büyütme sıcaklığı gerektirir [18]. Tipik taşıyıcı olarak hidrojen ve nitrojen gazları kullanılır. Çok tabakalı III-grubu nitritlerin büyütülmesi için en iyi metot MOCVD metodudur. Bu metot kitle üretim için kullanılabilir. AlGaIn/GaN ve InGaIn/GaN yapıların farklı cihaz yapıları için büyütülmesi MOCVD metoduyla geniş olarak incelenmiştir [2].

Bu büyütme tekniği epitaksiyel ince filmleri büyütme için “taşıyıcı” denilen moleküller içeren gaz karışımlarından yararlanır. Taşıyıcı gaz, büyütülen malzemenin çeşidine bağlı olarak yüksek saflıkta nitrojen veya hidrojendir [19].

Şekil 2.1 tipik bir MOCVD büyütmesinde işlem basamaklarını göstermektedir. Şekilde görüldüğü gibi dört farklı bölge vardır. Malzemenin büyütülmesi için gerekli bütün molekülleri içeren gaz karışımı, bu karışım ısıtılan alt tabakaya sol taraftan gelmektedir. Gaz karışımındaki kaynaklar alt tabakaya difüze olur. Difüze olan taşıyıcılar birbiri ile reaksiyona girer ve gerekli kimyasal etkileşmelerden sonra, şekilde belirtildiği gibi istenen malzeme alt tabakanın üzerine büyütülür [19]. Taşıyıcılar arasındaki kimyasal reaksiyonlar şu şekildedir;



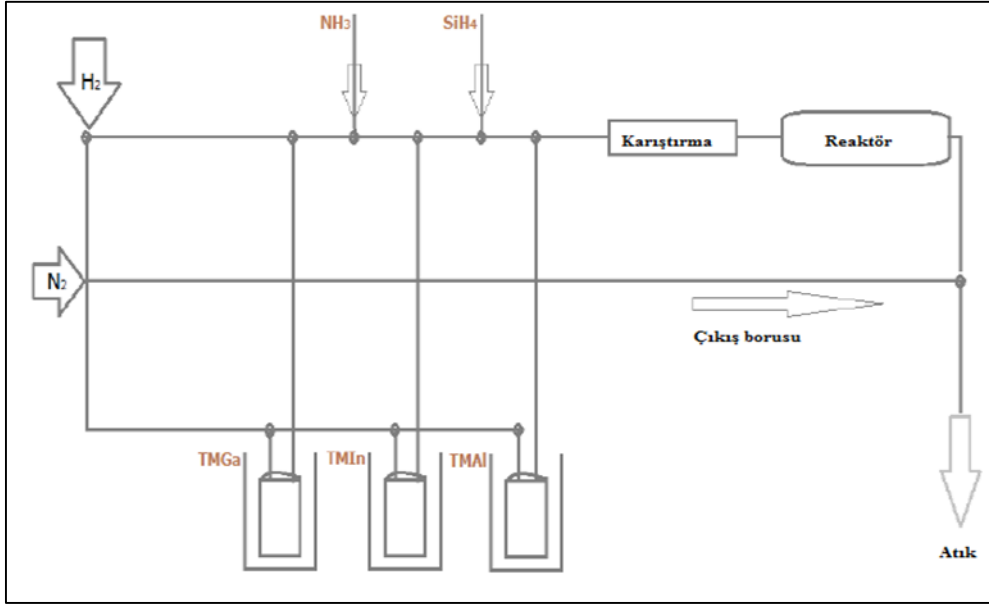


Şekil 2.1. MOCVD büyütme tekniği işlem basamakları

Yüzey tarafından absorbe edilen moleküller sabit değildir, hareketlidir. Yüzey hareketliliği daha tam olarak anlaşılamamıştır çünkü bunun için yeterli ölçme aracı yoktur.

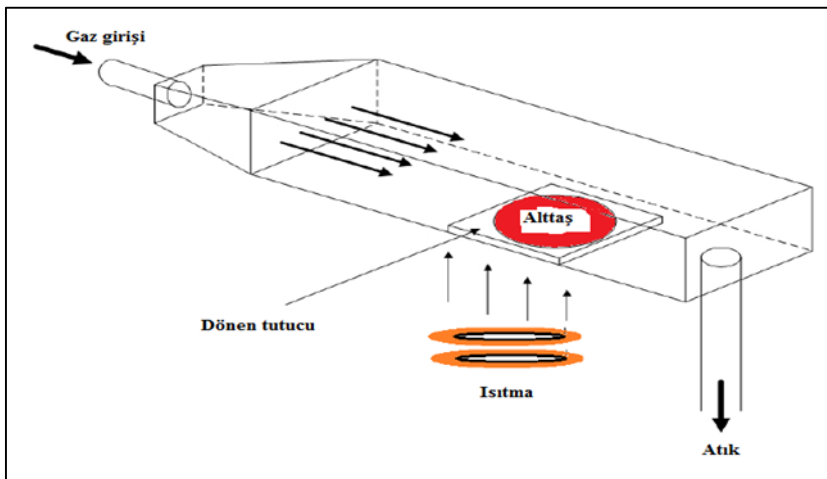
2.1.7. Konfigürasyon

Şekil 2.1 sadece kaynakların ve ilgili transfer borularının gösterildiği MOCVD sisteminin şematik bir diyagramını göstermektedir. Büyütme sırasında kullanılan reaktöre ulaşmak için gerekli yolları izler. Büyütmede kullanılmayan diğerleri ise çıkış borusuna yönlendir. MOCVD sistemi çeşitli elektronik ve pönomatik valflar, kitle akış kontrolörleri, basınç kontrolörleri ve anahtarlama sistemleri de kullanır. Bunlar reaktöre akan kaynakların miktarını ayarlamak ve büyütülen malzemelerin atomik ölçekte kontrolü içindir [19].



Şekil 2.2. MOCVD transfer boruları şeması

Şekil 2.2 yatay bir MOCVD reaktörünün basit şematik diyagramını göstermektedir. Kaynaklar ve taşıyıcı gazlar (H_2 veya N_2) gaz girişinden geçer ve reaktöre ulaşır. Alttaş tutucusunu taşıyan bir döner muhafaza vardır. Dönüş olayı büyütülen epitaksiyel tabakanın daha düzgün olmasına yardım eder. Reaktörün ısıtılması birkaç metotla yapılabilir. Reaktörün etrafındaki RF bobini, alttaşın etrafında düzgün bir sıcaklık değişimi sağlar. Epi büyütmede bu durum büyük önem taşır.



Şekil 2.3. Yatay MOCVD sistemi şeması

2.1.8. Kaynaklar

MOCVD sisteminin diğer ince film büyütme tekniklerine göre en büyük avantajı, geniş bir kaynak malzeme aralığına sahip olmasıdır. MOCVD büyütmesinde, genel olarak II ve III. grup metallerin alkileri ve V ve VI. grup elementlerin hidritleri kullanılır. Bu kaynakların buharları yüksek sıcaklıkta bir reaktöre transfer edilir. Bu reaktörde epitaksiyel ince film büyütmesinde yer alan prolisis reaksiyonu gerçekleşir.

Genellikle prolisis reaksiyonu III-V grubu malzemeler için aşağıdaki şekildedir; [8]



Çizelge 2.1. MOCVD kaynak malzemeler

Bileşiğin adı	Akronomi	Bileşim
Trimetilgalyum	TMGa	III element
Trietilgalyum	TEGa	III element
Trimetilaliminyum	TMAI	III element
Trietilaliminyum	TEAl	III element
Trimetilindiyum	TMIIn	III element
Trietilindiyum	TEIn	III element
Etidimetilindiyum	EDMIIn	III element
Trimetilantimon	TMSb	V element
Trietilantimon	TESb	V element
Trimetilarсенik	TMAAs	V element
Dimetilarсенikhidrit	DEAs	V element
Tertbutilarсенik	TBAAs	V element
Tertbutilfosfat	TBP	V element
Arsin	AsH ₃	V element
Fosfin	PH ₃	V element
Hidrojen selenit	H ₂ Se	n-dopant
Hidrojen sülfid	H ₂ S	n-dopant
Silan	SiH ₄	n-dopant
Disilan	Si ₂ H ₆	n-dopant
Tetrametilin	TMSn	n-dopant
Tetraetilin	TESn	n-dopant
Dimetilçinko	DMZn	p-dopant
Dietilçinko	DEZn	p-dopant
Dietilberilyum	DEBe	p-dopant
Dimetilkadmiyum	DMCd	p-dopant
Bisiklopendadilinmagnesium	BCp ₂ Mg	p-dopant

Burada sırasıyla R, M ve E'nin alkileri (C₂H₅ veya CH₃), III grubu metaller (Ga, In, Al) ve grup V elementleridir (N, P, As, Sb). Çizelge 2.1'de verilen kaynak malzemeler için kriterler [21] şu şekildedir;

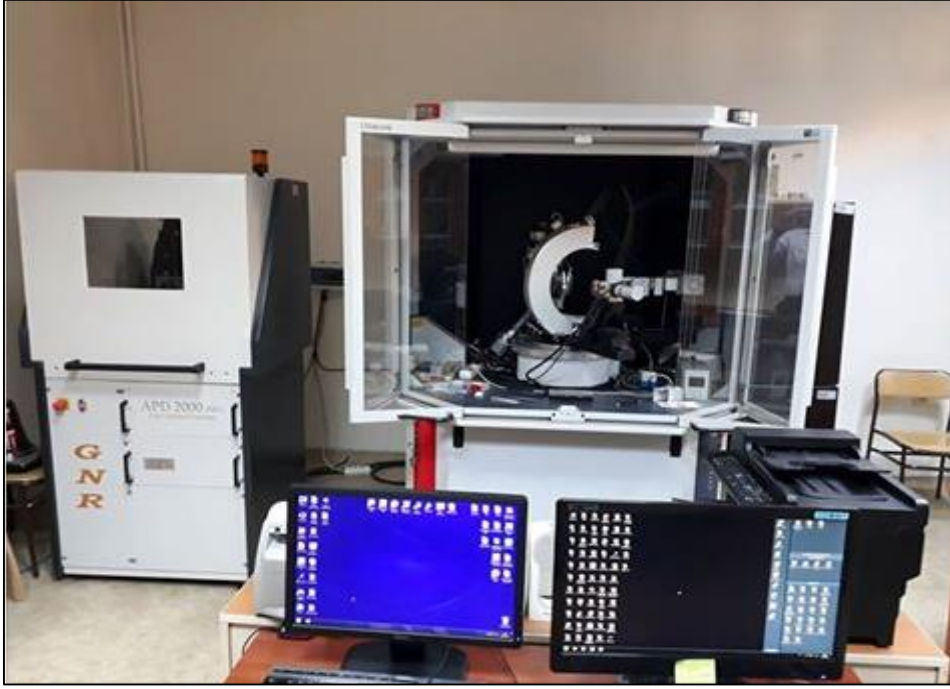
- Oda sıcaklığında kararlılık
- Tekrar bileşik yapmadan önce N₂, H₂ ve He ortamında buharlaşma.
- Mümkün olan en küçük toksitlik.
- Safsızlıklardan arındırmak için saflaştırma ihtimali.
- Kendiliğinden olan tekrar bileşik yapmaya ve polimerleşmeye karşı direnç.

MOCVD sisteminde, trimetil kaynaklar yüksek buhar basıncı ve kararlılıkları yüzünden daha sık kullanılırlar. İstenilen malzeme sisteminin büyüme sıcaklığında kolayca yeniden bileşik yapabilen metal-organik ve hidrit kaynakları seçmek de önemlidir.

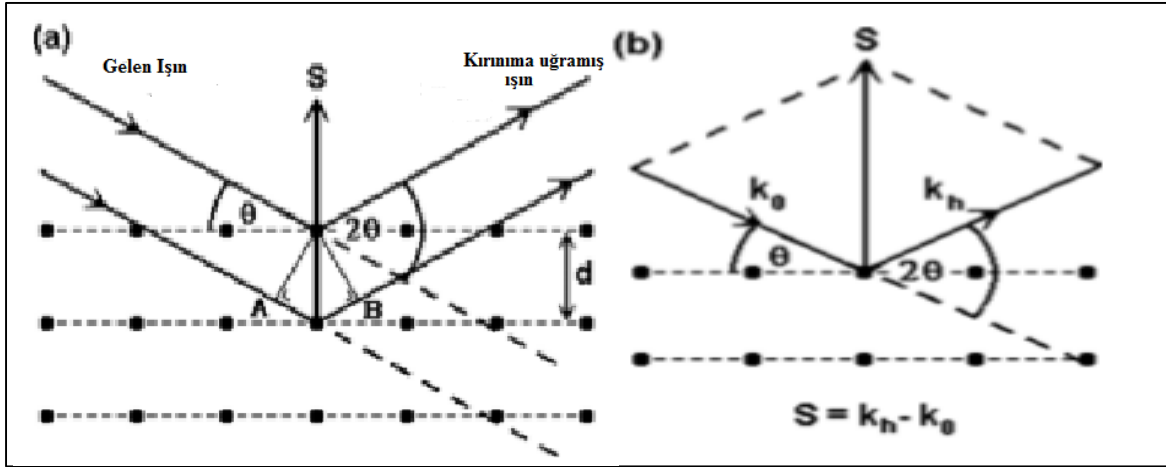
2.2. XRD (X Işınları Kırınımı)

2.2.1. Kırınım ve ters uzay

X-ışını kırınımı, bir kristalin derinliğinin, dalga boyu kristalin örgü aralığına yakın x-ışını ile yoklanmasını içerir. (Şekil 2.4) X-ışınları genellikle vakumlanmış bir tüpte, bir metalin (tipik olarak bakır) elektronlarla bombardımanı ile oluşur [22]. Genellikle tek renkli X-ışınları seçilir. Bu X-ışınları kristalin içindeki her atomu çevreleyen elektron bulutu tarafından saçılır. Yol farkı $AB(n\lambda)=2d\sin\theta$ olduğunda saçılan X-ışınları arasında yapıcı girişim oluşur. (Şekil 2.4) Bu Bragg yasasının temelidir. Bu yasa atom düzlemleri arasındaki aralık mesafesi (d) ile gelen monokromatik demetin yapıcı girişim oluşturması için gereken açı (θ)' yı ilişkilendirir.



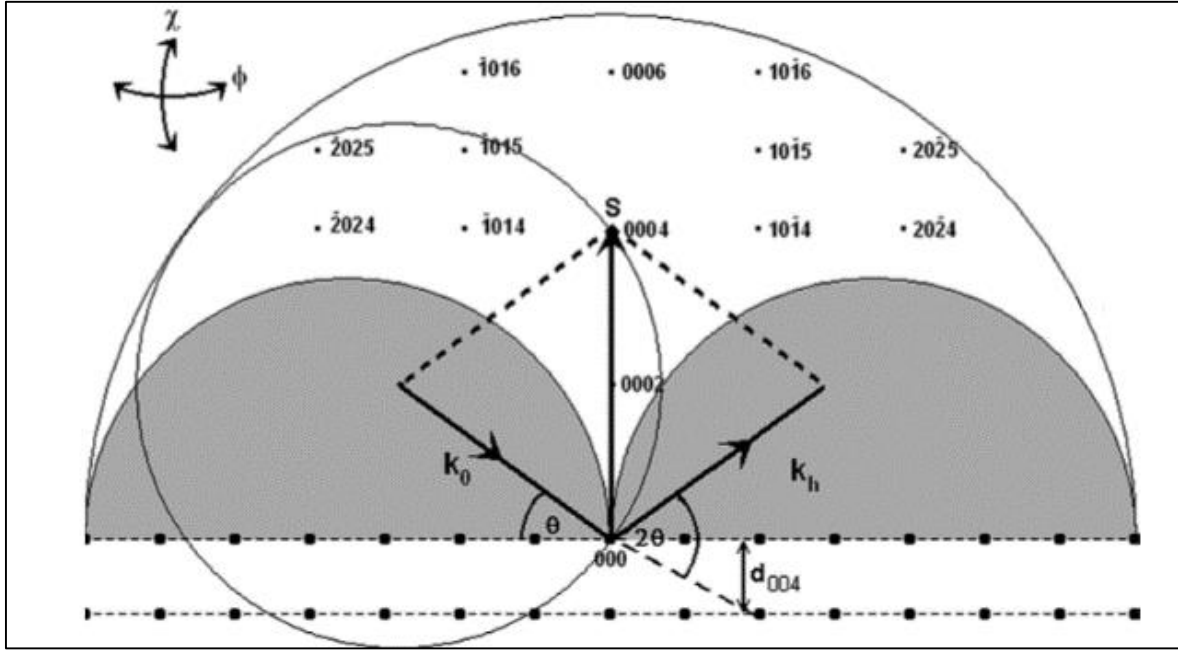
Resim 2.1. HRXRD cihazı



Şekil 2.4. X-ışını demetinin kristal düzlemlerinden yansımaları

$$n\lambda = 2d\sin\theta \quad (2.1)$$

Deneyssel olarak 2θ açısı ölçülmüştür. Kristal 3D bir kırınım ağı olarak davranır. Böylece numune veya dedektör hareket ettirildiğinde 3D bir kırınım dizisi gözlenebilir. Her kristal düzlemi seti bir kırınım görüntüsü üretir. Her görüntünün şekli ve pozisyonu, kristal boşlukları ve büyüklükleri ile ters olarak ilişkilidir. Kristal düzlemleri gerçek uzayla ve kırınım görüntüleri ters uzayla ilişkilidir. İkincisi ters 3D örgüyü oluşturur.



Şekil 2.5. Bragg yansımalarının ters uzayda oluşturduğu 3D görüntü

Bir kristalden ters örgüyü oluşturmak için, her kristal düzlemiyle ilgili ters örgü noktaları çizilir. Bu bir başlangıç noktası seçerek ve bu başlangıç noktasından uzakta bir vektör çizerek yapılır. Bu vektör kristal düzlemlerine dik olarak seçilir. Bu vektörün şiddeti $1/d$ 'dir. Burada d düzlemler arası uzaklıktır. Vektörün bittiği yere bir nokta çizilir. Bu her düzlem seti için tekrarlanır. Ta ki periyodik bir noktalar dizisi oluşana kadar. Sonuç olarak yönelimler ters ve gerçek uzayda aynı kalır. Ama mesafeler ters dönmüştür. Düzlemler arası mesafeyi değiştiren herhangi bir faktör, kırınım görüntülerinin pozisyonunu değiştirir.

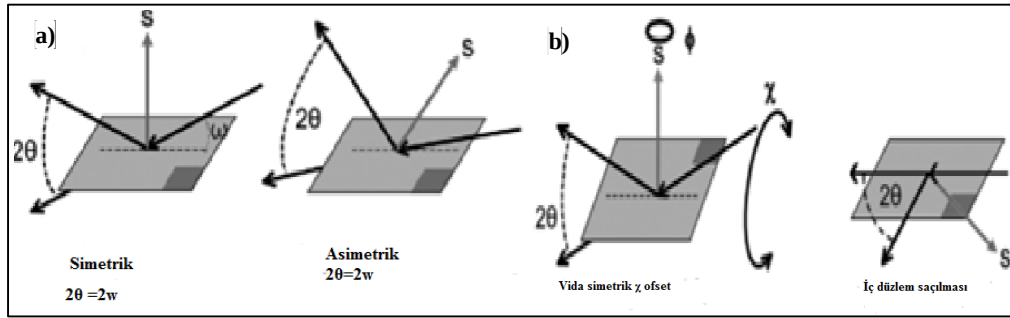
Çizelge 2.2. X-Işını kırınımında kullanılan parantezlerin anlamları

Üç indeksli notasyon	Dört indeksli notasyon	Anlamı
105	10-15	Yansıma
(105)	(10-15)	Düzlem
{105}	{10-15}	Düzlemler ailesi
[105]	[10-15]	Yön
<105>	<10-15>	Yönelimler ailesi

Şekil 2.5'deki örnekte baskıcı iç düzlem gerilimi, düzlem dışı düzlemler arası boşluğu (0002) artırır. (GaN'ta kristalin Poisson tepkisinden dolayı). Bu durum başlangıç noktasından ters uzaydaki (0002) görüntüsüne olan uzaklığı azaltır. Heksagonal kristal sistemleri için, 4 indisli (hkil) notasyon sıklıkla kullanılır [23]. İlave olarak kullanılan keyfi

i indisi= $-(h+k)$ 'dır. Bu $(11-20)$ ve (-2110) gibi düzlemlerin eşitliğini gösterir. Çizelge 2.2'de notasyon kolaylıklarının bir özeti verilmiştir.

Kırınım ters örgüde de görülebilir. Eğer gelen (k_0) ve kırınıma uğramış (k_h) demet vektörleri, kristalle uygun açılar yapıyorsa, saçılma vektörü $S = k_h - k_0$ bir ters örgü noktasında biter. (Şekil 2.4b). Saçılma vektörü S ters örgüyü incelemek için kullanılan probdur ve bunun uzunluğu 2θ açısını değiştirerek değiştirilebilir. S 'nin yönelim veya oryantasyonu w 'yi değiştirerek taranabilir. w , gelen demetin numunenin yüzeyiyle yaptığı açıdır (w ve θ aynı değildir. θ , gelen demetin atom düzlemiyle yaptığı açıdır). Bu durumda ters örgünün kristale yapışık olduğunu düşünebiliriz. Eğer kristal hareket ederse, ters örgü de hareket eder. Böylece ters uzayın farklı bölgelerini w ve 2θ 'yı değiştirerek ve S 'yi değiştirerek birde kristal oryantasyonunu değiştirerek inceleyebiliriz. Ewald küresi oluşumu sıklıkla bunu göstermek için kullanılır. (Şekil 2.5) Aynı vektörler $1/\lambda$ yarıçaplı bir küre üzerinde gösterilmiştir (merkezi gelen demetin başlangıç noktasıdır, k_0). Bu küre S ile inceleyebileceğimiz ters uzayın bölümünü gösterir. Bu λ ve θ 'nın özel bir bölümüne denk gelir. θ arttıkça S vektörünün büyüklüğü artar. S , maksimum değeri k_0 'ın iki katı olan $2/\lambda$ değerine kadar artar. Kürenin bir noktaya temas ettiği yerde kırınım oluşur.



Şekil 2.6. Mümkün olan kırınım geometrileri

Bütün kırınım noktaları elde edilemeyebilir. Şekil 2.5'deki büyük daire verilen bir λ ve maksimum θ için S 'nin ulaşılacak en dış değerini gösterir. w 'da bir offset uygulanabilir ($\text{offset} = \theta \pm w$). Fakat gri bölgeler numunenin giren ya da çıkan demeti engellediği bölgeleri gösterir. Alternatif geometriler de kullanılabilir. Şekil 2.5'deki taralı bölgeler geçiş geometrisinde elde edilebilir (X-ışını demeti numuneyi veya filmi delebilirse). Çoğunlukla Şekil 2.5'deki sayfanın dışındaki noktaları elde etmek için, numune ϕ çevresinde 90 derece döndürülür ve bir χ offseti Şekil 2.6'da görüldüğü gibi vida simetrisi verir. Bu offsetler

düzlemler arası açılar için standart denklemler kullanılarak hesaplanabilir ve sıklıkla veri yazılımı ile ilişkilidir. Numunenin yüzeyindeki noktalar, bölüm 2. 13. 5 te anlatıldığı gibi sıyırma kırınımıyla elde edilebilir (hemen hemen düzlem içi saçılmayla). Daha ileri bilgi için Fewster [24] ve Pietsche, Holy ve Baumbach'ın [25] kitaplarına bakınız. Pratikte bir kristal nadiren çok keskin kırınım noktaları verir. Üstelik noktalar ters uzayda mikro yapısal kusurlar yüzünden genişler, buna cihazın çözünürlüğü ve numunenin makro boyutu da katkı yapar (alt taşın eğriliği gibi).

Ters uzaydaki genişleme (XRD taramalarında ölçüldüğü gibi) ΔS olarak tanımlanabilir. Burada saçılma vektörü $S=1/d=2\sin\theta/\lambda$ ' dır. Gerçek numunedeki özellikler, ters uzaydaki genişlemeye aşağıdaki bağıntılara göre sebep olurlar;

$$L = \frac{1}{\Delta S} \quad (2.2)$$

$$\alpha = \frac{\Delta S}{S} \quad (2.3)$$

$$\varepsilon = \frac{\Delta S}{2S} \quad (2.4)$$

Halbuki L 'nin sınırlı değerine karşı genişleme, orijinden olan uzaklıkla değişmez. (S 'den bağımsızdır). Örgü aralığındaki genişleme ve burkulma (α), mikro gerilim ($\varepsilon=\Delta d/d$) bileşik/gerilim gradyentleri, orijinden olan uzaklıkla artar. (S 'ye bağlıdır)(Şekil 2.4). Bu yazıda sınırlı boyut kısa bir X-ışını korelasyon uzunluğuna işaret eder, tipik olarak küçük boyutta kristal atomunda üretilmiştir, bu uzunluk dislokasyonlar ve sınırlı film kalınlığı arasındaki ortalama kısa mesafedir (ters uzaydaki büyük bir nesneye karşılık gelen gerçek uzaydaki küçük bir nesne). Mikro gerginlik küçük ölçekli gerginlik değişimleridir. Bunun sebebi örneğin dislokasyonlar, “aralık ve burkulmadır”(2. 14. 1 'de var). Yanal mikro gerilim genişlemesinin simetrik yansımaları etkilemediği bilinmelidir. Çünkü bunların çıktığı düzlemlerin yanal bileşeni yoktur. Alt taşın eğriliği de orijin çevresinde bulunan noktaların genişlemesine neden olur. Üstelik dislokasyonlar, dizilme hataları ve nokta kusurlar, her noktayı çevreleyen zayıf difüzyon saçılmalarına katkıda bulunabilir.

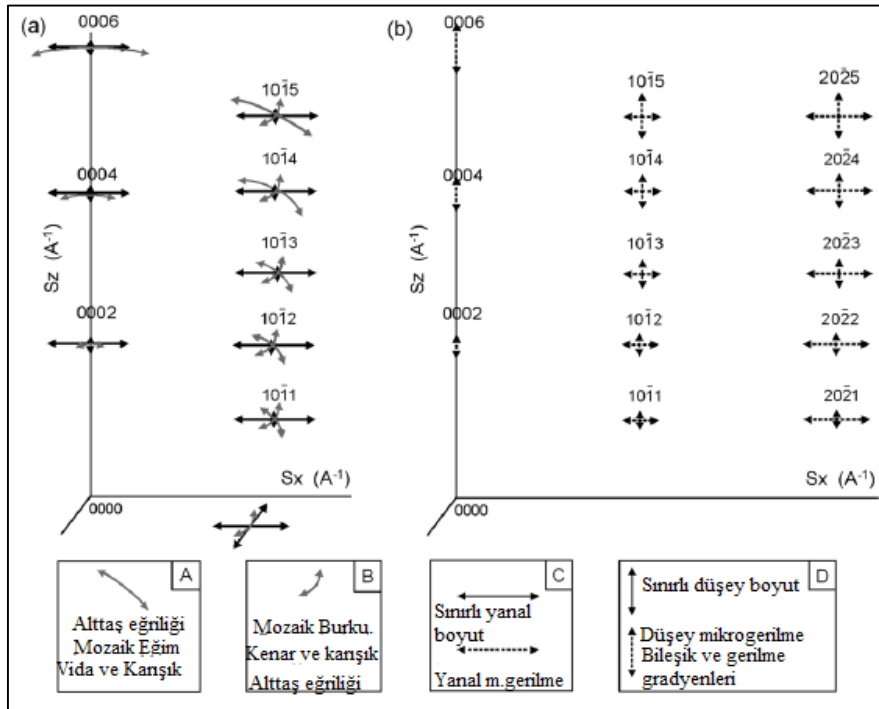
2.2.2. Difraktometreler

Ters uzay, bir difraktometre içinde, numuneyi ve dedektörü döndürerek elde edilebilir. Difraktometreler genellikle bir X-ışını kaynağı ve kırınımına uğramış veya gelen demeti karşılayan bir dedektör içerir (demet ıraksamasını sınırlayıcı yarıklar ve ekstra dalgalaboylarını filtre eden bir monokromatör gibi). Birçok X-ışını dedektörü 10^5 cps'ye uyumlu olmasına rağmen, otomatik bir soğurucu 10^7 cps veya daha yükseğine uyumlu olabilir (bazı çalışmalarda yüksek cps önemlidir).

Çoğunlukla örgü parametresi ölçümleri gerekir. Bunlar büyük 2θ açıları gerektirir (küçük bir açısal sapmaya sahip tek renkli demetle aşağıdaki bağıntı kullanılabilir).

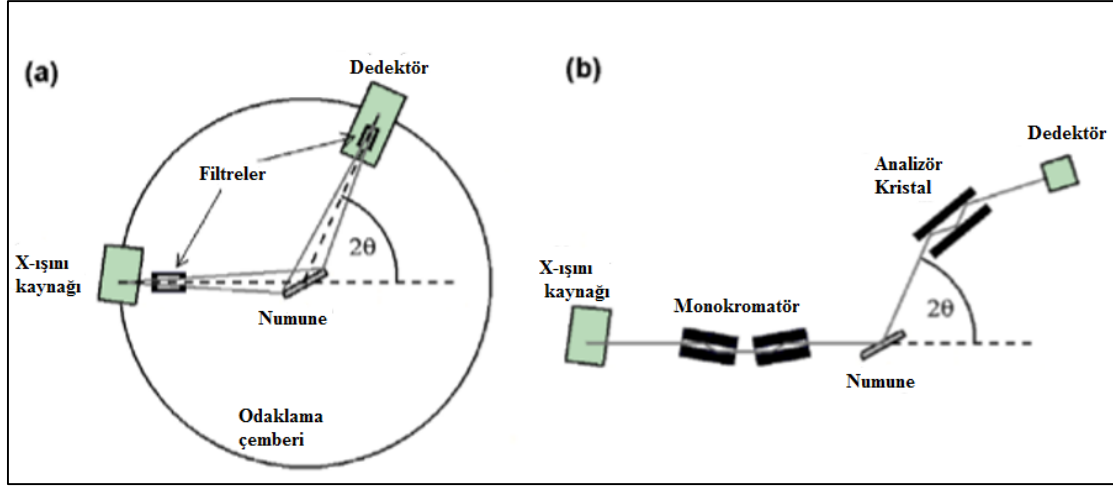
$$\frac{\Delta d}{d} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda} + \frac{\delta}{\tan \theta} \quad (2.5)$$

Δd , tahmini düzlem aralığı, d , $\Delta \lambda$, ışımadan yayılan dalga boyu, δ , gelen demet ıraksaması ve 2θ , kırınım açısıdır. Düşük değerli bir δ , ters uzaydaki genişlemeyi incelerken gereklidir. Açıkcası düşük δ ve düşük $\Delta \lambda$ sağlayan bir difraktometre gereklidir.



Şekil 2.7. Farklı kusurlar yüzünden ters uzaydaki genişlemeler

Standart difraktometreler, ıraksayan bir demet ve uygun bir $\Delta\lambda$ ' ya sahiptir (δ yaklaşık 0,5 derecedir). Bunlar ekstra $K_{\alpha 2}$ ve K_{β} ve w çizgileri verirler. Bu durum çözünürlüğü düşürür ve alt taş piki yakınındaki zayıf pikleri ölçmeyi zorlaştırır (Şekil 2.8).



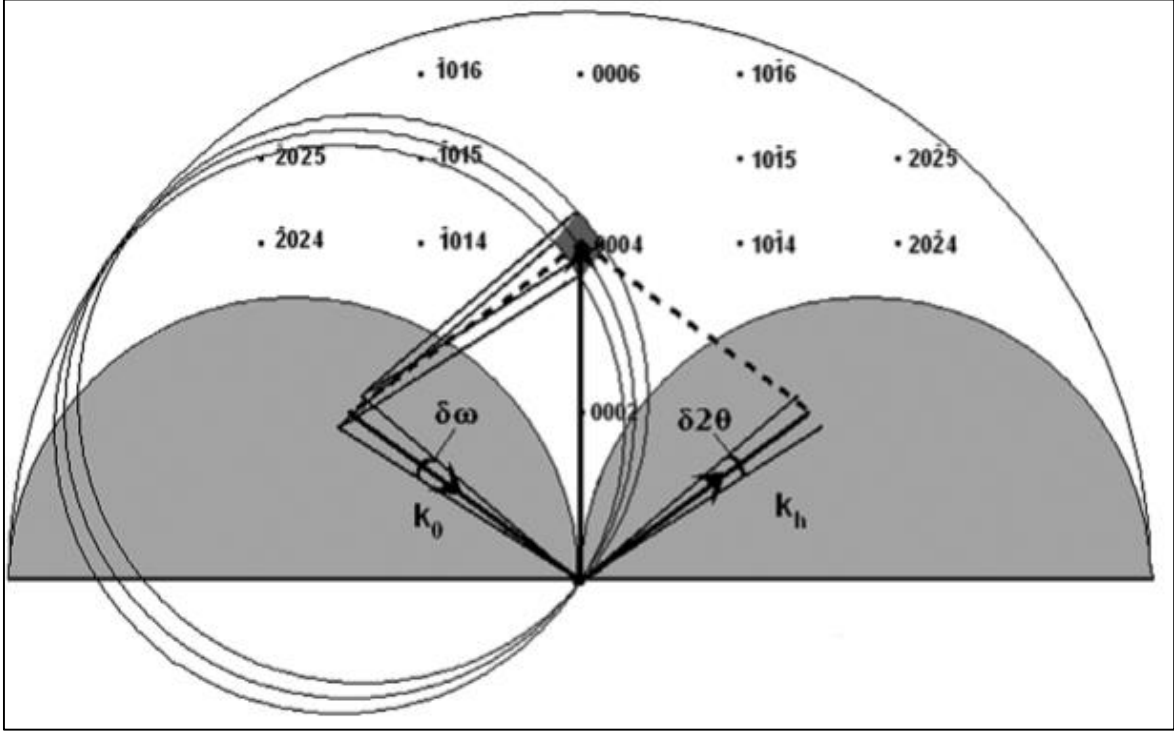
Şekil 2.8. Toz kırınımı ve yüksek çözünürlüklü kırınım için örnek geometriler

Merkezlenmiş numuneler için cihaz yüksek yoğunluklu veri versin diye optimize edilmiştir. Bu olumsuzluk, demet odaklanmayı kaybettiği için (numune kaydırılınca) ters uzay haritası oluşturmaya engel olur. Merkezlenmiş numuneler için, parabolik bir ayna paralel hale getirmek için kullanılabilir (δ yaklaşık 0,3 derecedir). Böylece w 'daki genişleme azalır ve şiddet 10 kat kadar artar. Birçok GaN işi için yüksek çözünürlüklü difraktometreler gerekir (Şekil 2.8b). Bunlar istenmeyen dalga boylarını engellemek için öncü bir monokromatöre sahiptir. Bu monokromatör sayesinde $\Delta\lambda$ azalır ve δ azalır. Δ neredeyse 0,003 derece olur. Bu açık bir dedektörle çift eksenli bir cihaz olur. Dedektörden önce analizör bir kristal ilave edilerek 2θ açısı tanımlanır, bu da 2θ açıda iyi çözünürlük veren 3 eksenli bir cihaz demektir (düşük şiddette bile) (Şekil 2.8). Bu oluşumda 2θ açısı kesin bir ölçekte ölçülebilir.

2.3. Tarama Tipleri

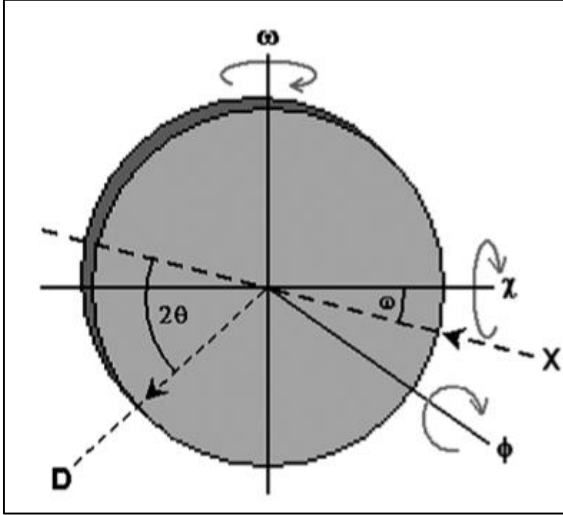
Şekil 2.9'da, tipik bir 4 dairesel difraktometrenin numune dönüş eksenleri gösterilmiştir. Bu gösterim Şekil 10'da gösterilen ve Çizelge 2.3'de özetlenen farklı tarama tipleri ile yapılmıştır. w taramaları bir yaydaki kırınım noktasını tarar ve filmin kalitesini ölçer. Aynı zamanda dislokasyonlar ve alt taş eğriliği ile genişlemeyi dedekte eder (Şekil 2.8). w - 2θ veya 2θ - w taramaları, genellikle daha az bir genişlemeye sahip olan bir yönelimde kırınım

noktasını derinleştirir. Bu taramalar örgü parametrelerinin belirlenmesinde gereklidir (artan bir saçılma vektörüyle). Hem w hem de $w-2\theta$ taramaları rocking eğrileri olarak adlandırılabilir. Çünkü her ikisi de w eksenini etrafında numuneyi döndürür (Bu bazen karışıklığa sebep olur). Her iki çeşit tarama da bir analizörle ya da analizörsüz yapılabilir. Ama ikisinin sonucunda ters uzayın farklı hacimleri numune olur.



Şekil 2.9. Ters uzaydaki probun hacminin gelen ışının sapmasına nasıl bağlı olduğunun gösterimi

Delme derinliği farklı yollarla açıklanabilir [26]. Fakat farklı yansımalar için hesaplanan yol uzunluğu “ p ” delme derinliğinin basit bir ölçüsü olarak kullanılabilir. X-ışınının şiddeti p ’deki artmayla azalır (malzemenin lineer soğurma katsayısına bağımlı olarak). ($\mu_{AIN}=119 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_{GAN}=429 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_{InN}=1508 \text{ cm}^{-1}$)



Şekil 2.10. Rotasyon eksenlerini gösteren referans örnek çerçevesi

Beer-Lambert kanununa göre;

$$I = I_0 e^{-\mu p} \quad (2.6)$$

Burada p kırınım geometrisine bağlıdır ve

$$p = \frac{t}{\cos\chi \sin\theta} \quad (\text{simetrik ya da virda simetrik}) \quad (2.7)$$

$$p = \frac{t}{(\sin w + \sin(2\theta - w))} \quad (\text{asimetrik}) \quad (2.8)$$

ile bulunur. Böylece gelme açısı azaldıkça, yol uzunluğu p artar ve örnekleme derinliği azalır. Gelme açısı daha küçük 2θ değerleri için azalır, w veya χ ' deki offset ile artar. Ters uzay haritalarında, düzlemler arası boşluklar ve kusur-ilişkili genişlemeyle ilgili pek çok bilgi özetlenebilir. Bu harita ters uzayın 2D bölümünü gösterir (RSM' lerde gösterilen şiddet normal olarak kırınım noktalarının 3D şiddetinin bir yansımasıdır). RSM' ler başarılı w değerleri için bir dizi w - 2θ taraması alınarak elde edilebilir. Bu taramaların sonuçları harita formatında verilir. Böyle haritaları grafikize etmek için, gelen demetin numune yüzeyiyle yaptığı açı (w) ve saçılan demetin gelen demetle yaptığı açı (2θ) genellikle ters örgü

birimlerine dönüştürülür. ($1\text{RLU}=1\text{\AA}^{-1}=2(\sin\theta/\lambda)$). Bu dönüşüm aşağıdaki formüllerle yapılır;

$$S_x = \frac{1}{\lambda} \{\cos w - \cos(2\theta - w)\} \quad S_x = \frac{Q_x}{2\pi} \quad (2.9)$$

$$S_z = \frac{1}{\lambda} \{\sin w + \sin(2\theta - w)\} \quad S_z = \frac{Q_z}{2\pi} \quad (2.10)$$

Bu bağıntılar, ölçümlerde kullanılan açıların direk olarak ters uzaydaki koordinatlara dönüşümünü sağlar. Bir yazılım ters uzayda tarama yapar ve gerekirse bu tekrar difraktometre açılarına dönüştürülebilir. Kristolografide S_x ve S_z birimleri ve $|k|=1/\lambda$ gibi bir dalga vektörü kullanmak kolaylık sağlar. Ters örgü aralıkları, ilgili düzlemler arası boşlukların tersi olduğu için bu birimler seçilmiştir (örneğin, saçılma vektörü S_{0002} 'nin uzunluğu $1/d_{0002}$ 'dir). Ama katı hal fiziğinde Q_x ve Q_z birimlerini kullanmak yaygındır. Burada dalga vektörü $|k|=2\pi/\lambda$ ve saçılma vektörü, S_{0002} 'nin uzunluğu $\lambda/2d_{0002}$ 'dir. Literatürde her iki kolaylıkla da karşılaşılabılır.

Çizelge 2.3. Yüksek çözünürlüklü difraktometrelerdeki tarama tipleri, w gelen ışınla numune yüzeyi arasındaki açıdır, 2θ gelen ve kırınıma uğramış ışınlar arasındaki açıdır [27]

Tarama tipi	Açıklama
2 θ -w	Numune w kadar ve dedektör 2θ kadar döndürülür. Açısal oran 1:2 dir. Ters uzayda S orijinden dışa doğru hareket eder. S 'nin büyüklüğü değişir ama yönü ofsete bağlı olarak aynı kalır. 2 θ -w taramaları için X eksenini 2θ birimindedir. W-2 θ taramaları için ise X eksenini w birimindedir. Ofset yokken $w=0$ 'dır. Bu ters uzayda simetrik bir taramadır.(θ -2 θ). Toz numuneler için standart tarama tipidir.
w-2 θ	Basit olarak bir 2 θ -w taramasıdır ama X ekseninde w vardır. Yansıma ve yüksek çözünürlüklü çalışmalar için standart tarama tipidir.
2 θ	Kaynak ve numune sabit tutulurken dedektör hareket ettirilir. S vektörü Ewald küresinin etrafında bir ark çizer. S 'nin hem yönü hem büyüklüğü değişir.
w-taraması	Dedektör sabit kalır ve numune w eksenini etrafında döndürülür. Ters uzayda S orijin merkezli bir yay çizer. S 'nin büyüklüğü aynı kalır ama yönü değişir.

Çizelge 2.3. (devam) Yüksek çözünürlüklü difraktometrelerdeki tarama tipleri, w gelen ışınla numune yüzeyi arasındaki açıdır, 2θ gelen ve kırınımına uğramış ışınlar arasındaki açıdır [27]

Tarama tipi	Açıklama
Q-taraması	Birbirinin çarpanı olmayan oranlarda w ve 2θ taramaları için yazılım kullanılabilir. Bu taramalar ters uzayda verilen bir yönde S' 'yi tarar. İstenilen şekilde ters uzay haritaları elde edilebilir.
ϕ	Numunenin ϕ eksenini etrafında dönmesidir. S' 'nin büyüklüğü aynı kalır ama numune hareket eder. Ters örgü noktası S' 'ye doğru gider ve S' 'nin yönü değişir
χ	ϕ taramalarına benzer. Farklı olarak numune χ eksenini etrafında döndürülür.

Şekil 2.11'de ters örgü noktalarını genişleten faktörler gösterilmiştir ve her çeşit taramayı genişleten faktörler Çizelge 2.4'te özetlenmiştir. Mikro yapısal özellikler kadar numunenin fiziksel büyüklüğü, şekli ve cihazsal genişleme taramaları etkileyebilir. Bu faktörler kompleks bir şekilde iç içedir ve her faktöre göre genişlemenin ayrılması zordur. Tipik olarak pikin şekli Gaussian (G) veya Lorentzian (L) olabilir. Bunu etkileyen faktörler aşağıdaki eşitliklerle birleştirilmiştir.

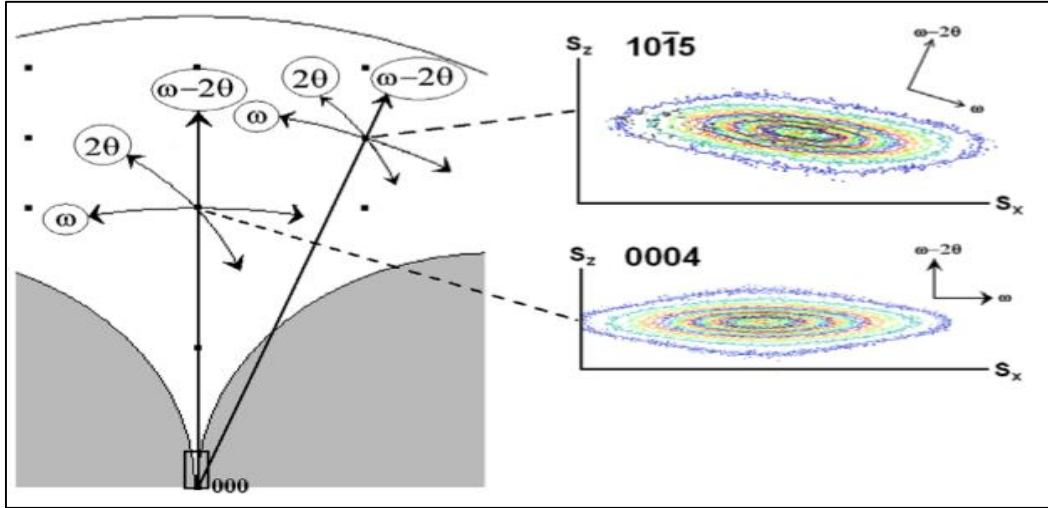
$$\beta_L = \beta_{numune} + \beta_{cihaz}$$

$$(\beta_{numune} = \beta_{boyut} + \beta_{gerilme} + \beta_{oryantasyon}) \quad (2.11)$$

$$\beta_G^2 = \beta_{numune}^2 + \beta_{cihaz}^2$$

$$(\beta_{numune}^2 = \beta_{boyut}^2 + \beta_{gerilme}^2 + \beta_{oryantasyon}^2) \quad (2.12)$$

Pik çarpanları veya genişlikleri, yarı maksimumda tam genişlikleri ile ölçülmüştür. III grubu nitrit taramalarının genişlemesine katkıların ayrıştırılması daha detaylı olarak bölüm 2. 13. 1'de izah edilmiştir.



Şekil 2.11. Ters uzayda farklı tarama tipleri ile alınan yönelimler

Bazı düşük şiddetli desenler, ters uzay haritalarında görülebilir. Dalga boyu izi, $\Delta\lambda$ 'daki küçük yayılmadan kaynaklanır. Bu, k_0 ve k_h 'ın uzunluğunda küçük bir kaymaya neden olur. Böylece saçılma vektörü S orijinden radyal yönde kayar. Dalga boyu izi ters uzayda orijinden uzaklaşır. Dedektörün izi gelen ışının açısal sapmasından kaynaklanır (δ). Bu durum gelme açısı w 'da küçük bir kaymaya neden olur. Son iz Ewald küresinde bir tanjanta yönelmiştir. Bu S_z eksenine $2\theta/2$ açısı yapacak doğrultudadır. Monokromatör veya kaynak izi, kırınım açısı 2θ 'da küçük bir kaymaya sebep olan, kırınımına uğramış ışının açısal sapmasında kaynaklanır. İz, S_z eksenine $2w/2$ açısı yapar. Ancak bu analizör izine zıt yönde oluşur. Analizör ve monokromatör izi arasındaki açı 2θ 'dır. Bu etkiler şekil 2. 10'a bakarak görülebilir. Şekil 2.10'a bakarken w , θ , λ ve S' 'deki küçük değişimler hesaba katılmalıdır. Üç iz, sadece çok güçlü bir yansımanın çevresinde gözlenebilir. (eğer üç eklemlerli bir analizör kullanıldıysa). İki eklemlerli bir analizör kullanılsa da bunlar belirgin olurlar. Bazen Şekil 2.12'de gösterildiği gibi tek bir iz görülür.

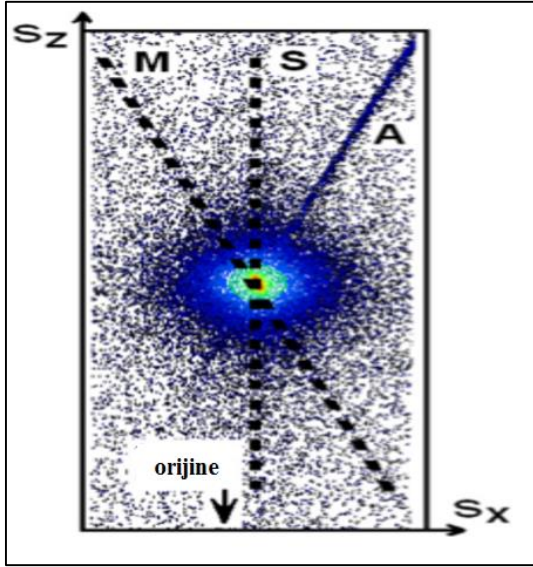
Çizelge 2.4. Ters uzayda ters örgü noktalarının farklı yönlerde genişlemelerine neden olan faktörler. Farklı tarama tiplerinde görülen genişlemeler, farklı numune kusurlarının ters örgü noktalarını nasıl genişlettiği hesaba katılarak anlaşılabilir. Bu özel bir tarama tipinin noktayla hangi doğrultuda kesişeceği hesaba katılarak yapılır. Kusurlardan kaynaklanan zayıf difüze saçılmalar da görülebilir. Birkaç genişleme faktörü etkisi ters uzayda bir elipsoid oluşturmak için birleşebilir. Bu elipsoidin başlangıç eksenini aşağıda verilen yönlerden farklı bir yöndedir.

Ters uzayda genişlemenin yönü	Genişlemeye neden olan olası faktörler
Düşey	Küçük tabaka kalınlığı, koherent olarak kırınıma uğramış domenlerin küçük düşey genişliği, düşey gerilme veya bileşik dalgalanmaları.
Yatay	Koherent olarak kırınıma uğramış domenlerin küçük yatay genişliği, yatay gerilme veya bileşik dalgalanmaları
Origin merkezli yay (w taraması)	Alttaş eğriliği, eğim veya burkulma kaynaklı dislokasyon
Origine yönelen çizgi (w-2θ taraması)	Gerilme veya bileşik gradyenlerinden kaynaklanan iç düzlem uzayında değişme, X-ışını dalga boyunda değişme.

Cihaz üretiminde alttaş eğriliğini görüntülemek de önemlidir (k). Alt taş eğriliği w taraması genişliklerini, w-2θ piklerini ve yansıma verilerini etkileyebilir. Neyse ki eğriliğin yarıçapı R ($R=1/k$) açık bir dedektörle HRXRD kullanılarak ölçülebilir. Bu ölçüm w taramasını kaydederek, demeti numunenin üzerinde bilinen bir mesafede (x) tutarak, hareket ettirerek ve sonra ikinci w taramasını kaydederek yapılır. İki taramadaki pikler arasındaki açısal denge (δw) eğriliğin yarıçapına şu şekilde bağlıdır;

$$\delta w = \frac{x}{R} \quad (2.13)$$

Ama bu alttaşın eğriliğinin küresel olduğu durumda geçerlidir. Eliptik veya silindirik alttaş eğriliklerinde, eğrilik değeri numunenin rotasyonuna göre değişir.



Şekil 2.12. Safır alttaşa ait simetrik 006 yansımasının ters uzay haritası

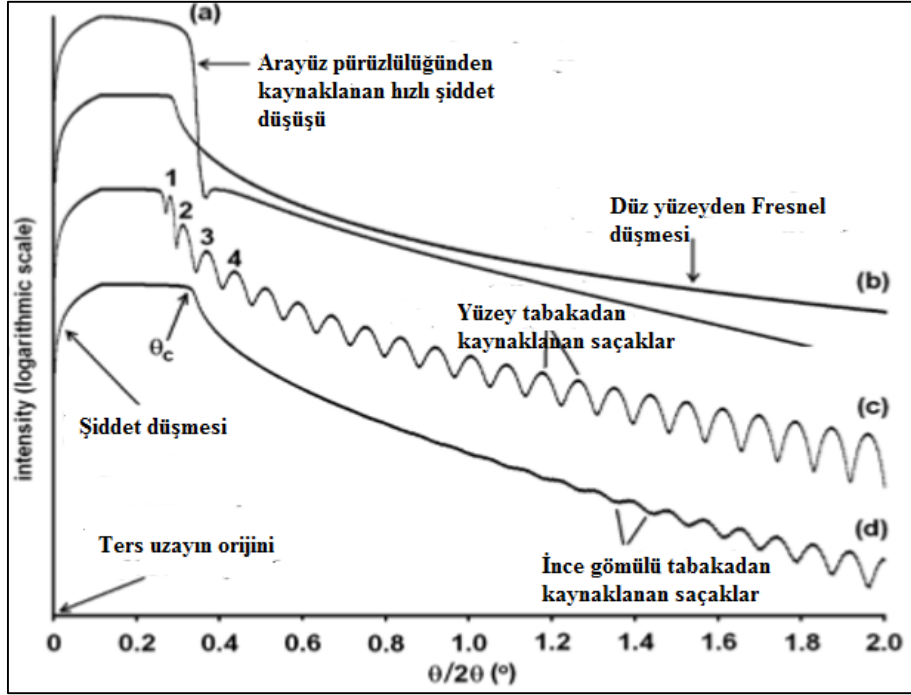
Bu aynı zamanda S'ye de demetin dönüştürülmesiyle bağlıdır. Yani, III-grubu nitritler için eğrilik değerleri, alt taşın üzerinde en az iki yönelim için demet dönüşümleri kullanılarak yapılmalıdır.

2.4. Girişim Saçakları ve X-Işını Yansımaları

Girişim pikleri, w-2θ taramalarında kırınım piklerinin tabanında sıklıkla görülür. Bunlar iki saçak arasındaki aralık ($\sin\theta_i - \sin\theta_j$ yaklaşık olarak $=\Delta\theta$) yani i ve j arasında n. derecedendir. Ve bunlar film kalınlığı ile ters orantılıdır.(simetrik taramalar için).

$$T = \frac{(n_i - n_j)\lambda}{2(\sin\theta_i - \sin\theta_j)} \approx \frac{\lambda}{2\Delta\theta \cos\theta} \quad (2.14)$$

λ , X-ışınının dalga boyudur. Çok katmanlı süper örgü veya kuantum kuyusu yapıları için daha karmaşık bir ifade ortaya çıkar. Bu durum toplam kalınlıktan kaynaklanan zayıf saçaklar ve tek katmandan kaynaklanan güçlü saçaklar şeklindedir. Bu kırınım ile ilişkili fenomenadır. Daha net saçaklar, çoklu tabaka da iki malzemenin boşlukları arasında terslik varken elde edilir (gerilme gradyenti yok gibi).



Şekil 2.13. Numunedeki bileşiklerin yansıma taramalarının simüle edilmiş hali

Benzer saçaklar (bazen Keissing saçakları da denir) düşük açılı X-ışını yansıması ölçümlerinden de ortaya çıkabilir. X-ışını için kırılma indisi genellikle 1'den küçük olduğu için düz bir numuneden toplam harici yansıma çok küçük kritik bir açının " θ_c " altında olur. Bu açıdan büyük değerlerde demet numuneyi delmeye başlar ve yansıma şiddeti düşer. Yani X-ışını yansıma taramaları, küçük açılarla yapılır ve bu taramalar ters uzayın orijine yakın bölgelerini etkili bir şekilde inceler (0000). Bu durum Şekil 2.13'de gösterilmiştir. Bu bölgede numune kesme çubuğu da incelenebilir. Saçaklar bu bölgede üst üste binmiştir. Burada şiddet $1/\theta_i$ 'ye bağlı olarak düşer (Fresnel düşmesi). Ama kırınım piklerinin çevresindeki girişim saçakları mevzusunun tersine, XRR'daki saçaklar elektron yoğunluğundan kaynaklanır. Bu yoğunluk saçak aralığını değil saçak yüksekliğini etkiler ($\Delta\theta$ radyan cinsinden). Saçak yüksekliği bileşikten bağımsızdır. Bu genellikle basit optikle anlaşılır. [12]'de daha fazla detay verilmiştir. Saçak aralığı için aşağıdaki yaklaşıklık kullanılabilir;

$$\Delta\theta \approx \frac{\lambda}{2T} \quad (2.15)$$

Bu yaklaşıklık yüksek şiddet olmadığı durumda iyi sonuç verir(kritik açı gibi). Optik bir analogi olan Snell ve Fresnel yasalarını kullanarak;

$$\frac{m^2 \lambda^2}{(2t)^2} = (\theta_l^2 - \theta_c^2) = (\sin^2 \theta_l - \sin^2 \theta_c) \quad (2.16)$$

Bu durumda yapıcı girişim oluşur. Successif maksimayı hesaba katarak, i ve $i+1$, m_i ve m_{i+1} . Dereceden ve kritik açıyı elimine ederek;

$$\frac{(2m_{i+1})\lambda^2}{(2t)^2} = (\theta_{l+i}^2 - \theta_i^2) = (\sin^2 \theta_{l+i} - \sin^2 \theta_i) \quad (2.17)$$

Böylece $\sin^2 \theta_{i+1} - \sin^2 \theta_i$ 'nin m_i 'ye göre grafiği $\lambda^2/(2t)^2$ 'nin gradyentidir ve kalınlığın tam bir ölçüsünü verir. Bu girişim saçaklarından, güvenilir sonuçlar elde etmek için modeller yapılmalı, simülasyon yazılımında hesaplamalar yapılmalı ve modeller verilere uyarlanmalıdır. Girişim saçaklarının nasıl oluştuğuna dair daha detaylı bilgi [2-8] ve [28] referanslarda verilmiştir. Ve tipik yansıma verisi bölüm 2. 4 ve 5'te gösterilmiştir. Kaliteli deneysel veri gereklidir. Taramayı başlatmak için, küçük w açısı ayarlamasında bir w taraması ve χ taraması yapılmalıdır ve bu açılardaki offsetler ayarlanmalıdır. Bu durumlar $w-2\theta$ taramasının çubuk boyunca yapılmasını sağlar (özel bir simetrik-tarama geometrisi). Özel olmayan taramalar ($2w$ eşit değildir 2θ durumu) ve ters uzay haritaları orijin civarında daha detaylı bilgi verebilir. Burada karmaşık modelleme gerekir. Deneysel olarak yansıma verilerinde iyi saçaklar elde edebilmek için, küçük bir demet ıraksaması gerekir. Ara yüzlerdeki pürüzlülük ve difüzyon artan bir saçılma vektörüyle yansımanın daha çabuk düşmesini sağlayabilir. Alt taş eğriliği de saçakları genişletir ve numunenin fazla aydınlatılması en küçük açıdaki veriyi etkiler. Aşırı aydınlatma numunenin boyutlarını büyük tutarak engellenebilir. Bu aynı zamanda demet genişliğini yarıklar kullanarak veya bir bıçak kenarı kullanarak azaltarak yapılabilir (ikinci yöntem şiddete de azalmaya neden olur). Alternatif olarak bir simülasyon yazılımı aydınlanma etkileri için kullanılabilir. Deneysel ayarlamaya rehberlik etmesi için modelleme yazılımı kullanarak tam bir yansıma taraması simülasyonu yapmak genellikle faydalıdır. Mesela eğer çok ince filmler analiz ediliyorsa o zaman büyük oranda düşük çözünürlüklü $w-2\theta$ taraması ve yüksek gelen demet şiddeti zayıf ve geniş yansıma maksiması için gereklidir. Diğer taraftan eğer çok kalın filmler analiz ediliyorsa düşük oranda bir yüksek çözünürlüklü tarama gerekir. Bu çok sayıda dar ve yakın aralıklı maksimayı çözmek için gereklidir. Genellikle yansıma maksimalarının pozisyonu tabaka kalınlığının belirlenmesi için mantıklı bir sonuç verir. Ama en iyi sonucu elde etmek için sonuçların simülasyonu gerekir. Simüle edilmiş verilerin

farklı yapısal parametrelere hassasiyeti için bazı modeller kurulmalıdır. Bu özellikle kompleks III-grubu nitritleri incelerken gereklidir. Yakın bir tarihte XRR kullanılarak yapılan bir round-robin çalışması gösterdi ki, yüksek dinamik şiddet aralığına sahip olmak, simule edilmiş verinin tam uyuşması için ve yeterli kalitede veri elde etmek için hayati önem taşır [29]. Tabaka kalınlığının belirlenmesinin tekrarlanabilirliği tipik olarak 1Å mertebesinde. XRR’de hata kaynakları hakkında detaylı bilgi veren ve hataları azaltmaya yönelik yaklaşımlardan bahseden bir kaynağı takip etmek faydalı olur.

2.5. Örgü Parametre Ölçümleri, Gerginlik ve Alaşım Bileşiği

Örgü parametre ölçümleri, yerel gerginlik ve baskı, aşılama miktarı, bileşik ve filmlerin ısısal genleşme katsayıları hakkında bilgi verir. X-ışını kırınımı bunun için ideal bir tekniktir. Si ve GaAs gibi mükemmel malzemeler için 10^{-7} ’de bir gibi bir hassasiyetle ölçüm yapılabilir [30]. Ama yanıl gerginlik ve geniş aralıklı referanslar, örgü parametreleri ve Poisson’un oranları, III-grubu nitritler için özel meselelerdir. Alaşım filmler için, örgü parametreleri üzerinde gerginliğin etkileri ve bileşik etkileri ayrılmalıdır.

2.5.1. Örgü parametresi için yaklaşık ve kesin ölçümler

Örgü parametreleri için iki yaklaşım vardır. Yaklaşık ölçümler, bir tabaka pikinin bir alttaş pikinden bulunmasını içerir. Bu, bir veya birkaç RSM taramasıyla yapılır. Bu taramalar yaklaşık gevşeme veya uyumsuzluğu verir. Ama bu III- grubu nitritler için daha az uyumludur. Çünkü alttaş ve tabaka pikleri büyük oranda ayrılmıştır. Bunun nedeni alttaşın kendisi genellikle gerilmiştir. Alışılmış olarak, başka bir III-grubu nitrit tabakası piki, gerginliği ve bileşimi belirlemek için kullanılır. Ama gerilmemiş III-grubu nitrit örgü parametreleri tam bilinmez. 2θ pozisyonu tam olarak kalibre edildiğinde ve çoklu ölçümler kullanıldığında kesin yaklaşımlar tercih edilir [31]. Bunlar III-grubu nitrit alttaşlar için tercihen kullanılır. Hâlbuki sıklıkla daha ince ve çoklu III-grubu nitrit tabakaları için yaklaşık uyumsuzluk belirlenir. Her iki yaklaşımın aynı örnekte kullanılması açıklayıcı olabilir.

2.5.2. Hızlı örgü parametre ölçümleri

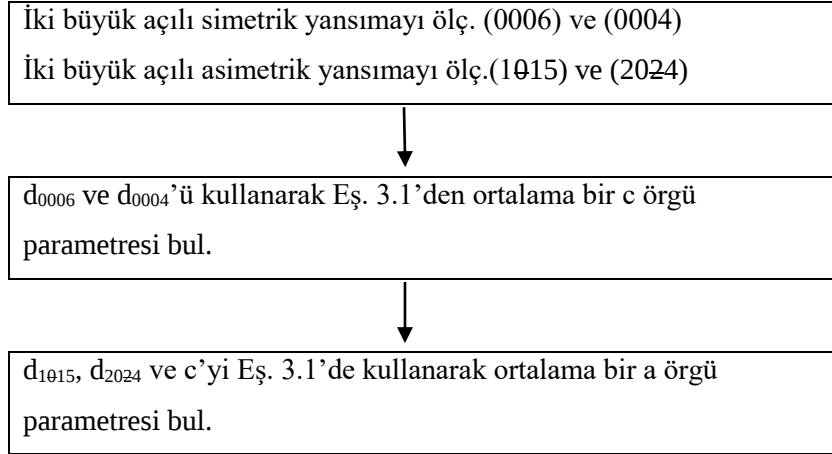
Örgü parametrelerinin belirlenmesine dair literatürde çok sayıda yayın vardır [32]. Burada sadece III-grubu nitritler için en faydalı metotlardan bahsedilmiştir. Sıklıkla deneyci filmin örgü parametrelerinin hızlı bir tespitine ihtiyaç duyar. Sıfır 2θ pozisyonu önceden kalibre edilmelidir [33]. Ölçüm için tam yansımalar seçilmelidir. Bragg yasasındaki θ açısı, bir grup özel düzlemler arasındaki mesafeyi elde etmek için (d_{hkl}) kullanılır. d_{hkl} 'deki hata Bragg yasasının türevini alarak bulunur.

$$\frac{\Delta d_{hkl}}{d_{hkl}} \approx \cot \theta_{hkl} \Delta \theta \quad (2.18)$$

Burada $\Delta \theta$, θ 'daki adım aralığıdır. Ayrıca düzlemlerde büyük açılarda kırınımına uğramış d_{hkl} değerlerine ihtiyaç duyulur. (0002 yansıması 17 derecede oluşur ve kullanılmamalıdır.) Aşağıdaki denklem d_{hkl} 'yi heksagonal sistemlerdeki örgü parametreleri a ve c 'ye ilişkilendirir.

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + k^2 + hk}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (2.19)$$

Burada iki bilinmeyen var, öyleyse en az iki d_{hkl} ölçümü gerekir. (Şekil 2.14) Genellikle c 'nin direk bulunabileceği bir veya iki büyük açılı simetrik yansıma ölçülür (genellikle d_{0004} ve d_{0006}). Sonra bir veya iki büyük açılı asimetrik yansıma ölçümü önceden bulunan c 'yi kullanarak a 'yı bulmak için yapılır (genellikle d_{10-15} , d_{2025} veya d_{20-24}). Bu yansımalar iyi bir şiddete sahip olmalıdır ve 0001 düzlemlerinden büyük bir açısal dengelemeyle çıkmalıdır. (Şiddet 10-15, 20-25, 10-15 ve 10-16 serilerinde azalır.)



a' da ki tahmin: bazı kısımlar 10^{-4} 'te.

c' de ki tahmin: 10^{-4} 'te bir kısım.

Şekil 2.14. Hızlı örgü parametresi belirlemenin basamakları

2.5.3. Yaklaşıklıkların içeriği

Hızlı ölçüm metodunun, düşük orandaki doğruluğu, pik pozisyonunun tam ölçülmemesinden kaynaklanır. Ayrıca analizdeki hataların propagasyonundan, ölçüm sıcaklığının kötü kontrolü ve kırılma etkilerinin düzeltilmemesinden de kaynaklanır (hava ve numunenin kırılma indisleri arasındaki fark). Özellikle geçerli asimetrik yansımalar, sadece c ekseninden hafifçe kaymış düzlemlerden kaynaklanır. Yani a örgü parametresine daha az hassasiyet vardır. Birde genellikle önce c bulunur. Dolayısıyla a değerindeki hata, c'ye bağlılığı oranında artar. Sonuç olarak a c'den daha büyük bir hatayla bulunur. Eğer örgü parametresi değişimi varsa a ve c parametreleri tutarsız olabilir. Bu tutarsızlık kötü kalibrasyondan da kaynaklanabilir. Böylece a ve c parametreleri tipik olarak 10^{-4} 'de bir hatayla kestirilebilir (Çizelge 2.5-7'ye bakınız.).

2.5.4. Örgü parametrelerinin ölçümlerle kestirilmesi

Daha tutarlı sonuç elde edebilmek için, difraktometre ve numune sıcaklıkları bilinen ve sabit bir değerde tutulmalıdır. Birçok malzeme için ısısal genleşme katsayısı değerleri 10^{-5} - 10^{-6} K^{-1} aralığındadır. Böylelikle örgü parametrelerindeki ölçülebilir değişimler 10^{-5} sıcaklık değişiminden kaynaklanabilir. Ayrıca hesaplamalarda kullanılan X-ışını dalga boyu belirtilmelidir. Kristolografi için belirtilen Cu $K_{\alpha 1}$ λ 'nın uluslararası çizelgedeki değeri

1,5405974(15)Å'dur [34]. Pik fit etme yazılımı kullanılarak pik pozisyonu tam olarak belirlenmelidir. Eğer pik çok keskinse pikin merkezi kullanılmalıdır. Sonra bilindik bir ölçüm metodu kullanılmalıdır.

2.5.5. Çift eksenli gerilme durumu

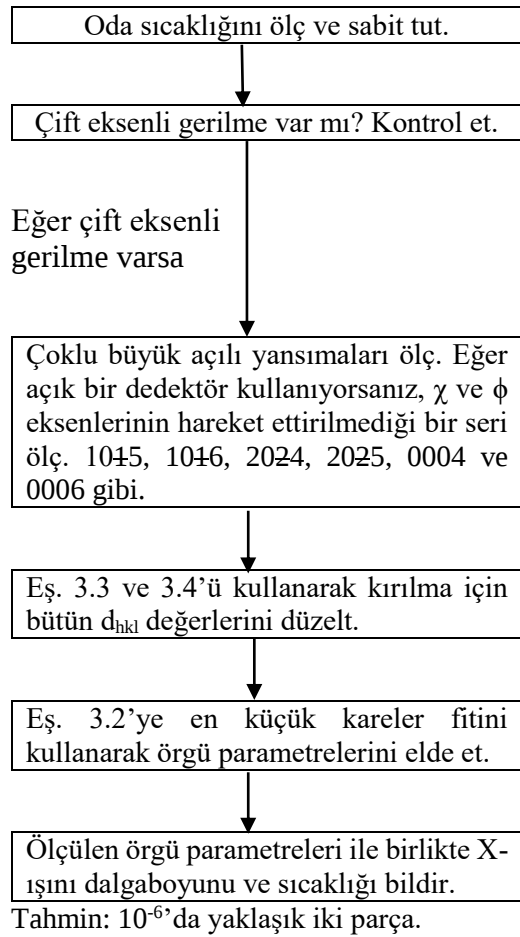
İlk yüksek yüzdeli tahmin metodu Bon tarafından ileri sürülmüştür [35]. Bu metotta hem pozitif hem negatif 2θ değerleri için (sıfır hatasını ortadan kaldırmak için) tek bir yansımada ölçümler yapılır. Ve d aralıkları kristal kurulumundaki ölçümlerin arasındaki farktan elde edilir. Bu Fatemi tarafından GaN için Herres [36] tarafından InGaN için çıkarılmıştır. Her iki metottada açık bir dedektör kullanılır (çift eksenli difraktometre). Bu metotlar aynı bölgeden bir dizi yansıma kullanarak d aralıklarının w kurulumundaki farktan faydalanarak tam olarak belirlenmesini sağlar (ϕ ve χ kurulumları sabittir.) Bu sayfalar w 'daki pozitif ve negatif offsetle ölçülmüş 0004 ve 0006 ve 10-15 yansımalarını gösteriyor. Ama buradan 20-25 ve 20-24 gibi ilave yansımalar da çıkarılabilir. w kurulumundaki farklara dayanan yaklaşımın esas avantajı, elde edilen yüksek şiddetlerdir. Bu hızlı ölçüm yapmayı sağlar. Ama Fewster'in metodu (2θ 'nın kesin bir ölçekte ölçüldüğü metot) daha uygulanabilir. Çünkü hatalı kalibrasyon, kıvrımlı örnekler ve örgü parametresi değişimlerinden kaynaklanan hataları minimize edebilir. Bu metotların herhangi biriyle elde edilen 2θ değerleri düzeltilmelidir. d aralıklarını elde ederken, kırılma etkileri sonuçları etkileyebilir. Fewster deneysel olarak elde edilen 2θ değerlerini düzeltmek için basit bir eşitlik vermiştir. Bu eşitlik θ , w ofseti ve X-ışını kırılma indisine bağlıdır. Düzeltilmiş değerler tipik olarak deneysel değerlerden $10^{-5}, 10^{-6}$ 2θ gibi bir oranda saparlar. Diğerleri (mesela Darakchieva [37]) düzeltilmiş d aralıklarını çıkarmak için deneysel 2θ değerlerini kullanırlar;

$$d_{hkl}^{coff} = \frac{\lambda}{2\sin\theta_h} \left(1 + \frac{\delta}{\sin 2\theta_h}\right) \text{ (simetrik yansımalar)} \quad (2.20)$$

$$d_{hkl}^{coff} = \frac{\lambda}{2\sin\theta_{hkl}} \left(1 + \frac{\delta \cos(\theta_{hkl} - w_{hkl})}{\sin(2\theta_{hkl} - w_{hkl})\sin w_{hkl}}\right) \text{ (asimetrik yansımalar)} \quad (2.21)$$

Bu denklemlerde, λ , X-ışını dalga boyu, θ_h ve θ_{hkl} , sırasıyla simetrik ve asimetrik piklerin açılal pozisyonuna işaret eder. d_{hkl} , hkl düzlemleri arasındaki mesafedir. w_{hkl} gelme açısı, δ ,

kırılma indisidir. Hesaplama kolaylık için, $\delta=4,48 \times 10^{-6} n_0 \lambda_0^2$ 'dir. λ_0 angstrom cinsinden dalgaboyu ve n_0 her $\text{\AA}^3$ başına düşen elektron sayısıdır. Böylece c ve a değerleri bazı farklı d_{hkl}^{corr} değerleri kullanılarak bulunabilir. Burada Eş. (2.19) kullanılmalıdır [38]. d 'nin her değerindeki hata da Eş. 3.1'den elde edilebilir. En küçük kareler uyum prosedürü [23-24] ve [25]'le ağırlıklı ortalama faktörleri literatürde anlatılmıştır ve kristolografik yazılım da vardır. HRXRD ölçümlerindeki hataların tam anlaşılmasını sağlayan bilgiler Fewster tarafından verilmiştir ve en küçük kareler konusu [26]'da verilmiştir. Genel olarak hatalar küçüktür. 10^{-6} 'da iki yaklaşıklık vardır. Örgü parametreleri, yüksek kaliteli malzemeyle keskin pikler verir ve gerçekçi olarak elde edilebilirler (Şekil 2.15).



Şekil 2.15. Kesin örgü parametresinin belirlenmesi için bir metodun özeti

2.5.6. İki eksenli olmayan gerginliğin varlığı

Örgü parametresi ölçümleri yapılırken, genellikle alttaştaki gerginliğin rotasyonel olarak simetrik olduğu kabul edilir.(iki eksenli) Ama alttaşın yanlış kesilmesiyle doğan triklinik ayrılmalar gözlemlenmiştir. Ayrılmış yapıların kırınım profilleri hesaplanabilir [39], ama bu III-grubu nitritler için yapılmaz. Filmin gerilme durumunu tam olarak karakterize edebilmek için ikiden fazla d_{hkl} ölçümüne ihtiyaç vardır. Eğer birim hücre heksagonal ise çok küçük gerilme seviyelerinin varlığı kabul edilebilir. III- grubu nitritlerden SiC gibi ayrılmış filmlerin örgü parametreleri için yaklaşık bir yöntem bilinmektedir ama bunu diğer alttaşlar için kullanmak zordur. Eğer örgü ayrılması varsa en az dokuz büyük açılı pik ölçülmelidir. d_{hkl} için olan denklem üç bilinmeyen triklinik örgü parametresi ve üç bilinmeyen hücre açısı için ölçülmelidir.

2.6. III-Grubu Nitritlerde Örgü Parametrelerini Etkileyen Faktörler

XRD tekniğiyle yapılan ölçümlerde aşağıdaki faktörler, örgü parametrelerini etkiler.

- 1) Potansiyel etkisinde deformasyon. Elektrik olarak aktif olan kusurlar yarıiletkenlerde iletim bandını deforme edebilir [40]. Bu durum elektron konsantrasyonundaki artışla örgü parametrelerinin artmasına neden olur [41]. N boşluklarını da içeren böyle kusurlar ve metal ansiteleri ve dislokasyonlar en saf malzemelerde bile bulunabilir.
- 2) Dopant büyüklüğü etkisi. P- tipi aşılama için Mg ve n-tipi aşılama için Si genellikle kullanılır. Ama O,C,H gibi safsızlıklar aşılamaaya karışabilir ve esas gövde malzemede de var olabilir. GaN'taki Mg ve O için, dopant büyüklüğü pozitif etkilidir. GaN'taki Si ve Be için bu etki negatiftir. GaN'taki Mg için konuşursak $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ konsantrasyon c ve a'da %0,1 genişlemeye neden olur [42]. Ani kusurlar da boyut etkisi yapabilir. $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ 'lık bir Ga ansite konsantrasyonu örgü parametrelerini yaklaşık %0,005 artırabilir. Ama dislokasyonlar ve N boşluklarının örgü parametrelerine etkisi net değildir.
- 3) Yanal gerilme. Bu gerilme olduğu düşünülmeyen örneklerde bile genellikle vardır. Kalın GaN filmlerde gerilme olduğu düşünülmez, ama bu kalın ve serbest duran tabakalar için bile doğru değildir. Gövde GaN kristallerde de gerilme olabilir. Bunun nedeni N yüzünün ve Ga yüzünün farklı büyütme oranına sahip olması ve farklı dopant katılım oranlarının olmasıdır. Bu farklı oranlar iç gerilme yapar. Aynı HVPE ile büyütülen GaN gövde

örnekler veya N yüzü ve Ga yüzü için belirlenen örgü parametreleri genellikle farklıdır. Generasyon, tekrar dağıtma ve difüzyon yanal gerilmeye önemli katkı yapar.

- 4) Isısal genleşme katsayısına aşılamanın etkisi. Daha yüksek elektron konsantrasyonları veya metalik dropletler, ısısal genleşme katsayısını artırır. Bu verilen sıcaklıkta örgü parametrelerinin artmasındandır.

İlave olarak hem safsızlıklar hem harici kusurlar(dislokasyonlar gibi) III- grubu nitritlerin esneklik özelliklerini etkileyebilir. Bunu onların baskıya karşı tepkisini değiştirerek yaparlar. Üstelik Si gibi dopantlar, büyütme sırasında ortaya çıkan gerilmeleri etkileyebilirler [43]. Homoepitaksiyel GaN filmler bile %0,02 gibi bir örgü parametresi uyumsuzluğuna sahiptir [44].

Çizelge 2.5. Nominal olarak gerilmesiz AlN'in c/a oranları ve örgü parametreleri

a	c	c/a
3,1106 ±0,0003 ^{+a}	4,9795 ±0,0002 ^{+a}	1,6008±0,0002 ^{+a}
3,110±0,001 ^{+b}	4,980±0,001 ^{+b}	1,601±0,001 ^{+b}
3,11197±0,00002 ^c	4,98089±0,00004 ^c	1,60056±0,00002 ^c
3,1114±0,0001 ^d	4,9792±0,0002 ^d	1,6003±0,0001 ^d
3,1111±0,0003 ^{+e}	4,9788±0,0003 ^{+e}	1,6003±0,0002 ^e
3,112±0,001 ^{+f}	4,978±0,001 ^{+f}	1,600±0,001 ^f
3,1112±0,0001 ^g	4,9810±0,0002 ^{+g}	1,6010±0001 ^g

Çizelge 2.6. Nominal olarak gerilmesiz GaN'ın c/a oranları ve örgü parametreleri

a	c	c/a
3,1896±0,0003 ^{+a}	5,1855±0,0002 ^{+a}	1,6258±0,0002 ^{+a}
3,1878±0,0003 ^b	5,1850±0,0002 ^b	1,6265±0,0002 ^b
3,1892±0,0009 ^c	5,1850±0,0005 ^c	1,6259±0,0007 ^c
3,1890±0,0003 ^d	5,1864±0,0002 ^d	1,6263±0,0002 ^d
3,1881±0,0003 ^e	5,1856±0,0002 ^e	1,6265±0,0002 ^e
3,1893±0,0003 ^{+f}	5,1851±0,0002 ^{+f}	1,6258±0,0002 ^{+f}
-	-	1,6264±0,0015 ^g
3,18843±0,00001 ^h	5,18524±0,00001 ^h	1,62627±0,00001 ^h
3,1888±0,0008 ⁱ	5,1850±0,0002 ⁱ	1,6260±0,0005 ⁱ
3,1896±0,0002 ^j	5,1855±0,0002 ^j	1,6258±0,0002 ^j
3,1894±0,0002 ^k	5,1865±0,0001 ^k	1,6267±0,0002 ^k
3,1890±0,0003 ^{+l}	5,1850±0,0002 ^{+l}	1,6262±0,0002 ^l
3,28940±0,00001 ^m	5,18614±0,00002 ^m	1,62606±0,00001 ^m
3,1890±0,0003 ⁿ	5,1862±0,0002 ⁿ	1,6263±0,0002 ⁿ

[45a,46b,47c,48d,49e,50f,51g]-[52h,53j,54k,55l,56m,57n,58a,59b,60c,61d,62e,63f]

2.7. Referans Örgü Parametreleri ve Gerilmenin Belirlenmesi

Çizelge 2.5, Çizelge 2.6 ve Çizelge 2.7 gerilmemiş AlN, GaN ve InN malzemelerin 298 K’de örgü parametrelerini göstermektedir. Aynı metotlarla büyütülen ve nominal olarak aşılammamış örneklerde bile tutarlı referans değeri yoktur. Çizelge 2.8, Çizelge 2.9 ve Çizelge 2.10 AlN, GaN ve InN için benzeyen geniş aralıkta Poisson oranları değerlerini göstermektedir. c/a ’nın wurtsite yapılarıdaki teorik değeri 1,633’tür. Sadece $c/a \leq 1,633$ olan yapılar kararlıdır. İdeal olmayan bileşiklerde c/a ve u değerlerinin değişimiyle wurtsite yapı deforme olabilir. “ u ” değeri şu ifadeyle verilir;

$$u = \frac{la^2}{3c^2} + \frac{1}{4} \quad (2.22)$$

Eğer c/a oranı değişirse, u değişir ancak bağ uzunlukları aynı kalır, bağ açıları ayrılır. Çizelge 2.5, Çizelge 2.6 ve Çizelge 2.7 referans c/a oranı açık bir öngörüyle ifade edilebilir. Mesela GaN kristalleri için c/a oranı 1,6265 bulunmuştur, bu değer başka bir çalışmadaki gerilmemiş GaN örneği için bulunan değer ile örtüşmektedir. a/c oranı AlN için 1,6006 ve InN için 1,6121 olarak bulunmuştur. Bu oranlar, artan hidrostatik basınçla ve artan sıcaklıkla biraz düşebilir ama fark küçülür.

Çizelge 2.7 Nominal olarak gerilmesiz InN’ın c/a oranları ve örgü parametreleri

a	c	c/a
3,5378±0,0001 ^a	5,7033±0,0001 ^a	1,6121±0,0001 ^a
3,5374±0,0001 ^b	5,7027±0,0005 ^b	1,6121±0,0002 ^b
3,5390±0,0001 ^c	5,7083±0,0001 ^c	1,6130±0,0001 ^c
3,5366±0,0005 ^d	5,7009±0,0005 ^d	1,6120±0,0005 ^d

Çizelge 2.8 AlN için ölçülmüş veya hesaplanmış elastik sabitlerden elde edilen Poisson oranı değerleri(ν)

Ölçülmüş	Hesaplanmış
ν	ν
$0,177 \pm 0,013^a$	$0,224^f$
$0,207 \pm 0,05^{+b}$	$0,200^f$
$0,179 \pm 0,001^{+c}$	$0,255^g$
$0,255 \pm 0,001^{+d}$	$0,257^h$
$0,245 \pm 0,001^{+c}$	$0,203^i$
	$0,236^j$
	$0,207^k$
	$0,244^l$
	$0,176^m$

[64a,65b,66c,67d,68a,69b,70c,71d,72e,73f,74g,75h,76ı,77j,78k,79l,80m,81m]

2.7.1. Homojen gerilme

Gerilme serbest referans parametreleri c_0 ve a_0 ile verilir.

$$\varepsilon_c = \frac{c_{ölçülen} - c_0}{c_0} \quad (2.23)$$

$$\varepsilon_a = \frac{a_{ölçülen} - a_0}{a_0} \quad (2.24)$$

Gövde GaN’da hidrostatik gerilme baskındır ve bu aşılama ve kusurlardan etkilenir. İki eksenli gerilme genellikle film-alttaş ısısal genleşme katsayısı ve örgü parametresi uyumsuzluğundan kaynaklanır. Ama tipik iki eksenli gerilmelerle kıyaslandığında, referans örgü parametrelerindeki değişim büyüktür. Ortalama referans değerleri kullanılabilir ama bunlar güvenilmezdir. Alternatif olarak iki eksenli gerilmenin iç düzlemde dış düzleme aştığı, gerilme olmayan bir yön vardır. Wurtsite III- grubu nitritler için bu yön (20-22) düzlemlerine dikin yakınındadır.

Çizelge 2.9 GaN için ölçülmüş veya hesaplanmış elastik sabitlerden elde edilen Poisson oranı değerleri(ν)

Ölçülmüş	Hesaplanmış
ν	ν
$0,202 \pm 0,050^a$	$0,212^j$
$0,156 \pm 0,033^h$	$0,182^k$
$0,228 \pm 0,035^c$	$0,205^l$
$0,212 \pm 0,001^d$	$0,119^m$
$0,23 \pm 0,06^e$	$0,185^n$
$0,146 \pm 0,035^f$	$0,158^o$
$0,17 \pm 0,03^{*g}$	$0,222^p$
$0,183 \pm 0,003^h$	$0,190^q$
$0,18 \pm 0,03^{*i}$	$0,197^r$
	$0,184^s$
	$0,202^t$
	$0,166^u$
	$0,161^u$
	$0,248^v$

[82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92]

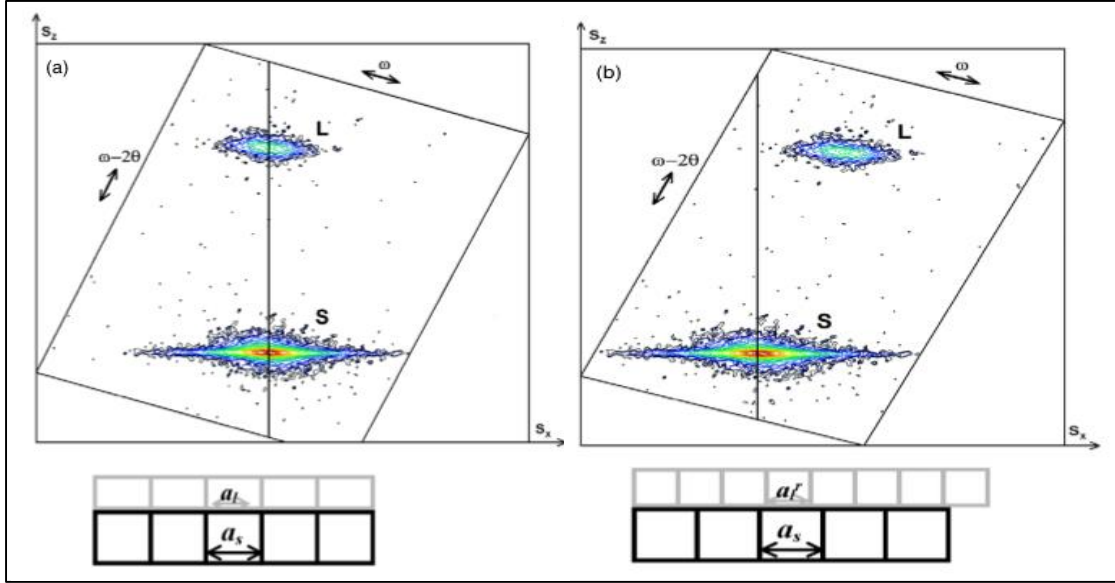
Çizelge 2.10 InN için ölçülmüş veya hesaplanmış elastik sabitlerden elde edilen Poisson oranı değerleri(ν)

Ölçülmüş	Hesaplanmış
ν	ν
$0,21 \pm 0,05^a$	$0,274^h$
	$0,254^c$
	$0,272^d$
	$0,238^e$
	$0,272^f$

Çizelge 2.11 AlN, GaN ve InN'in hesaplanmış ve ölçülmüş Young modülü değerleri. Bütün değerler GPa birimindedir

AlN	GaN	InN
374 ± 15^a	287^g	145^f
$308,3^b$	290 ± 20^h	
295^c	290^f	
317^d	279^i	
322^e		
329^f		

[93a,94b,95c,96d,97e,98f]



Şekil 2.16. Gerilmiş ve rahatlamış InGaN tabakaları için ters uzay haritaları

2.7.2. Çoklu III-grubu nitrit tabakalarda gerilme ve gevşeme

Eğer GaN tabakası üzerine AlN tabakası büyütülürse, karşıt uzayda yanyana benzer yansımalar olur. Üstteki düzlemin, düzlemiçi örgü parametreleri alttaki tabakaninkilerle gerilmiş duruma gelir ama arayüzden de gevşer. Üstteki düzlem L'nin iç düzlem gevşeme yüzdesi R% alttaki düzlem S'e göre şu şekilde verilir;

$$R_{\%} = \frac{d_{\parallel}^{L(\text{ölçülen})} - d_{\parallel}^{S(\text{ölçülen})}}{d_{\parallel}^{L(0)} - d_{\parallel}^{S(0)}} * 100 \quad (2.25)$$

III-grubu nitritler için, eğer asimetric RSM Şekil 2.16a' ya benzerse, bir film altındaki tabakaya göre tam olarak gerilmiş demektir. Eğer RSM Şekil 2.16b'dekine benzerse tabaka kısmen veya tamamen gevşemiş demektir. Gerilme RSM'lerde görülen spotların düzlem dışı ayrılmalarını da değiştirir. Heksagonal yapıdaki bir alaşım için, gevşemeyi elde edebilmek için tam örgü parametrelerini bilmek gerekir. Referans örgü parametrelerindeki belirsizlik R%'deyi hata konusu yapar. Kesin mod yerine, yaklaşık bir modda çalışarak hata azaltılabilir. Her iki modda da referanstaki belirsizliğin etkilerinin iyi bir kontrolünü sağlar. Eğer tabakalar arasında bir tilt olduğu varsayılırsa farklı ϕ kurulumlarında daha fazla ölçüm gerekir.

2.7.3. Alaşımlarda gerilme ve bileşik belirlenmesi

Optoelektronik bir cihazın yayımladığı ışığın dalgaboyunun belirlenmesi, ışık salan bölgenin bileşiğinin ana faktörüdür. Ama III- grubu nitritlerdeki piezoelektrik bölgeler, bant bükülmesi oluşturarak salma dalga boylarını etkiler.(kapalı quantum stark etkisi) [99] Gerilme ışık salan bölge üzerinde piezoelektrik alanları değiştirebilir. Bu yüzden salma dalga boylarını da etkileyebilir. Alaşım filmlerin örgü parametreleri gerilme ve bileşikten etkilenebilir, bu yüzden her etki birbirinden ayrılmalıdır.

2.8. Üçlü Alaşımlar (InGaN gibi)

Eğer malzeme gerilmesiz kabul edilirse, o zaman bileşik örgü parametrelerini etkileyen tek faktördür ve sadece örgü parametresinin ölçülmesine gereksinim vardır. Vegard'ın kuralı uygulanır. Bu kural örgü parametrelerinin uçtakiler arasında doğrusal olarak değişeceğini vurgular. AlGa_N'ın c parametresi için şöyle verilir; (x, AlGa_N'ın mol kesri)[100].

$$c_0^{AlGaN}(x) = c_0^{GaN}(1 - x) - c_0^{AlN}(x). \quad (2.26)$$

Vegard'ın kuralı, AlGa_N filmler için muhtemelen güvenilirdir. Burada Ga_N ve Al_N arasındaki örgü uyumsuzluğu sadece %2'dir (Düşük In'lu InGa_N filmler için veya AlIn_N için) [101]. Şekil 17, film tam olarak gerildiğinde hücre parametrelerinin farkının artmasını göstermektedir. Heksagonal bir sistemde basit çift eksenli gerilme için, düzlemdışı gerilme, düzlemdışı gerilmeye ayrılma faktörüyle bağlıdır (D)[102].

$$\frac{c_{ölçülen} - c_0}{c_0} = -D \left(\frac{a_{ölçülen} - a_0}{a_0} \right) = -\frac{2c_{13}}{c_{33}} \left(\frac{a_{ölçülen} - a_0}{a_0} \right) = -\frac{2\nu}{1-\nu} \left(\frac{a_{ölçülen} - a_0}{a_0} \right), \quad (2.27)$$

Burada c_{meas} ve a_{meas} ölçülmüş gerilme parametreleridir. c_0 ve a_0 gevşeme parametreleridir. c_{13} ve c_{33} esneklik sertlik tensörünün bileşenleridir ve γ poisson oranıdır. Film alttaşa uymak için tam olarak gerildiğinde denkleme basit bir düzeltme yapılır. Bunu düzlemdışı parametreyi gevşeklik değerine uyarlamak için yaparız [103].

$$\chi = \frac{(1-\nu) (c_{ölçülen}^{AlGaN} - c_0^{GaN})}{(1+\nu) (c_0^{AlN} - c_0^{GaN})} \quad (2.28)$$

Poisson'un oranı, uçtakiler arasında doğrusal olarak iç kutuplanmıştır.

Film aşağıdaki tabakaya kısmen gerildiğinde iç düzlem ve dış düzlem parametreleri hem gerilmeden hem de bileşikten etkilenir. Öyleyse hiçbir parametre tek başına belirlenemez, ikisi birlikte belirlenmelidir. Tekrar, ilgili Poisson oranı ve esneklik sabiti uçtaki değerler arasında doğrusal olarak iç kutuplanmıştır. Denklemler birleştirilir ve sonuç elde edilir. Referans [98], kolayca çözülebilecek X için ilave bir açıklama yapar. Bu çözüm az doğrudur, çünkü bu çözüm esneklik sabitinin bileşikle değişmediğini varsayar. Gevşemiş InGaN filmlerin birim hücre parametrelerini gerilmiş değerlerden elde etmenin grafiksel bir metodu referans [20]'de verilmiştir.

Alaşım filmim gevşemesini ve kimyasal bileşimini elde etmek için ve a ve c'nin tespiti için simetrik ve asimetrik yansımanın minimumuna ihtiyaç vardır (Eğer bir tilt'ten veya diğer düzlem içi farktan şüpheleniliyorsa bölüm 2. 20. 1'de anlatıldığı gibi ölçümler birden fazla ϕ kurulumu için yapılmalıdır). Sonuçta bileşik için ön bir tahmin yapılmalıdır. Vegard kuralına göre esneklik sabitleri bileşikle doğrusal olarak değişir (Çizelge 2.8-10'da verilen uç değerleri kullanarak).

Herhangi bir oryantasyondaki gerilmiş kübik filmler için ifadeler de geliştirilmiştir [104]. Hem iç düzlem ve hem de dış düzlem parametreleri tekrar ölçülmelidir. Referans örgü parametreleri gereklidir ve Poisson oranı Vegard kuralından tahmin edilmelidir. Bileşik değerlerinin doğruluğunu kontrol etmek için bir hata analizi yapılmalıdır. Elbette gerilme durumu iki eksenli simetrik olmayabilir. Togliente ve arkadaşları, MOW'lar ve ayrılmış filmler için bir analiz prosedürü geliştirmiştir. Bunu gerilmemiş bir SiC film için yapmıştır. Bu prosedür yüksek sıcaklıkta üretilen filmlere uyarlanamaz. Çünkü bu tür filmlerde yüksek doğrulukta alaşım bileşiminin belirlenmesi zordur. Alaşım filmlerinin kesin bir kalınlığın önünde gevşemesi önemli olabilir [105]. Mesela, GaN üzerine büyütülen InGaN filmlerin w-20 taramalarında genellikle çift pik görülür. Bunun nedeni, bileşik olarak düzgün filmin tam olarak gevşemiş veya gerilmiş dilimleridir [106]. Ama, büyütme sırasında gevşeme oluşursa, buna bileşik değişimleri de eşlik edebilir [107]. Çünkü alttaki tabakanın gerilmesine katyon katılım oranı da bağlıdır [108]. Özellikle bol InGaN'ta [109] geniş

skalalı bileşik faz ayrılması olabilir. Bazı araştırmacılar InGaN'ı tam bir alaşım gibi kabul etmezler [110].

2.8.1. Dörtlü alaşımlar

AlN ve InN'ın dalga boyu aralığı (6,2 eV-0,67 eV) üçlü alaşımlarla karışlanabilmesine rağmen, dörtlü alaşımlar bant aralığının ve gerilme durumunun bağımsız kontrolünü sağlar. Mesela, AlInGaN alaşımlar, InGaN quantum kuyuları [111] için gerilme mühendisliğinde kullanılır. Aynı zamanda AlGaIn quantum kuyularının [112] verimlerini bulmak için de kullanılır. 2,97 eV ve 6,28 eV [113] doğrudan bant aralığına sahip SiC-AlN dörtlü alaşımlarda büyütülmüştür. Bunlar optoelektronik uygulamalarda faydalıdır. Eş. 2.26 Vegard kuralı ve Poisson oranı kullanılarak dörtlü alaşımlara uyarlanabilir. AlInGaIn için;

$$v_0^{AlInGaIn} = v_0^{AlN}x + v_0^{InN}y + v_0^{GaIn}(1 - x - y). \quad (2.29)$$

Gerilme etkileri kaldırılrsa bile, farklı bileşikler yine aynı örgü parametrelerine sahip olabilir. Bu yüzden Rutherford geri saçılması veya fotoluminesans gibi farklı bir teknik tam bileşiği belirlemek için gerekebilir.

2.8.2. Referans Poisson denklemi ve esneklik sabiti değerleri

Gerilmiş alaşım filmlerin, gerilmemiş örgü parametrelerini bulmak için, tek eksenli Poisson oranı γ kullanılır. Bunu iç düzlem ve dış düzlem örgü parametrelerini eşleştirmek için yaparız (Eş. 2.30). Aynı zamanda, kuantum kuyularının kalınlıklarını ve bileşiği bulmak için simülasyonlar kullanırız. Bu simülasyonlar, bant aralığı bükülme parametreleri, alttaş eğriliğini film stresine bağlarken ve film baskısını film gerginliğine [114, 115] bağlarken kullanılır. Eş. 2.27'den [0001] düzlemi boyunca heksagonal bir sistem için tek eksenli Poisson oranı, esneklik sabitlerine şu şekilde bağlanmıştır;

$$\frac{2\nu}{1-\nu} = 2 \frac{c_{13}}{c_{33}} \quad (2.30)$$

$$v = \frac{\left(\frac{c_{13}}{c_{33}}\right)}{1 + \left(\frac{c_{13}}{c_{33}}\right)} \quad (2.31)$$

Çizelge 8-10'da [0001] oryantasyonlu filmler için, referans tek eksenli γ değerlerinin bir özeti verilmiştir. Muhtemelen, esneklik sabitlerini tam olarak ölçerken ve hesaplarırken karşılaşılan güçlüklerden dolayı, büyük farklılıklar vardır [116]. Bu farklılıklar, numuneler arasındaki farklılık ve hesaplamada kullanılan esneklik sabitlerinin seçiminden kaynaklanabilir. Eğik kenar dislokasyonları filmin uygulanan baskıya tepkisini etkileyebilir. Poisson oranı dislokasyon yoğunluğuyla değişebilir $\gamma = 0,212$ değeri hemen hemen mükemmel GaN için en güvenilir değerdir. Halbuki $\gamma = 0,183$ değeri MOVPE ile büyütülmüş GaN için tam değerdir. Bu sonuç ortalama bir dislokasyon yoğunluğu içindir. InN için $\gamma = 0,272$ ve AlN için $\gamma = 0,203$ değerleri en güvenilir değerlerdir.

2.8.3. Alaşım filmlerde sıralama

III- grubu nitritlerde XRD kullanarak alaşım sıralaması gözlemlenmiştir. Bu gözlem AlGaIn [117] ve InGaIn [118] kapsar ve büyütme şartlarına güçlü bir şekilde bağımlıdır. III. Grup atomun tabakalarının [0002] düzlemine yığıldığı zaman ortaya çıkar. Mesela sıralanmış bir $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$ alaşımında wurtsite birim hücreler $(1/3, 2/3, 0)$ pozisyonunda In atomları ve $(2/3, 1/3, 1/2)$ pozisyonlarında Ga atomları içerir. Beklenen ise In ve Ga atomlarının o iki mümkün tarafta rastgele dağılmış olmalarıydı. Bu durumda c eksenini boyunca In-Ga-In-Ga yığılması olur. (1:1) sıralaması ve orijinal simetride azalma olur. Bu azalma 0001, 0003 ve 0005 yansımaları üretir. 1:3 sıralaması ($\text{In}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{N}$ alaşımında görülebilir). 0001/2 ve 0001 tipi yansımalar neden olur. 11-21 ve 11-23 gibi yasak asimetrik yansımalar da görülebilir. Üstelik sıralamanın çeşidine bağlı olarak bütün yasak pikler görülebilir.

Wurtsite yapıdaki III-grubu nitritlerin sıralamasının Al-N, Ga-N ve In-N'in bağ kuvvetlerindeki büyük farklılıklar yüzünden (bu farklılıklar kinetik etkilere atfedilir) arttığı düşünülür [119, 120]. Sıralamanın adım kenarlarında başladığı ve farklı adım kenarı bölgelerinde farklı III. Grup katyonların tercihlerinden dolayı ortaya çıktığı düşünülür. Yığılmış sıralı tabakalar arasında ortaya çıkan iç gerilmeden dolayı bunun termodinamik olarak kararsız bir oluşum olması beklenir. Bu durum atom büyüklüğü farklılıklarına rağmen düşünülür. Makro ölçekteki gerilme sıralamaya neden olduğu için, sıralama ve gevşeme arasında büyütme sırasında bir iç oynama olabilir. Düşük bant aralıklı sıralama bölgeleri

eksiton yerleşme merkezleri gibi davranabilir. InGaN ve AlInN'taki sıralama bant aralığı bükülmesini artırabilir ve film gerilmeye maruz kaldığında oluşan piezoelektrik alanların kuvvetini azaltabilir. Sıralanmış bölgelerin analizi XRD kullanarak mümkündür. Sıralanmış filmin oranı, yasaklanmış 0001 pikinin ve izinli 0004 pikinin şiddet oranını gözleyerek görüntülenebilir. Öte yandan sıralamanın çeşidi 0001 pikinin 2θ pozisyonuyla incelenebilir. Burada 1:1 sıralaması alaşımın %50'sinin beklenen 0001 pozisyonuyla örtüşür. Boyut, mozaik yapı ve sıralanmış bölgenin gerilmesi yasak bölgenin genişlemesinin analiziyle bulunabilir. Bu analiz bölüm 2. 14. 2'de anlatılan metotlarla yapılır. Özellikle 1 tekken sıralanmış bölgeler arasındaki antifaz domenler 0001 yansımalarını genişletir. Bu aynı zamanda yoğunlukların tahmin edilmesine de meydan verir. Antifaz domenlerin bir incelemesi Warren'de [121] bulunabilir. Ama 0001 yasak piki, mükemmel olmayan bir monokromatörden yayılan harmonik X-ışını dalga boyu yüzünden veya çoklu kırınımından ortaya çıkabilir [122] (X-ışını tüpünün voltajını azaltmak harmonikleri azaltabilir). Bu yüzden herhangi bir gözlenen 0001 pikinin doğuşu, sıralamanın varolduğu sonucuna varılmadan önce dikkatlice incelenmelidir.

2.9. Zorlama

İç düzlem çift eksenli baskı (σ) büyütme sürecinde ortaya çıkar. Bu süreç aşılama, örgü parametrelerindeki uyumsuzluk, film ve alttaş arasındaki ısısal genleşme katsayısını içerir. Stres genellikle film gerginliği (ϵ) ve film eğriliği (R) ölçülerek bulunur.

2.9.1. Gerilme ölçümlerden stresin bulunması

Eğer rotasyonel olarak simetrik bir gerilme durumu varsa, stres gerilmeden bulunabilir. Çift eksenli gerilme $\epsilon_a(b)$ ve iç düzlem çift eksenli stres $\epsilon_c(b)$ arasındaki ilişki Eş. 2.32 ve 2.33'de verilmiştir (γ , Poisson oranı ve E young modülüdür).

$$\epsilon_a^{(b)} = \frac{\sigma^*(1-\nu)}{E} \quad (2.32)$$

$$\epsilon_c^{(b)} = \frac{\sigma^*2\nu}{E} \quad (2.33)$$

Esneklik sabitleri cinsinden aşağıdaki eşitlik geçerlidir.

$$\sigma^* = (c_{11} + c_{12} - 2 \frac{c_{13}^2}{c_{33}}) \varepsilon_a^{(b)} \quad (2.34)$$

Genellikle $\varepsilon_a^{(b)} = \varepsilon_a$ kabul edilebilir. Daha karmaşık ifadeler hidrostatik gerilmeyi hesaba katarak çıkarılmıştır.

2.9.2. Eğrilik ölçümlerinden stresin bulunması

Gerilme ölçümleri zaman alır ve gerilme değerleri tam doğru olmayabilir. (kesin olmayan referans örgü parametreleri yüzünden). Birde wurtsit III-grubu nitritler anizotropiktir, öyleyse izotropik stres izotropik gerilme oluşturmaz. Bunun yerine stres alttaş eğrilinden bulunabilir. Bunu yapmak için Stoney formülü [123] ve küçük düzeltmeler kullanılır [124]. Ama bu benzer alttaşlı ve young modüllü ince filmlere uyarlanabilir. Daha genel olarak geçerli bağıntılar kullanılmalıdır. Örneğin;

$$\sigma^* = E'_s \frac{t_s^2 a}{6 t_f} [1 + 4 E'_f t_f - t_f]. \quad (2.35)$$

Burada a eğrilik (eğrilğin yarıçapının tersi), σ sapmaya neden olan ani stres, t_s ve t_f , alttaş ve filmin kalınlıkları, E'_s , küresel eğrilği olan bir alttaşın etkin young modülü, E_r ve t_r , filmin ve alttaşın young modüllerinin oranı, t_s/t_f (sırasıyla) [125]. Diğer çalışmacılar tarafından benzer çıkarımlar yapılmıştır. Daha büyük streslerde eğrilik eliptik olur. (Şekil 18). Bu durumda, stres yine iki eğrilik ölçümüyle bulunabilir. Bağıntıdaki a ve b elipsin maksimum ve minimum eksen uzunluklarıdır.

$$\sigma^* = \frac{E_s}{1-\nu_s^2} \frac{t_s^2 (a+b)}{6 t_f} \left[1 + \left(1 + \frac{3(\nu_s+1)}{(\nu_f+1)} \right) E_f t_f - t_f \right]. \quad (2.36)$$

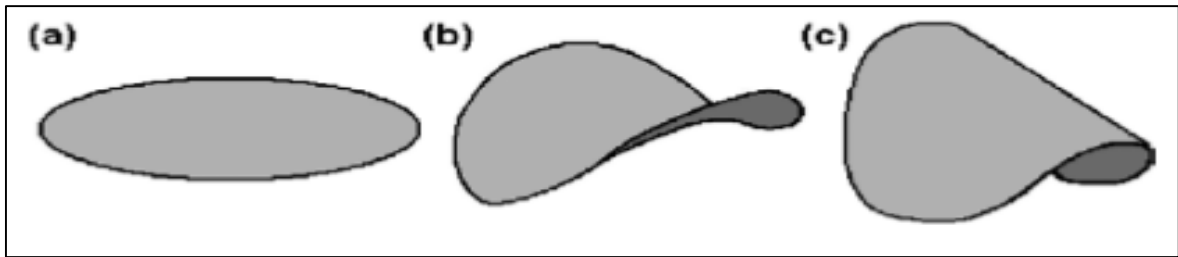
2.10. Alttaş Kesimleri ve Eğim

Alttaşların yüzeyi, kristolografik bir yüzeye paralel olarak açıklanır. Ama pratikte bunlar arasında açısal kesim olabilir.(yüzey adımları bu şekilde oluşur) Eğer yüzey düzlemi izinli bir yansımaaya denk geliyorsa, kesim ölçülebilir. Asimetrik bir yansıma bilinen bir yönelime paralel olan numunenin rotasyonel hizalaması için kullanılır. Bu $\phi=90$ derecelik aralıklarla yapılan 4 tane w taraması alındıktan sonra olur. W offset açısı yatayda (α_H) ve düşeyde (α_v) açılarının yarı farkı, yanlış kesilme açısı α ve iç düzlem açısı X'i verebilir (Şekil 2.18) [126]

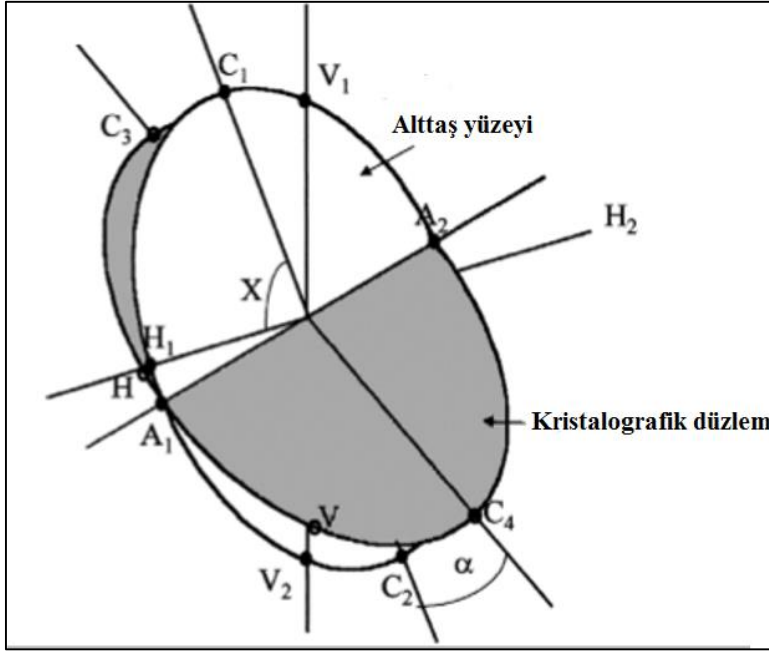
$$\alpha = \tan^{-1} \sqrt{\tan^2 \alpha_H + \tan^2 \alpha_v} \quad (2.37)$$

$$\tan X = \frac{\tan \alpha_v}{\tan \alpha_H} \quad (2.38)$$

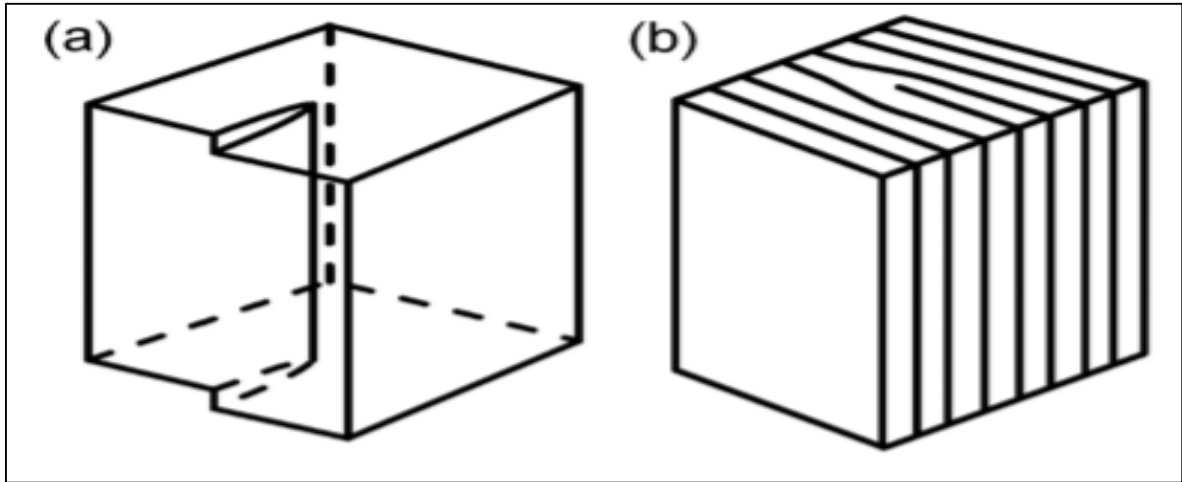
Eğim (kesime benzer şekilde) epitaksiyel tabakalar arasında oluşabilir. Bu durumda doğru olmayan gevşeme değerleri elde edilebilir. Üst düzlemin ters örgü noktası, alt düzlemin ters örgü noktasına göre döneceği için ölçümler farklı ϕ değerlerinde yapılarak bu hata düzeltilir.



Şekil 2.17. Artan gerilme durumunda alttaş ayrılımları



Şekil 2.18. Açılarının gösterimi



Şekil 2.19. Vida ve kenar dislokasyonlarından kaynaklanan yanlış yönelim

2.11. c- Düzlemli GaN Filmlerde Dislokasyon Yoğunluğunun Belirlenmesi

[0001] yönelimli c- düzlemli GaN filmler normal olarak [0001] düzlemi boyunca çizgi yönelimli dislokasyonlar içerir. Bunlarda kenar ($b=1/3\langle 11-20 \rangle$), karışmış ($b=1/3\langle 11-23 \rangle$ ve vida ($b=\langle 0001 \rangle$) tipindedir. Genellikle %2'den az vida dislokasyonu olur[127, 128], ama karışmış dislokasyonların, kenar dislokasyonlara oranı değişkendir[129]. Her dislokasyon tipi, yanal bir örgü ayrılmasıyla ilgilidir.[0001] boyunca devam eden dislokasyonlar için, kenar dislokasyonları örgü burkulması içerir, vida dislokasyonları örgü eğimi içerir ve

karışmış dislokasyonlar her ikisini de içerir.(Şekil 2.19)[130] Elbette eğer bir dislokasyonun yönü değişirse dislokasyon tipi değişir. Bu ayrılmalar için mozaik modeliyle yaklaşıklık yapılabilir. Bu model filmlerin kusursuz bloklardan oluştuğunu kabul eder. Bu bloklar birbirine göre eğimlidir veya burkulmuştur. Örgü eğimi veya burkulmasının tam değerleri dislokasyon yoğunluklarıyla ilişkilendirilebilir[131, 132]. Burada malzemenin [0001] yönelimli heksagonal olduğu varsayılır. Diğer yapılar ve yönelimler bölüm 2. 20’de tartışılmıştır.

2.11 ve 2.12 denklemlerinden Hondon ve Aumbach’ın[133] kullandığı gibi herhangi bir w taraması aşağıdaki gibi genişler.(Pik şekillerinin Gaussian olduğu düşünülürse)

$$\beta_m^2 = \beta_0^2 + \beta_d^2 + \beta_\alpha^2 + \beta_\varepsilon^2 + \beta_L^2 + \beta_r^2 \quad (2.39)$$

β_m , ölçülmüş FWHM, β_0 , gelen rocking eğrisi genişliği, β_d , cihazsal genişleme, β_α , örgü rotasyonları ve dislokasyonlardaki genişleme(eğim veya burkulma), β_ε , örgü gerilmesi yüzünden genişleme (dislokasyonlarda), β_L , sınırlı korelasyon uzunluklarındaki genişleme, β_r , altaş eğriliğinden dolayı genişleme. β_0 ve β_d eğim ve burkulmayla kıyaslanınca küçüktür, ancak $\beta_\varepsilon, \beta_L$ ve β_r büyük olabilir[134]. Büyük dislokasyon yoğunluklu filmlerde β_α baskındır ve dislokasyon yoğunluklarının bir ölçüsü olarak kullanılabilir[135]. Gaussian piki profilinin kabulü, üst kısım yüksek dislokasyon yoğunluklu filmler için doğru olabilir ama düşük dislokasyon yoğunluklu filmler için doğru olmayabilir[136]. İkincisi için, pik genişliğinin ölçümleri direk olarak verilerden ve ikisinin oranından bulunabilir. Bu ikili pik şekline katkıda bulunan Gaussian(G) ve Lorentzian(L) bileşenlerinin oranlarının belirlenmesinde kullanılır[137]. Alternatif olarak, profil fit etme yazılımı FWHM’yi verir. Bu yazılım β, L, G oranını da verir.(Pseudo- Voight fonksiyonunu kullanarak).

2.12. Eğim

Karışmış ve vida dislokasyonlarından faydalananarak örgü eğimini ölçmek için 0001 yansımalarının w taramalarından faydalanılır[138]. Kenar dislokasyonları 0001 düzlemlerini ayırmaz, çünkü onların Burger vektörleri o düzlemlerin içindedir [139]. Çoğunlukla kenar dislokasyonu ihtiva eden filmler için çok düşük 0001 w taraması genişliği beklenir. Ama daha yüksek değerler aşağıdaki nedenlerden dolayı gözlenebilir.

İlk olarak, düşük dislokasyon yoğunluğuna sahip filmler yüksek oranda eğri olmaya meyillidir. Bu durum w taramalarını kolay kolay düzelmeyecek şekilde genişletir. (Şekil 2.18)[140]. İkinci olarak, kenar dislokasyonların $[0001]$ yönünden eğilmesi alışılmış olarak dislokasyon azaltma teknikleri sırasında oluşur. Mesela, iki adımlı ELO [141], pendeoepitaksi, arayüzlerin kullanılması, kasıtlı ada oluşumu gibi eğik düzlem veya dislokasyon eğriliklerini kontrol etmek için $g \cdot (bxu)$ görünmezlik kriteri kullanılabilir [142, 143, 144]. Burada g $000l$ 'nin yansıması, b , Burger vektörü, u , dislokasyon çizgi doğrultusudur. Eğer $g \cdot (bxu)$ eşit değil 0 ise o zaman dislokasyon w taramalarının yansıması g 'yi etkiler[145]. Mesela, $b=1/3 \langle 11-20 \rangle$ 'li dislokasyon $[0001]$ 'den öteye eğildiyse, $000l$ yansımalarının w taramalarını genişletir. Halbuki, $[0001]$ boyunca uzanan saf dislokasyonlar bunu yapmaz. Böylece eğim değeri umulandan yüksek olurken, burkulma değeri aynı kalır. (Bu sürpriz değildir, çünkü film içindeki dislokasyonların çizgi uzunluğu artmıştır.) Üçüncü olarak, iç rocking eğrisi genişliği ve cihazsal genişleme düşük dislokasyon yoğunluklu filmler için önemli olabilir ve dikkate alınmalıdır. Eğimin başka kaynakları da olabilir. Özellikle ELO filmlerde Wing bölgesi genellikle şerit yönüne dik olarak eğilmiştir [146]. Bu gibi numuneleri karakterize etmek için, numune en az 180 derece adım adım döndürülmeli ve $000l$ w -FWHM'ler her adımda ölçülmelidir. Diğer bir mesele de gövde plakalar ve kalın HVPE filmler gibi örneklerde w 'da çoklu piklerin gözlenmesi olabilir. Burada tek ve büyük çekirdekler olabilir.

2.13. Burkulma

2.13.1. Vida simetrik w taraması ölçümleri

Burkulma, genellikle kenar ve karışmış dislokasyonlardan kaynaklanır ve kapalı eksen yansımalarının w taramalarıyla ölçülür. (h veya k eşit değildir 0)[147]. Vida simetrik w taramaları kullanılmalıdır çünkü asimetrik w taramaları sadece eğime duyarlıdır (bölüm 2.3). İkinci olarak yüzeye dik düzlemler direk olarak incelenmediğinde w taraması burkulmadan olduğu kadar eğimden de etkilenir. ($l=0$). Bu yüzden büyük χ açılarında oluşan yansımalar kullanılır. Böylelikle w -FWHM bir iç düzlem burkulmasında baskındır.

2.13.2. ϕ ölçümleri

Asimetrik yansımaların ϕ taramaları da burkulmayı ölçmek için kullanılır. (Numune tarama sırasında alttaş normali etrafında döndürülüyor)[148] Burada kırınım spotu vida simetrik w taramalarındakiyle aynı yönelimdedir. Heinke'nin çalışmasına göre, büyük ofsetlerde ϕ taramaları ve vida simetrik w taramaları iyi uyum gösterir. Düşük ofsetlerdeki benzer taramalar uyumlu değildir. Ama HRXRD'nin farklı tarama geometrisi, oldukça yüksek yanal demet ıraksamasının ϕ taramalarını önemli ölçüde genişlettiği anlamına gelir. (vida simetrik taramalarını az genişleten, düşük düşey ıraksamanın tersine) ϕ taramaları yüksek burkulmalı kusurlu filmler için uyumludur.

2.13.3. Doğrudan iç-düzlem ölçümleri

Numune yüzeyine paralel olan düzlemler, gelen X-ışını demetinin çok küçük bir açıyla numuneye girmesi sağlanarak ölçülür. X-ışını kırılma indisi 1'den küçüktür. Toplam yansıma için, gelme açısı sınır açısından küçükse yansıma oluşur (0,05 veya 1,5 derece gibi) demetin bir kısmı, numuneyi delen ve kristal düzlemlerinden saçılan geçici bir X-ışını dalgası oluşturur.(kritik açı civarında GaN için 10nm derinlik). Bir metotta numuneyi $w=-90$ dereceye ayarlayarak ve χ eksenini kullanarak numuneyi tam olarak demetle küçük bir açı yapacak şekilde eğerek ölçüm yapmaktır [149]. Sonra w taramalarını yapmak için ϕ eksenini kullanılır. Bu durum $w-2\theta$ taramaları veya RSM'lerin elde edilmesini engeller. Alternatif olarak, paralel bir demet mevcutsa, $\chi=90$ dereceye ayarlanır, hafifçe düzeltilmiş numune tutucu küçük açılı bir eğim sağlayacak şekilde ayarlanır. Yaklaşık iç düzlem rotasyonel hizalaması ve ϕ ayarlaması elle yapıldıktan sonra standart ayarlamalar yapılır ve w ve $w-2\theta$ taramaları yapılır. Bunlar ters uzay haritasını verir.

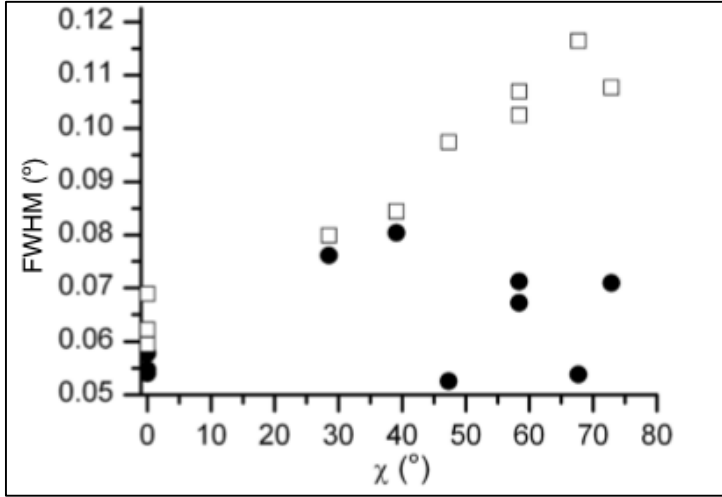
Alternatif olarak, kenar geometrisi kullanılabilir. Numunenin ilgilenilen düzlemden ayrıldığı ve ayrılmış düz tutulan yüzeyden yukarda tutulur. Bundan sonra standart bir w taraması yapılır. Burada küçük örnek alanından dolayı küçük şiddetler görülebilir. Geçiş deneyleri de kullanılabilir. Bu deneyler alttaşın direkt olarak ışına dik tutulduğu yerde yapılabilir. Ama demet şiddetinin birçoğu yüzey tarafından soğurulur. Düşük kırınım şiddetleri bütün bu metotlar için problemdir. Siklatron X-ışını kaynakları ince filmler için kullanılabilir, ama genelde extrapolasyon metotları daha pratiktir.

2.13.4. Extrapolasyon metotları ve burkulmanın belirleyicileri

İlk metot Srikant ve arkadaşları tarafından ortaya atılmıştır. Bunu bir mozaik film yapısı üzerinde çalışarak yapmışlardır. Bir dizi w taraması genişliğinin, her düzlemin 0001 düzlemiyle yaptığı χ açısına karşı grafiği çizilmiştir [150]. Bu şimdi çok kullanılan bir metottur. Data yüksek kusurlu GaN filmler için çıkarılmış bir modelle fit edilmiştir. Bu model için gereken bir fit etme parametresi kullanılmıştır ve genişletme faktörleri ve pik şeklindeki olası değişimler de ihmal edilir. Sun ve arkadaşları [151], sadece tek bir simetrik ve tek bir vida simetrik yansımanın w -FWHM lerini kullanmıştır. Bunlar χ açısına göre grafik edilmiştir. Bu modelde sadece burkulma açısı değişmiştir. Burkulma tahmini olarak bulunmasına rağmen, bunun nedeni w taramaları için açık bir dedektör kullanılması olabilir [152]. Hem simetrik w taramaları genişlikleri hem de asimetrik ϕ taramalarının χ açısına göre grafikleri çizilebilir. $\chi = 90$ derecede her ikiside aynı değeri verir [153]. Fakat ϕ taramaları demet sapmasıyla genişleyebilir, öyleyse bu metot yüksek kusur yoğunluklu filmler için daha uygundur. Lee ve arkadaşları, bir veya daha çok vida simetrik pik için işe yarayacak benzer bir metot yayınladılar. Bölüm 2.20.2. Burkulma değerlerinin iyi belirleyicileri vardır. 30-32 FWHM'si genellikle burkulma açısının bir ölçüsü olarak kullanılabilir. Çünkü $\chi = 62,7$ derecede oluşur. Vickers ve arkadaşları 30-32 yansımasının genişlikleri ile iç düzlem 10-10 yansıması arasında mantıklı bir uyum olduğunu buldular. Henke ve arkadaşları, gerçek burkulma açısının daha yüksek olduğu sonucuna vardılar. 30-32 w -FWHM'nin yaklaşık $1,14 \pm 0,04$ katı kadar. Alternatif olarak, 20-21 yansıması daha iyi bir belirleyici olabilir. ($\chi = 72,9$ derece). Birde Zheng ve arkadaşları 12-31 yansıması için ($\chi = 78,6$ derece) hem w taramaları hem de ϕ taramalarının aynı sonucu verdiğini gördüler. Analizör kullanılmadığı için w -FWHM'ler ihmal edilebilmesine rağmen sonuçlar extrapolasyon metotlarıyla bulunanlarla örtüştü. Birçok rapor yüksek dislokasyon yoğunluklu, eğimli ve burkulmalı filmleri anlatır ve bu yaklaşımlar düşük dislokasyonlu malzemeler için faydasızdır. Şekil 2. 20'de farklı dislokasyon yoğunluklarıyla GaN filmin extrapolasyon eğrisi görülmektedir. Daha az dislokasyonlu filmler için diğer w taraması genişleten kaynaklar önem kazanır. Alttaşı eğriliği, kalınlık, kusur yoğunluğu değişimleri ve dislokasyon faktörü farklılıkları (farklı yansılardan) önemli olabilir [154].

2.13.5. Burkulma ve eğim için derinliğe duyarlı metotlar

Derinliğe duyarlı w taraması analiz metotları Lyons ve Holwell [155] tarafından ileri sürülmüştür ve diğerleri tarafından geliştirilmiştir [156, 157]. Artan gelme açılarıyla tek bir asimetrik yansımanın w taramaları



Şekil 2.20. Farklı dislokasyon yoğunluklarına sahip filmlerin FWHM değerlerinin χ açısına karşı grafiği

alınmıştır. Bu taramalar kırınım geometrisini asimetrikten vida simetriğe çevirerek alınmıştır. (w 'dan χ 'ye). Bu yaklaşım GaN tabanlı LED yapılara uygulanmıştır. (Reiher ve arkadaşları) [158]. Bu araştırmacı 10-13 yansımasından derinliğe duyarlı bilgiyi çıkarmak için bir algoritma kullanmıştır. Pik genişliğinin sonuçları eğim ve burkulmanın bir karışımıdır. Bu yüzden burkulma ve eğimi ayırmak için ilave ölçümler gerekebilir.

2.13.6. Diğer genişleme faktörleri mevcutken eğim ve burkulmayı bulma

Alttaş eğriliği w taraması genişlemesinin önemli bir kaynağıdır. Bu yüzden X-ışını demetinin büyüklüğünün azaltılması önemlidir. Simetrik w taramaları için, X-ışını demetinin yüksekliği sınırlanmalıdır. Öte yandan vida simetrik w taramaları için demet genişliği sınırlandırılmalıdır. Burada yükseklik numuneye dik olan demet boyutu ve genişlik numune düzlemine paralel olan demet boyutudur (0 derecede, w ve 2θ 'da). Alttaş eğriliğinin etkileri karmaşık olabilir ama demetin sınırlandırılması bunları minimize eder. Alternatif

olarak numuneden küçük bir dilim kesilerek incelenebilir. Daha sonra diğer genişleme kaynaklarına yönelinebilir.

Kırınım pikleri, cihaza ait parametreler veya numuneye ait parametreler tarafından genişletilebilir. Basitleştirmeler yapılabileceği gibi tüm genişleme faktörlerinin ayrılması zor olabilir. Etkili bir yaklaşım, genişleme faktörlerini bir araya birleştiren modellerle deneysel veriyi simule etmektir. Daha sonra deneysel veriyi modele fit ederiz. Ancak III-grubu nitritler için modeller iyi açıklanmamıştır. Birkaç faktörü birbirinden ayırmak için basitleştirilmiş metotlar kullanılır. Bu basitleştirmelerde genişleme için birçok kabul yapılır. Gerçekte yaklaşımlar, boyut genişlemesi (β_L) ve gerilme genişlemesi (β_ϵ)'yi ayırmaya yöneliktir. Bunlar θ ile farklı olarak değişir ve farklı pik şekilleri verir. Williamsen-Hall metodu [159, 160] birinci için geçerli bir metottur. İkinci için tek çizgi metodu kullanılır. Boyut genişlemesi Lorenzian olarak ve gerilme genişlemesi Gaussian olarak alınır [161]. Waren-Aumback analizi bütün pik profilinin Fourier analizini içerir [162]. Bu analiz boyut ve gerilme etkilerinin ayrılmasına izin verir. Ne yazık ki, dislokasyonlardan kaynaklanan gerilme orijinal analizle tutarsız olarak değişir [163]. Yüksek kaliteli ve kirli olmayan deneysel veri gerekir. Bunlar diğer genişleme faktörlerinden etkilenmemelidir. Pik genişliklerine dayalı metotlar burada tartışılmıştır.

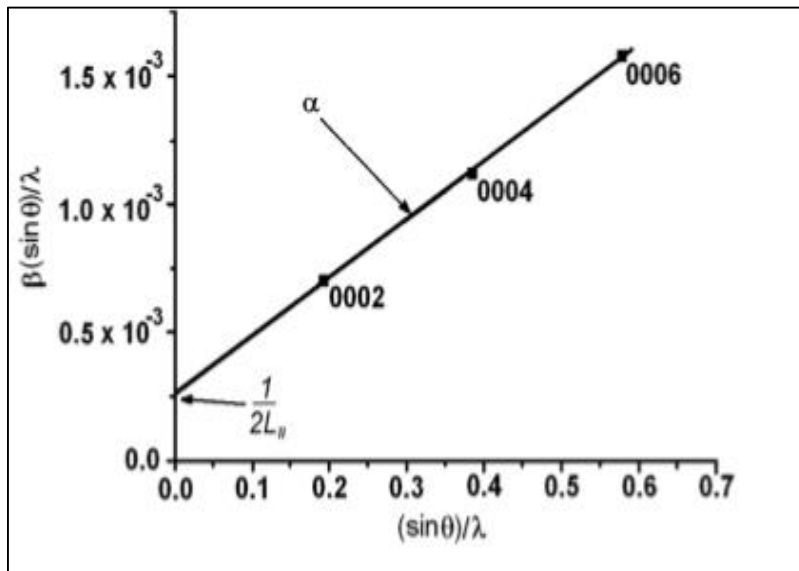
Çizelge 2.12. X ekseninin w açısıyla örtüştüğü taramaları temel alan boyut ve gerilmenin grafiksel analizini temel alan denklemler. Δs , ters uzay birimlerinin profilinde integral çarpanına işaret eder. ($\Delta s = (2\beta \cos\theta)/\lambda$ w -2 θ taramaları için ve $\Delta s = \beta s$, w taramaları için. B , ölçülen integral çarpanı ve θ Bragg açısıdır. Yanlış yönelim terimi α burkulma veya eğim için kullanılabilir

Genişleme	Gerçek uzay	Ters uzay
Size (L)	$\beta_L = \frac{\lambda}{2L \cos\theta}$	$\Delta s_L = \frac{1}{L}$
Gerilme (ϵ)	$\beta_\epsilon = 2\epsilon \tan\theta$	$\Delta s_\epsilon = 2\epsilon s$
Yanlış yönelim (α)	$\beta_\alpha = \alpha$	$\Delta s_\alpha = \alpha s$

2.13.7. Pik genişliklerine bağlı metotlar

Bölüm 2.3'de anlatıldığı gibi, pik genişlikleri, pik genişlemesine olan farklı katkıları birbirinden ayırmak için kullanılabilir. Bu metotlar toz numunelerin w -2 θ taramalarına uygulanabilir. Ama epitaksiyel filmlere ve diğer tarama çeşitlerine de açılım yapılabilir. Düşük düşey korelasyon uzunluğu(L)(gerçek uzayda), ters uzayda RLP'nin büyük düşey

genişlemesine neden olabilir. Buna boyut genişlemesi denir(bölüm 2.3) Düşük L değerleri, genellikle küçük film kalınlıkları veya film yüzeyine eğimli ya da paralel yakın yerleşmiş kusurlardan kaynaklanabilir. Düşey gerilme değişimleri (ϵ veya $1,25 \epsilon_{RMI}$)de düşey gerilmeye neden olabilir($\beta\epsilon$). Bunlar w-2 θ taramalarıyla dedekte edilebilir. Benzer bir analiz, iç düzlem taramaları kullanılarak, yanal korelasyon uzunlukları ve gerilme değişimleri için yapılabilir. Simetrik yansımalarındaki w taramaları hem eğim hem de yanal korelasyon uzunlukları hakkında bilgi içerir. w-2 θ ve w taramaları için boyut ve gerilme genişlemelerini açıklayan denklemler Çizelge 2.12’de verilmiştir. Boyut ve gerilme genişlemelerine olan etkiler 2.11 ve 2.12 denklemlerine dayanan grafiklerle birbirinden ayrılabilir. William ve Hall metallerle çalıştılar ve gerçek uzayda Lorentzian profillerini kullandılar. Pik genişliklerini ters uzayda kabul etmek daha basittir.[131]’de olduğu gibi. Verilen veriyle kıyaslamamanın kolaylığı açısından, gerçek uzaydaki pik genişlikleri hesaba katılır. Mesela Lorentz pik profilini kabul edersek; Eş. 2.11 ($\beta \sin \theta / \lambda$ ’nın $\sin \theta / \lambda$ ’ya göre grafiği 0002 ve 0004 ve 0006 için w-2 θ taramalarından 4 ϵ eğimli düz bir çizgi ve $1/2L_{||}$ kesme noktalı bir grafik verir). Ters uzayda genişlikleri kapsayan denklemler($\Delta Stot$) veya w taraması uygulaması eşit olarak kullanılabilir.(Şekil 2.21) Önemli olarak integral sınırları β bu denklemlerde kullanılır. Gaussian pikleri için β , FWHM ile aynıdır. Lorentzian pikleri için β , FWHM’nin 0,62 katıdır. Bu denklemler w açısıyla taramalara uygulanır. X eksenine göre grafiği çizilir. Hacimsel ağırlıklı bir boyutta L’yi verir [164]. Karmaşık profil kullanmak yerine, Lee ve arkadaşları tarafından yeni bir metot geliştirilmiştir.



Şekil 2.21. Simetrik w taramaları için tipik bir grafiksel ayırma çizgisi metotta pik profiline Lorentzian ve Gaussian katkılarının oranı basit bir pik fiti ile bulunur

Herhangi bir hkl yansımasının vida simetrik w taramasına, eğim, burkulma ve sınırlı korelasyon uzunluklarının katkısı aşağıdaki ifadeyi kullanarak ayrıştırılabilir.

$$\beta_{hkl}^n = (\beta_{tilt} \cos \chi)^n + (\beta_{twist} \sin \chi)^n + \frac{(1/L)^n}{|K_{hkl}|^n}. \quad (2.40)$$

IKhklI saçılma vektörünün şiddetidir. n=1 Lorentz piki için, n=2 Gaussian piki için ve 1<n<2 ikisinin bileşimi için. (1/L terimi $2\pi/L$ ile değiştirilebilir. Bu eğer ters uzay farklı bir şekilde açıklandıysa geçerlidir. (Bölüm 2.3). Ama IKhklI aynı açıklanmalıdır ve L ile aynı birimde verilmelidir.). Lorentzian ve Gaussian piklerinin kesri η ile verilir. Birçok pik Gaussian tipindedir. Son terimi atmak, yüksek dislokasyon yoğunluklu filmlerde önemsiz bir hataya neden olur. İkincisi için Eş. 2. 40 şu şekilde basitleştirilebilir.

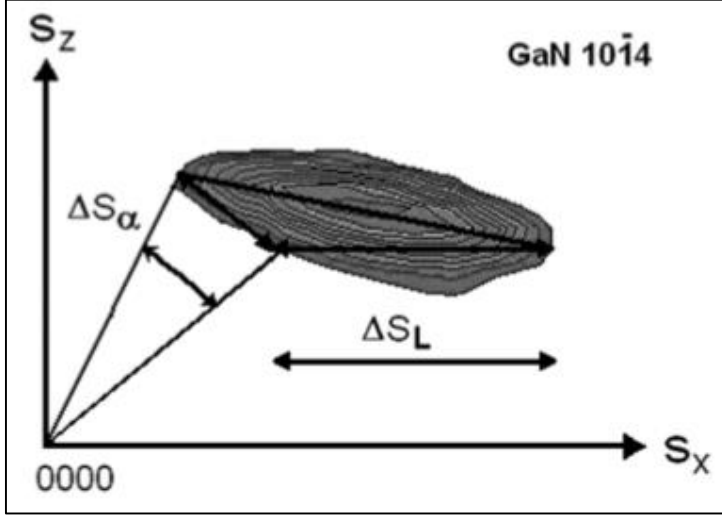
$$\beta_{hkl}^2 = (\beta_{tilt} \cos \chi)^2 + (\beta_{twist} \sin \chi)^2. \quad (2.41)$$

Bu denklemin bir dizi vida simetrik w-FWHM'nin χ açısına karşı en küçük kareler yöntemiyle fit edilmesi hem eğimi hem burkulmayı verir. Bu düşük şiddeti olan yüksek χ açılı yansılarda, özellikle yüksek kusurlu filmler için faydalıdır [165]. Offseti olmayan ($\chi=0$) simetrik pikler için ve n =1 durumunda Eş. 2. 40 klasik bir William-Hall tipi analiz verir. Bu analiz Sun ve arkadaşlarının ki ile aynıdır.

2.14. Ters Uzay Haritaları

Yanal korelasyon uzunluğunun genişleme etkileri ve eğim, asimetrik bir yansımanın tek bir ters uzay haritası kullanılarak ayrıştırılabilir. III- grubu nitritlerin ters örgü noktaları w taraması yönüne hizalanmış baş eksenleriyle genellikle eliptiktir. Şekil 2.22'de yanal korelasyon uzunlukları ve eğimin ayrıştırılmasına yönelik grafik bir metot gösterilmiştir. (Şekil 4'e bakın). Bu yaklaşımda bazı zorluklar olabilir. Eğer örgü noktası Şekil 2.22'de gösterilen diğer yöne eğildiyse düşey boyut genişlemesi muhtemelen dominanttır. Simetrik ölçümlerin eğim değerleri de kullanılabilir. Ve asimetrik yanal korelasyon uzunluğu bu değeri bilerek çıkarılabilir. Ters uzay haritaları bu faktörler dikkate alınarak modellenenirler. Ek olarak, eğim, burkulma ($\beta\alpha$) ve yanal korelasyon uzunlukları(βL ve

β size) w taraması genişlemesinin kaynakları olmayabilirler. Daha önce bahsedildiği gibi mikrogerilme olabilir veya alttaş bükülmesi, uyumsuz dislokasyonlar durumunda analiz daha az güvenilir olur.



Şekil 2.22. Eğim ve yatay korelasyon uzunluklarının yüzünden olan genişlemenin grafiksel ayrımı

2.14.1. Dislokasyon yoğunluklarının eğim ve burkulmadan bulunması

Genellikle, w taramalarındaki genişleme faktörleri ayrılmıştır, böylelikle dislokasyon yoğunlukları bulunabilir. Yüksek kusurlu III-grubu nitrit filmlerde örgü burkulması ve eğimi direk olarak dislokasyon yoğunlukları ile ilgilidir. Mesela, mikrogerilim, yanal korelasyon uzunlukları ve difuze saçılma buna dahildir. Prensip, pik genişlemesi birde dislokasyonların film içinde uzaysal dağılımına da bağlıdır. Metallerde dislokasyon yoğunlukları ile ilgili çalışmalar 1950’lerde Hirsch ve Kelly [166] tarafından başlatılmıştır ve hala şimdiki yaklaşımların temelini oluşturmaktadır. Bu yaklaşımlar Eğim/burkulma, mikrogerilim veya difuze saçılmayı kapsar.

2.14.2. Dislokasyon yoğunlukları için basit denklemler

Gay ve arkadaşları ilk önce dislokasyon yoğunluklarını w-FWHM ile ilişkilendirdiler. Mozaik bir yapıyı ele alarak, dislokasyonların çekirdek sınırlarında olduğunu kabul ederek dislokasyon yoğunluğunu yaklaşık olarak (D_B);

$$D_B \approx \frac{\beta}{3bt} \quad (2.42)$$

ile verileceğini söylediler. Burada b , Burger vektörünün uzunluğu, β , w-FWHM ve t ortalama çekirdek boyutudur. Benzer fakat daha doğru bir formül aşağıdaki gibidir;

$$D_B = \frac{\beta}{2.1b_c d_0}. \quad (2.43)$$

Chirchia ve arkadaşları [167], bunu kenar dislokasyonları için sonlu boyut etkilerini açıklayan bir denklemle birleştirdiler. (Çizelge 2.12). β_e , burkulma değeridir ve bu değer eğimden ve sınırlı korelasyon uzunluğundan etkilenir.

$$D_B = \frac{1}{2.1b_c d_0} \sqrt{\beta_c^2 - \left(\frac{0.9\lambda}{d_0 \cos\theta}\right)}. \quad (2.44)$$

Eğer d_0 tam bilinmiyorsa, iki etkiyi bölmek daha kolay olabilir ve bunun yerine Eş. (2.43) ve (2.46)'yı kullanabiliriz. Dislokasyonların rastgele dağılımı için Kurtz ve arkadaşları [168] tarafından bir denklem önerilmiştir;

$$D_B = \frac{\beta^2}{9b^2}. \quad (2.45)$$

Ve Dunn ve Koch;[169]

$$D_B = \frac{\beta^2}{4.35b^2}. \quad (2.46)$$

Eş. (2.43) ve (2.46) gösterir ki, mozaik film yapısı için dislokasyon yoğunluğu β ile orantılıdır ama rastgele bir dislokasyon dağılımı için β^2 ile orantılıdır. İkincisi farklı pik şekilleri de verir. (2.43) ve (2.46) denklemlerinin her ikisi de GaN filmlerin dislokasyon yoğunluklarını elde etmek için kullanılır. Eş. (2.45) III-grubu nitritlerde kenar ve vida dislokasyon yoğunluklarını hesaplamak için kullanılmıştır. Bu hesaplamalarda 0002'nin

FWHM'sini ve 10-12 veya 12-31'in yansımaları kenar ve vida dislokasyonları için ayrı denklemlerde kullanılmıştır. Yüksek dislokasyon yoğunlukları için (2.44) ve (2.46) denklemleri kullanılarak bulunan sonuçlar arasındaki fark küçüktür. Bunun nedeni iki modeli karşılaştırırken dislokasyon boşlukları arasında küçük bir fark olmasıdır. Ama bu fark daha küçük kusur yoğunluklarında önemli hale gelebilir. Diğer çalışmalar göstermiştir ki Eş. (2.47) küçük kusur yoğunluklu filmler için daha tutarlı sonuç vermektedir. Wilkens ve arkadaşları [170], eğer dislokasyonların Burger vektörleri dış bir mesafeden kesecek şekilde ayarlanırsa gerilme enerjisinin azaltılabileceğini göstermişlerdir. Kogner ve arkadaşları, korelasyon durumunda rastgele dislokasyon dağılımı için Eş. (2.43)'in düzeltilmesi gerektiğini göstermişlerdir. M , korelasyon derecesini, L , Burger vektörünün sifıra ortalandığı bölgenin alanıdır.

$$D_E = \frac{18\beta_c^2 \cos^2 \theta_B}{(2.8 + \ln M)^2 b_c^2} \quad (2.47)$$

$$D_S = \frac{36\beta_s^2}{(2.4 + \ln M)^2 b_s^2} \quad (\text{burada } M = L\sqrt{D_B}). \quad (2.48)$$

M , yaklaşık, 1'den çok büyük bir değere kadar değişebilir. 1'e yaklaşık değer yüksek korelasyon, 1'den çok büyük değer korelasyon yok anlamına gelir. M , ihmal edilmemelidir. Korelasyon XRD ve TEM arasında önceden gözlenen ayrılıkları açıklayabilir. Korelasyon hesaba katıldığında, dislokasyon yoğunluğu değerleri 10 kat artabilir. Korelasyon, yüksek dislokasyon yoğunluklu filmlerle ilişkilidir. Bu yüzden Eş. (2.43) benzer örnekler için gerçek dislokasyon yoğunluğunu verebilir. Eş. (2.44) ve (2.46) yüksek dislokasyonlu filmler için uygundur. (geniş w-FWHM) öte yandan Eş. (2.43) düşük dislokasyon yoğunluklu filmler için yeterlidir. (dar w-FWHM). Karışık dislokasyonlar, bir karışık dislokasyonun bir kenar ve bir vida dislokasyonun toplamına eşit olduğu varsayılarak hesaba katılabilir.

Pratikte dislokasyon yoğunlukları yanal korelasyon uzunluk ölçümlerinden elde edilebilir. (L_{11}). Rastgele bir dislokasyon dağılımı için, dislokasyon yoğunlukları (D_B) şu şekilde verilir;

$$D_B = \frac{1}{L_{\parallel}^2}. \quad (2.49)$$

L₁₁ değerleri sık sık dikkate değer hataların konusu olur. Bu yüzden eğim ve burkulma ölçümler, dislokasyon yoğunluk ölçümlerinde tercih edilir.

2.15. Pik Profili Analizi Metotları

Pik genişliği olduğu kadar pikin şekli de dislokasyon yoğunlukları hakkında bilgi toplamak için kullanılır. Özellikle her pikin tabanındaki difuze saçılmadan faydalanarak. Pik profili analizinin bir özeti Kuzel [171] tarafından verilmiştir. Okuyucu genellikle Krivoglar, Ungar, Grama ve Wickers 'ın yayınlarına çalışır [172]. Pik profili analizi hakkında (III- grubu nitritler için) az çalışma vardır. Sadece Kogoner ve arkadaşları direk dislokasyon yoğunlukları ile ilgili olan difuze saçılmayı modellemiştir.

2.15.1. Ters uzay haritalarının modellemesi

Başka bir modelleme çalışması Holy ve arkadaşlarınınkindir [173]. O, ters uzay haritalarını modellemek için kinematik teoriyi kullanmıştır. Eğimin ve yanal korelasyon uzunluğunun etkilerini ayırt edebilmek için ekstra verilere ihtiyaç duyulsa da, bu, dislokasyon yoğunluğu belirlenmesi için kullanılmıştır [174]. Bu yüksek dislokasyon yoğunluklu örnekler için en iyi yöntemdir. Çünkü saçılma kinematik teoriyle açıklanabilir.

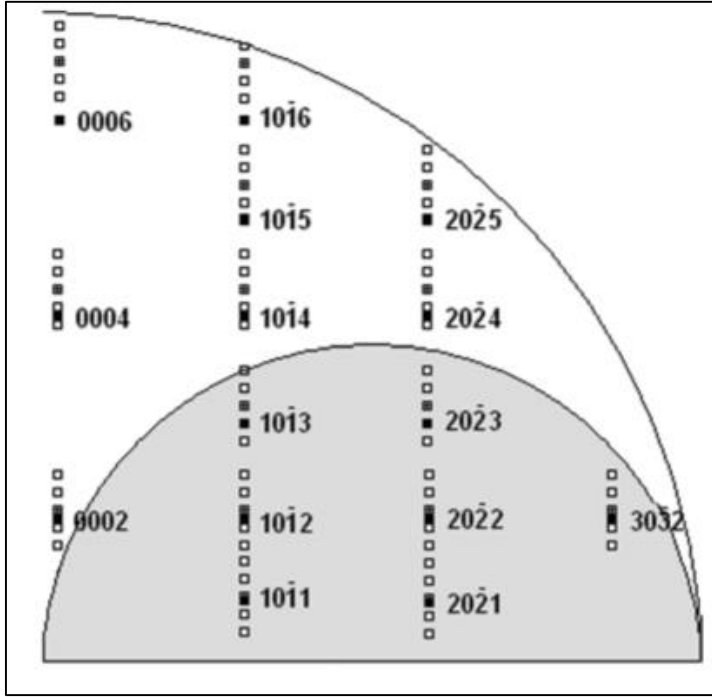
2.16. Çoklu Tabakalar ve Kuantum Noktaları

Süper örgüler ve kuantum yapılar III-grubu nitrit cihazlarda sıklıkla kullanılır. Quantum kuyuları LED'lerin ve LASER'lerin ışık salan bölgelerinde kullanılan ince yapılardır (tipik olarak 1-10nm). QW malzemenin bant aralığı, diğer tabakalarinkinden düşüktür. Bu sayede elektron ve holleri içerir ve ışımsal yeniden birleşmeye izin verir. Çoklu QW tabakalar da kullanılabilir. Diğer süper örgü veya çok tabakalı yapılar Bragg yansıtıcıları [175] olarak kullanılabilir. Aynı zamanda dislokasyon azaltıcı olarak da kullanılabilir. QW'lerin ve bariyerlerin bileşik, kalınlık ve gerilme durumları, bant aralıkları ve cihaz içindeki elektrik alanları kontrol eder. Bunlar salma dalga boylarını ve verimleri etkiler. Bir de süper örgülerdeki kalınlık ve gerilme Bragg yansıtıcılarının optik ve yapısal özelliklerini inceler [176]. $w-2\theta$ taramaları, küçük açılı X-ışını yansıtma taramaları ve RSM'ler böyle yapıları analiz etmek için kullanılır. Bir çok kırınım profili özelliği bazı örnek parametrelerinden etkilendiği için simülasyon yazılımı gereklidir. Basit kinematik teoriye bağlı simülasyonlar

yeterlidir, ama daha mükemmel yapılar için dinamik teori gerekir. İlgili simülasyon yazılımı genellikle X-ışını ekipmanıyla birlikte alınır ve kırınım için genellikle optik ve dinamik teoriyi kullanır [177]. Ücretsiz yazılım internette vardır ama diğer yazılımlara ulaşmak için yazarlarıyla işbirliği kurmak gerekir. Güvenilirlik ve kabullenmeler ve yazılımın parametreleri hesaba katılmalıdır. Yazılım paketleri arasında farklılıklar vardır [178]. Bu farklılıklar III- grubu nitritler için azdır. Standart kitaplar kullanılarak buradaki formüllerle kinematik simülasyonlar oluşturulabilir. III- grubu nitritler için elde edilen veriler kinematik teoriyi kullanan simülasyonlara uyumludur. Tam dinamik teoriyi kullanan simülasyonlara daha az uyumludur. Çünkü III- grubu nitritler kusursuz kristal değildirler. Demek oluyor ki, kırınımın fiziksel yapıyla nasıl bir ilişkisi olduğunu anlamak için, tutarlı simülasyonlar hazırlamak ve deneysel veriyi yorumlamak gereklidir. Şimdi III-grubu nitrit çalışmalarındaki temel yapıları tartışacağız.

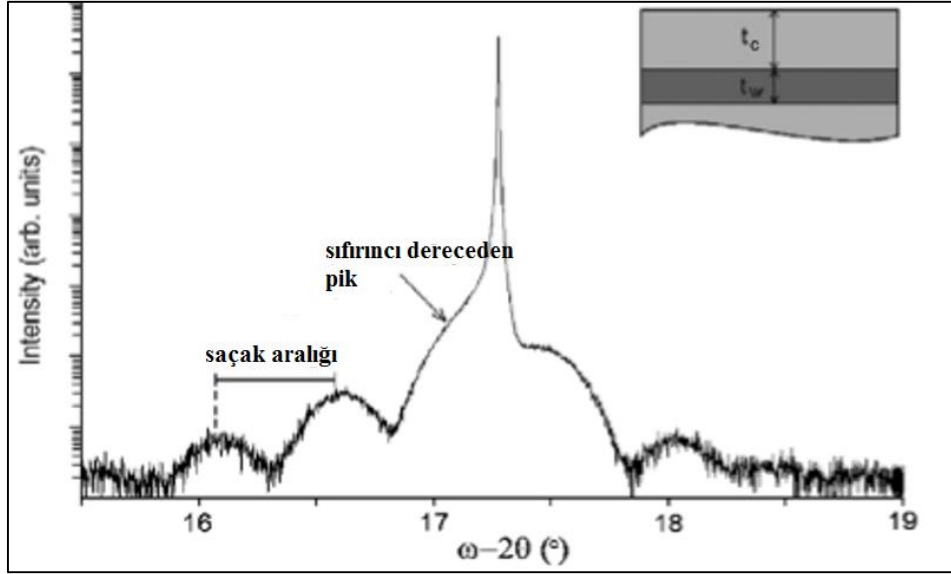
2.16.1. Tek quantum kuyuları (SQWs)

Bir SQW üç faktörle karakterize edilir. Kuyu bileşimi, kuyu kalınlığı(t_w) ve kaplama malzemesinin kalınlığı(t_c). Ama SQW'den elde edilen kırınım profilleri sadece iki faktöre bağlıdır. Toplam kalınlık(t_w+t_c) ve ortalama bileşik ($X t_w/(t_w+t_c)$)(kuyunun ve kaplama tabakalarının) [179]. SQW'nin tipik bir w-2 θ taraması Şekil 2.24'de gösterilmiştir. Temel SQW pikinin pozisyonu, toplam kalınlık ve ortalama bileşikteki değişimlerden etkilenir. Temel SQW piki, altındaki tabakanın pikine doğru kayar çünkü SQW piki, pikin kuyruğunda süperimpozedir [180]. Bu yüzden güvenilir bilgi elde edebilmek için, saçılma profili simule edilmeli ve deneysel veri ile kıyaslanmalıdır. Ne yazık ki, X, t_w ve t_c 'nin farklı kombinasyonlarına dayanan simülasyonlar deneysel veriyle benzer bir fit verebilirler.



Şekil 2.23. Ters uzaydaki kırınımın çoklu tabakalardaki şeması

İdeal olarak diğer bir teknik kullanılabilir. Bu teknikte tek bir değişken bilinmektedir. Diğer iki değişken simülasyon kullanılarak bulunabilir. Tek değişkeni belirlemenin en kolay yolu QW kalınlığı t_w 'yi bulmak için X-ışını yansıması kullanmaktır [181]. SQW yapıların küçük açılı X-ışını yansımalarından saçaklar gözlenir. Bu saçaklar SQW'nin alt ve üstünden yansıyan X-ışınlarının girişiminden kaynaklanır. Bu yansımalar, örnek yüzeyinden de olabilir. Fresnel saçılmasını çıkararak osilasyonlar daha kolay gözlenebilir. Bunlar polinomial bir ifade ile daha kolay tahmin edilebilir. Bu girişim saçaklarının periyodu, kaplama tabakasının kalınlığı t_c azaldıkça artar. Osilasyonun şiddeti t_c artınca artar. Bu artma SQW ve altındaki tabakanın bileşik farkından da kaynaklanabilir. Osilasyonlar w_0 pozisyonunda sıfıra düşer. Bunlar sadece SQW kalınlığına bağlıdır.



Şekil 2.24. Analizör bir kristal kullanılarak elde edilmiş InGaN-GaN tekli kuantum kuyusuna ait ω taraması

SQW yapısı ve bileşiğin osilasyonları nasıl etkilediği bilgisi simule edilmiş yansıma verisini üretmek ve ayarlamak için kullanılabilir. Bu veriler deneysel verilerle daha etkili uyum sağlar. Bu, deneysel sonuçları değişen t_w ve t_c 'li yapılar için üretilmiş bir dizi simule edilmiş küçük açılı yansıma taramaları ile kıyaslayarak yapılabilir. III- grubu nitrit örneklerin pürüz ve eğriliğinden dolayı, yüksek kaliteli deneysel veri elde etmek zor olabilir. Eğer durum böyleyse demet boyutunu azaltmak faydalı olabilir veya daha kalın bir kaplama tabakası kullanmak. Önceki bölümlerde büyük açılı yansımalar tavsiye edilse de, burada daha küçük açılı 0002 yansıması kullanılır. Çünkü zayıf pikleri ölçmek için daha büyük pik gerekir.

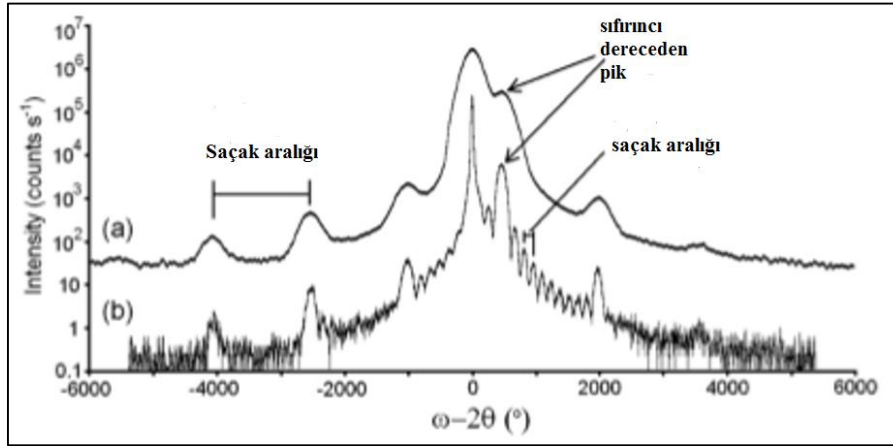
2.16.2. Çoklu kuantum kuyuları

Çoklu kuantum kuyuları, III- grubu nitrit LED ve LASER yapılarda kullanılır. Literatürde InGaN/GaN MQW'ler hakkında yayın çoktur. Bunlar, yeşil, mavi ve UV ledlerde büyük iç kuantum verimleriyle kullanılır. InGaN ve AlGaIn'ta da kullanılır. UV salıcılarda bu yapılar popülerdir. Süper örgüdeki saçılma, saçılmaya optik açıdan bakarak anlaşılabilir. Burada kalınlık saçaklarının sayısı tekrarlanan sayısıyla ilişkilidir. SQW'ler gibi MQW'lerde üç faktörle karakterize edilebilir. Bileşik (X), kalınlık (t_w) ve bariyer kalınlığı (t_b). MQW'lerden X-ışını verisini elde etmek daha kolaydır. Çünkü toplam kalınlık daha büyüktür. Bu kalınlık X-ışını verilerini sıkıştırır ve şiddeti artırır. Ek olarak, bu modelden yola çıkarak verilerin nasıl etkilendiği açıklanabilir. 10 tekrarlı AlGaIn/GaN MQW'ler için

w-2 θ taraması Şekil 2.24’de gösterilmiştir [182]. SQW’ler için olduğu gibi 0. Dereceden piki içeren saçılma modeli, süper örgünün içinde ortalama bileşik hareket eder. Bu kuyuların ve bariyerlerin bileşikleriyle ilgilidir.(dw-db). Aynı zamanda kalınlıklarıyla da ilişkilidir(tb-tw) ve bu dar aralıklı bir pik verir.

$$d_{av}T = d_b t_b + d_w t_w \quad (2.50)$$

Bölüm 2. 3 ‘de verilen denklemleri kullanarak, toplam tekrar kalınlığı $T=tw+tb$ süper örgü piklerinin açılma ayrılmasından elde edilir. Daha yakın yerleşmiş ortalama pikler toplam kalınlığı verir [183]. Daha az tekrarlamalı bir MQW yapı, daha geniş kalınlık saçakları ve süper örgü piklerine sahiptir. Pikler yüzey pikine göre daha az şiddetli olurlar ve daha az süper örgü piki arka plan kirliliğinden ayırdedilebilir. Bu yüzden çok tekrarlamalı MQW yapıların analizi daha kolaydır. Daha kalın qw’ler ve yüksek iç yapılı MQW’ler gibi. Optoelektronik cihaz yapılarının çoğunluğu 5-10 tekrarlamalı MQW’ler içerir. Çizelge 2.13 bir MQW’nin kırılma profili veya süper örgü yapısının üzerinde farklı parametrelerin etkilerini özetler.



Şekil 2.25. Açık bir dedektörle elde edilen AlGaIn-GaN MQW’ ye ait w taraması

Veriler genellikle 0002 yansımasının w-2 θ taramalarından elde edilir. Çünkü şiddet yüksektir ve daha fazla SL piki dedekte edilebilir. 0002’deki w-2 θ taramalarının pik pozisyonları bileşik ve gerilim farklılıklarından kaynaklanan birim hücre parametresi değişimlerine daha az duyarlı olmasına rağmen bu geçerlidir [184]. Şekil 2.25 hem büyük açılı kırınım hem de düşük açılı yansıma verilerinin simülasyonunu gösterir. Bunlar bir dizi

InGaN/GaN MQW'lerin %5-25 X, kalınlık oranı $R(tw/tb)^{2-4}$, tekrar kalınlığı $T(100 \text{ \AA})$ ve 10 tekrarlamasının hesaplanması girişimden önce elde edilmiştir. Pik pozisyonları hem X'e hem R'ye bağılı olarak değişir. SQW'ler için olduğu gibi X, tw, tb'nin kombinasyonlarındaki küçük farklılıklar için yapılan simülasyonlar aynı MQW verilerine uyabilir. Eğer veriler küçük bir açı aralığında elde edildiyse bu geçerlidir. (3 derece veya 6 derece, 2θ). SL piklerin ilgili şiddetleri bir zarf fonksiyonuyla belirlenir. Bu fonksiyon temelde R'ye bağılıdır. Zarf fonksiyonunun minimumu eksik SL piki verir. Bunlar büyük açı aralığında elde edilen kırınım vektörlerinden elde edilir.(6-7 derece(w)-12-14 derece(2θ)) gibi. Eksik SL piklerinin pozisyonları R'ye bağılıdır. Bu zayıf ve yüksek dereceden SL pikleri açık bir dedektörle $w-2\theta$ taramalarından ölçülebilir. Arka plan saçılmasını önlemek için bir yarı kullanılır. Küçük kalınlık saçakları dağılsa da SL piklerinin ilgili şiddetleri korunabilir. Deneysel verilerde minimumun açıkça görüldüğü yerde, R, verileri bir dizi simülasyonla kıyaslayarak bulunabilir. Tarama geniş aralıkta olmalı, pik şiddetleri yüksek olmalı ve iki minimum arasında en az bir SL piki daha dedekte edilmiş olmalıdır. Sonuç olarak bileşik X, bütün pik pozisyonlarını kullanarak belirlenebilir. Simülasyon en iyi modeli oluşturduğunda, en iyi modelden küçük farklılıkları olan daha ileri simülasyonlar belirsizliklerin tahmin edilmesine yardım eder. Küçük açık yansıma verisinde de minimum gözlenebilir. Onların yaklaşık şiddetleri sadece R'ye bağılıdır ve bileşikten bağımsızdır. Bir dizi simülasyon örnek parametrelerini belirlemek için kullanılabilir (Şekil 2.25). Bu SQW'ler için kullanılan yaklaşıma benzerdir ve eğer SL piki şiddetleri düşükse MQW'ler için faydalıdır [185]. Yansıma verileri R'deki değişimlere daha az duyarlıdır ve eğer örnek çok pürüzlüyse düşebilir, bu yüzden büyük açılı $w-2\theta$ taramaları eğer şiddetler yeterliyse daha iyidir. Bu şiddetler çoklu ve yüksek dereceden SL piklerinin dedekte edilmesine müsaade eder. R bir kez güvenli olarak bulunduğu zaman X, tw ve tb simule edilmiş veriyi, merkez bölgenin ikinci bir $w-2\theta$ taramasına uyarlayarak bulunabilir. Bu InGaN ve AlGaIn için gösterilmiştir [186].

Yüksek bir saçılma kontrastı için eksik SL pik pozisyonları bileşikten fark edilir şekilde etkilenir hale gelir. O zaman veriler bir dizi modelden faydalanarak daha kolay simule edilebilir. Bu modeller, 0. Dereceden SL pikinin tam pozisyonunu vermesi için farklı alaşım bileşikleri ve kalınlıklarını içerir. Bunlardan sonra R'ye uydurmak için minimum saçılma zarfında tekrar kullanılır. Alternatif olarak, önceki metot kullanılabilir. Önceki metot farklı alaşım bileşiklerinin hesaplamaları yapıldığı zaman geçerlidir. İkincil iyon kütle spektrometresi gibi diğer bir metot veya siklotron radyasyonu kullanan anormal X-ışını

saçılması X 'i bulmak için kullanılabilir. Ya da t_w ve t_b 'yi bulmak için Rutherford saçılması kullanılır. Genelde birçok QW yapısı tam gerilmiştir ve ölçülmüş d_{hkl} 'den gerilmenin etkilerini kaldırmak için uygun esneklik sabitleri gerekir. Bütün QW diliminin ortalama bileşimini elde edebilmek için bu gereklidir. Eğer çift eksenli gerilme yoksa X yanlış olur. Düşük gerilmeler için, bir simetrik veya asimetrik pikten bulunan sıfırıncı dereceden pik önceden bahsedildiği gibi işlem görebilir. Bu ortalama bir bileşik için gereklidir. Buradan R belirlendiğinde alaşım bileşiği elde edilebilir. Daha büyük gevşemelerde diğer faktörler hesaba katılmalıdır. Değişik bir yaklaşımda w -2 θ taramalarının eksenini $\text{\AA}^{-1}$ 'e dönüştürmektir. Bu dönüşüm bölüm 2.3 teki bağıntılar kullanılarak yapılır. Sonra Fourier dönüşümü verilere uygulanır. Bu dönüşümde piklerin periyodikliklerini verir. Ama, verilerin yüksek kaliteli ve geniş aralıkta olma gerekliliği, III-grubu nitritler için bu yaklaşımı uygunsuz yapar.

Çizelge 2.13. QW'lerin ve süper örgülerin w -2 θ kırınım taramalarını ve küçük açılı yansıma taramalarını etkileyen faktörler.

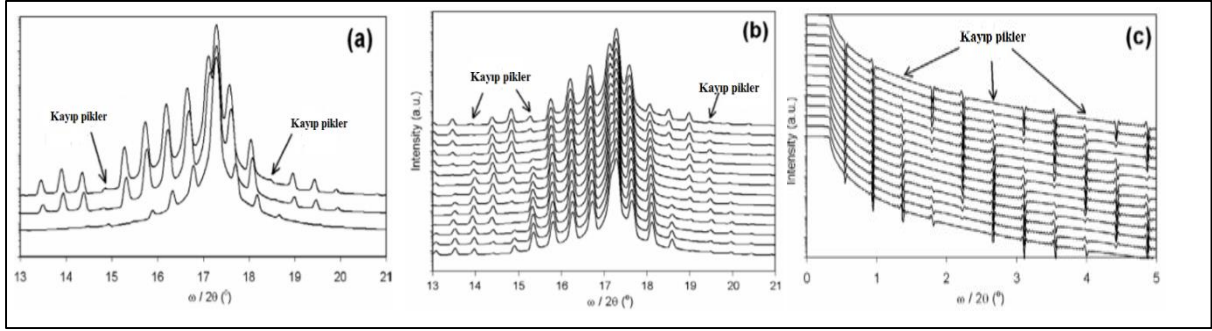
Faktör	w -2 θ taramaları	Yansıma
QW'lerin ve bariyerlerin bileşimi(x)	Sıfırıncı dereceden ve SL pik pozisyonları ve şiddetleri	Pik şiddetleri
Tekrar kalınlığı $T=t_b+t_w$	Sıfırıncı dereceden ve SL pik pozisyonları ve şiddetleri	Pik pozisyonları ve şiddetleri
Tekrarların azalan sayısı	Bütün piklerin genişlemesi (alttaşı piki hariç)	Bütün piklerin genişlemesi
Tekrarların azalan sayısı	İyi girişim saçaklarının sayısı	İyi girişim saçaklarının sayısı
Kalınlık oranı($R=t_b/t_w$)	SL minimumlarının pozisyonu	Zayıf piklerin pozisyonu
Toplam kalınlık (MQW'ler ve süperörgüler)	Saçak aralığı	Saçak aralığı
Kuyu-bariyer saçılma faktörü	Pik şiddetleri ve SL şiddetlerindeki asimetri	Pik şiddetleri
Pürüzsüz ve difüze arayüzler	Daha yüksek dereceden gözlenebilir SL pikleri	Artan 2θ ile şiddet kaybı
Bileşik veya kalınlık değişimi	Pik genişlemesi	Pik genişlemesi
MQW tekrar kalınlık değişimi	Artan mesafe ile SL genişlemesi artar	Artan 2θ ile pik genişlemesi artar
Bileşik sınıflandırılması	Daha yüksek dereceden SL piklerinin şiddetinde düşme	Yüksek dereceden piklerin şiddetinde düşme
Kristal kusurları	Pik genişlemesi	Önemli bir etki yok
Tabaka yığınının alt kısmında tekrar kalınlık farkı	Hafif pik genişlemesi	Daha yüksek 2θ 'larda pik aralığı farkı

2.17. Diğer Süper Örgüler

Süper örgü tabakalar, birkaç on nm kalınlığında olabilir, AlGaIn/GaN süper örgüler alan etkili transistörlerde kullanılır ve hem AlGaIn/GaN hem de AlInN/GaN süper örgüler dağıtılmış Bragg reflektörlerinde kullanılır.(DBR'ler). DBR'ler benzer örgü parametreleri ile değişen tabakalar içerirler ama bu tabakaların kırılma indisleri farklıdır. Bu tabakaların kalınlıkları seçilen bir dalgaboyunu yansıtacak şekilde kesilmiştir. Yansıtmayı artırmak için çoklu tabakalar kullanılır. Bu durum gerilmeyi yükseltir. RSM'ler gerilim durumunu bulmak ve gevşemeyi çıkarmak için kullanılır. Süper örgüler MQW'den daha kalın tabakalar içermeye yaklaştığında, SL pikleri daha yakın yerleşir ve $w-2\theta$ taramalarında genellikle daha büyük karışıklık görülür. Gerilmede asimetric SL pikleri üretebilir ve gevşeme saçakların dağılmasına neden olur [187]. Çizelge 2.13 bir kırılma modelinde değişen yapısal parametrelerin etkilerini özetler. MQW'ler için olduğu gibi, yansıma verilerinin işe yaradığı simülasyonlar gerekir. Tekrar kalınlığı T , denk.2.15 veya 2.16'yı kullanarak SL pik aralığından elde edilebileceğine rağmen, tabaka kalınlıkları ve bileşik için iyi bir sonuç bulunamayabilir. Birkaç çeşit gerilme durumunun mümkün olduğu hemen hemen mükemmel yapılarda bile bu geçerlidir [188].

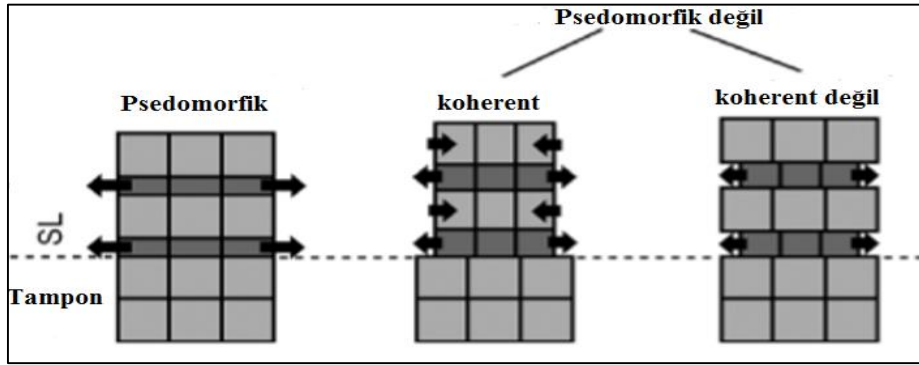
2.18. Homojen Olmayan, Pürüzlü ve Kusurlu Tabakaların Analizi

Şimdiye kadar, mükemmel yakın yapılar hesaba katılmıştı, bunların tabaka kalınlıkları ve bileşikleri iyi tanımlanmıştı. Simülasyonlarda, QW profilinin genellikle kare olduğu kabul edilir ve QW'nin bileşik ve kalınlık açısından homojen olduğu kabul edilir. Bu her zaman olmayabilir. Mesela UV ve yeşil bölgede ışık salan InGaIn QW'ler tabaka kalınlığı ve bileşik açısından homojen değildir [189]. Homojensizlikler, rastgele bir alaşımdan beklenen nano skalalı bileşik dalgalanmalarından daha büyük skalalıdır ve XRD ile dedekte edilebilir.



Şekil 2.26. MQW'ler için açık dedektörle simülaze edilmiş büyük açı w taramaları

XRD ortalama bir bileşik bilgisi ve QW genişliği bilgisini verir. Bu bilgi lüminesans davranışını yansıtmaz. Yerel homojensizlikten kaynaklanan pik genişlemesini veren simülasyonlar gerekir [190].



Şekil 2.27. Süper örgülerde farklı gerilme veya rahatlama olasılıkları

Ek olarak, arayüz pürüzlülüğü ve dağılımı, pik şiddetlerinin umulandan daha çabuk düşmesine neden olur. Arayüz pürüzlülüğü ve dağılımı değerlerini $w-2\theta$ taramalarından çıkarmak zor olabilir, bunun nedeni ekstra dağılım saçılmalarıdır. Ama bunlar simülasyonlarla dedekte edilebilir. Bu, yüksek açılarda şiddet kaybına bakılarak da yapılabilir. Büyük açılarda küçük bir dağılım saçılması vardır. Üst ve alt arayüzlerdeki pürüzlülük farkları da ayırt edilebilir. Mesela, eğer kaplanmış bir QW'nin bir tarafındaki pürüzlülük daha fazla ise, küçük açı yansıması verilerinden elde edilen osilasyonlar sıfıra düşmez, ama saçılma zarfında hala tanımlanabilen bir minimum olur, bu kuyu kalınlığını temsil eder. Osilasyonların modeli, alt veya üst arayüzlerden hangisinin daha pürüzlü veya dağılmış olduğuna göre değişir. Bu özellikle InGaN QW'lerle ilgilidir [191]. Bunlarda arayüzler QW'nin altında veya üstünde daha dağınıktır [192]. Tek tabaka yüzünden pürüzlülük ve arayüzlerdeki dağılıma yüzünden sınıflandırma aynı tip QW'ler için incelenmiştir. Her tabaka, altındaki tabakaya uyum sağlasın diye gerilmiş kabul edilir. Bu

doğru olmayabilir. Özellikle tabakalar, bileşik olarak farklıysa bu doğru değildir (Şekil 2.27). Mesela, AlGaIn/GaN QW'ler, alttaki GaN'ın iç-düzlem örgü parametrelerine uysun diye gerilmiştir. Çünkü her tabaka arasında oldukça küçük bir örgü uyumsuzluğu vardır. In içeriği InGaIn/GaN QW'leri yükselttiği için büyük örgü uyumsuzluğu ortaya çıkar. Bu küçük kritik kalınlığa neden olur. Eğer dislokasyonlar varsa, InGaIn tabakalar için kritik kalınlık beklenenden büyük olur. Buna rağmen özellikle daha kalın tabakalar için gevşemenin oluşması muhtemeldir. Bir dizi MQW'nin içinde birkaç QW'nin tepesinde gevşeme oluşabilir [193]. Bunun nedeni uyumsuzluk gerilmesinin yapıda oluşmasıdır. Gerilmenin gevşemesi eksiton yerleşmesini azaltır. Bunun nedeni kusurlarla ilişkili olmasıdır. Gevşeme ters uzay haritası kullanılarak dedekte edilebilir ve w-2 θ taramalarındaki SL saçaklarının dağılmasını gösterebilir. Kusur ilişkili genişlemede pikleri dağıtır. Bunun simule edilmesi kusurların tip ve dağılımlarını bilmeden zor olur. w-2 θ taramalarındaki etkileri belli bir alttaşı eğriliği kabul edilerek yaklaşık olarak bilinebilir. III-grubu nitritlerdeki kusur ilişkili genişlemenin sonucu, arayüz pürüzlülüğünün analizidir. MQW periyodunun değişimi AlGaAs/GaAs tipinin arayüz sınıflandırılması gösterilemez.

2.19. Quantum Noktaları(QD'ler)

III-grubu nitrit quantum noktalarına dayanan optoelektronik cihazlar, yüksek verim ve yüksek ısısal kararlılık gösterirler [194]. Bunların beyaz ışık üretimi ve tek foton kaynaklarında kullanılması ilgi alanıdır. QD'lerin tabakası oldukça pürüzlü QW'ye benzer, bu yüzden QD'lerin karakterizasyonu oldukça zordur. Bunun nedeni düşük kırınım şiddeti ve XRR'daki 2 θ 'nın artmasıyla şiddetteki hızlı düşüştür. Dağılım saçılması, yanal pik genişlemesi veya uydu oluşumu QD'lerden elde edilen RSM'lerde tipik olarak görülebilir. QD'ler üstüne birçok çalışma yüksek şiddetli sıklatron radyasyonu kullanılarak yapılmıştır [195]. Bu küçük gelme açılı X-ışını saçılmasıyla yapılmıştır. X-ışını kırınımı ise QD'lerde yanal korelasyon, gerilme dağılımı bileşik değişimlerini bulmak için yapılmıştır [196]. Bir QD üzerinde hem gerilme hem bileşik değişimini bulmak için karmaşık metotlar gerekir. QD'ler ve ilgili nano yapıların analizi hakkında daha fazla bilgi [6,218,219]'da vardır. Ne yazık ki nitrit QD'ler için yeterli bir çalışma yapılmamıştır. Arsenik QD'ler laboratuvar cihazlarıyla analiz edilmiştir [197]. QD'lerin boyutu şekli ve bileşimi RSM'den bulunmuştur. X-ışını yansıması kullanılarak, herhangi bir tip QD'nin, uzaysal korelasyonu, boyut ve şekli çıkarılabilir. Bu kristal mükemmeliyeti gerektirmez [198]. Bu teknikler

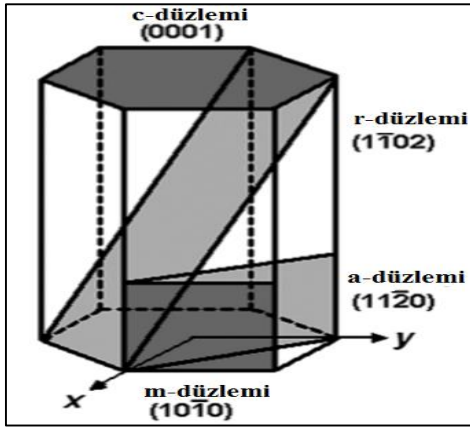
modern III-grubu nitritler için uyarlanabilir. Bu QD'ler yüksek nokta yoğunluğu ve düşük kusur ilişkili genişlemeye sahiptir [199].

2.19.1. Tabaka kalınlığı ve bileşik değerlerindeki hataların kaynakları

Birçok özellik tabakaların kalınlığına ve bileşimine bağlı olduğu için hataları belirlemek önemlidir. Normal olarak bu, bir dizi simülasyon üreterek yapılabilir. Ortalama fite yakın parametreler kullanılarak bu yapılabilir. Dış hata bağları, simülasyonların deneysel verilerle örtüşmediği parametrelerle açıklanır. Hata numunenin yapısına ve bileşiğine göre değişir. Sadece 0002'nin w- 2 θ taramalarını kullanarak analiz edilen SQW'ler için hatalar ihmal edilmeyecek kadar büyüktür. Fit'i daraltmak için XRR verileri kullanılmalıdır. SQW'lerin üzerindeki daha kalın kaplama tabakaları XRR'dan elde edilen daha iyi kuyu kalınlığı değerleri verir. w- 2 θ taramalarından ise daha az iyi bileşik değerleri verir. Çünkü tabaka pik pozisyonu kaplama tabakanın katılımıyla daha baskındır. SQW'ler için olan hatalar MQW'lerden daha fazladır. Bunun nedeni w-2 θ taramalarından elde edilen geniş ve düşük şiddetli piklerdir. Tipik olarak SQW kalınlığı $\pm 1,5 \text{ \AA}$ ve $2,5 \text{ \AA}$ arasındaki hatalarla belirlenebilir. Ve bileşikler $\pm 2\%$ ve $\pm 4\%$ aralığındaki hatalarla bulunabilir. Genel olarak QW ve bariyer tabakaları arasındaki bileşiksel kontrastın büyük olması ve daha geniş kuyular daha az hataya neden olur. MQW bileşikleri ve kalınlıkları tipik olarak sırasıyla $\pm 1\%$ ve $\pm 1 \text{ \AA}$ 'luk hatalarla belirlenebilir. TEM ve XRD arasında benzer seviyede uyumluluk rapor edilmiştir. Hatanın önemli bir kaynağı, Poisson oranlarındaki belirsizlik, referans örgü parametreleri ve Vegard kuralının tutarlılığıdır. Bunlar bölüm 2.20.1'deki veri tablolarından üst ve alt bağları kullanarak tahmin edilebilir. InGa_N/Ga_N MQW'ler için örgü parametresi belirsizliği $\pm 0,5\%$ hataya neden olur ve Poisson oranı belirsizliği MQW bileşik değerlerinde $\pm 1\%$ hataya neden olur. Burada üst ve alt sınırlar için mantıklı değerler kullanılmıştır. Bu AlGa_N ve diğer alaşımlar için farklı olabilir. Bunun nedeni, alaşım ve onu oluşturan içeriklerin örgü parametrelerinin farkının küçük olmasıdır. Bu herhangi bir referans örgü parametresi belirsizliğini önemli yapar. Her zaman olduğu gibi her sistem için hatalar ayrı çalışılmalıdır.

2.20. Polar Olmayan ve Yarıpolar III-grubu Nitrit Filmler

Optoelektronik cihazların temelinde genel olarak 0001 yönelimli filmler vardır. Ama bunların verimleri quantum-stark etkisiyle sınırlanır. (QCSE) [200]. Wurtsite kristal yapı, merkezi simetrik değildir ve 0001 düzlemi boyunca polar eksene sahiptir. Bu düzlem boyunca polarizasyon alanları kendiliğinden oluşur. Farklı bileşiklerin kuantum kuyularında bulunan ilave gerilme 0001 düzlemine paralel ilave bir piezoelektrik polarizasyon alanına sebep olur. Bu alanlar bant yapısını eğer ve elektronlar ile hollerin QW'nin zıt taraflarında birikmesine neden olur. Bu ışınımsal yeniden birleşme verimini düşürür. Eğer polar eksen kuantum kuyusuna belli bir açıyla duruyorsa, bu etki azalır. Bu farklı film oryantasyonları kullanılarak elde edilebilir [201].



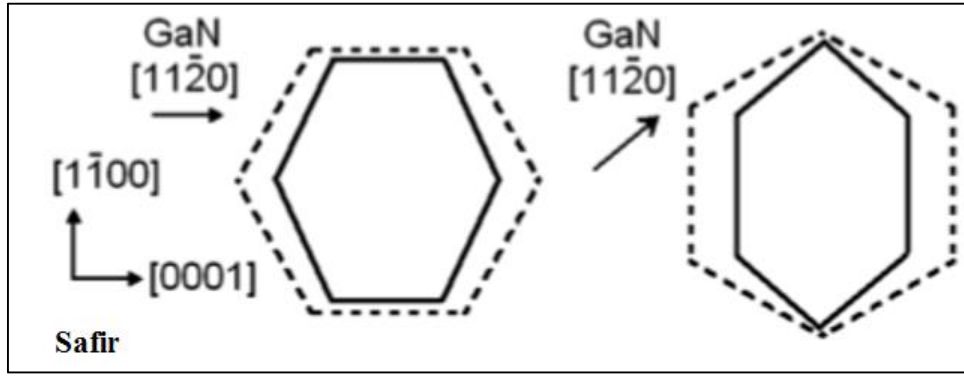
Şekil 2.28. İlkel olmayan heksagonal hücre açısından, polar c düzlemi, yarıpolar r düzlemi ve polar olmayan a düzlemi yönelimleri

Yarıpolar oryantasyonlar (10-12) r düzlemi veya diğer düzlemleri içerir. (10-11), (10-13) ve (11-22). Piezoelektrik polarizasyonun c düzlemiyle 45 dereceye yakın eğim yapan düzlemler için sıfıra yaklaşması tahmin edilir. Bu durum bu konuyu ilginç yapar. Polar olmayan a düzlemi (11-20) veya m düzlemi (1-100) oryantasyonları eşit derecede ilginçtir. Çünkü polar eksen, kuantum kuyusuna paraleldir ve bu yüzden polarizasyonla ilgili etkiler beklenmez. Yüksek iç quantum verimi ve QCSE'nin olmayışı, düşük kusur yoğunluklu polar olmayan m düzlemleri GaN'ın büyütülmesiyle oluşturulmuş mavi ışık salan cihazlar için gösterilmiştir [202]. Polar olmayan ve yarıpolar III-grubu nitritlerin büyütülmesiyle ilgili daha fazla bilgi [203]'de verilmiştir. Ne yazık ki polar olmayan ve yarıpolar filmlerin incelenmesi daha zordur. Bunun nedeni yüksek kusur yoğunlukları ve birim hücrenin daha düşük iç düzlem rotasyonel simetrisidir. Film yüzeyi oryantasyonu bağıntılarını da ifade etmek zor olabilir

çünkü bunlar filmin büyütülme sürecine göre değişir. Aşağıdaki bölümler polar olmayan ve yarıpolar III-grubu nitritlerin XRD analizi hakkında mevcut bilgileri vermektedir.

2.20.1. Gerilme ve örgü parametreleri

Polar olmayan ve yarıpolar filmler için termal genleşme katsayısı ve esneklik sabitleri ve yüzey düzlemde anizotropiktir. Mesela, hem GaN'ın hem de safirin termal genleşme katsayıları a eksenine paralel olduğu durumda, c eksenine paralel olduğu durumdan daha büyüktür. Bu yüzden film gerilimini belirlemek daha zordur. Çünkü ona simetrideki bir değişim eşlik eder. İlginç olarak düzlem dışındaki sıfır gerilmeyi ölçmek mümkündür. İç düzlem gerilmesi var olmasına rağmen bu mümkündür.



Şekil 2.29. Büyütme sürecinde ortaya çıkan mümkün ortorombik birim hücre ayrılımları

Gerilme durumunu tam olarak karakterize etmek için birçok yansımanın ölçülmesi gerekir. Ama gerçekte daha az yansıma geometrik olarak elde edilebilir. İşe yarar yansımalar da, gerilmiş yapının yeni örgü parametreleri a,b,c'ye farklı olarak duyarlıdır. Polar olmayan filmler 0001 düzlemine dik durumda, paralel olduğu duruma göre daha az altta eğriliği gösterirler ve ortorombik olarak ayrılmışlardır.(Şekil 2.29) [204]. Bu durum gerilmeyi ölçerken hesaba katılmalıdır. Genel olarak baskıcı gerilme gözlenir. Daha ince filmlerde diğer tür gerilme olabilir. x, y ve z eksenlerinin [11-20],[1-100] ve [0001] yönlerinde olduğu yerde gerilmeler şu şekilde verilir.

$$\varepsilon_{YY} = -\frac{c_{11}}{c_{12}} \varepsilon_{xx} - \frac{c_{13}}{c_{12}} \varepsilon_{zz} \quad \text{a-düzlemi (11-20) malzeme için,} \quad (2.51)$$

$$\varepsilon_{yy} = -\frac{c_{12}}{c_{11}}\varepsilon_{xx} - \frac{c_{13}}{c_{11}}\varepsilon_{zz} \quad \text{m-düzlemi (1-100) malzeme için, [205]} \quad (2.52)$$

A düzlemlı malzeme için a ve b parametreleri bir dizi heksagonal yansıma kullanılarak bulunabilir. 11-20 ve 22-40 simetrik yansımaları gibi ve 21-30,20-20,30-30 asimetrik yansımaları gibi. Bunlar sadece ω ve 2θ açılarını değıştirerek bulunabilir. Farklı ϕ ve χ açılarından elde edilen yansımalar c örgü parametresini bulmak için gerekir. Alternatif olarak c örgü parametresinin direk iç düzlem ölçümleri 0004 ve 0006 yansımalarını kullanarak yapılabilir [206]. Bu sadece düşük kusur yoğunluklu filmler için pratik bir yöntemdir. Bu tip filmlerde mantıklı bir signal-to-noise oranı elde edilebilir. Benzer olarak yansımaların geniş bir aralığı m düzlemlı malzemeler için seçilmelidir. Bütün ortorombik örgü parametreleri a, b, c'yi bulmak için her yansımadan elde edilen d_{hkl} değeri kullanılabilir. Bu Eş. (2.53)'e en küçük kare fitiyle yapılır. Şekil 2.11'de gösterilen prosedüre uyarak

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (2.53)$$

Heksagonal miller indisleri (hkil), ortorombik indisler (hkl)'ye dönüştürülmelidir. Sonra Eş.(2.9) kullanılmalıdır [207]. Sonra referans örgü parametreleri kullanılarak gerilme bulunabilir. Bunlar ilkel olmayan ortorombik birim hücreye dönüştürülmüştür [235]. Elde edilen örgü parametreleri seçilen yansımalara çok duyarlı olabilir veya diğer ağırlıklı parametrelere de duyarlı olabilir. Bu duyarlılık muhtemelen farklı delme derinlikleri veya kusurlardan kaynaklanan anizotropik pik kaymalarından kaynaklanır. Daha büyük bir hat örgü parametresi ve polar olmayan ve yarıpolar malzemelerde gerilme belirlenmesiyle ilgilidir. Birim hücrenin triklinik bir ayrılması beklenebilir. Bu durum yarıpolar oryantasyonlar için geçerlidir. Bunun nedeni filmdeki anisotropi ve yüzeyin termal genişleme katsayısı ve esneklik sabitleridir. Az sayıda çalışma gerilme analizi hakkında bilgi verir. Yüzey oryantasyonuna bağılı olarak örgü parametresi belirlenmesi için Tagliente ve arkadaşlarınıninkine benzer bir metot kullanılabilir. Aksi halde tüm mümkün büyük açıları yansımalar ölçülmelidir ve elde edilen d_{hkl} değeri en küçük kare fiti ile bir triklinik hücrenin örgü parametreleri için kullanılmalıdır [22].

Yarıpolar veya polar olmayan III-grubu nitritlerin bileşimini tam olarak bulabilmek için esneklik sabitleri bilinmelidir. Az sayıda işe yarar değer yayınlanmıştır, c- düzlemler malzemelerin esneklik sabitlerini yeni bir eksen setine dönüştürerek bunları bulmak mümkün olmasına rağmen. esneklik sabitleri olmadan, ölçülen örgü parametreleri üzerinden gerilme etkileri ve alaşım bileşimini ayırt etmek mümkün değildir. Esneklik sabitlerinin yokluğunda birbirine paralel olan düzlemlerin ters uzay haritası gösterilebilir. Bu iç düzlem gevşemesinin yaklaşık bir ölçüsünü verebilir. Bu değer yüzeyinkine yakındır. Aynı zamanda alaşım bileşiminde kaba bir ölçümü yapılabilir.

Çizelge 2.14. Polar olmayan ve yarıpolar III-grubu nitrit filmler için yığılma kusurlarını özetleyen bilgi. R yığılma kusuru yerdeğiştirme vektörüdür. Yığılma sıraları sıkı paketlenmiş [0001] yönünde verilmiştir. Her büyük harf III-N atomik çift tabakayı belirtir.

Yığılma kusur tipi	R	Yığılma sırası
I ₁	$\frac{1}{6} < 20 - 23 >$	ABABCBCBC
I ₂	$\frac{1}{3} < 1 - 100 >$	ABABCACAC
I ₃	hiçbiri	ABABCBABA
E	$\frac{1}{2} < 0001 >$	ABABCABAB
Prizmatik	$\frac{1}{2} < 10 - 11 >$	{-12-10} düzlemleri boyunca oluşur

2.20.2. Kusurlar

Heteroepitaksiyel, polar olmayan ve yarıpolar filmlerde kusur yoğunlukları c düzlem filmlerinkinden çok daha yüksektir ve basit kusur azaltma teknikleri bunlarda daha az başarılıdır. C düzlemler III-grubu nitrit filmler genellikle saf kenar, karışmış veya vida dislokasyonları içerir. Polar olmayan ve yarıpolar filmler ek kusurlar içerir. Bunlar Çizelge 2.14-15'te özetlenmiştir [208]. Hem iç hem dış düzlem hataları mümkündür.(BSF).I1 BSF atomik bir düzlemin yerleşmesiyle oluşur.(1/2(0001)) bunu bir kayma takip eder. 1/3<1-100>bunlar kısmi dislokasyonlarla bağlıdır ve büyütme hatalarından ortaya çıkar. Tipik olarak gözlenen BSF'lerin %90'ı I1 tipindedir. Çünkü bunlar en düşük oluşum enerjisine sahiptir. I3 BSF'ler çift I1 BSF'sine benzerler ve bunların teorik olarak I1'den sonra ikinci oluşum enerjisine sahip olduğu tahmin edilir [209]. Herhangi bir dislokasyonla bağlı olduğu gözlemlenmemesine rağmen bunlar TEM'le dedekte edilir ve

ekstra spotlar oluşturur. Bu ekstra spotların nedeni c eksenı boyunca birim hücrenin çiftlenmesidir. Bu 0001/2 spotları XRD ile de gözlenebilir. I2 BSF'ler basit olarak $1/3 < 1-100 >$ kayması içerir ve kısmi dislokasyonlarla bağılıdır [210]. Bunlar büyütme esnasında veya sonrasında baskıdan dolayı oluşur. Enerji olarak hem I1 hem I3'ten büyüktür.

Çizelge 2.15. Polar olmayan ve yarıpolar III-grubu nitrit filmlerde bulunan dislokasyonlar için özet bilgi. b dislokasyon Burgers vektörüdür

Dislokasyon tipi	B	Bağlar
Franck-Schockley kısmı	$\frac{1}{6} < 20 - 23 >$	I ₁
Schockley kısmı	$\frac{1}{3} < 1 - 100 >$	I ₂
Franck kısmı	$\frac{1}{2} < 0001 >$	E
Saf (a-tipi)	$\frac{1}{3} < 11 - 20 >$	hiçbiri
Saf (a+c tipi)	$\frac{1}{2} < 0001 >$	hiçbiri
Saf (c-tipi)	$\frac{1}{6} < 10 - 10 >$	BSF'ler/PSF'ler
Merviden-çubuk	$\frac{1}{6} < -3 - 2 - 10 >$	

Daha az gözlenirler. E-tipi BSF'ler nokta kusurlarla oluşur ve dislokasyonlarla çevrilidir ve en yüksek enerjiye sahiptir dolayısıyla normal olarak deneysel gözlenemezler. Prizmatik kusurlar da vardır(PSF). Tipik olarak iki I1 tipi BSF'yi bağlar. BSF ve PSF'nin kesişim noktasında da bir dislokasyon vardır. Filmler genellikle 10^5 - 10^6 cm⁻¹ gibi bir BSF yoğunluğu ve 10^{10} cm⁻² gibi bir dislokasyon yoğunluğuna sahiptir. Bu yüzden bu kusurlar XRD verilerini güçlü bir şekilde etkiler. 10^2 cm⁻¹ gibi düşük bir PSF yoğunluğu XRD saçılmasında önemli değildir. Bu kusurlar hakkında daha fazla bilgi [210]'da bulunabilir. Epitaksiyel yanal fazla büyütme kusur yoğunluklarını azaltmak için kullanılmıştır [211]. BSF'ler maskenin yanlış hizalandığı fazla büyümüş bölgelere katılabilir. Daha düşük kusur yoğunluğu yanyüz epitaksiyel yanal fazla büyütmeyle elde edilebilmesine rağmen bu geçerlidir [212]. Çok kalın ve HVPE ile büyütölmüş c düzlemli alttaşların dilimlenmesiyle elde edilmiş gövde yüzeyler kullanılarak en düşük kusur yoğunlukları elde edilebilir. Bunlarda dislokasyon yoğunlukları 10^7 cm⁻² gibi düşüktür ve hatalar yoktur [213]. Gerçek gövde büyütme metotları kullanılmasına rağmen bu geçerlidir [214]. Bu yüzeylerin üzerine büyütölmüş konuyla ilgili cihazlar çok verimlidir. Ama bu yüzeyler küçük alanlıdır, pahalıdır ve kolay bulunmaz. Bu yüzden zararsız kusur yoğunluğu ölçümleri,

heteroepitaksiyel büyütmenin iyileştirilmesi için gereklidir [215]. c- düzlemli malzemeler için simetrik w taramalı FWHM'ler sıklıkla kusur yoğunluğunun kaba bir ölçümü için kullanılabilir. Hem polar olmayan hem yarıpolar oryantosyanlar için simetrik yansımaların w taraması FWHM'leri numune, düzlemde döndükçe periyodik olarak değişir [216]. Bu değişim M tipi veya W tipi olabilir. Bu büyütme şartlarına bağlıdır [217]. Bu MOVPE ve MBE için olduğu kadar HVPE için de olur. Bu anisotropik alttaş eğriliğine atfedilebilir. Düşük eğrilikli gövde malzemeler ve düşük kusur yoğunlukları için böyle bir şey yoktur[218]. Daha küçük kristal simetrisi önemli olabilir. Bunun nedeni kusurların ters örgü noktalarını genişletmesiyle anisotropi oluşturmastandır. Yüzey gerilmesinin gevşemesinin etkileri(delme derinlikleri farkıyla birleştiğinde) farklı yansımalar arasında w taraması FWHM'lerinde fark oluşturur. Sonuç olarak, polar olmayan ve yarıpolar oryantosyonlarda w taraması FWHM'leri kusur yoğunluklarının açık belirleyicisi değildir. Ama bazı istisnalar olabilir. Bunlar elektron mikroskopisi tabanlıdır. Eğer $gR=n$ şartı sağlandıysa kusurlar XRD'de görülmez. Bu yüzden polar olmayan ve yarıpolar GaN için 10-10 ve 20-20 yansımaları I1 ve I2 BSF'leri ile genişletilir. Vida simetrik geometride incelendiğinde bu durum geçerlidir ama 30-30 yansımaları bundan etkilenmez. FWHM'nin 30-30 yansımından yola çıkarak 10-10 ve 20-20 yansımaları BSF'lerin genişlemeye katkısının belirleyicisi olarak kullanılabilir. BSF yoğunluklarını belirlemek için 10-10 ve 20-20 yansımalarının William-Hall analizine dayanan bir teknik geliştirilmiştir [219]. Ama bu diğer kusurların yoğunluklarının önemli olduğu örneklerde başarılı değildir. Kusur yoğunluklarıyla ilgilenenler için ZnO ve ilgili malzemeler için yazılmış olanlar faydalı olabilir. Çünkü wurtsite ZnO yapıların nitritlere benzer kusur tipleri vardır [220].

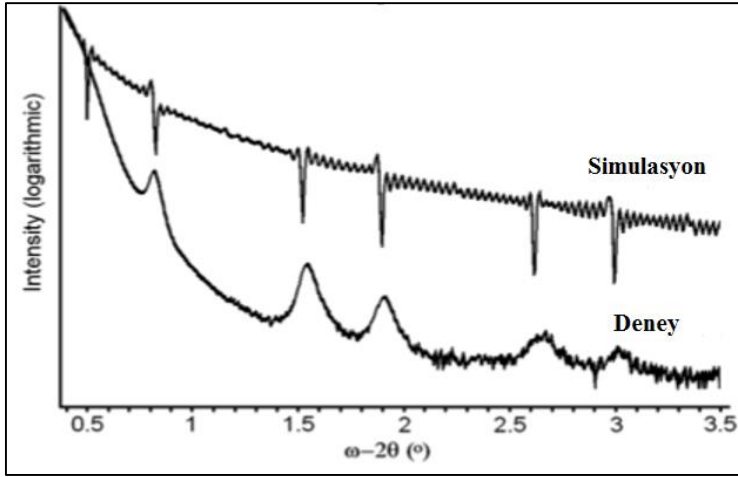
2.20.3. Quantum kuyuları

Büyük kusur yoğunlukları ve yüzey pürüzlülüklerine rağmen, polar olmayan ve yarıpolar cihazlar yine de yapılabilir. Tipik olarak quantum kuyuları bu yapılardandır. Düşük kusur yoğunluklu malzemeler için çok yüksek iç quantum verimi mümkündür. Oldukça şaşırtıcı olarak X ışını yansıması bariyerden-kuyuya kalınlık oranı R 'yi bulmak için kullanılabilir. Bu Xışını demeti yüzeye paralel olarak yönlendirildiğinde mümkündür [221].(Şekil 2.30). Bir $w-2\theta$ taramasında sıfırıncı dereceden maksimumun pozisyonu R ile belirlenir. Aynı zamanda kimyasal bileşik ve esneklik sabiti ile de belirlenebilir. R biliniyorsa, esneklik

sabitlerinin uygun bir koordinat sistemine dönüşümünden sonra bileşik sıfırıncı dereceden yansımanın pozisyonundan belirlenebilir.

2.21. Kübik III- Grubu Nitritler

Birçok III-grubu nitrit wurtsite (heksagonal) yapıda olmasına rağmen, meta kararlı zinc-blende(kübik) yapıda büyütülebilir. Bu yapının bant aralığı 3,2 eV gibi küçük bir değerdir [222]. NaCl yapıda GaN’da incelenmiştir, ama bu yapı kararsızdır ve indirek bant aralığına sahip olduğu tahmin edilmektedir. Bu özellik onu biraz pratik kullanımlı yapar, kübik faz denk olmayan büyütme teknikleri ve düşük büyütme sıcaklıklarıyla kararlı hale getirilebilir.



Şekil 2.30. Yarıpolar çoklu kuantum kuyusu yapısından küçük açılı X-ışını yansımaları [223]

100 yönelimli kübik III-grubu nitrit filmler ilgi alanı oluşturur, çünkü onlar pizoelektrik etki göstermezler. Bu yüzden wurtsite III-grubu nitritlerin polar olmayan ve yarıpolar oryantasyonlarına alternatif teşkil ederler. Üstelik atomik olarak pürüzsüz yüzeyleri 100 yüzeyli, kararlı 001 yönelimli kübik III-grubu nitritlerden ayırabilmenin anlamı onların laser yapılarda kullanılabileceğini gösterir. Zinc-blende yapı termodinamik olarak meta kararlı olduğundan tipik problem heksagonal malzemenin film içinde bulunmasıdır. Bir de Zinc-blende III-grubu nitritlerde kusur enerjisi azdır. Bu yüzden kübik malzeme genellikle yüksek yoğunluklu kusur içerir. Bu kusurlar [111] A ve [111]B düzleminde. Kübik III-grubu nitritler heteroepitaksiyel olarak büyütülebilir. Mesela, GaAs ve Si üzerine. Bu yüzden gerilme olabilir. XRD, gerilme durumunu analiz etmek için kullanılabilir.

2.21.1. Örgü parametreleri ve gerilme

Kübik filmlerin örgü parametreleri Şekil 2.11’de özetlenen prosedürle ölçülebilir. Ama farklı yansımalar ölçülmeli ve farklı denklemler kullanılmalıdır. Bunun nedeni ölçülen d_{hkl} değerleri ile birim hücre parametreleri arasında ilişki kurmaktır. Denklemin seçimi, gerilimi azalmış birim hücrenin ayrılmasına bağlıdır.

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \quad (\text{kübik}), \quad (2.54)$$

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (\text{tetragonal}). \quad (2.55)$$

Çizelge 2.16. Kübik III-grubu nitritlerin esneklik sabitleri(hesaplamalardan)

	C_{11}	C_{12}	C_{44}
AlN	304	160	193
	294	160	189
	313	168	192
	348	168	135
	304	152	199
	313	156	202
GaN	293	159	155
	285	161	149
	296	154	296
	274	166	199
InN	187	125	86

Tamamıyla gerilmemiş olan kübik filmler için a örgü parametresini bulurken verilen bir hkl yansımasından düzlemler arası boşluk d_{hkl} ’nin sadece bir kez ölçülmesi yeterlidir. Ama bu hiç gerilme olmadığını kabul etmek için yeterli değildir. Çift eksenli gerilmiş 100 düzlemlili kübik filmler için, kübik birim hücre tetragonal olarak ayrılmış hale gelir ve iç düzlem a ve dış düzlem c örgü parametrelerini elde edebilmek için en az iki farklı d_{hkl} ölçümü gerekir. Çift eksenli gerilmiş 111 yönelimli kübik filmler için kübik birim hücre rombohedral olarak ayrılmış hale gelir. Ama rombohedral bir birim hücreyi kullanarak gerilmiş filmi açıklamak

oldukça güçtür. Çünkü hem örgü parametreleri hem de birim hücrenin eksenleri arasındaki açı kübik birim hücreye göre değişir. Bu yüzden yansımaları ayrılmış 111 yönelimli kübik filminden indekslemek daha iyidir. Bunu daha büyük bir heksagonal birim hücre kullanarak yaparız. Bu durum, pik pozisyonlarındaki değişimlerle, heksagonal örgü parametreleri arasında ilişki kurmayı kolaylaştırır. Bu durumda en az iki farklı d_{hkl} ölçümü gerekir. Yüksek şiddetli yansımalar, d_{105} (heksagonal), $d_{(200)}$ kübik, d_{1-12} (heksagonal), $d_{(111)}$ kübik'i içerir. Her zaman olduğu gibi mümkün en yüksek 2θ açısında oluşan yansımalar, hataları azaltmak için kullanılmalıdır.

Kübik III-grubu nitritler, wurtsite III- grubu nitritlere göre genellikle daha küçük sıcaklıklarda büyütülür. Bunun nedeni termodinamik olarak kararlı wurtsite fazın görünümünü engellemektir. Böylece onlar daha az gerilmeli olmaya meyleder. Ama gerilme hala önemli olabilir. 100 yönelimli kübik filmlerdeki gerilmeyi bulabilmek için aşağıdaki bağıntılar kullanılabilir. Burada a_0 gerilmiş örgü parametresidir. c_{11} ve c_{12} kübik esneklik sabitleridir.

$$(a_{ölçülen}^{dik} - a_0) = -\frac{2\nu_{100}}{1-\nu_{100}} (a_{ölçülen}^{paralel} - a_0), \quad (2.56)$$

$$\text{Burada } \frac{2\nu_{100}}{1-\nu_{100}} = \frac{2c_{12}}{c_{11}} \quad (2.57)$$

$$\text{Ve } \nu_{100} = \frac{c_{12}}{c_{11}+c_{12}} \quad (2.58)$$

111 yönelimli kübik filmlerdeki gerilmeyi bulmak için, aşağıdaki bağıntılar kullanılabilir. Burada a ve c ölçülmüş örgü parametreleridir (ilkel olmayan heksagonal hücre için). c_{11} , c_{12} , c_{44} kübik esneklik sabitleridir.

$$\frac{(c_{ölçülen}-c_0)/c_0}{(a_{ölçülen}-a_0)/a_0} = -\frac{2\nu_{111}}{1-\nu_{111}}, \quad (2.59)$$

$$\nu_{111} = \frac{1}{2} \frac{c_{11}+2c_{12}-2c_{44}}{c_{11}+2c_{12}+c_{44}}. \quad (2.60)$$

Kübik III- grubu nitritler için esneklik sabitleri veya poisson oranı için deneysel veri yoktur. Bu yüzden hesaplanmış esneklik sabitleri c_{11} , c_{12} ve c_{44} Çizelge 2.16'da verilmiştir. Poisson oranı ve Young modülü farklı oryantasyonlardaki filmler için değişkendir. Çünkü III-grubu nitritler esneklik olarak anisotropiktir. Tipik olarak 111 yönelimli filmler 100 yönelimli filmlere göre daha katıdır.

Kesin gerilmeyi bulmak için referans örgü parametreleri kullanılır. 100 yönelimli filmler için gerilmemiş örgü parametresi a_0 gerekir. 111 yönelimli filmler için gerilmemiş heksagonal örgü parametreleri a ve c bilinmelidir. Burada $a_{\text{hex.}} = \sin 45 a_0$ (kübik) ve $c_{\text{hex.}} = 3d_{111}$ (kübik). Ama III- grubu wurtsite nitritler gibi referans örgü parametrelerini tam olarak tanımlamak mümkün değildir. Bunun nedeni dopant seviyelerindeki değişim, taşıyıcı yoğunlukları ve referans numunelerdeki yerel gerilmedir. Birkaç güvenilir referans örgü parametresi literatürde vardır. Kübik malzemeler için, her film için gerilmemiş örgü parametreleri bulunabilir. Bu tam bir Poisson oranı kullanılarak yapılabilir. İç düzlem ve dış düzlem kübik örgü parametrelerinin eşit olduğu biliniyorsa bu gerilmemiş örgü parametrelerini bulmamıza yardım eder. Alternatif bir metot ise farklı kalınlıklarda iki veya daha fazla film büyütme ve iç düzlem ve dış düzlem parametrelerinden ikisi eşit bulununcaya kadar işlem yapmaktır.

O zaman kübik alaşımların kompozisyonu, heksagonal malzemelerden daha kolay bulunabilir. Burada gerilmemiş örgü parametreleri kullanılır. Vegard kuralı kullanılarak bileşik ve gerilmemiş örgü parametreleri bulunabilir. Kübik III- grubu nitritler için referans örgü parametresi tam değerleri bilinmemektedir. Ama her son üyenin filmlerini büyütme ve gerilmemiş örgü parametrelerini elde etmek gerekmektedir. Bu bileşiği bulmak için Vegard kuralını kullanmadan önce yapılır. Hesaplanmış örgü parametresi değerleri kullanılmamalıdır. Çünkü bunlar geniş değişimler gösterir.

2.21.2. Kübik ve heksagonal fazların hacim kesirleri

III-grubu kübik nitritler meta kararlıdır ve heksagonal fazda olabilirler. Benzer olarak dengede olmayan şartlarda büyütülmüş kübik III-grubu nitritler kübik faz içerebilirler. XRD potansiyel olarak mevcut kristal fazlarını belirlemede faydalıdır. Örneğin kristolografik ilişkiler mümkün ikizleme ve hacim kesirlerini bulma XRD ile mümkündür. Ama bu iki yapı

arasındaki benzerlikten dolayı karışıktır. Heksagonal ve kübik olarak sıkı paketlenmeye dayanan wurtsite ve zinc-blende kristal yapılar mevcuttur. Bu yüzden bunlar III-grubu nitrit çift tabakalar bakımından farklıdır. Çok yakın 2θ açılarında ve herbir yapıdan olan birçok yansıma oluşur, mesela kübik 111 ve heksagonal 002 yansımaları. Farklı w ve χ 'deki diğer tek yansımalar faz belirlemesi için gerekir, diğer fazla ilişkili bir fazın oryantasyonu hangisinin dominant faz olduğunu gösterir.

İlk önce heksagonal 0001 oryantasyonlu bir faz düşünelim, bu faz kübik ve 111 oryantasyon içerikli olsun. Kübik 111 yansımasını, heksagonal 0002 yansımasından ayırt etmek zor olabilir. Ama bunlar bir RSM'de ayrılabilir. Bu Li ve arkadaşları [224] tarafından gösterilmiştir. 200 kutup şeklinden gelen ek bilgi kübik bir fazın olduğunu doğrulayabilir ve bir ikizleme verebilir. Alternatif olarak, benzer 2θ fakat farklı offsetli iki yansıma seçerek tek kutup şekli her iki fazda iç düzlem bilgisi verir. Bunlar kübik 311 ve heksagonal 11-22'dir. İkisi de 2θ yaklaşık 70 derecedir fakat offsetler yaklaşık 29 derece ve 58 derecedir. Kübik 200 ve heksagonal 10-12 yansımalarının şiddetleri kullanılabilir. Bu kübiklerin heksagonal fazlara oranını bulmak için uygun bir skalada yapılır. Bu büyütme şartlarını iyileştirmek için yeterli olabilir. Ama hacim kesirlerinin tam bir ölçüsünü elde etmeye çalışırken hemen hemen aynı gelme açılı iki yansıma kullanmak uygun olur. Bunun nedeni şiddet düzeltmelerini minimize etmektir. İki faydalı çift, kübik 311 ve heksagonal 10-14 yansımaları ve kübik 200 ve heksagonal 10-11 yansımalarıdır. Pik şiddeti şu bağıntıyla verilir.

$$I = I_0 m V |F_{hkl}|^2 N^2 L P e^{-2M}, \quad (2.61)$$

Burada I_0 gelen X ışını şiddeti, M çoklu V hacim faktörü, F_{hkl} yapı faktörüdür. N , birim hacim başına düşen birim hücre sayısıdır, L , Lorentz faktörüdür, P , polarizasyon faktörü, e^{-2M} sıcaklık faktörüdür. Bu faktörlerin birçoğu, benzer 2θ açılı iki yansıma seçildiği zaman sabit tutulur. Çokluluk ve yapı faktörünü hesaba kattığımızda, piklerin integre edilmiş şiddetlerinin oranı, var olan kübik ve heksagonal fazların oranının açık bir belirlenmesini verir. Ama, eğer kübik faz film-yüzey arayüzünde konsantre ise farklı χ değerlerinde delme derinliklerindeki fark, farklı çift yansılardan farklı sonuç verebilir. Heksagonal içerikli 001 yönelimli kübik filmler için analiz daha karmaşıktır. Simetrik w - 2θ taramaları sadece 001 oryantasyonlu kübik fazı gösterir. Çünkü kübik ve heksagonal fazlar (111)/(001)

düzlemlerinde kusurlarla ilişkilidir. $w-2\theta$ taramaları göstermese de, heksagonal faz mevcut olabilir [225]. Burada heksagonal 10-11 yansıması kübik 002 yansımasından yaklaşık 7 derece farklıdır, bu yüzden kutup şekilleri saçılma vektörünün bir haritası bir RSM veya rocking eğrileri heksagonal fazın varlığını göstermek için kullanılabilir. Morfoloji, heksagonal içeriğin üzerine kübik olarak büyütülmüş ve baskın olarak kübik olan filmde çok karmaşık olabilir. Bu karmaşık ilişkileri anlayabilmek için ilave kutup şekilleri gerekir. Q'nun yazısındaki harita heksagonal içerikli temel kübik fazı gösterir ve ilave kübik ikizlerden daha zayıf pikleri gösterir. Faz belirlemesi için, heksagonal 10-11 şiddet oranı malzemenin heksagonal/kübik oranını göstermek için kullanılır [226]. Bu genellikle büyütme şartlarını iyileştirmek için yeterlidir. Belirleyici iş için yapı faktöründe, hacim faktöründe ve multiplisitede uygun düzeltmeler yapılarak Eş. (2.61) kullanılmıştır. Önceden anlatıldığı gibi heksagonal/kübik oranı yansımaları toplayarak, multiplisiteler, saçılma faktörleri ve hacimlerdeki fark hesaba katılarak elde edilebilir. Eğer sadece bir faz analiz edilecekse, sadece o yapıya özgü bir yansıma bulunmalıdır. Mesela heksagonal ve kübik GaN'ın toz kırınım modellerinin kıyaslanması gösterir ki kübik 200 ve heksagonal 10-12 yansımaları önemli ölçüde farklı 2θ değerlerinde oluşur. Bu yüzden kübik fazın iç düzlem oryantasyonu, kısmi bir kutup şekli gösterilerek bulunabilir. Burada difraktometre kübik 200 yansıması için 2θ 'ya ayarlı olmalıdır. Bu tip analiz, kübik fazda bir ikizleme verir. Heksagonal fazdan gelen piklerden kaynaklanan karışıklık olmadan bunu yapar. Her iki fazın iç düzlem oryantasyonu bir dedektör penceresiyle ölçülebilir. Bu pencere her fazdan gelen yansımayı yakalayacak şekilde büyük olmalıdır. Mesela kübik 311 ve heksagonal 11-22 gibi. Herres ve arkadaşları, 10-12 heksagonal ve 200 kübik yansımaları civarında ϕ taramalarından elde edilen şiddetleri kübik/heksagonal oranını görüntülemek için kullandı. Ama her iki fazın hacim kesrini tam olarak almaya çalışırken hemen hemen aynı gelme açılı iki yansıma almak iyidir. Böylece toplam şiddetler düzeltmeye gerek kalmadan kıyaslanabilir.

2.21.3. III-grubu nitritlerde kusur belirlenmesi

Kübik GaN'ta bulunan temel kusurlar, $[111]A$ ve $[111]B$ bulunan kusurlardır. Burada dislokasyonlar da bulunabilir. Kusurlar filmlerdeki gerilmeyi rahatlatılabilir. Tozların veya polykristal malzemelerin kusur analizleri iyi yapılmıştır. Ama III-grubu kübik nitritlerin kusur analizi hakkında az çalışma yapılmıştır. W taramalı FWHM kusur yoğunlukları için

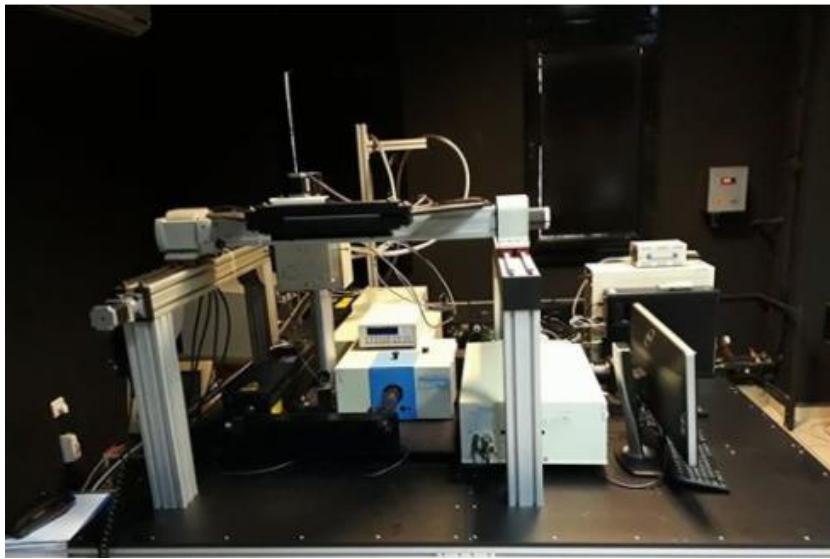
kullanılmıştır [227]. (111) w-2 θ FWHM bir de <111> doğrultusunda korelasyon uzunluğunun belirleyicisi olarak kullanılabilir. Genişlemenin diğer kaynakları için düzeltildiğinde kusurlar arası ortalama uzaklığın bir ölçüsünü verebilir. Kusurlar, oldukça zayıf gerilme alanı ile çevrilidir. Öyleyse dislokasyonlar veya diğer kusurların varlığı FWHM’de önemli değişiklere sebep olabilir.

III-grubu nitrit filmlerin analizinde XRD tabanlı teknikler, kesin örgü parametresi belirleme metotlarını içerir. Aynı zamanda QW’lerin ve çok katmanlıların analizini de içerir. Düzgün olmayan tabaka kalınlıkları ve bileşik hesaba katılmalıdır.

Alaşım filmlerin örgü parametrelerinde gerilme ve bileşiklerin etkilerinin ayrılması da incelenmiştir. Ancak sonuçların tutarlılığı esneklik sabitleri ve referans örgü parametrelerinin tam bilinmesiyle mümkündür. Dislokasyon yoğunluklarında w taramaları önemli bir rehberdir. Ama alttaş gerginliği ve dislokasyon bükülmesi FWHM’yi önemli ölçüde etkiler. Gelişmekte olan araştırma alanları, III-grubu nitrit yapıları, kübik GaN gibi malzemeleri içermektedir.

2.22. Optik Özellikler

2.22.1. Fotolüminesans (PL)



Resim 4.1. Foto lüminesans ölçüm cihazı

Foto lüminesans ölçümleri(PL), Jobin Yvon Fluorolog-550 PL sistemi kullanılarak yapılmıştır. Burada 50 mW HeCd laser ($\lambda = 325$ nm) ışık kaynağı kullanılmıştır. Ölçümler oda sıcaklığında yapılmıştır.

Bir malzeme ışık kullanılarak uyarılabilir. Bir foton bir atomun elektronuna çarptığında, bu elektron daha üstteki bir enerji seviyesine uyarılır. Maddeler kararlı olmayı tercih ettiklerinden dolayı, bu üst seviyeye çıkan elektron doğal olarak temel seviyeye geri döner. Ekstra enerji farklı bir foton olarak salınır. Bu fiziksel olay foto lüminesans (PL) olarak adlandırılır. Salınan fotonun enerjisi tam olarak iki seviye arasındaki enerji farkına eşittir. Bu enerji aralığı PL piklerini kullanarak hesaplanabilir.

2.22.2. Geçirgenlik



Resim 4.2. Geçirgenlik ölçümlerinin yapıldığı cihaz

Bu çalışmada, optik geçirgenlik ölçümleri UV-Vis spektrometrenin (Lambda 2S, Perkin Elmer) oda sıcaklığında ve 200-1100 nm aralığında yapılmıştır. Geçirgenlik, malzemeden geçen ışığın şiddetinin malzemeye gelen ışığın şiddetine oranı olarak tanımlanabilir ($T=I/I_0$). Geçirgenlik ve yansıma malzemenin soğurma ve kırılma özelliklerine bağlıdır. Optik geçirgenlik ölçümleri, optik soğurma katsayıları ve bazı safsızlıkların belirlenmesinde kullanılır. Safsızlıklar optik ölçümlere denk gelir. Bazı safsızlıklar titreşimsel modlar yüzünden karakteristik çizgilere sahiptir. Mesela InGaN'daki Ga ve N gibi. Yarıiletkenlerde soğurulan bir foton bazı titreşimlerin etrafında ve bazı safsızlıkların etrafında yerel

titreşimsel modlara sahiptir [237]. Geçirgenlik ölçümleri sırasında, foton numuneye gelir ve geçirgenlik dalgaboyunun bir fonksiyonu olarak ölçülür. Yarıiletkenin bant aralığı, foton enerjisinin fonksiyonu olarak soğurma katsayısının ölçümü ile belirlenebilir. Bant aralığından daha büyük enerjiye sahip fotonlar soğurulur [238].

2.22.3. FTIR



Resim 4.3. FTIR ölçümlerinin yapıldığı cihaz

Düşük ışık enerjisinin bir problem teşkil ettiği durumlarda Fourier dönüşüm spektroskopisi spektrumlar elde etmek için oldukça başarılı bir yöntemdir. InGaN ve GaN için optik FTIR spektrumları bir Bruker Vertex 80 IR spektrometresi ile $7500-400\text{ cm}^{-1}$ aralığında ölçülmüştür. FTIR geçirgenlik ölçümleri FTIR spektrumunda girişim saçakları oluşturur. Buna ilave olarak geçirgenlik ölçümleri $4000-400\text{ cm}^{-1}$ aralığında ATR ile yapılmıştır. ATR metodunda EWs kullanıldığı için bunlar yüzeydeki fononları direkt olarak uyurabilir ve LO ve TO optik fononlarının gözlenmesini sağlayabilir [30].

2.22.4. Raman

Raman saçılması, ışık moleküler titreşimlerle etkileştiği zaman oluşur. Bu daha çok bilinen kızılötesi soğurma spektroskopisi ile benzerdir ancak farklı kuralları vardır. Raman etkisinin oluşabilmesi için titreşim sırasında bir moleküler polarizite değişimi gerekir. Raman spektrumunda kızılötesinde bulunmayan bazı titreşimler görürüz. Bunun nedeni farklı seçim kurallarıdır.

Raman spektrumunu elde etmenin ilk adımı numuneyi lazer gibi monokromatik bir ışıkla aydınlatmaktır. Saçılan birçok fotonun enerjisi değişmez. Buna Rayleigh saçılması denir. 10 milyonda bir foton enerji kaybeder ya da kazanır (Raman saçılması). Bu Raman kaymasının oluşmasının sebebi fotonların moleküler titreşimlerle enerji alışverişinde bulunmasıdır. Enerji kaybedilmesi durumuna STOKES, enerji kazanılması durumuna ANTİ-STOKES denir.

Gönderilen fotonların enerjisindeki değişim molekülün titreşim frekansına bağlıdır. Titreşim çok hızlıysa (yüksek frekans) hafif atomlar kuvvetli bağlarla bağlı demektir, bu durumda enerji değişimi önemlidir. Eğer titreşim yavaşsa (düşük frekans), ağır atomlar zayıf bağlarla bağlıdır. Bu durumda enerji değişimi küçüktür.

Bu tez çalışmasında numunelerin Raman spektroskopisini elde etmek için Gazi Üniversitesi Eczacılık Fakültesinde bulunan Imaging (Micro Publisher 5.0 RTV) marka Raman spektroskopi cihazı kullanılmıştır (Resim 4.4).



Resim 4.4. Raman Spektroskopi Cihazı (Imaging Micropublisher 5.0 RTV)

2.23. Morfolojik Özellikler

2.23.1. AFM

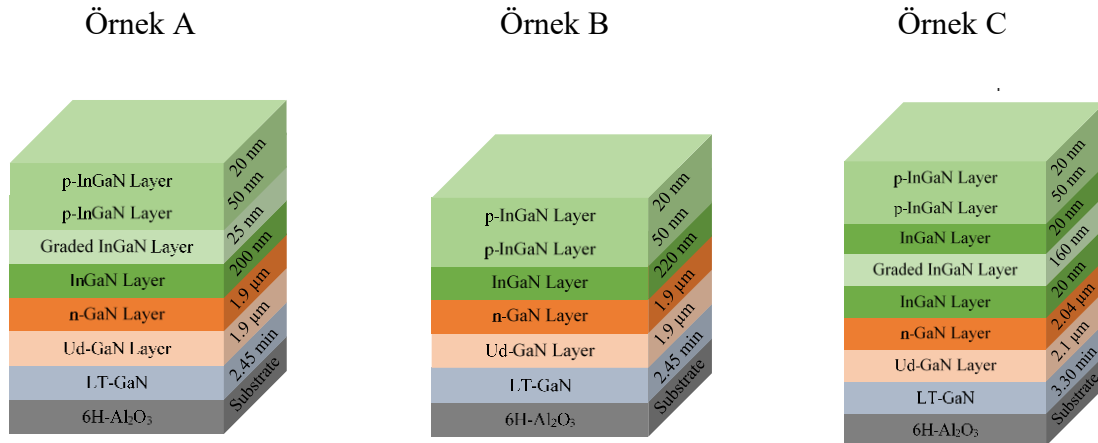
Numunelerin morfolojik özellikleri yüksek performanslı Atomik kuvvet mikroskopunun dinamik tarama modu kullanılarak yapıldı. AFM görüntüleri InGaN ve GaN güneş pili yapılarının yüzey morfolojisinin iyi bir belirleyicisidir.

2.23.2. SEM

Numunelerin yüzey morfolojisi taramalı elektron mikroskopisi (SEM) ile de belirlenebilir. SEM diğer optik mikroskoplara göre daha iyi çözünürlük ve daha yüksek büyütme oranına sahiptir (25×10^3). Elektron kaynağından salınan elektronlar hızlandırılıp numune yüzeyine çarparlar. Bu elektronlardan bazıları esnek çarpışmalarla yansır ve bazıları da esnek olmayan çarpışmalarda ikincil elektronlara sebep olur. Bu ikincil elektronlar SEM görüntüsü oluşturur.

3. DENEYSEL YÖNTEM

Trimetilgalyum (TMGa), Trimetilindiyum (TMIn) ve amonya sırasıyla Ga, In ve N'a ayrıştırılır. Bu ayrıştırma MOCVD reaktöründe (Aixtron 200/4 HT-S) düşük basınçlarda ve düşük sıcaklıkta GaN (LT-GaN) tabakalar, TMGa, Trimetilaliminyum (TMAl) ve amonya (Bu gazların transferi yüksek sıcaklıkta H kaynağı kullanılarak oluşturulmuştur) kullanılarak Al_2O_3 alttaşın üzerine InGaN yapı büyütülmüştür. Üç çeşit numune oluşturulmuş ve bunlar Örnek A, B, C olarak isimlendirilmiştir. Epitaksiyel büyütme işleminden önce, Al_2O_3 alttaş 10 dakika 1100°C azot atmosferinde tavlânır. Bu işlem üzerindeki oksit tabakayı kaldırmak için yapılır. İlk adımda düşük sıcaklıktaki GaN(LT-GaN) tabakanın amacı örgü uyumsuzluğunu gidermek içindir. Bütün numuneler LT-GaN tabakalarını farklı kalınlıklarda içermektedir (Şekil 1). Sonra beş tane GaN tabaka katkısız olarak 200 mbar sabit basınçta dislokasyonları azaltmak için büyütülür. Bütün bu durumlar her üç numune için de geçerlidir. Örnek A'da 2,45 dakika LT-GaN, beş katkısız GaN(toplamda $1,9\ \mu\text{m}$), $1,9\ \mu\text{m}$ n-GaN, 200 nm InGaN, 25 nm dereceli InGaN, 50 nm p-InGaN ve 20 nm kalınlığında p-InGaN tabaka büyütüldü. Örnek C için, 3,30 dakika LT-GaN, beş tabaka katkısız GaN(toplamda $2,1\ \mu\text{m}$), $2,04\ \mu\text{m}$ n- GaN, 20 nm InGaN, 160 nm dereceli InGaN, 20 nm InGaN, 50 nm p- InGaN ve 20 nm kalınlığında p-InGaN tabaka büyütüldü.



Şekil 3.1. $6\text{H-Al}_2\text{O}_3$ alttaş üzerine büyütülen farklı tampon tabakalara sahip LT- GaN epitabakalar

Kontakları oluşturmak için, Leybold Univex Electron Beam Evaporation metalizasyon sistemi kullanılmıştır. Ti (10 nm)/Al (20 nm)/ Au (20 nm) alaşımları n- tarafı için kullanılmıştır ve Ni(40 nm)/ Au(150 nm) alaşımları p tarafı kontaklar için kullanılmıştır. Metal deposizyon sürecinde n tarafı ve p tarafı kontaklar sırasıyla 550°C ve 530°C 'de 1-1,5 dakika tavlânmıştır. InGaN güneş pili için büyütme koşulları Şekil 3.1'de verilmiştir.

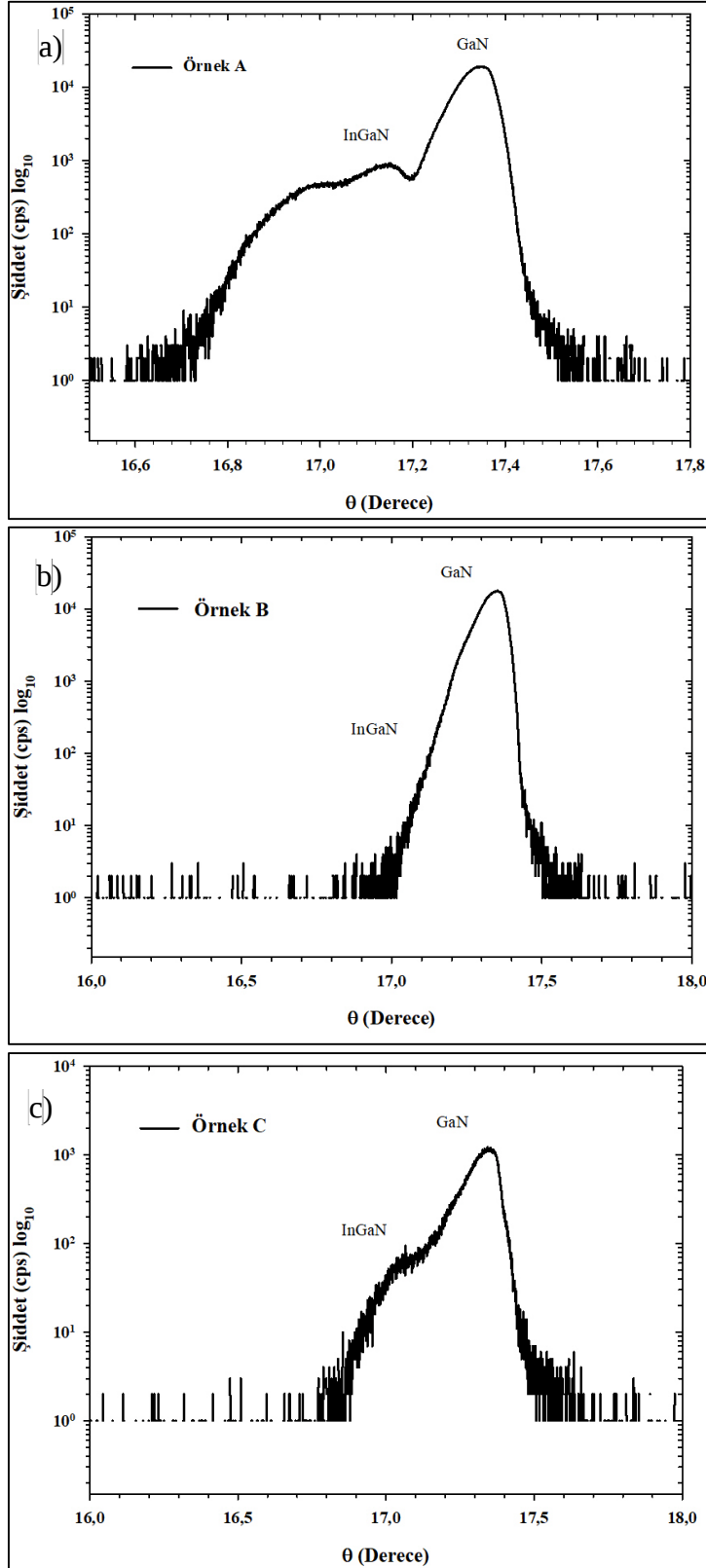
Çizelge 3.1. Büyütme Şartları

Numune-C	p-InGaN tabaka (2) t~20 nm
	p-InGaN tabaka (1) t~50 nm
	InGaN tabaka (1) t~20 nm
	Dereceli InGaN tabaka t~160 nm
	InGaN tabaka (1) t~20 nm
	n-GaN tabaka t~2,04 µm
	ud-GaN tabaka (5) t~1.7 µm
	ud-GaN tabaka (4) t~2 min
	ud-GaN tabaka (3) t~1 min
	ud-GaN tabaka (2) t~2 min
	ud-GaN tabaka (1) t~10 sec
	LT GaN NL (3,30 min)
Numune-B	p-InGaN tabaka (2) t~20 nm
	p-InGaN tabaka (1) t~50 nm
	InGaN tabaka (2) t~20 nm
	Dereceli InGaN tabaka t~160 nm
	InGaN tabaka (1) t~20 nm
	n-GaN tabaka t~2,04 µm
	ud-GaN tabaka (5) t~1.7 µm
	ud-GaN tabaka (4) t~2 min
	ud-GaN tabaka (3) t~1 min
	ud-GaN tabaka (2) t~2 min
	ud-GaN tabaka (1) t~10 sec
	LT GaN NL (3,30 min)
Numune-A	p-InGaN tabaka (2) t~20 nm
	p-InGaN tabaka (1) t~50 nm
	InGaN tabaka t~220 nm
	n-GaN tabaka (6) t~1,9 µm
	ud-GaN tabaka (5) t~1.5 µm
	ud-GaN tabaka (4) t~2 min
	ud-GaN tabaka (3) t~1 min
	ud-GaN tabaka (2) t~2 min
	ud-GaN tabaka (1) t~10 sec
	LT GaN NL (2,45 min)

4. DENEYSEL BULGULAR VE YORUMLAR

4.1. XRD Analizi

Numunelerin XRD analizi (yüksek çözünürlüklü X-ışını kırınımı) HR-XRD D-8 Discovery cihazı ile yapılmıştır. Bu tekniğin normal XRD'ye göre avantajları: dört kristalli Gy monokromatöre sahiptir. Bu monokromatörün yönelimi (002)'dir ve bu monokromatör tek dalgaboylu yüksek çözünürlüklü pik kullanır. $K_{\alpha 1}$ ve $K_{\alpha 2}$ fonksiyonlarını birbirinden ayırır. $\text{CuK}_{\alpha 1}$ tüpü kaynak olarak kullanılır. Simetrik ve asimetrik düzlemlerde iyi kırınım şartları elde etmek için θ ve 2θ eksenlerinden başka. x , y , z , ϕ ve χ eksenleri kullanılmıştır.



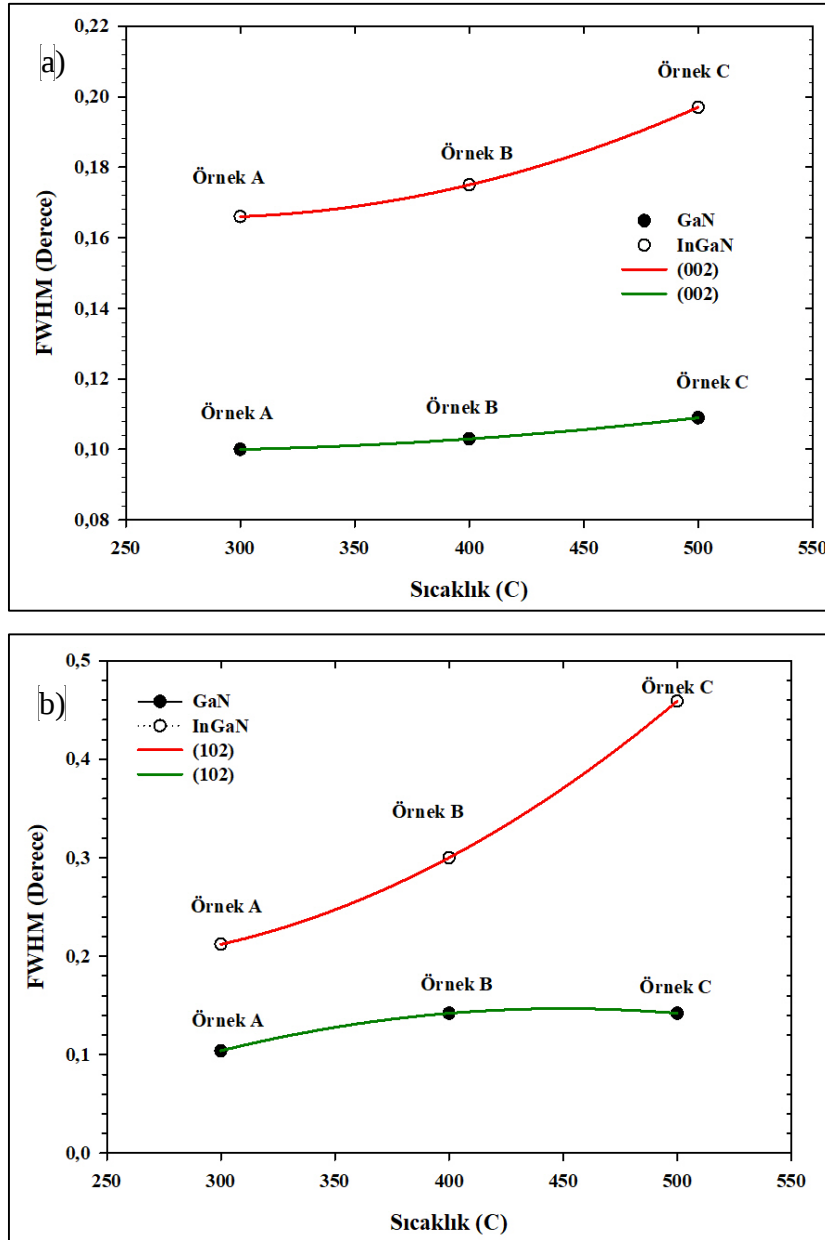
Şekil 4.1. Örnek A, B ve C'nin (004) Miller yansıma düzleminde HR-XRD roking eğrileri

Şekil 4.1 üç farklı numune için roking eğrilerini göstermektedir. A numunesi için GaN tepe pikinin solunda InGaN piki tam olarak ayrışmamıştır. Numune B için GaN pikinin solunda

InGaN pik belirgin değildir. Ama buradaki zayıf uydu pikleri açıkça görülebilir. Numune C için GaN tepe pikinin solunda InGaN piki hemen hemen belirgindir ama numune A'da olduğu gibi burada da tam ayrışmamıştır. Bu ayrışmamış InGaN piklerinin nedeni mikro yapısal kusurlar olabilir [233, 234]. Vegard yasasına göre alaşımdaki In oranı (x) şu formülle hesaplanabilir:

$$x = \frac{c(InGaN) - c_0(GaN)}{c_0(InN) - c_0(GaN)} \quad (4.1)$$

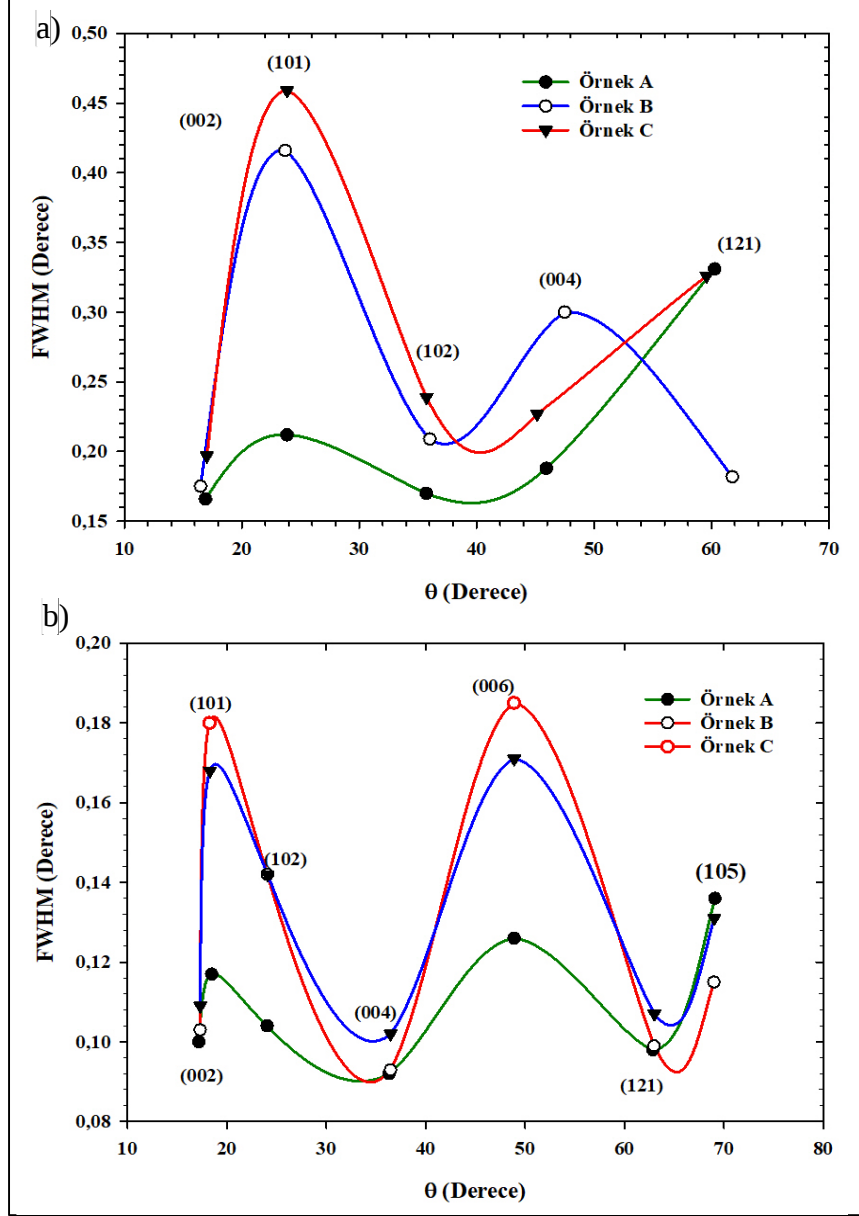
Bu formüldeki c- hesaplanmış örgü parametresi ve c_0 evrensel örgü parametresidir. In oranları sırasıyla numune A için, 0,105 ve 0,183, numune B için, 0,136 ve 0,249 ve numune C için 0,048 ve 0,207 olarak hesaplanmıştır. Birinci değer InGaN1 ve ikinci değer InGaN2 tabakaları içindir.



Şekil 4.2. (002) simetrik ve (102) asimetrik düzlemlerinde GaN ve InGaN tabakalar için FWHM'nin sıcaklığa göre değişimi

Şekil 4.2 A, B ve C numunelerinde simetrik (002) düzlemi ve asimetrik (102) düzlemi için FWHM'nin (Yarı pik yüksekliğindeki genişlik) sıcaklığa (T) göre değişimini göstermektedir. (002) simetrik düzlemi için, artan büyütme sıcaklıklarında GaN tabaka için FWHM değerleri InGaN tabaka için olduğundan daha azdır. GaN için FWHM'nin değişimi sıcaklık arttıkça artar. InGaN tabaka için FWHM değeri ise GaN tabaka için olduğundan daha fazla artar. (102) asimetrik düzlemi için 400°C 'ye kadar FWHM değeri önce artar sonra artan sıcaklıkla hafifçe düşer. InGaN tabaka için aynı düzlemde FWHM değerleri artan sıcaklıkla sadece artar. InGaN tabaka için hesaplanan değerler GaN tabaka için olduğundan

daha fazladır. InGaN tabakanın değerlerindeki artış GaN tabakaninkilerden %25 daha fazladır.



Şekil 4.3. Örnek A, B ve C'nin a) InGaN ve b) GaN tabakaları için (002), (101), (102), (004), (121), (006), (105) Bragg kırınım açılarına bağlı olarak FWHM değerleri

Bir de Şekil 4.3 (002), (101), (102), (004), (121) ve (006) düzlemlerindeki tüm taramaları temsil eder. Burada InGaN ve GaN tabakaların FWHM değerleri ve pik pozisyonları görülmektedir. Şekil.4.3 kullanılarak her üç numune için aynı düzleme ait FWHM değerleri kıyaslanabilir. InGaN tabakada FWHM değerleri B ve C numunelerinin (002) ve (004)

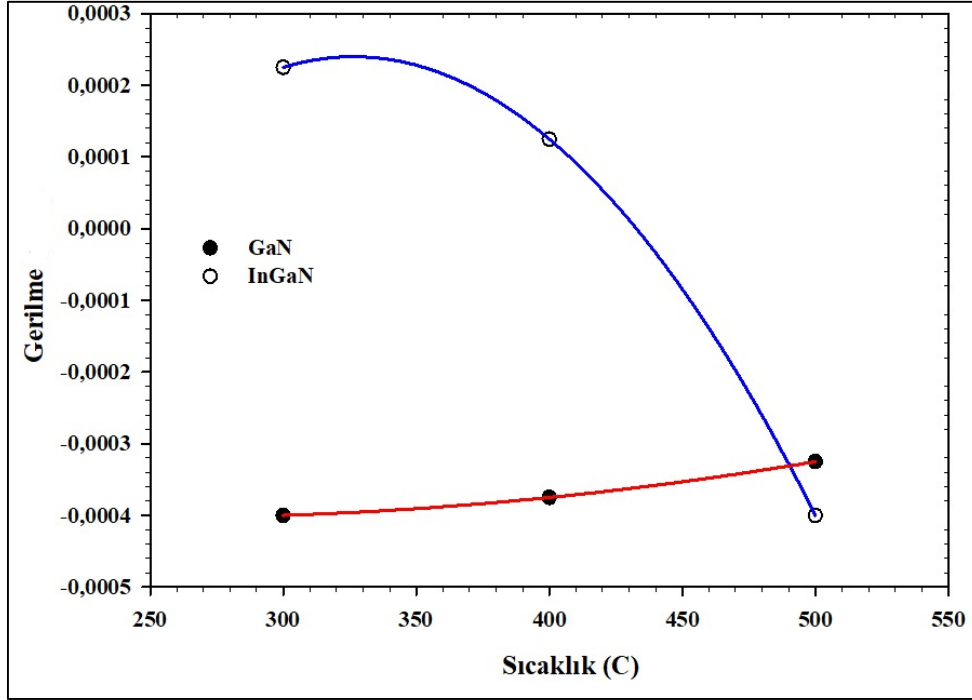
düzlemleri için birbirine yakındır. A numunesinde ise FWHM değerleri her iki düzlem için daha düşüktür. Her üç numunenin (102), (121) ve (006) düzlemleri için FWHM değerleri birbirine çok yakındır. GaN tabaka için (002) düzleminde FWHM değerleri her numune için (101) düzleminde olduğu gibi birbirinden farklıdır. (102) ve (004) düzlemleri için FWHM değerleri her üç numune için de birbirine yakındır.

4.1.1. Gerilme

Epi tabakadaki iç düzlem çift eksenli gerilme Eş. (4.2)'u kullanarak hesaplanabilir. Eğer çift eksenli stress bir yönelim boyunca biliniyorsa [229, 230].

$$\sigma_f = (c_{11} + c_{22} - 2 \frac{c_{13}^2}{c_{33}}) \varepsilon_a^b \quad (4.2)$$

Burada gerilme (ε_a^b) evrensel ve deneysel örgü parametrelerinin farkının deneysel örgü parametresine bölümü ile bulunur. Eş. (4. 2)'da parantezin içi eksenel modül olarak isimlendirilir (M_f). Böylece çift eksenli gerilme şu formülle hesaplanabilir; $\sigma_f = M_f \varepsilon_a^b$ [229]. Bütün numuneler için hesaplanan çift eksenli gerilmeler Şekil 4.4'te gösterilmiştir. Bu şekil sıcaklığa bağlı olarak çizilmiştir. Çift eksenli gerilme özellikleri GaN tabaka için artan davranış gösterir ama InGaN tabaka için artan sıcaklıkla azalır.



Şekil 4.4. GaN ve InGaN'dan oluşan yapılar için çift eksenli gerilmenin sıcaklığa bağlı değişimi

320°C'den sonra her tabaka için çift eksenli gerilme değeri farkı artan sıcaklıkla azalır. Çift eksenli gerilmenin değerlerindeki farklılıklar geniş bir sıcaklık aralığında görülür. Bu farklılıklar GaN ve InGaN'ın ısısal genleşme katsayılarının farklı olmasından kaynaklanır.

4.2. a-, c- Örgü Parametreleri, Gerilme Stres Analizleri ve Isısal Genleşme Katsayıları

MOCVD ile büyütülen InGaN/GaN yapılarının yapısal özellikleri yüksek çözünürlüklü X-ışını tekniği ile incelendi(HR-XRD). İncelenen (hkl)düzlemlerine göre a- ve c- örgü parametrelerinin küçük farklılıklar gösterdiği gözlemlendi. Bulunan a- ve c- örgü parametrelerinin hata hesapları da yapıldı. İncelemeler üç farklı numune üzerinde yapıldı. Her üç numune için de hata yüzdesinin %2'den küçük olduğu görüldü. Büyütme koşullarından kaynaklanan kristal kalitesi farklılıklarına her üç numunedeki de rastlandı. Aynı zamanda, kristal boyutu, gerilme ve stres gibi parametreler de belirlendi. Stresin belirlenmesi sırasında, esneklik sabitleri, Young modülü ve Poisson oranını da içeren iki farklı yöntem kullanıldı. Bu iki farklı metottan bulunan sonuçlar birbirleriyle kıyaslandı. InGaN'ın simetrik (002), (004), (006) ve asimetrik (121) düzlemleri için ısısal genleşme katsayıları hesaplandı. Bu hesaplamalar 100 °C sıcaklık farkı için yapıldı. HR-XRD'den elde edilen pik

pozisyonlarının veri tabanındakiyle yaklaşık aynı olduğu görüldü. Hesaplamalardan elde edilen bütün sonuçlar ilerleyen bölümlerde tablolar halinde verilmiştir. Elde edilen sonuçların daha önce farklı araştırmacıların çalışmalarının sonuçlarıyla ve gerçek değerlerle uyumlu olduğu görülmüştür.

4.2.1. Örgü parametreleri

HRXRD tekniğinde paralel demetteki $K_{\alpha 1}$ ve $K_{\alpha 2}$ piklerini birbirinden ayırabilmek için ve $K_{\alpha 2}$ 'yi elimine edebilmek için Goebel aynasıyla birlikte Ge 022 (+,-,-,+) monokromatör kullanılmıştır. Simetrik ve asimetrik yansımalarla birlikte, Bragg açısı θ ve örgü eğim açısı τ şu ifadelerle hesaplanabilir; $\theta=(\theta_++\theta_-)/2$, $\tau=(\theta_+-\theta_-)/2[228]$. Bozulmuş InGa_{1-x}N hexagonal birim hücresinin a- ve c- örgü parametreleri uygun (hkl) yansıma açılarıyla hesaplanabilir. Çizelge 4.1'de bazı düzlemlere karşılık gelen τ açıları verilmiştir.

Çizelge 4.1. (101), (102), (106), (121) düzlemlerine karşılık gelen τ açıları

(hkl)	τ (derece)
(101)	61,9599
(102)	43,1913
(106)	17,3763
(121)	78,6181

InGa_{1-x}N tabakasının örgü parametreleri Vegard yasası kullanılarak hesaplanabilir. x tane InN örgü parametresi ve (1-x) kere GaN gerçek örgü parametresinin toplamı ile bulunabilir. x numunelerdeki In içeriğidir. Bu içerikte yine Vegard yasası ile hesaplanır.

$$a_{InGaN} = (x)a_{InN} + (1-x)a_{GaN} \quad (4.3)$$

$$c_{InGaN} = (x)c_{InN} + (1-x)c_{GaN} \quad (4.4)$$

Eğer Eş. (4.1) ve (4.2)'nin son terimleri yerine Eş. (4.3) ve (4.4)'ten elde edilen değerleri kullanırsak deneysel değerlere ulaşırız. Eğer literatürdeki gerçek değerleri kullanırsak kesin değerlere ulaşırız. Hata hesabı ise bulunan bu iki değeri kullanarak yapılabilir. Kübik sistemi

referans olarak ve GaN tabakanın örgü parametrelerini belirlemek için $\sin\tau$ ve $\cos\tau$ düzeltme çarpanları Eş. (4.3) ve (4.4)'te kullanıldı.

$$c = \frac{\lambda l}{2 \sin \theta \cos \tau} \quad (4.5)$$

$$a = \frac{\lambda \sqrt{4/3} \sqrt{h^2 + hk + k^2}}{2 \sin \theta \sin \tau} \quad (4.6)$$

Yukarıda bahsedilen a- ve c- örgü parametreleri GaN ve InGaN tabakalar için Çizelge 4. 2, 4. 3 ve 4. 4'te verilmiştir. Bunlara ilave olarak gerçek a- ve c- değerlerini, a- ve c- 'nin ölçülen değerlerine karşı $\cos^2\theta/\sin\theta$ grafiğini çizerek bulunabilir. Bu grafik Şekil 4.5'de gösterilmiştir. Bu grafiğin Y eksenini kesme noktaları gerçek a- ve c- örgü parametrelerini verir.

Çizelge 4.2. GaN için örgü parametreleri

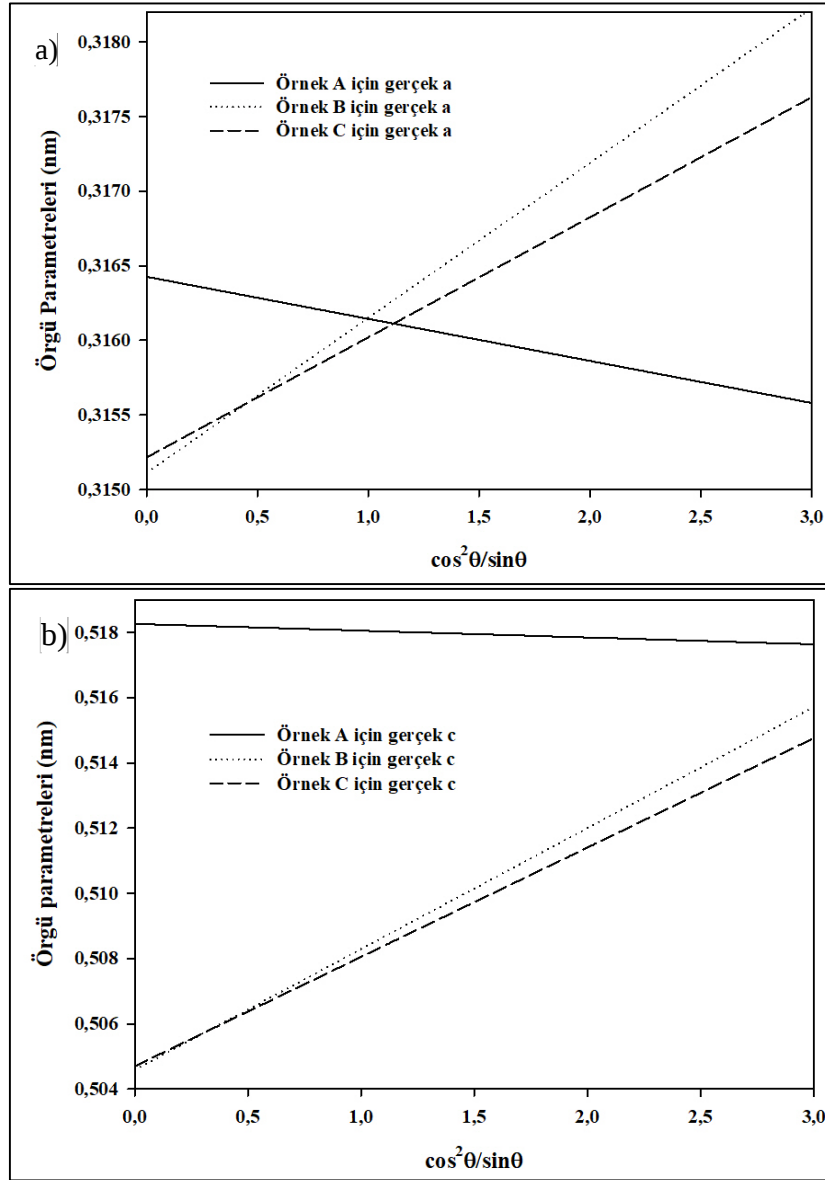
Örnek A			Örnek B		Örnek C	
(hkl)	c(nm)	a(nm)	c(nm)	a(nm)	c(nm)	a(nm)
(101)	0,5172	0,3169	0,5161	0,3204	0,5150	0,3197
(102)	0,5184	0,3138	0,5108	0,3135	0,5104	0,3133
(121)	0,5179	0,3169	0,5071	0,3170	0,5070	0,3169

Çizelge 4.3. InGaN için örgü parametreleri

Örnek A						
(hkl)	a(kesin)(nm)	a(hesaplanmış)(nm)	%Hata(a)	c(kesin)(nm)	c(hesaplanmış)(nm)	%Hata(c)
(101)	0,3227	0,3207	0,60	0,5280	0,5270	0,19
(102)	0,3225	0,3180	1,41	0,5280	0,5279	0,01
(121)	0,3226	0,3171	1,72	0,5280	0,5275	0,09
Örnek B						
(hkl)	a(kesin)(nm)	a(hesaplanmış)(nm)	%Hata(a)	c(kesin)(nm)	c(hesaplanmış)(nm)	%Hata(c)
(101)	0,3237	0,3249	0,39	0,5314	0,5296	0,34
(102)	0,3237	0,3190	1,40	0,5314	0,5256	1,10
(121)	0,3237	0,3220	0,50	0,5314	0,5229	1,63
Örnek C						
(hkl)	a(kesin)(nm)	a(hesaplanmış)(nm)	%Hata(a)	c(kesin)(nm)	c(hesaplanmış)(nm)	%Hata(c)
(101)	0,3206	0,3214	0,24	0,5316	0,5265	0,97
(102)	0,3206	0,3152	1,64	0,5315	0,5228	1,68
(121)	0,3206	0,3187	0,58	0,5315	0,5201	2,21

Çizelge 4.4. GaN ve InGaN tabakalar için gerçek a- ve c- örgü parametreleri

	GaN	InGaN
	Gerçek -a(nm)	Gerçek- c(nm)
S.A	0,3164	0,5183
S.B	0,3151	0,5046
S.C	0,3152	0,5047

Şekil 4.5. Örnek A, B ve C'deki GaN ve InGaN tabakalar için $\cos^2\theta/\sin\theta$ 'nın örgü parametrelerine göre grafiği

4.2.2. Gerilme, stres ve kristal boyutu

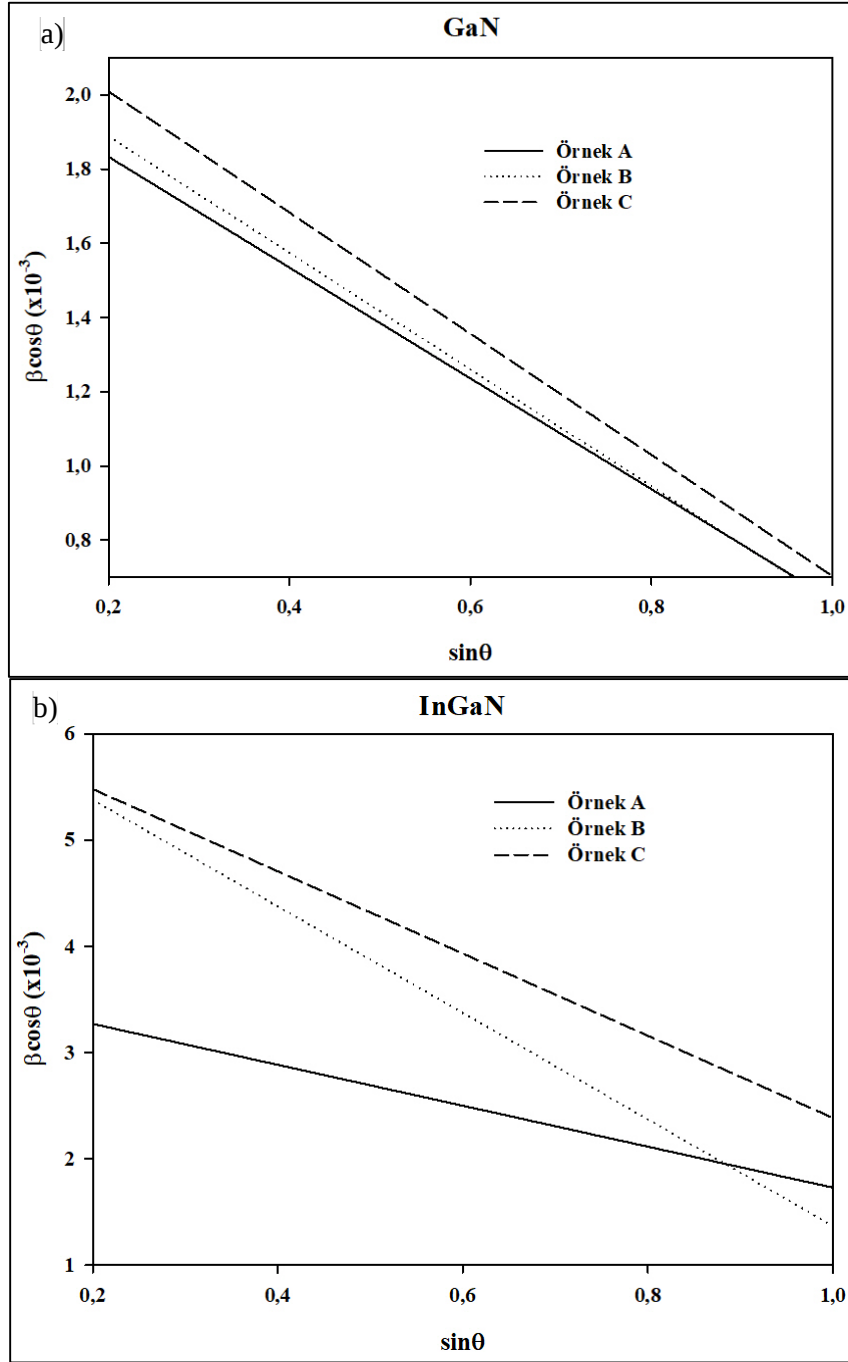
Gerilme ölçümlerinden stresi bulmak mümkündür. Eğer rotasyonel olarak bir simetrik gerilme durumu varsa stres gerilmeden hesaplanabilir [229]. Çift eksenli gerilme ϵ_a , stresle birlikte Eş. (4.7)'de verilmiştir.

$$\epsilon_a = \frac{\sigma^*(1-\nu)}{E} \quad (4.7)$$

Burada ϵ_a gerilme, σ^* stres, ν poisson oranı ve E Young modülüdür[230]. Esneklik sabitleri yardımıyla stress Eş. (4. 8) ile bulunabilir.

$$\sigma^* = (c_{11} + c_{12} - \frac{2c_{13}^2}{c_{33}})\epsilon_a \quad [230] \quad (4.8)$$

Eş. (4.7)'deki gerilme değeri (ϵ_a), $\sin\theta$ 'nın $\beta\cos\theta$ 'ya karşı grafiği çizilerek bulunabilir. Burada β modifiye edilmiş FWHM değeridir. Bu grafik Şekil 4.6'da gösterilmiştir. Bu grafiğin eğimi ϵ_a değerini verir. Grafiğin Y eksenini kesme noktası $k\lambda/L$ 'yi verir. Genellikle $k=1$ alınır. L ise kristal boyutudur [231].



Şekil 4.6. Örnek A, B ve C'deki GaN ve InGaN tabakalar için $\sin\theta$ 'nın $\beta\cos\theta$ 'ya karşı grafiği

Stres Eş. (4.7) ve (4.8)'den bulunur. Young modülü ve esneklik sabitleri kullanılarak bulunan stress değerleri birbirleriyle uyum içindedir. Sonuçlar Çizelge (4.5)'de özetlenmiştir. Bu çalışmada Young modülü 305, Poisson oranı 0,183 ve esneklik sabitleri C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} sırasıyla 390, 145, 106, 398 GPa olarak alınmıştır.

Çizelge 4.5. GaN tabakalar için Kristal boyutu, gerilme ve stress değerleri

	Örnek A	Örnek B	Örnek C
Gerilme (GPa)	-0,0015	-0,0016	-0,0016
Kristal boyutu (nm)	73,36	70,03	66,98
Young modülü ile stres(GPa)	-0,5599	-0,5973	-0,5973
Esneklik sabitleri ile stres(GPa)	-0,7178	-0,7656	-0,7656

4.2.3. Isısal genleşme katsayıları

Bir katının ısısal genleşme katsayısı 1 °C sıcaklık farkıyla boyda meydana gelen değişimdir. Termodinamikten bilindiği gibi ısıtılan her madde genleşir çünkü maddenin atomlarının enerjisi artar ve daha hızlı titreşirler. Bunun sonucunda birbirlerinden çok küçük ölçekte de olsa uzaklaşırlar. Aynı durum mevcut yapılar için de geçerlidir. Bu çalışmada da örnek A, B, C ısıttığımızda genleşir [15]. Örgü parametrelerindeki değişimin yardımıyla, ısısal genleşme katsayıları simetrik (002), (004), (006) ve asimetrik (121) düzlemleri için hesaplanmıştır. Sıcaklık değişimine göre örgü parametreleri Çizelge 4.6'da her üç örnek için de verilmiştir.

Çizelge 4.6 a) Örnek A için değişik sıcaklıklarda nm boyutunda c- örgü parametreleri

(hkl)	300 °C	350 °C	400 °C	450 °C
(002)	5,305565878	5,28229216	5,373110254	5,267880735
(004)	5,293512834	5,28381001	5,295430549	5,277142891
(006)	5,287514874	5,28456077	5,288110591	5,280896717

b) Örnek B için değişik sıcaklıklarda nm boyutunda c- örgü parametreleri

(hkl)	300 °C	350 °C	400 °C	450 °C
(002)	5,30645493	5,310133801	5,32701156	5,315456902
(004)	5,31336219	5,314826238	5,32174101	5,316132613
(006)	5,31631280	5,316973498	5,31884296	5,316605611

c) Örnek C için değişik sıcaklıklarda nm boyutunda c- örgü parametreleri

(hkl)	300 °C	350 °C	400 °C	450 °C
(002)	5,28386391	5,289526127	5,296216777	5,286450331
(004)	5,29109573	5,293751383	5,295883831	5,291714065
(006)	5,29385443	5,295677721	5,295606374	5,294052621

d) (121) düzlemi için değişik sıcaklıklarda Örnek A, B ve C'nin nm boyutunda a ve c örgü parametreleri

	Örnek A		Örnek B		Örnek C	
Sıcaklık(°C)	a	c	a	c	a	c
300	3,37166	5,27568	3,22032	5,22925	3,18724	5,20146
350	3,17134	5,27520	3,21966	5,22798	3,18534	5,19811
400	3,17365	5,27778	3,22210	5,23243	3,18952	5,20544
450	3,17331	5,27809	3,22107	5,23055	3,19065	5,20741

Isısal genleşme katsayıları Eş. (4.9) ve (4.10) kullanılarak hesaplanmıştır.

$$dl = l_0 \cdot \alpha \cdot dT \quad (4.9)$$

Burada dl sıcaklık farkıyla boyda meydana gelen değişme, l_0 genleşmeden önceki uzunluk, α ısısal genleşme katsayısı ve dT genleşmeye neden olan sıcaklık farkıdır. Eğer Eş. (4. 9)'da α yalnız bırakılırsa, ısısal genleşme katsayısını veren formül bulunur. Bu eşitlik Eş. (4.10)'da verilmiştir [232].

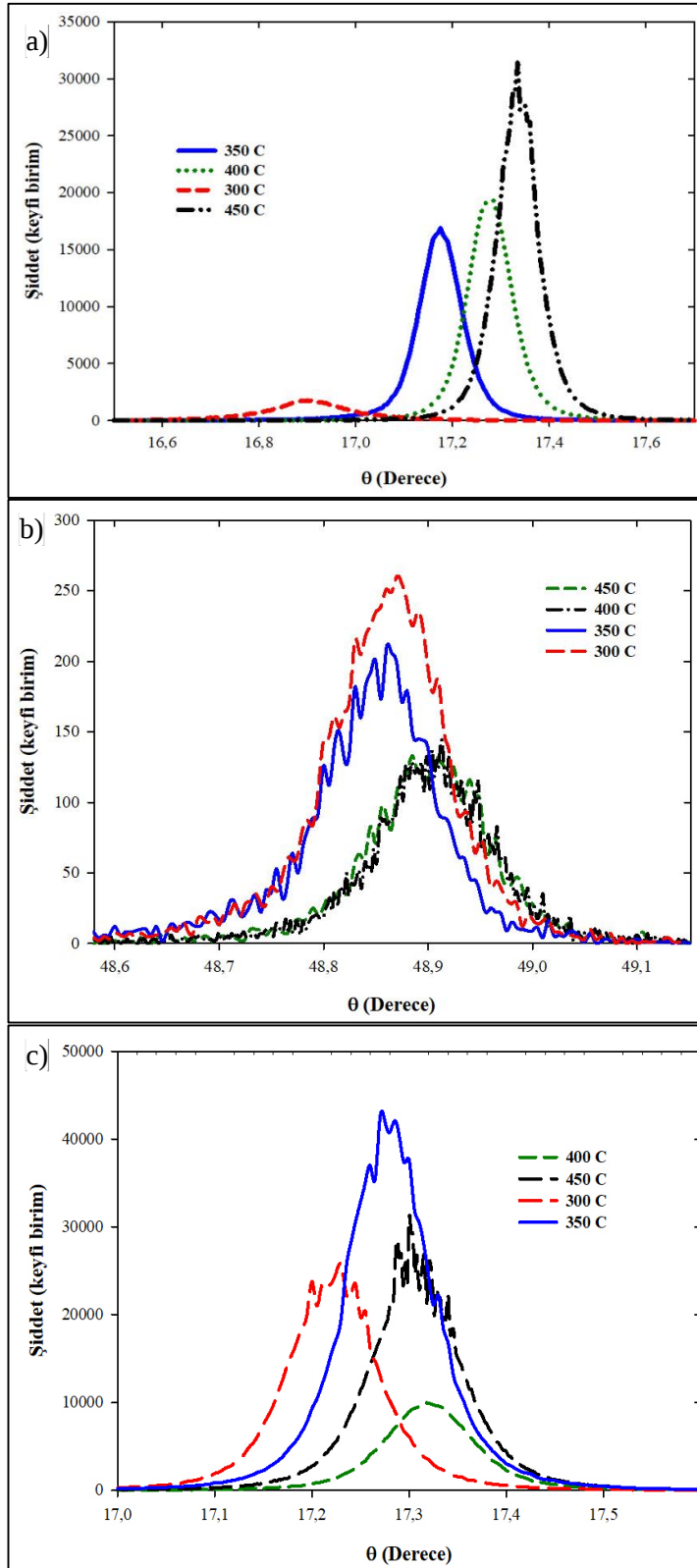
$$\alpha = \frac{1}{l_0} \frac{dl}{dT} \quad (4.10)$$

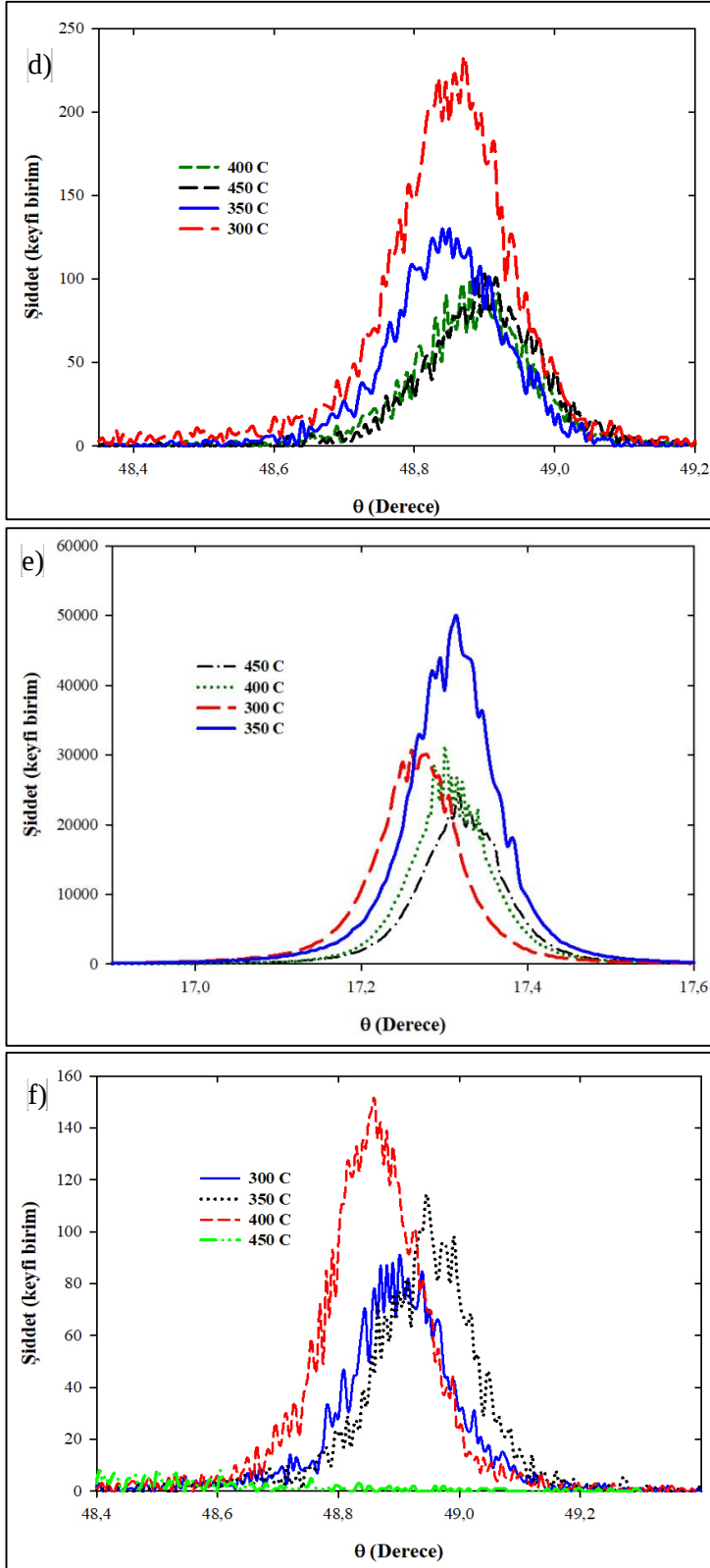
Farklı düzlemlerdeki ısısal genleşme katsayıları Çizelge (4.7)'de verilmiştir.

Çizelge 4.7. Örnek A, B ve C için farklı düzlemlerde ısısal genleşme katsayıları

Düzlem	α – Örnek A(1/°C)	α – Örnek B(1/°C)	α – Örnek C(1/°C)
c-002	1,42197E-05	3,87389E-05	2,33785E-05
c-004	3,62276E-06	1,57693E-05	9,04934E-06
c-006	1,12665E-06	4,75924E-06	3,30938E-06
c-121	3,99077E-06	6,08758E-06	7,65075E-06
a-121	6,26314E-06	5,44245E-06	7,13665E-06

Isısal genleşme katsayılarındaki farklılıkları daha detaylı anlatabilmek için Şekil 4.7'de pik pozisyonlarındaki kaymalar gösterilmiştir.



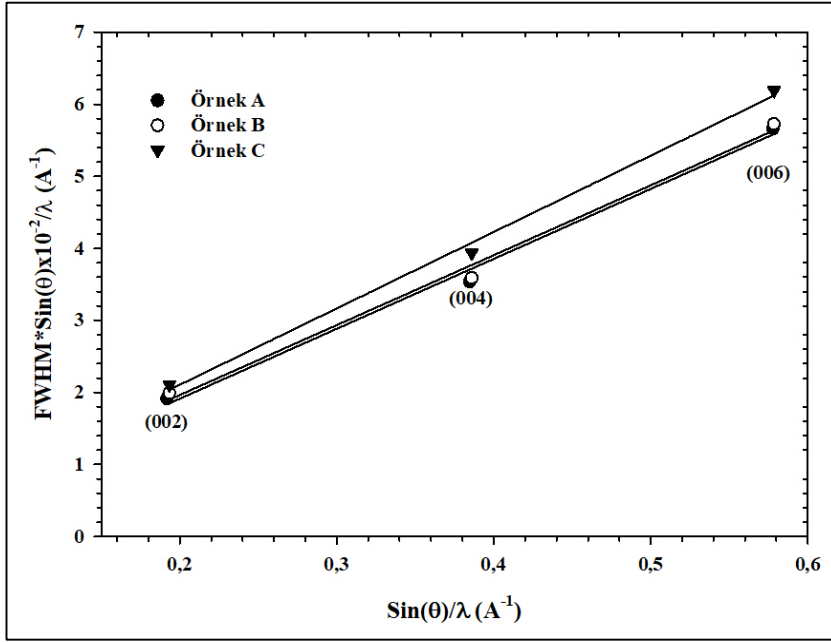


Şekil 4.7. a), b) Örnek A'nın GaN tabakası için (002) ve (121) düzlemlerinde pik pozisyonlarındaki kayma
 c), d) Örnek B'nin GaN tabakası için (002) ve (121) düzlemlerinde pik pozisyonlarındaki kayma
 e), f) Örnek C'nin GaN tabakası için (002) ve (121) düzlemlerinde pik pozisyonlarındaki kayma

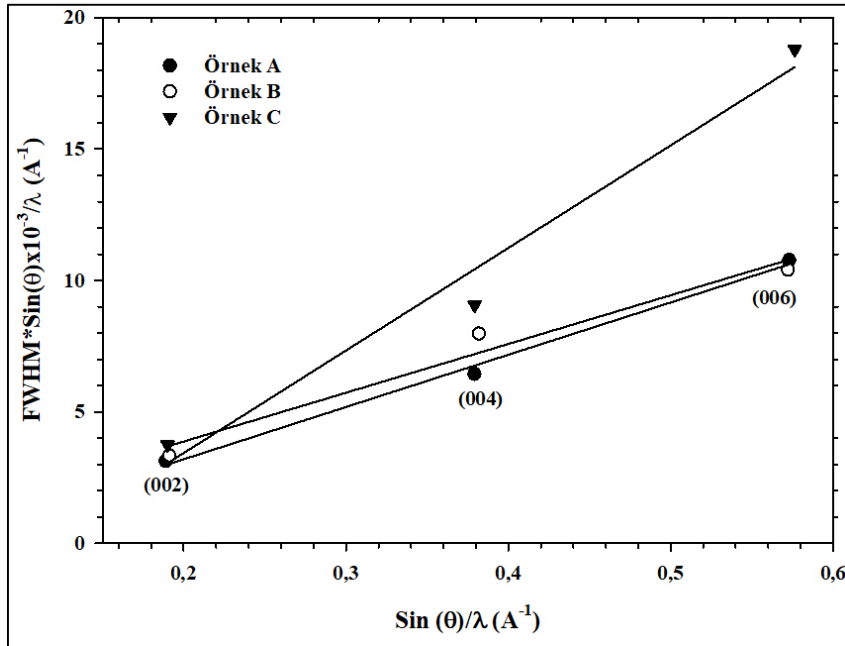
Bu şekiller sıcaklıktaki artmayla pik pozisyonlarında meydana gelen kaymaları göstermektedir. Bu kaymalar ısısal genleşme katsayılarında farklılıklara neden olur çünkü örgü genişlediğinde a- ve c- örgü parametreleri değişir. Şekil 4.7’de sadece simetrik (002) ve asimetrik (121) düzlemleri için pik pozisyonlarındaki kaymalar örnek olarak gösterilmiştir. Görüldüğü gibi (121) asimetrik düzlemi ile kıyaslandığında simetrik (002) düzlemi için pikler birbirinden daha fazla ayrılmıştır. (121) düzlemi için ısısal genleşme katsayısının diğer düzlemden 10 kat daha büyük hesaplanmasının nedeni budur. Bu sonuç Şekil 4.7’den kontrol edilebilir. Örgü parametrelerinin hesaplanmasında pik pozisyonları Eş. (4.3) ve (4.4)’ e göre büyük rol oynamaktadır. Farklı örnekler için hesaplanan ısısal genleşme katsayılarındaki farklılıklar mevcut yapıyı oluşturan kristallerin mükemmeliyetini tahmin etmek için kullanılabilir. Kusurların bir kısmı büyütme sırasında ortaya çıkmış olabilir.

4.3. Williamson Hall

Radyal doğrultuda simetrik yansımaların taranmasıyla, görüldü ki; c eksenini boyunca heterojen gerilme ve alt tabakaya paralel olan düşey kristal boyutu Bragg yansımalarında bir genişlemeye neden olur. Simetrik ve asimetrik taramalar için, gelen ve yansıyan dalga vektörleri z ekseninde bulunur. Bunlar yansıma düzlemini içerir. Yanal Kristal boyutu ve mozaik blokların eğimi simetrik kırılmalardan elde edilir. Bunlar z eksenine paralel olan HR-XRD pik eğrilerinde genişlemeye neden olur [232]. Bu iki etkinin katkısı yansıma düzleminin genişlemesinde doğrusal bağımlılık oluşturur. Bu durum her ikisinin etkisini ayırt etmek için kullanılır. Bunun için bir Williamson-Hall grafiği kullanılabilir (WH). Bu grafik doğrusal bir grafiştir. Bu grafik FWHM’yi yansıma açılarının bir fonksiyonu olarak kullandığımız doğrusal bir grafiştir. Bu yansıma açıları roking eğrilerinden elde edilir. Bu grafik $FWHM \cdot \sin(\theta) / \lambda$ fonksiyonunun $\sin(\theta) / \lambda$ ’ya karşı grafiğidir [235, 236].



Şekil 4.8. a) (002), (004), (006) düzlemlerinde kenar mozaik blokları için Örnek A, B ve C'deki GaN tabakaların Williamson-Hall grafiği



Şekil 4.8. b) (002), (004), (006) düzlemlerinde kenar mozaik blokları için Örnek A, B ve C'deki InGaN tabakaların Williamson-Hall grafiği

Şekil 4.8 (a) ve (b)'de GaN ve InGaN tabakaların (002), (004), (006) düzlemleri için WH grafikleri gösterilmiştir. FWHM ölçülen profilin toplam genişliğidir. λ ve θ sırasıyla X-ışınlarının dalgaboyu ve gelme açısıdır. WH grafiğinin eğimi düzlemin eğim açısını verir. Mozaik bloğun yanal uzunluğu ise ($L_{\parallel}$) fitin y eksenini kestiği noktadan bulunur. Bu fitler

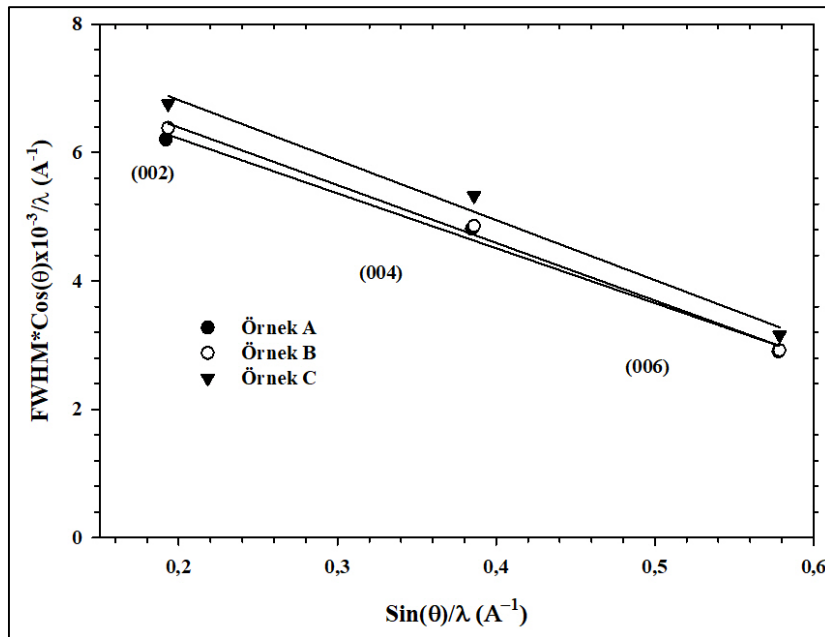
$y=y_0+a*x$ gibi bir doğru denklemi ile ifade edilir. A numunesinin InGaN tabakası için y_0 ve a değerleri sırasıyla (-4,37), (39), B numunesinin InGaN tabakası için (0,16), (18,55), C numunesinin InGaN tabakası için (-0,78), (19,89), A numunesinin GaN tabakası için (-0,0126), (10,59) ve B ile C numunelerinin GaN tabakası için (0,026), (9,7) olarak bulunmuştur. WH grafiğinin iki sınırlaması vardır. Birincisi, çok kristalize olma durumunda eğim sıfıra gider. İkinci sınırlama ise amorf yapıya sahip olma yani kristallikten uzak olma durumunda veya zayıf boyutlu çoklu kristal yapısında olma durumudur. Bu çalışmada zayıf kristal yapı, yanal ve düşey kristal uzunlukları iki sınır arasında belirlenmiştir. Çizelge 4.8’de elde edilen veriler görülebilir.

Çizelge 4.8 InGaN ve GaN tabakaların Eğim, Yanal uzunluk, Düşey uzunluk değerleri

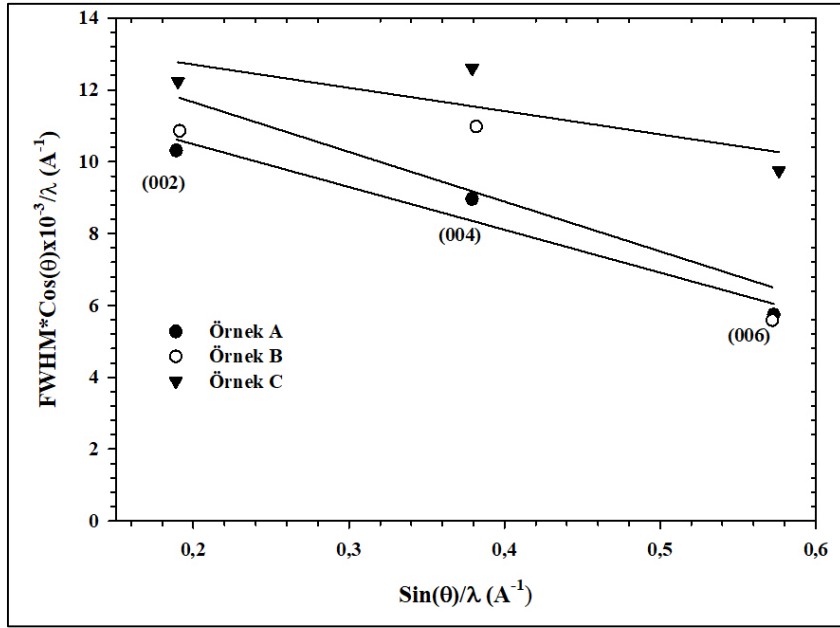
Sıcaklık (°C)	Örnek A			Örnek B			Örnek C			
	Eğim	Yanal (nm)(x10 ⁴)	Düşey (nm)(x10 ³)	Eğim	Yanal (nm)(x10 ²)	Düşey (nm)(x10 ³)	Eğim	Yanal (nm)(x10 ²)	Düşey (nm)(x10 ³)	
300	GaN	1,7	9	321,4	1,7	9	321,4	1,8	22,5	300
	InGaN1	4,2	9	264,7	5	9	450	6,8	5,63	187,5
	InGaN2	4,2	9	264,7	5	9	450	6,8	5,63	187,5
350	GaN	1,7	22,5	321,4	1,6	1,5	321,4	1,8	22,5	300
	InGaN1	3,8	22,5	204,5	4,3	9	225	6,8	5,63	187,5
	InGaN2	3,8	2,2	204,5	4,3	9	225	6,8	5,63	187,5
400	GaN	1,1	0,1	321,4	1,7	5	321,4	1,8	22,5	300
	InGaN1	5,4	5,6	450	3	6,4	150	6,8	5,63	187,5
	InGaN2	5,4	5,6	450	3	6,4	150	6,8	5,63	187,5
450	GaN	1,9	0,6	375	1,7	5	346	1,8	22,5	300
	InGaN1	2	5	150	3,1	75	166,6	6,8	5,63	187,5
	InGaN2	2	5	150	3,1	75	166,6	6,8	5,63	187,5
500	GaN	1,7	2,2	346	1,8	1,5	346	1,8	22,5	300
	InGaN1	4,7	11,3	195	3,1	225	180	6,8	5,63	188
	InGaN2	4,7	11,3	195	3,1	225	180	6,8	5,63	188

GaN tabakası için, A numunesi için eğim açıları 400 ve 450 °C için hariç bütün sıcaklıklar için hemen hemen aynıdır. 400 °C’de bir azalma ve 450 °C’de keskin bir artma vardır. B numunesi için eğim açısı değerlerinde artan sıcaklıkla önemli bir değişme yoktur. C numunesi için de durum aynıdır. GaN tabakanın yanal kristal uzunlukları artan sıcaklıkla dalgalanmalar gösterir. 350 °C’de keskin bir şekilde artar ve 400 °C’de tekrar keskin bir şekilde düşer. 450 ve 500 °C’de numune A için hafifçe artar. Numune B için yanal kristal uzunluğu değeri numune A için olduğundan daha yavaş değişir. Numune C için aynı değerler artan sıcaklıkla değişmez. Bütün numuneler için düşey kristal uzunluğu değerleri artan sıcaklıkla çok büyük farklılıklar göstermez. InGaN1 tabakası için, A numunesinin eğim açısı değerleri artan sıcaklıkla hafif dalgalanmalar gösterir. Numune B için de durum aynıdır. Numune C için eğim açısı değerleri artan sıcaklıkla değişmez. Yanal kristal uzunluğu

değerleri, 350 °C’de hızlı bir şekilde artar ve 400 °C’de birden düşer bu sıcaklık değerinden sonra hafifçe artar. Numune B için yanal kristal uzunluğu değerleri 450 ve 500 °C’de ani bir artma gösterir. Numune C için yanal kristal uzunluğu değerleri bütün sıcaklıklarda aynıdır. Numune A için düşey kristal uzunluğu değerleri 400 °C’de bir pik yapar diğer sıcaklıklarda çok önemli bir değişiklik göstermez. Numune B için düşey kristal uzunluğu değerleri çok fazla değişmez ancak 300 °C’de değeri maksimumdur. Numune C için düşey kristal uzunluğu değerleri artan sıcaklıkla değişmez. InGa_{0.2}N_{0.8} tabakası için eğim açısı değerleri numune A ve B için dalgalanan bir davranış gösterir ama numune C için bu değerler sabittir. Bu durumlar yanal kristal uzunluğu değerleri için de aynıdır. Düşey kristal uzunluğu değerleri numune A için 400 °C’de bir pik yapar ve değerler diğer sıcaklıklarda değişmez. Numune B için düşey kristal uzunluğu değerleri 300 °C hariç diğer sıcaklıklarda hemen hemen aynıdır. Numune C için ise düşey kristal uzunluğu değerleri bütün sıcaklıklarda aynıdır. Buna ilave olarak GaN tabakada yüzeye paralel olan mozaik blok uzunlukları InGa_{0.2}N_{0.8} için olanlardan daha büyüktür. Bu durum numunelerin çabuk soğutulmasından kaynaklanabilir. Bunun sonucunda tabakalar mozaik bloklar olarak oluşur. Aynı zamanda WH grafiğini çizerken, $FWHM \cdot \cos(\theta) / \lambda$ ’nın $\sin(\theta) / \lambda$ ’ya karşı grafiği düz bir çizgi verir. Bu grafiğin Y eksenini kesme noktası paralel mozaik blok uzunluğunu verir (y_0). $L_{\perp} = 0.9 / (2y_0)$ denklemini kullanarak $L_{\perp}$ ’i hesaplayabiliriz. $\epsilon_{\perp}$ stres değeri bu fitin eğiminin direkt olarak $4 \cdot \epsilon_{\perp}$ değerini vermesiyle hesaplanabilir [233, 234].



Şekil 4.9. a) Örnek A, B ve C’nin GaN tabakaları için (002), (004), (006) düzlemlerinde düşey mozaik boyutunun Williamson-Hall grafiği



Şekil 4.9. b) Örnek A, B ve C'nin InGaN tabakaları için (002), (004), (006) düzlemlerinde düşey mozaik boyutunun Williamson-Hall grafiği

Şekil 4.9'da GaN ve InGaN için WH grafikleri görülebilir. Bu doğrusal grafikler $y=y_0+a*x$ gibi bir doğru denklemi ile ifade edilebilir. Numune A'nın InGaN tabakası için y_0 ve a değerleri (14), (-6,4), numune B'nin InGaN tabakası için (14), (-13), numune C'nin InGaN tabakası için (12), (-11), numune A'nın GaN tabakası için (8,6), (-9,3), numune B'nin GaN tabakası için (8,1), (-8,9), ve numune C'nin GaN tabakası için (7,9), (-8,5) olarak bulunmuştur. Çizelge 4.8'de GaN tabakası için paralel kristal uzunluk değerleri görülebilir. Bu değerler artan sıcaklıkla hafifçe azalır ve artar. InGaN tabaka için bu değerler sürekli azalır ancak 400 °C hariçtir.

4.3.1. Kenar ve vida dislokasyonları

10^8 - 10^{12} cm^{-2} aralığındaki dislokasyonlar tedirgin edici dislokasyonlar olarak kabul edilir (TD). Safir üzerine büyütülen azot tabanlı tabakalar örgü uyumsuzluğundan dolayı tedirgin edici dislokasyon özelliği gösterir [234, 235].

Bu çalışmada, GaN ve InGaN tabakalar safir üzerine büyütüldüğünde büyük ölçüde tedirgin edici dislokasyon yoğunluğu özelliği gösterir. Bu gibi tabakaların üzerindeki dislokasyonların üç çeşidi vardır [20,23]. Bunlar Burgers vektörü ile verilen $\langle a \rangle$ kenar dislokasyonu, yine $\langle c \rangle$ Burgers vektörü ile verilen vida dislokasyonu ve $\langle c+a \rangle$ Burgers

vektörü ile verilen karışık tip dislokasyondur. Kristalleşme seviyesi ile ortaya çıkan sonuçları görebilmek için iki yöntem kullanılır. İlk metotta kenar (D_{Kenar}) ve vida (D_{Vida}) tipi dislokasyonlar epitaxial tabakalarda aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$D_{\text{screw}} = \frac{\beta_{(0002)}^2}{9b_{\text{screw}}^2}, D_{\text{edge}} = \frac{\beta_{(10-12)}^2}{9b_{\text{edge}}^2} \quad [17-21] \quad (4.11)$$

Burada β FWHM değeridir ve HRXRD roking eğrileri ile ölçülür. Kristallik durumunu belirler. (GaN için $b_{\text{Vida}}=0,5185$ nm, $b_{\text{Kenar}}=0,3189$ nm ve InGaN için $b_{\text{Vida}}=0,5198$ nm, $b_{\text{Kenar}}=0,3417$ nm.) İkinci metoda göre, kenar ve vida dislokasyon yoğunlukları Burger vektörüne, eğim ve yanal mozaik uzunluğuna bağlıdır. Her çeşit dislokasyon, yanal mozaik uzunluğu, eğim ve burkulma açılarına bağlıdır. Metzger ve arkadaşları tarafından bildirildiği gibi [12] GaN filmlerin (002) düzlemindeki ortalama burkulma açısı kenar Burger vektörü ($b=1/3(11-20)$) tipi dislokasyon yoğunluğu ile alakalıdır. Ortalama eğim açısı ise, monoton Burger vektörü $b=(0001)$ vida tipi dislokasyon ile ilişkilidir [11]. Burger vektörü, kristal bloğun ($b=1/3(11-20)$) kenar tipi dislokasyon yüzeyinin normali etrafında azimutsal dönmesi ile oluşur. Ölçülen burkulma, burkulma açısı α_{twist} 'ten bulunur. Bu açıklamaları kullanarak kenar tipi dislokasyonu hesaplayabiliriz. Eğer dislokasyonlar küçük boyutlu bir parçacık sınırında toplandıysa, kenar tipi dislokasyon yoğunluğu aşağıdaki formüllerle hesaplanabilir [237, 238];

$$N_{\text{screw}} = \frac{a_{\text{tilt}}^2}{4.35b_{\text{screw}}^2}, N_{\text{edge}} = \frac{a_{\phi}}{2.1b_{\text{edge}} * L_{\parallel}} \quad (4.12)$$

Burada $\alpha_{\text{Eğim}}$ açısı mozaik kusur eğim açısıdır. α_{ϕ} , asimetrik düzlemlerin pik genişlemesidir ve b_{Vida} Burger vektörünün uzunluğudur.

GaN ve InGaN tabakalar için hesaplanmış TD değerleri ikinci metottan Çizelge 4.9'da verildiği gibidir.

Çizelge 4.9. GaN ve InGaN tabakalar için sıcaklığa bağımlı olarak Vida ve Kenar dislokasyon yoğunlukları

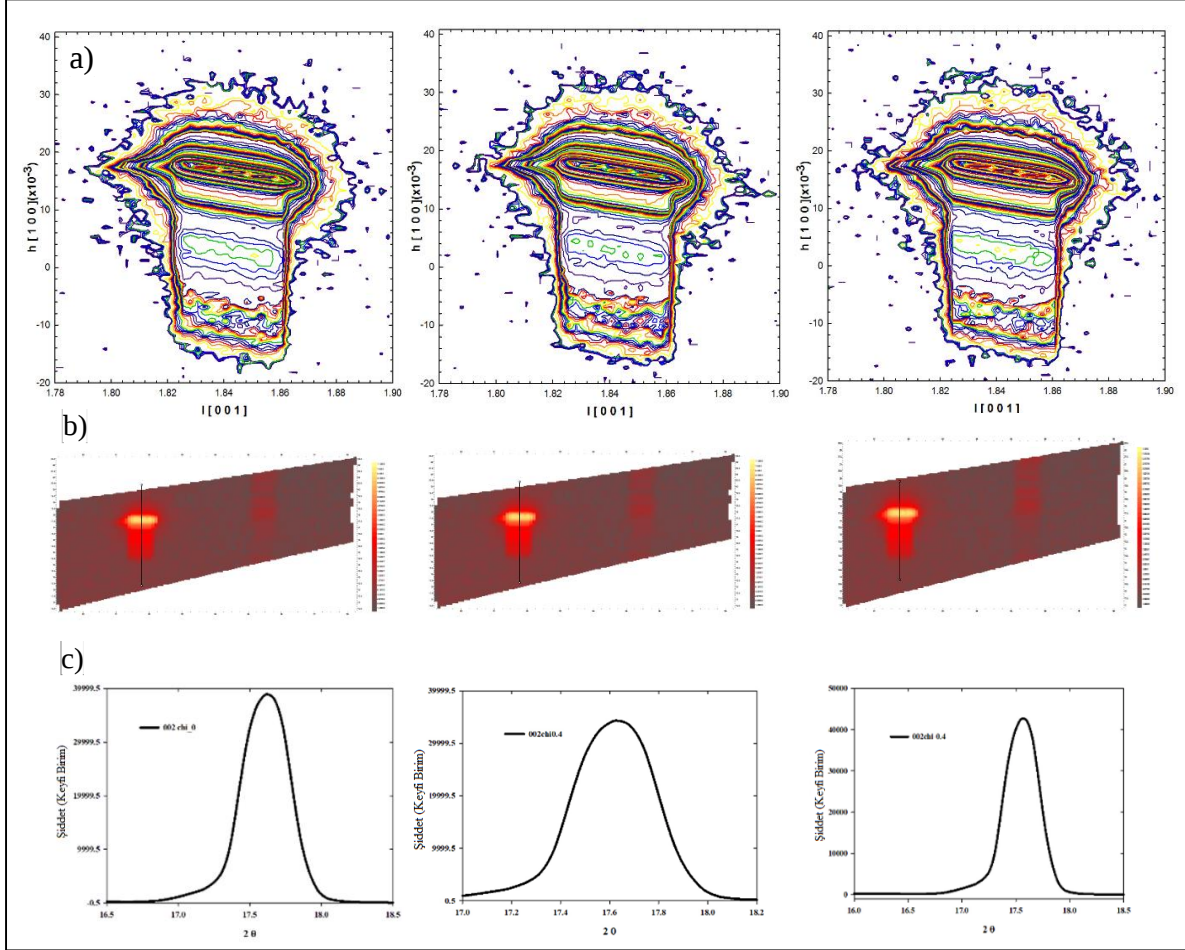
Sıcaklık (°C)		Örnek A		Örnek B		Örnek C	
		2.metot		2.metot		2.metot	
		Kenar D.L($\times 10^9$)	Vida D.L($\times 10^8$)	Kenar D.L($\times 10^9$)	Vida D.L($\times 10^8$)	Kenar D.L($\times 10^9$)	Vida D.L($\times 10^8$)
300	GaN	1,55	1,25	2,36	1,25	1,55	1,25
	InGaN1	9,55	1,64	10,80	9,55	9,55	1,64
	InGaN2	10,80	1,60	42,90	3,62	4,22	3,57
350	GaN	1,46	1,25	2,22	1,29	1,46	1,25
	InGaN1	1,50	3,39	4,80	3,56	1,50	3,39
	InGaN2	1,60	3,20	4,00	3,01	0,16	3,20
400	GaN	1,42	3,10	1,69	1,26	1,40	3,00
	InGaN1	2,21	1,30	2,90	4,59	2,21	1,30
	InGaN2	1,67	4,89	1,89	4,79	1,28	3,86
450	GaN	1,46	9,70	3,28	1,16	0,34	1,49
	InGaN1	3,13	4,13	3,14	4,31	3,10	4,10
	InGaN2	3,14	4,31	2,86	1,31	0,34	1,47
500	GaN	1,50	1,08	2,24	1,19	0,35	1,49
	InGaN1	1,73	3,81	1,90	3,82	1,67	4,89
	InGaN2	1,90	3,82	2,86	1,31	0,34	1,47

İkinci metoda göre, kenar tipi dislokasyonlar önce azalır sonra artar ve vida tipi dislokasyonlar önce artar sonra azalır. Bütün bu sonuçlar GaN ve InGaN tabakalar için artan sıcaklıkla gerçekleşir. Bu durumlar her üç numune için de geçerlidir. Eğer Çizelge 4.9 dikkatlice incelenirse görülebilir ki TD yoğunlukları genelde GaN tabakalar için daha düşüktür. Bu sonuç, büyütme koşullarına atfedilebilir. Büyütme koşulları GaN tabakalar için InGaN tabakalara kıyasla daha optimize edilmiştir.

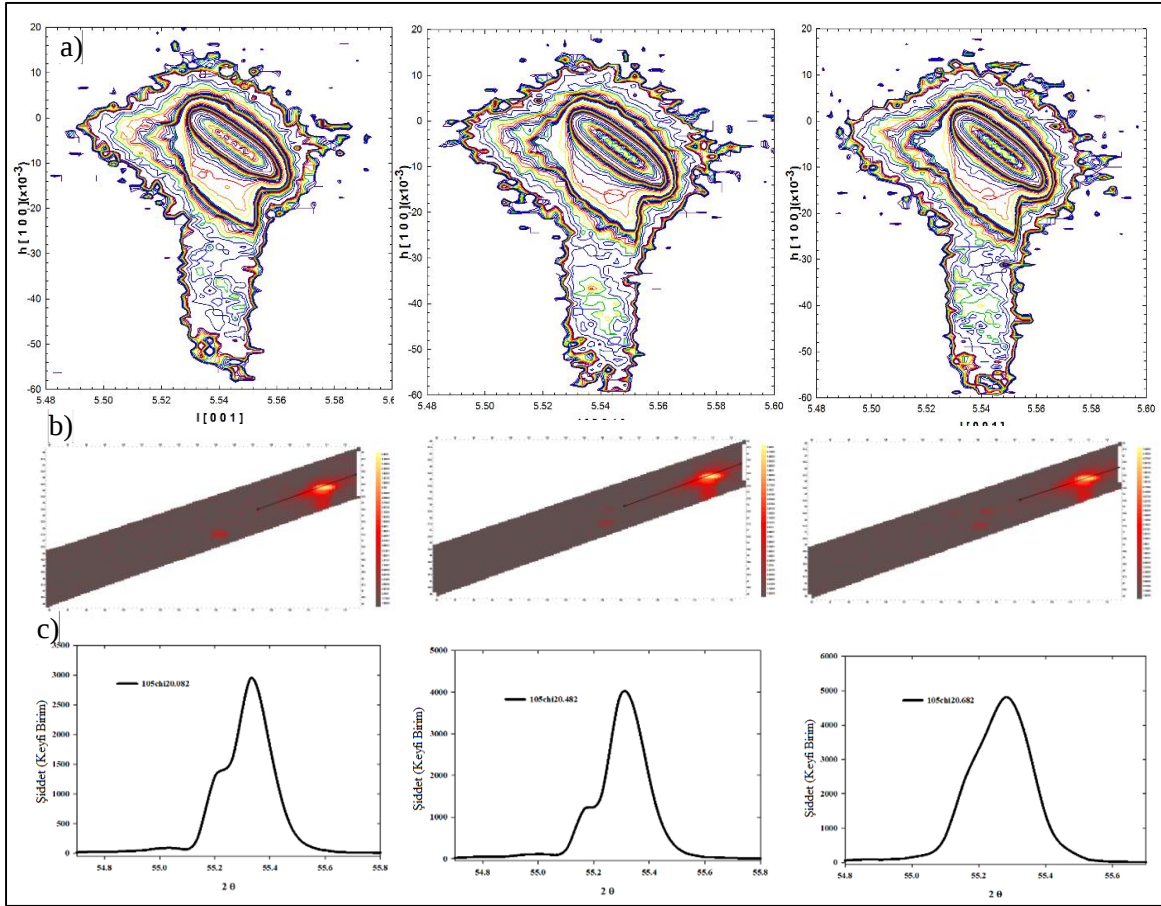
4.4. Ters Örgü Uzak Haritası Kullanılarak Yapısal Özelliklerin Belirlenmesi

Ters örgü uzak haritalaması, X-ışını kırınımından veri elde edilmesinde kullanılan yeni bir terimdir. Burada prensip X-ışını kırınım deseninden mümkün olduğunca çok bilgi çıkarılması ve bu işlemin kırınım uzak probunun ters uzayı mümkün olduğunca detaylı araştırmasıyla sağlanır. Bu detaylar, mükemmellikten sapmaları ve mikroyapı hakkında bilgi sahibi olmamızı sağlar. Bunlar genellikle malzemenin yapısal özellikleri üzerinde baskındır. Bu dijitize edilmiş film metodlarına benzerdir. Ancak prob daha küçüktür ve dinamik aralık daha yüksektir. X-ışınları kırınım tekniğiyle yapılan analizler çok geniş bir alana yayılır ve ters uzak haritalaması ile ilgili kısım Fewster (1996)'da görülebilir. Genel olarak çözünürlük probleme uygun seçilmelidir. Analiz etmek istediğimiz numunenin üç boyutlu imajı temel prensiptir. İki boyutlu ters uzak haritalaması numune hakkında tahminler yapmamızı

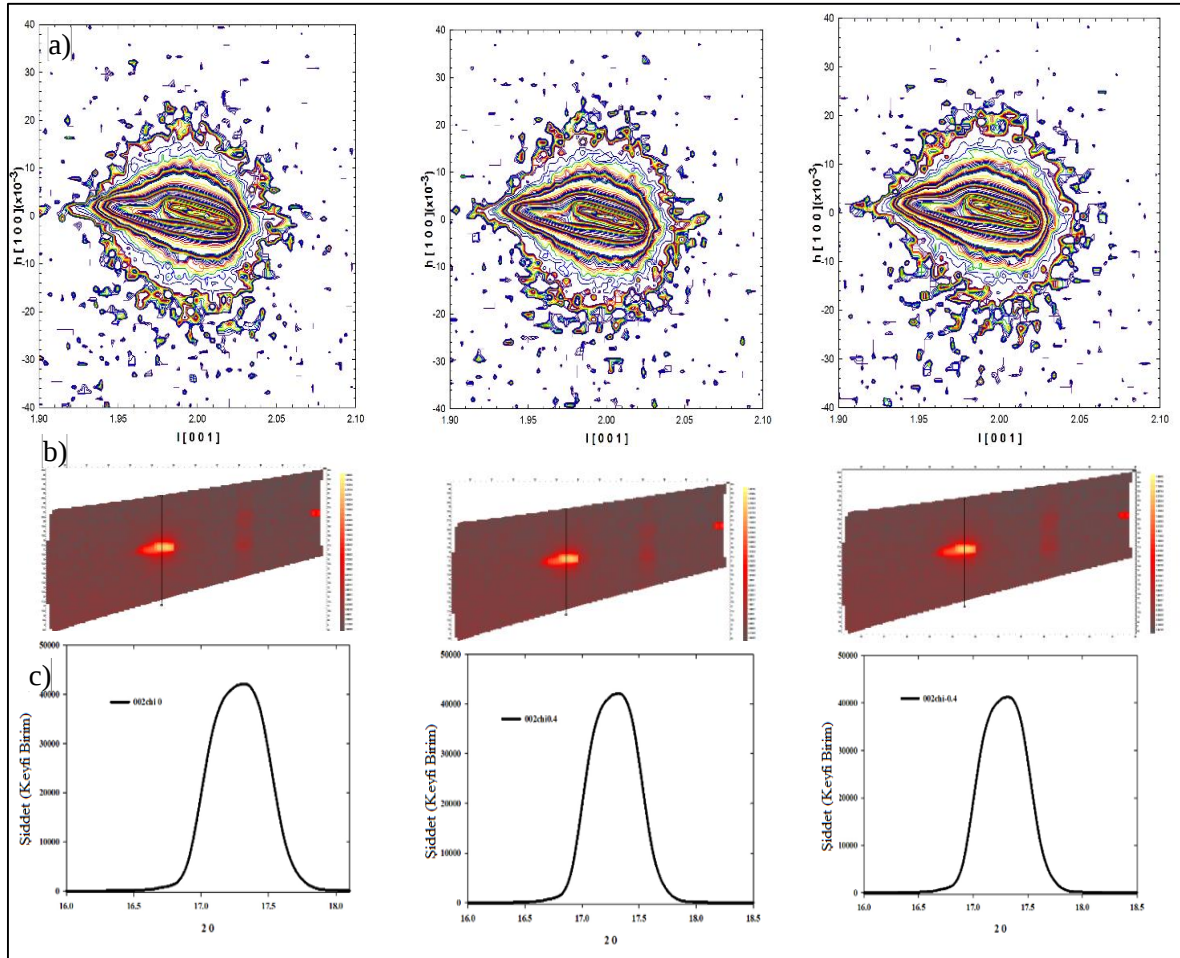
gerektirir, çünkü bunlar sırasıyla bir düzlemin yansımaları ve ters uzayda bir çizgidir. Bu çalışmada numunelerin üç boyutlu olarak ters uzay haritalamaları verilmiştir.



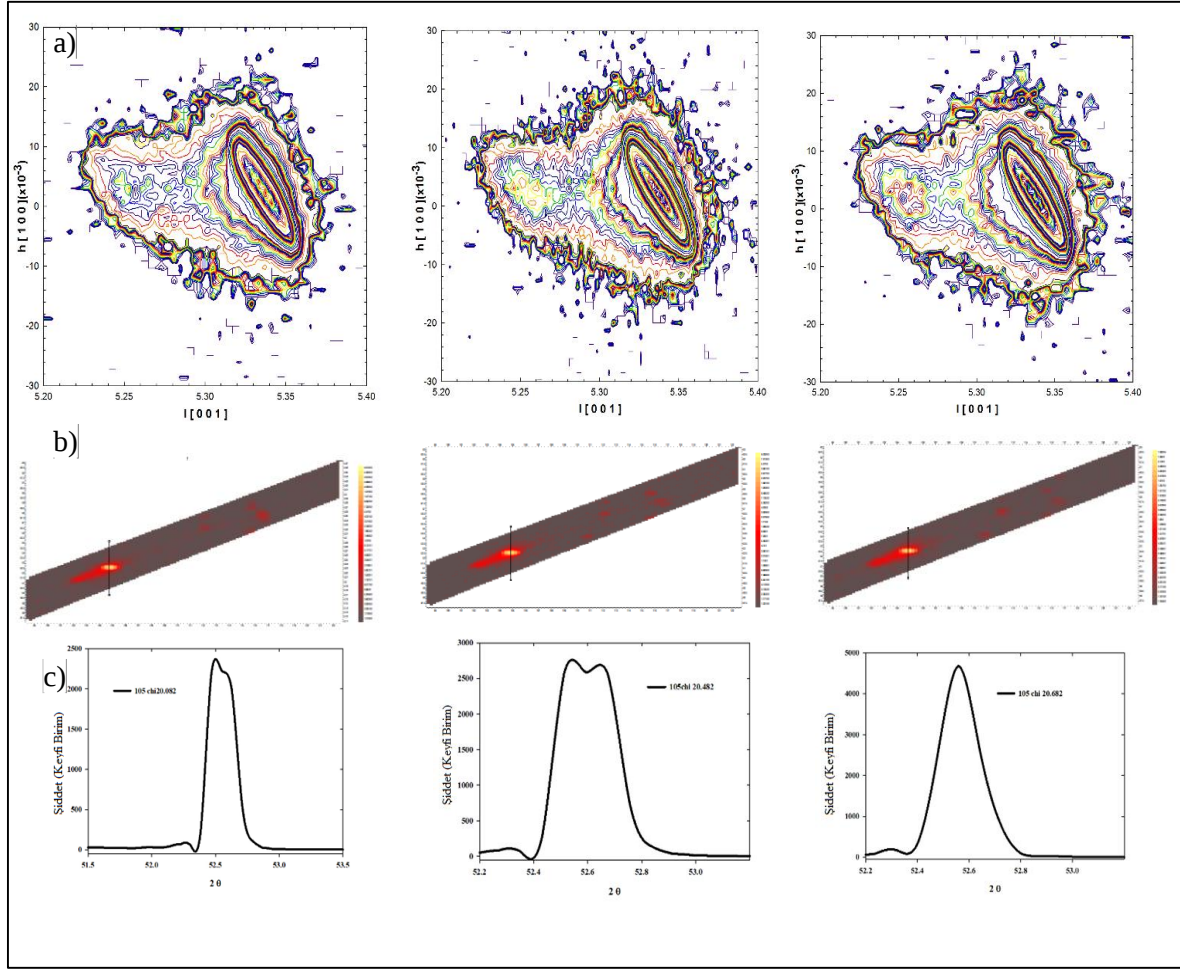
Şekil 4.10. a) Örnek A için (002) düzleminde sırasıyla chi 0, 0.4, -0.4 açılarında ters uzay haritaları b) Örnek A için (002) düzleminde software'den chi 0, 0.4, -0.4 açılarında 2θ dönüşüm ekranı c) Örnek A için (002) düzleminde chi 0, 0.4, -0.4 açılarında 2θ eğrileri



Şekil 4.11. a) Örnek A için (105) düzleminde sırasıyla chi 20.082, 20.482, 20.682 açılarında ters uzay haritaları b) Örnek A için (105) düzleminde software'den 20.082, 20.482, 20.682 chi açılarında 2θ dönüşüm ekranı c) Örnek A için (105) düzleminde chi 20.082, 20.482, 20.682 açılarında 2θ eğrileri



Şekil 4.12. a) Örnek B için (002) düzleminde sırasıyla χ 0, 0.4, -0.4 açılarında ters uzay haritaları b) Örnek B için (002) düzleminde software'den 0, 0.4, -0.4 χ açılarında 2θ dönüşüm ekranı c) Örnek B için (002) düzleminde χ 0, 0.4, -0.4 açılarında 2θ eğrileri



Şekil 4.13. a) Örnek B için (105) düzleminde sırasıyla chi 20.082, 20.482, 20.682 açılarında ters uzay haritaları b) Örnek B için (105) düzleminde software'den 20.082, 20.482, 20.682 chi açılarında 2θ dönüşüm ekranı c) Örnek B için (105) düzleminde chi 20.082, 20.482, 20.682 açılarında 2θ eğrileri

GaN ve InGaN gibi nitrit tabanlı bileşikler heksagonal yapıya sahiptir ve bunların kristal kalitesi simetrik piklerindeki genişleme ölçülerek bulunabilir. Aynı zamanda bu gibi tabakalardaki HR-XRD dönme tarama eğrilerinin simetrik ve asimetrik genişlemeleri dislokasyonlardan kaynaklanır. Ters uzay haritalarının LEPTOS yazılımı sayesinde 2 teta verilerine dönüştürülmesiyle elde edilen tam genişlik yarı maksimum (FWHM) değerleri GaN ve InGaN tabakalar için Çizelge 4.10'da verilmiştir. Her iki numune için ölçülen değerler karşılaştırıldığında (105) düzlemi için olan değerlerin hemen hemen aynı olduğu görülür. Bunun nedeni her iki numunedeki GaN tabakalarının benzer büyütme şartlarına sahip olmasıdır. (002) düzlemi için InGaN tabakanın FWHM değerleri literatürdeki ile kıyaslanabilir. Bu sonuç gösterir ki örnek A'daki InGaN tabakası daha yüksek kristal kalitesine sahiptir.

Çizelge 4.10. Örnek A ve B için GaN ve InGaN tabakalarının (002) ve (105) düzlemlerinde pik pozisyonları

	Örnek A	Örnek B
(hkl)	Pik pozisyonu (2θ)	Pik pozisyonu (2θ)
(002) GaN	34,563	34,563
(002) InGaN	34,169	33,929
(105) GaN	105,006	105,006
(105) InGaN	104,241	104,319

4.4.1. Ters uzay haritasından elde edilen örgü parametreleri

Örgü parametrelerinin hesabı, gerilme, zorlama, kenar ve vida dislokasyonlarının hesabında kullanılabilir. Heksagonal yapılar için a- ve c- örgü parametreleri hesaplanmalıdır. Bu örgü parametrelerinin hesabı için gerekli formüller Eş. (4.3) ve (4.4)'de verilmiştir. InGaN tabakaları için örgü parametreleri Vegard yasası kullanılarak bulunabilir. InGaN tabakalarının örgü parametreleri için Vegard yasası Eş. (4.1) ve (4.2)'te verilmiştir. Burada x InGaN bileşiğindeki In oranıdır. Bu oran Eş. (4.9) ile hesaplanabilir. Örnek A ve B için In oranları sırasıyla %10,5 ve %13,6 olarak bulunmuştur. Eş. (4.1), (4.2), (4.3) ve (4.4)'den bulunan a- ve c- örgü parametreleri Çizelge 4.11'de verilmiştir.

Çizelge 4.11. Örnek A ve B için GaN ve InGaN tabakalardaki (002) ve (105) düzlemlerinde örgü parametreleri

	Örnek A		Örnek B	
Düzlem ve Bileşik	a-	c-	a-	c-
GaN (002)	Xxxx	5,1859	Xxxx	5,1859
InGaN(002)	Xxxx	5,2033	Xxxx	5,2033
GaN (105)	3,2650	5,1686	3,2570	5,1686
InGaN(105)	3,2650	5,1686	3,2650	5,1686

4.4.2. Gerilme, zorlama

Gerilme, referans örgü parametreleri a_0 ve c_0 ile tanımlanır. Bu durum Eş. (4.13) ve (4.14)'de gösterilmiştir.

$$\varepsilon_c = \frac{c_{\text{measured}} - c_0}{c_0} \quad (4.13)$$

$$\varepsilon_a = \frac{a_{measured} - a_0}{a_0} \quad (4.14)$$

Gövde GaN’da hidrostatik gerilme baskındır. Bu aşılama ve kusurlardan etkilenir. Gerilme genellikle ince film-alttaş ısısal genleşme katsayısı uyumsuzluğu ya da örgü uyumsuzluğundan kaynaklanır. Ama tipik gerilmelerle kıyaslandığında evrensel örgü parametrelerindeki değişimin büyük olduğu görülür. Bu gibi durumlarda ortalama evrensel parametreler kullanılabilir ama bunlarda çok güvenilir değildir. Gerilmenin, bu çalışmanın bazı kısımlarında olduğu gibi, negatif değerler alması mümkündür. Bunun nedeni dislokasyonların ve kusurların örgü parametrelerini nasıl etkileyeceğinin kesin olmamasıdır.

İç düzlem zorlama (σ) büyütme sırasında ortaya çıkar. Bu süreç, aşılama, örgü uyumsuzluğu ve film ile alttaşın ısısal genleşme katsayıları arasındaki uyumsuzluktan kaynaklanır. Zorlama genellikle gerilmeyi ölçerek hesaplanır. Eğer rotasyonel simetrik bir gerilme varsa zorlama gerilmeyi kullanarak bulunabilir. Zorlama formülleri Eş. (4.15) ve (4.16)’da verilmiştir.

$$\varepsilon_a = \frac{\sigma^* (1 - \nu)}{E} \quad (4.15)$$

$$\varepsilon_c = \frac{\sigma^* . 2 . \nu}{E} \quad (4.16)$$

Burada ν Poisson oranıdır ve 0,212 olarak alınmıştır. E, Young modülüdür ve 287 olarak alınmıştır [14]. Gerilme ve zorlamaya ait değerler Çizelge 4.12’de verilmiştir.

Çizelge 4.12 a) Örnek A için gerilme ve zorlama değerleri

a_o veya c_o	$a_{meas.}$ veya $c_{meas.}$	Gerilme	Stres	Bileşik ve düzlem
5,1855	5,1859	$7,91 \times 10^{-5}$	0,05352	GaN (002) -c
5,2808	5,2033	-0,01467	-9,92754	InGaN (002) -c
3,1896	3,2650	0,02363	8,60512	GaN (105) -a
5,1855	5,1686	-0,00325	-2,2021	GaN (105) -c
3,2262	3,2570	0,0096	3,4805	InGaN (105) -a
5,28075	5,1892	-0,01734	-11,7349	InGaN (105) -c

Çizelge 4.12 b) Örnek B için gerilme ve zorlama değerleri

a_o veya c_o	$a_{meas.}$ veya $c_{meas.}$	Gerilme	Stress	Bileşik ve düzlem
5,1855	5,1860	$7,91 \times 10^{-5}$	0,05352	GaN (105) -c
3,1896	3,2650	0,02363	8,6052	GaN (105) -a
5,28075	5,1892	-0,01734	-11,7349	InGaN (105) -c
3,2262	3,2570	0,009547	3,4771	InGaN (105) -a

(002) düzlemi için Örnek A ve B’de gerilme ve zorlama değerleri aynı bulunmuştur. Bu yüzden Çizelge 3 (b)’de sadece (105) düzlemi için olan değerler gösterilmiştir.

InGaN tabanlı güneş pili yapılarında In oranı x ’in ölçülememesi başlıca bir problemdir. Bunun nedeni gerilmenin In oranına olan katkısıdır [16]. Gerilme ve In oranının etkilerini birbirinden ayırmak için bir kübik denklem kullanılır. InGaN’da genellikle bu tür bir problem mevcuttur. Bu değerleri birbirinden ayırmak için kübik denklem metodu kullanılmıştır.

Literatürde görülebildiği gibi, kristallerin kalitesini artırmak için III grubu nitrit film ve safir arasına bir GaN tampon tabaka büyütülür [16]. Bunun sayesinde, GaN tampon tabaka ve kristal tabaka arasında c- iç düzlem oryantasyonu sağlanır. Bunun da sonucu olarak, aittaş üzerinde GaN tampon tabaka rahatlamalı olarak oluşur ve düzgün bir büyütme sağlanır [16]. Heksagonal birim hücrenin alt ve üst düzlemleri çakışır ve gerilme oluşur. Bu heksagonal hücrenin deformasyonuna neden olur ve c/a oranı değişir [16]. Birim hücredeki deformasyon, heksagonal sistemler için esneklik modülü kullanılarak genelleştirilmiş Hooke yasası ile ifade edilir.

Bütün bu sürecin sonunda, epitaksiyel sistemlerdeki birim hücrenin c eksenine z eksenine veya üç doğrultuya paraleldir. Bu durum esneklik modülünün sadeleşmesi ile sonuçlanır [16]. Gerilme ve çift eksenli gerilme durumunda, kristal yüzeyine dik doğrultuda $\sigma_{33} = 0$ ve alt düzlem ε_{11} gerilmesi ve büyütme yönündeki ε_{33} gerilmesi Eş. (4.17) ile verilir.

$$\varepsilon_{33} = -\frac{C_{13}}{C_{33}}(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) \quad (4.17)$$

σ_{ij} zorlama ve C_{ij} Voigt's rotasyonundaki esneklik modülüdür. Alt düzlemde $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{33}$ ile izotropiktir. Uyarılmış ve kısmen rahatlamış filmlerde heksagonal yapı korunur. Gerilmelerin tanımlanmasıyla $\varepsilon_{33} = (c(L) - c_0(L))/c_0(L)$ ve $\varepsilon_{11} = (a(L) - a_0(L))/a_0(L)$ eşitlikleri Eş. (4.18)'de yerine yazılır.

$$\frac{c(L) - c_0(L)}{c_0(L)} = -2 \frac{\varepsilon_{11}(L)}{\varepsilon_{33}(L)} \frac{a(L) - a_0(L)}{a_0(L)} \quad (4.18)$$

Burada $c(L)$ ve $a(L)$ InGaN'ın gerilmiş örgü parametreleridir. $c_0(L)$ ve $a_0(L)$ rahatlamış örgü parametreleridir. Gerilmiş örgü parametreleri direk olarak XRD analizinden belirlenir. Uyarılmış büyütme için $a(L) = a_0(S)$ 'dir. Burada S altaş ve GaN tampon tabakayı temsil eder. ε_{11} ve ε_{33} esneklik modülleri bileşiğin kimyasal kompozisyonuna bağlıdır. Heksagonal kristal sistemi için Poisson oranı, (001) düzlemine dik olan çift eksenli gerilme Eş. (4.19) ile verilir.

$$\nu = 2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \quad (4.19)$$

Poisson oranı için doğrusal ilişki birinci dereceden yaklaşımla Eş. (4.20) ile verilir.

$$\nu(L) = x \nu(K) + (1 - x) \nu(M) \quad (4.20)$$

Burada K, M ve L kristal tabakayı oluşturan bileşimlerdir ve bizim çalışmamız için InN, GaN ve InGaN'dır. $a_0(L)$, $c_0(L)$ ve $\nu(L)$ Eş. (4.18)'de yerine konulursa Eş. (4.21)'teki kübik eşitlik elde edilir.

$$Px^3 + Qx^2 + Rx + S = 0 \quad (4.21)$$

InGaN tabakadaki In oranı x InN ve GaN'ın pik pozisyonlarına bağlı olarak Vegard yasasından bulunabilir. InN ve GaN'ın pik değerlerine bağlı olarak bulunan InGaN tabakanın değerlerindeki bozukluklar örgüde gerilme olduğunu gösterir. InGaN için x değerindeki fark Vegard yasası kullanılarak hesaplanabilir. InGaN için olan x değerindeki gerilmeden gelen katkıyı ayır edebilmek için (4.21) deki kübik denklem kullanılabilir [16]. Bu denklemdeki P, Q, R ve S sabitlerinin anlamları; Poisson oranı ve InN ve GaN için a - ve c - evrensel örgü parametreleridir. Örgü parametreleri Vegard ve Poisson denklemleri ile elde edilebilir. x oranı uygun bir yazılımla bulunabilir. Bu x değerini kullanarak gerilme hesaplanır.

$$P = (\nu(InN) - \nu(GaN))((a_0(InN)) - a_0(GaN))(c_0(InN) - c_0(GaN)) \quad (4.22)$$

$$Q = (1 + \nu(GaN))(a_0(InN) - a_0(GaN))(c_0(InN) - c_0(GaN)) + (\nu(InN) - \nu(GaN)) \\ \left[(a_0(InN) - a_0(GaN))c_0(GaN) + (a_0(GaN) - a(InGaN))(c_0(InN) - c_0(GaN)) \right] \quad (4.23)$$

$$R = (a_0(InN) - a_0(GaN)) \left[(1 + \nu(GaN))c_0(GaN) - c(InGaN) \right] + \\ (c_0(InN) - c_0(GaN)) \left[(1 + \nu(GaN))a_0(GaN) - \nu(GaN)a(InGaN) \right] + \\ (\nu(InN) - \nu(GaN))(a_0(GaN) - a(InGaN))c_0(GaN) \quad (4.24)$$

$$S = (1 + \nu(GaN))a_0(GaN) - c_0(GaN) - \nu(GaN)a(InGaN)c_0(GaN) - \\ a_0(GaN)c(InGaN) \quad (4.25)$$

Bu denklemlerdeki GaN ve InN için olan sabitler sırasıyla $C_0^{GaN} = 0,51850$ nm, $a_0^{GaN} = 0,31892$ nm, $C_0^{InN} = 0,57033$ nm, $a_0^{InN} = 0,35387$ nm, GaN için $C_{13} = 103$ GPa, $C_{33} = 405$ GPa, InN için; $C_{13} = 92$ GPa, $C_{33} = 224$ GPa şeklindedir [14]. Kübik denklemin üç tane reel kökü vardır. Ancak bunlardan sadece bir tanesinin fiziksel anlamı vardır. x oranı değeri 0 ile 1 arasında değişir. InGaN tabakalar için In oranı x örnek A ve B için sırasıyla

%9,82 ve %15,11 olarak bulunmuştur. In oranının tam değeri hesaplanırsa gerilme de tam olarak hesaplanabilir. Bu tam değerın hesaplanmasında ters uzay haritasının büyük önemi vardır. Standart ölçümler sırasında ortaya çıkan pik kaymaları ters uzay haritalaması metodu ile engellenebilir. Örnek A'daki InGa_N tabaka için gerilme değerleri $2,68 \times 10^{-3}$ c- ve $-3,37 \times 10^{-3}$ a- şeklindedir. Örnek B için aynı değerler sırasıyla, $5,88 \times 10^{-3}$, $-7,53 \times 10^{-3}$,dir. Buradaki gerilme hesaplamaları InGa_N'ın evrensel değeri ve $\Delta x/x_0$ denklemine göre yapılmıştır. Burada $\Delta x = x - x_0$ 'dır ve x , x_0 gerilmiş ve gerilmemiş evrensel örgü parametreleridir.

4.4.3. Dislokasyonlar

Kenar, vida ve karışık tip dislokasyonlar Kurtz tarafından bulunan bir metotla hesaplanabilir [234]. Bu metotda dislokasyonlar Burger vektörünün uzunluğuna ve FWHM değerine bağlıdır. Vida ve kenar tipi dislokasyonlar Eş. (4.26) ve (4.27) ile hesaplanabilir.

$$D_B = \frac{\beta^2}{9b_{screw}^2} \quad (4.26)$$

$$D_B = \frac{\beta^2}{9b_{edge}^2} \quad (4.27)$$

Burada β , FWHM değeridir ve b Burger vektörünün uzunluğudur. Burger vektörünün uzunluğu $b_{screw}=5,185$ nm ve $b_{edge}=3,196$ nm alınmıştır [233]. Burger vektörünün uzunluğu örgü parametreleri ile aynıdır. Burger vektörünü kullanarak kenar tipi dislokasyonlar kristalin yüzeyinin normali etrafında azimutsal dönüşüyle uyumlu hale gelir. Karışık tip dislokasyon ise kenar ve vida tipi dislokasyonların toplamı olarak hesap edilebilir. Bu eşitlik Eş. (4.28)'de gösterilmiştir.

$$DB_{mixed} = DB_{screw} + DB_{edge} \quad (4.28)$$

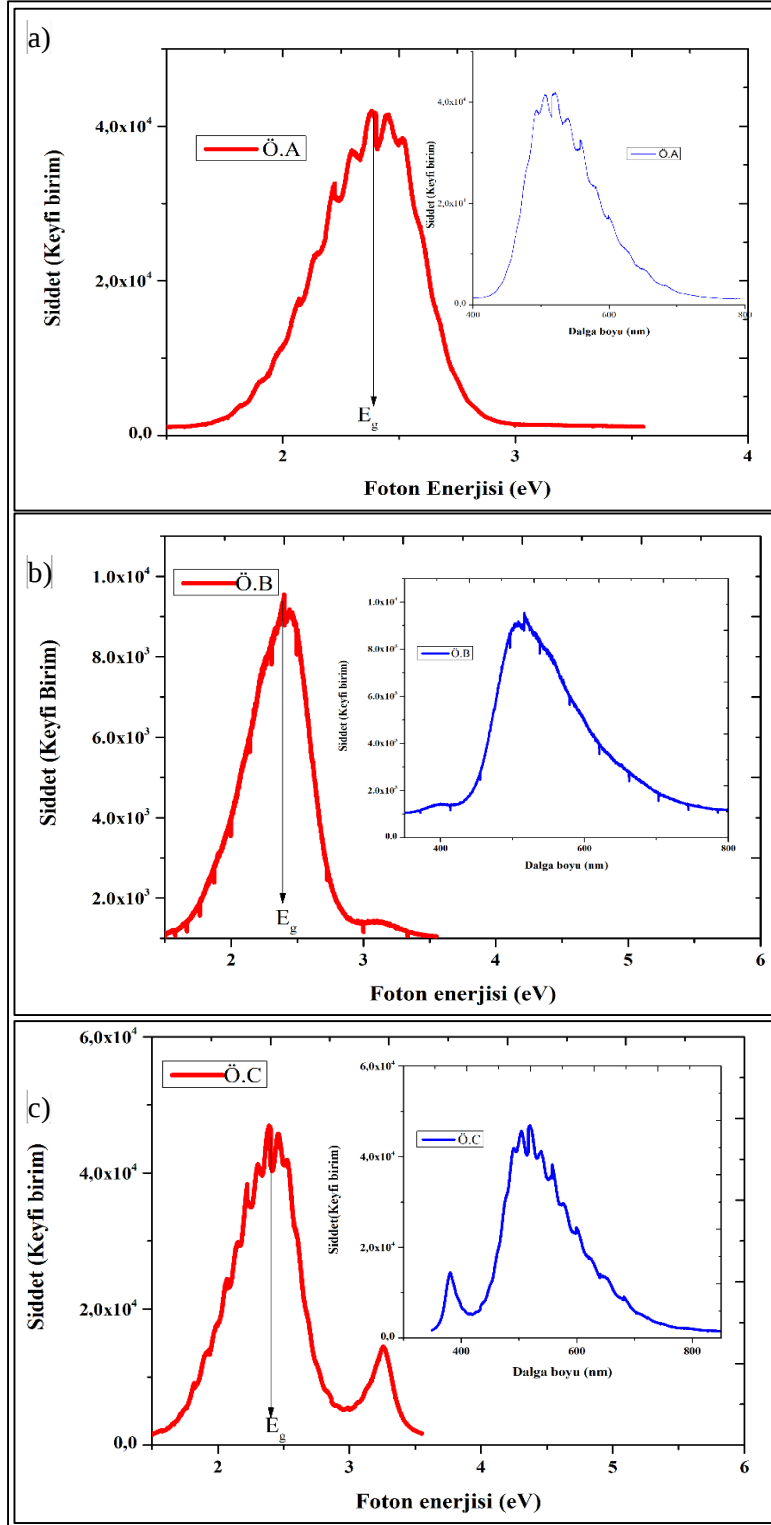
Hesaplanan dislokasyon yoğunlukları Çizelge 4.13'te gösterilmiştir.

Çizelge 4.13. Örneklerin vida ve kenar tipi dislokasyon yoğunlukları

<i>Bileşik ve düzlem</i>	<i>FWHM(Der.)</i>	<i>b_{kenar}-C</i>	<i>b_{vida}-a</i>	<i>DB_{kenar}</i>	<i>DB_{vida}</i>
GaN(002) Ö.A	1,169	5,185	Xxx	0,005648	Xxx
InGaN(002)Ö.A	0,4359	5,185	Xxx	0,0007853	Xxx
GaN(105) Ö.A	0,2182	5,185	3,196	0,000197	0,000518
GaN(105) Ö.B	0,2173	5,185	3,196	0,000195	0,000514

4.5. Optik Karakteristikler

4.5.1. Fotolüminesans



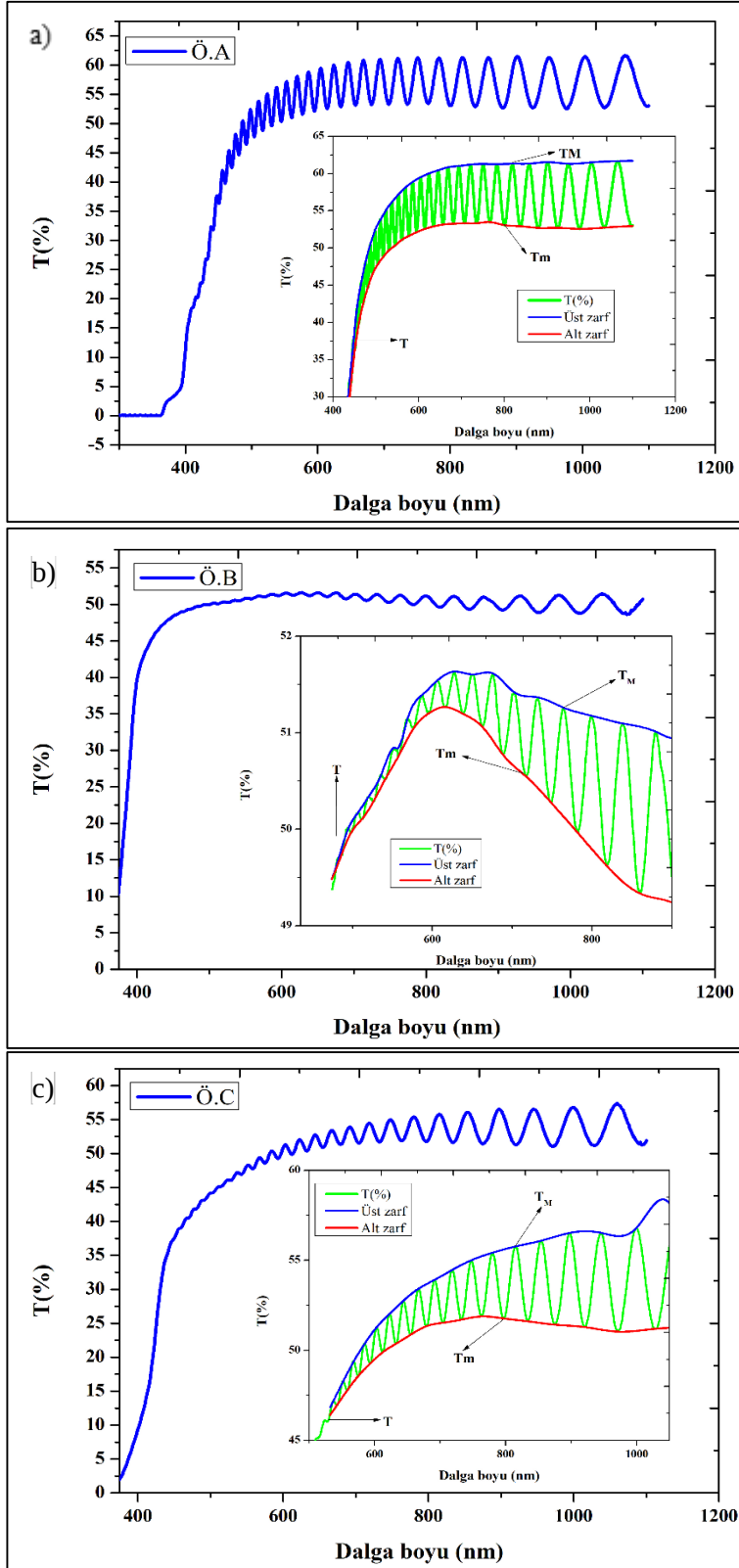
Şekil 4.14. InGaN/GaN yapıları için PL spektrumu

Şekil 4.14 PL spektrumunun taşıyıcı yoğunluğuna bağımlılığını göstermektedir. Bu spektrum laserle elde edilen eksitasyon sayesinde oluşmuştur. Düşey eksen logaritmik skalaya ayarlanmıştır. Bu spektral değişimi geniş bir aralıkta inceleyebilmek için yapılmıştır. 380 (3,24 eV) nm dalgaboyu civarında, GaN'ın bileşenlerinden biri numune C'de keskin bir pike sebep olmuştur [24]. Bu durum, bu bileşene ait taşıyıcı yoğunluğunun bu spektral bölgede büyük olduğunu gösterir. Her üç bileşende de geniş bir yeşil emisyon merkezi ~520 nm (2,38eV) dalga boyu civarında görülebilir. Bu emisyonun orijini bazı safsızlıklar ve yerel kusurlara atfedilebilir [25]. Bu maksimuma denk gelen dalga boyu bant aralığı (E_g) yi $E = h * c / \lambda$ denkleminde yerine koyarak bulunabilir. Numuneler A, B, C için bant aralıkları sırasıyla 2,4 eV, 2,35 eV ve 2,38 eV olarak hesaplanmıştır. Dalgaboyunun 650 nm değerinden sonra PL şiddet eksenindeki düşüş bu değerden sonra InGaN'ın herhangi bir enerji seviyesi bileşeni olmadığını gösterir. Eksitasyonla oluşan stimulasyon için gelen fotonun enerjisi tam olarak atomun enerji seviyelerinden birine eşit olmalıdır [238].

Bu çalışmada InGaN ve GaN'ın yasak enerji aralıkları (E_g), PL ve soğurma spektrumlarından hesaplanmıştır. Enerji aralığı soğurma spektrumu kullanılarak da hesaplanabilir. Soğurma varsa yansıma yoktur. Tüketim ise gelen fotonun enerjisinin malzeme içerisinde aniden düşmesidir. Kırılma indisi, soğurma katsayısı, tüketim katsayısı ve kalınlık gibi bazı optik özellikler (Swanepoel 1983) tarafından bulunan bir metotla hesaplanabilir. Bu metodun InGaN/GaN yapıya uygulanabilmesi için geçirgenlik spektrumuna ihtiyaç vardır. Geçirgenlik numuneye gelen ve numuneden geçen ışın şiddetlerinin oranıdır. Swanepoel metodunda maksimum geçirgenlik (T_M) ve minimum geçirgenlik(T_m) değerleri uygun bir yazılımla belirlenir. Bu değerlerin oluşturduğu fit çizgileri zarf metodunda kullanılır. Bu metottan elde edilen sonuçlar literatürle iyi bir uyum içindedir. Şekil 4.14 a, b, c PL'i enerjiye bağlı olarak ve küçük grafikler dalga boyuna bağlı olarak göstermektedir. Numunelerin E_g 'leri PL'deki pik kullanılarak hesaplanabilir. Enerji-şiddet grafiğindeki pik merkezi tam olarak E_g değerini verir. Örnek C için olan PL grafiğinde InGaN pikinin solunda bir pik daha vardır. Bu pikin GaN'a ait olduğu tahmin edilir. Literatürde InGaN'ın E_g 'si mavi bölgededir. Ama burada yeşil bölgeye kaymıştır. Bu durum In katkısından kaynaklanmış olabilir.

4.5.2. Geçirgenlik

Geçirgenlik ölçümlerinin spektrumu dalga boyunun %T'ye göre grafikleri çizilerek bulunur. Bu grafik Şekil 4.15'de gösterilmiştir. Bu grafiğe göre ışık yakın görünür bölgede tamamen soğurulmuştur (~390 nm). Numune A'ya ait olduğu tahmin edilen kırmızı eğri numune B ve C eğrilerine göre daha keskin bir şekilde yükselmiştir. Bunun nedeni GaN'ın bant aralığının mavi bölgede olması olabilir. Spektrumun diğer kısımlarında şiddet değerlerinin dalgalanmalarından başka büyük bir fark yoktur. Bu dalgalanmalar kalınlık farklılıklarından kaynaklanabilir. Kalınlıklar tabakaların yarı geçirgen pencereler olarak davranmasına neden olabilir. Bu durum InGaN güneş pilinin verimini etkiler [236]. Geçirgenlik spektrumundaki girişim saçakları film kalınlıklarındaki değişimlere bağlıdır. Bant aralıkları girişim saçaklarının yüksek enerji sınırlarından belirlenir [236]. Ama bu soğurma sınırı bant aralığına denk gelen banttandır. Bant geçişten ziyade eksitonlar sayesinde olabilir.



Şekil 4.15. InGaN/GaN yapısının geçirgenlik spektrumu

Ölçülmüş bir geçirgenlik spektrumundan enerji aralığını belirlemenin tek bir prosedürü yoktur. Bu yüzden PL ölçümleri bant aralığını belirlemek için kullanılır. InGaN/GaN/Al₂O₃

MQW yapının geçirgenlik ölçümleri yapılmıştır. Optik geçirgenlik spektrumu kullanılarak, film kalınlığı, kırılma indisi, tüketim katsayısı ve soğurma katsayısı hesaplanabilir. Aşağıdaki denklemlerde n_s alt tabakanın kırılma indisidir (Safir).

Şekil 4.15’de numunelerin geçirgenlik spektrumları görülebilir. Şekil 4.15’deki küçük grafiklerde zarflar görülebilir. Bunlar üst ve alt zarflar olarak çizilmiştir. T_M ve T_m matematiksel bir model olarak ifade edilirse Eş. (4.29) elde edilir. Kırılma indisi için gereken denklem Eş. (4.30) dadır. Eş. (4.30) deki N Eş. (4.31) kullanılarak bulunabilir.

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (4.29)$$

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2}$$

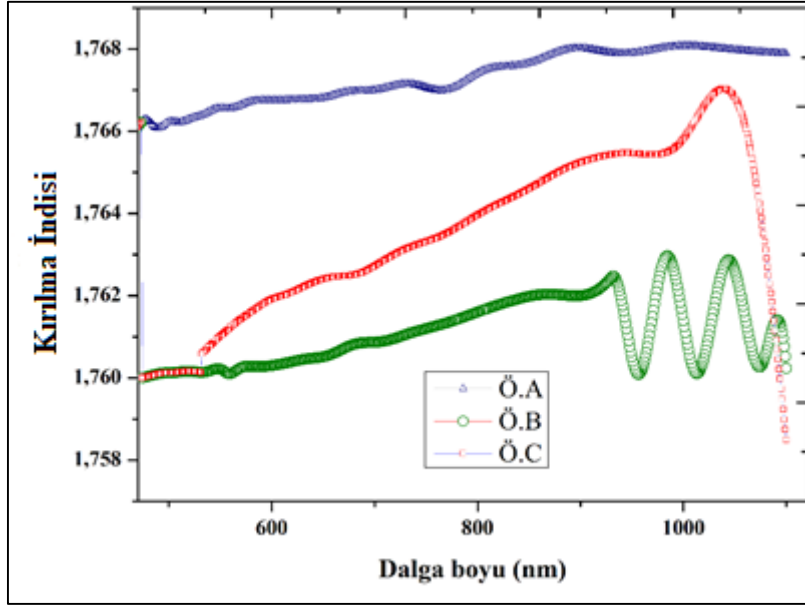
$$n = [N + (N^2 - n_s^2)^{1/2}]^{1/2} \quad (4.30)$$

$$N = \frac{1}{2}(1 + n_s^2) + \frac{2n_s(T_M - T_m)}{T_M \times T_m} \quad (4.31)$$

Film kalınlığı ardışık T_M ve T_m değerleri kullanılarak hesaplanabilir. Kırılma indisi değerleri $n(\lambda_1)$ ve $n(\lambda_2)$ kalınlık denkleminde kullanılır.

$$t = \frac{\lambda_1 \times \lambda_2}{2[n(\lambda_1)\lambda_2 - n(\lambda_2)\lambda_1]} \quad (4.32)$$

Burada t film kalınlığıdır. Kırılma indisinin dalga boyuna bağımlı olarak değişimi Şekil 4.16’da gösterilmiştir.



Şekil 4.16. Kırılma indisinin dalga boyuna göre değişimi

Örnek B’ de kırılma indisi değerleri dalgali bir değişim göstermiştir. Bunun nedeni yüzeydeki pinholların yoğunluğu veya yapıdaki In katkısının homojen olmaması olabilir. Şekil 4.21’de pinhollar görülebilir. Örnek A ve C’de kırılma indisi değerlerinin dalga boyuna göre değişimleri normaldir. Örnek A için kırılma indisi değerleri hemen hemen sabittir. Bu durum örnek A’nın kristal kalitesinin ve büyütme şartlarının optimize olduğunu gösterir. Zayıf ve orta bölgede soğurma katsayısı α sıfır değildir ve Eş. (4.29)’daki x 1’den küçüktür. Bu bölge için kırılma indisi Eş. (4.30)’da verilmiştir. Eş. (4.29)’da ki x Eş. (4.33) ile hesaplanabilir.

$$x = \frac{E_M - [E_M^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - n_s^2)]^{1/2}}{(n - 1)^3 (n - n_s^2)} \quad (4.33)$$

Buradaki E_M Eş. (4.34)’den bulunur.

$$E_M = \frac{8n^2 n_s}{T_M} + (n^2 - 1)(n^2 - n_s^2) \quad (4.34)$$

T_m ’ye göre x Eş. (4.35)’den hesaplanabilir.

$$x = \frac{E_m - [E_m^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - n_s^2)]^{1/2}}{(n - 1)^3 (n - n_s^2)} \quad (4.35)$$

Bu denklemde E_m Eş. (4. 36) ile hesaplanabilir. Bu çalışmada x her iki yöntemle de hesaplanmıştır ve uyum içinde oldukları görülmüştür. Çizelge 4.14’de bulunan x değerleri gösterilmiştir. E_M , E_m ve N hesaplamalarda kullanılan parametrelerdir ve adları yoktur. Soğurma katsayısı (α) x kullanılarak Eş. (4. 37) ile hesaplanır.

$$E_m = \frac{8n^2 n_s}{T_m} - (n^2 - 1)(n^2 - n_s^2) \quad (4.36)$$

ve tüketim katsayısı (k) Eş. (4. 38) ile hesaplanır.

$$\alpha = \frac{1}{t} \ln\left(\frac{1}{x}\right) \quad (4.37)$$

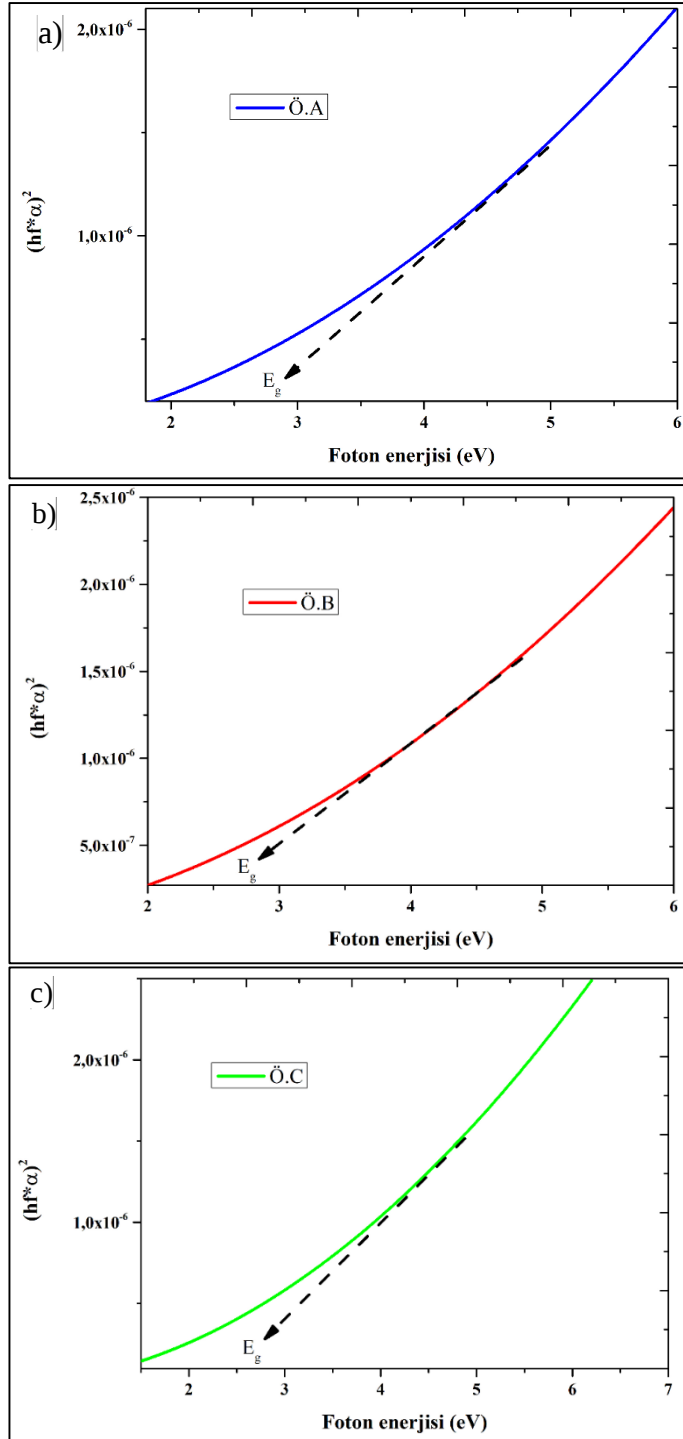
$$k = \frac{\alpha \lambda}{4\pi} \quad (4.38)$$

Soğurma, sönüm ve kalınlık değerleri Çizelge 4.14’de gösterilmiştir.

Çizelge 4.14. X değerleri, sönüm, soğurma katsayıları ve kalınlık

Örnek	T_M 'den X	T_m 'den X	
A	11,87	11,83	
B	11,75	11,70	
C	11,82	11,78	
Örnek	Sönüm Katsayısı	Soğurma Katsayısı	Ortalama Kalınlık (nm)
A	$2,1 \times 10^{-2}$	$2,4 \times 10^{-4}$	10229,50
B	$2,2 \times 10^{-2}$	$2,6 \times 10^{-4}$	9457,847
C	$2,2 \times 10^{-2}$	$2,5 \times 10^{-4}$	9706,214

Yarıiletken malzemelerde, foton enerjisinin soğurma katsayısına etkisinden faydalanarak, yasak enerji aralığı belirlenebilir. Soğurma eğrileri Şekil 4.17’de gösterilmiştir. Yüksek enerji bölgesinin fitinin x eksenini kesme noktası yasak enerji aralığı değerini verir. E_g değerleri her üç numune için de 2-3 eV aralığında bulunmuştur. Bu sonuç PL sonuçlarıyla uyumludur.



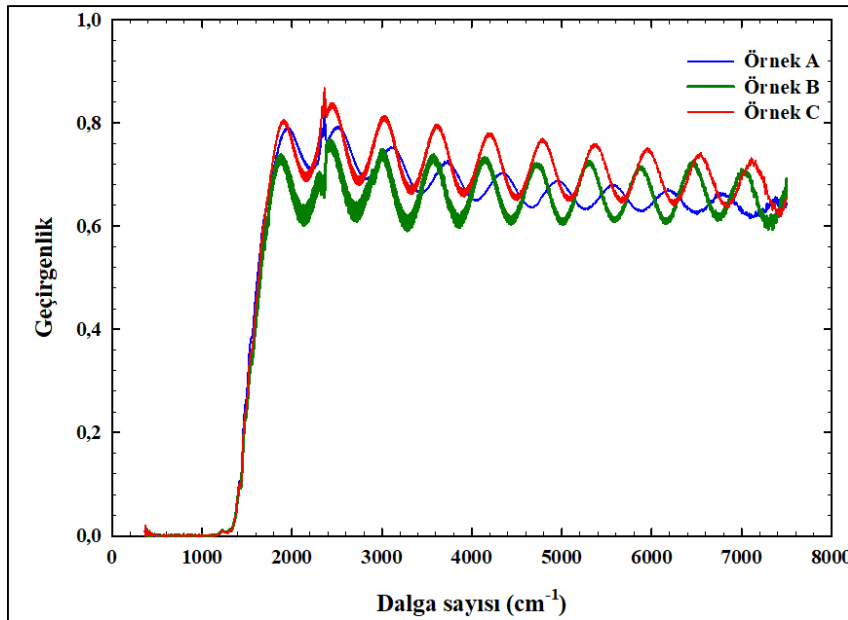
Şekil 4.17. Örnek A, B ve C için soğurma spektrumları

4.5.3. FTIR

Bütün numunelerin ATR spektrumu $670\text{-}690\text{ cm}^{-1}$ aralığında keskin bir soğurma piki gösterir. Gözlenen bu pik frekans rezonansı sonucudur. Bu rezonans gelen ışımanın dalga vektörüyle ara yüz polaritonlarının eşleşmesiyle oluşur [239].

InGaN güneş pilinin FTIR spektrumu Şekil 4.16'da görülebilir. Bu grafik dalga sayısının geçirgenliğe karşı değişimini gösterir. Her üç numune için üç ortak özellik spektrumda görülebilir.

- 1) $2000\text{-}1000\text{ cm}^{-1}$ spektral aralığında In ilişkili gerilmiş bantların şiddeti düşer. Bu durum In-Ga ve Ga-N bağlarından kaynaklanır [240].
- 2) $3000\text{-}3500\text{ cm}^{-1}$ spektral aralığında dalgalanmaların şiddetindeki artma geçirgenlik görülebilir. Bu InGaN bağları ile alakalıdır. Bunlar bu spektral aralık civarındaki LO ve TO fononlarıdır [240].
- 3) Spektrumun diğer kısımlarında keskin bir bant yoktur ve sıradan dalgalanmalar görülebilir [240].



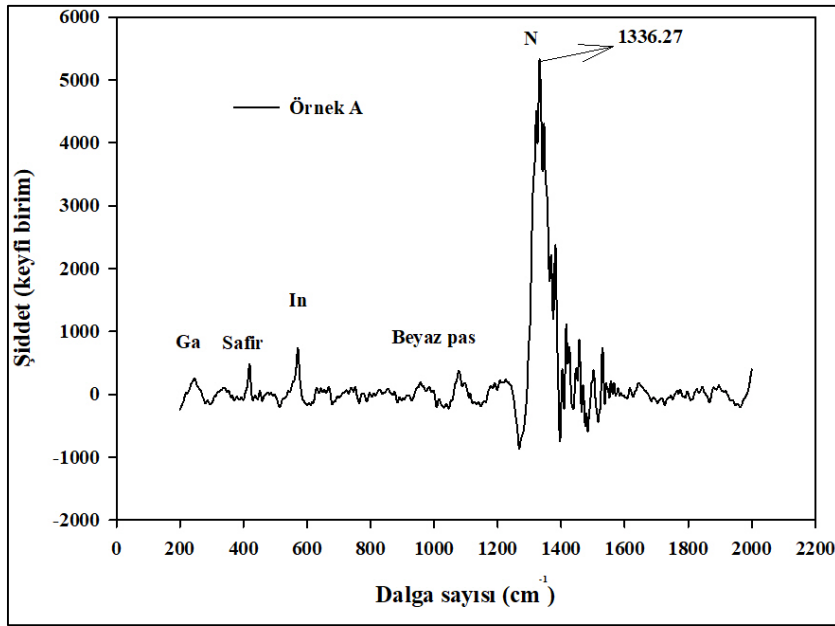
Şekil 4.16. InGaN aktif tabakanın FTIR titreşim spektrumu

Spektrumdaki bütün özellikler birden fazla ölçüm yapılarak kıyaslanabilir. Spektrumdaki eğrilerin kalınlıkları kıyaslanarak fotometrik uygunluk görülebilir [33]. Şiddeti dikkate alarak, 2000 cm^{-1} civarındaki maksimumun geçen elektronların oluşturduğu titreşimsel

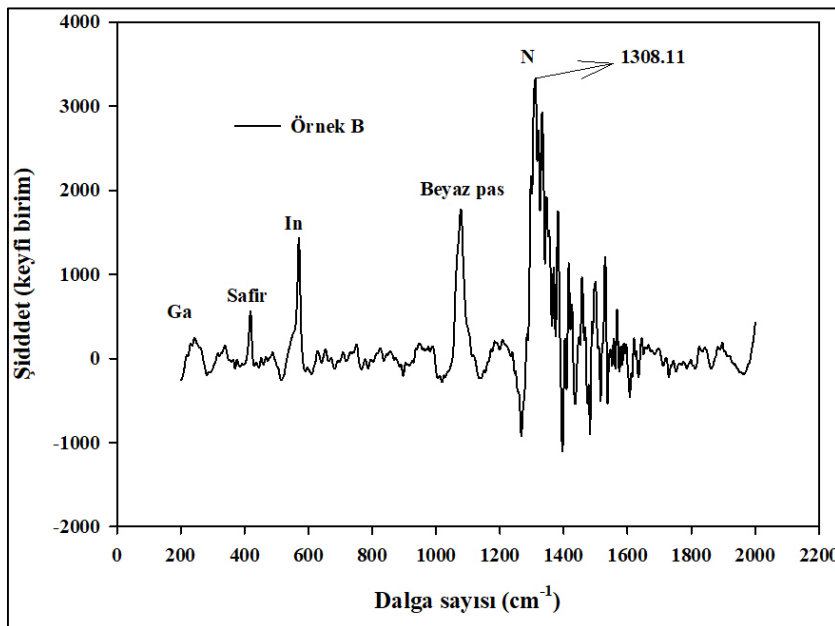
modlardan kaynaklandığı görülebilir. Bu maksimum In içeren yapısal kusurlardan da kaynaklanabilir.

4.5.4. Raman spektroskopisi

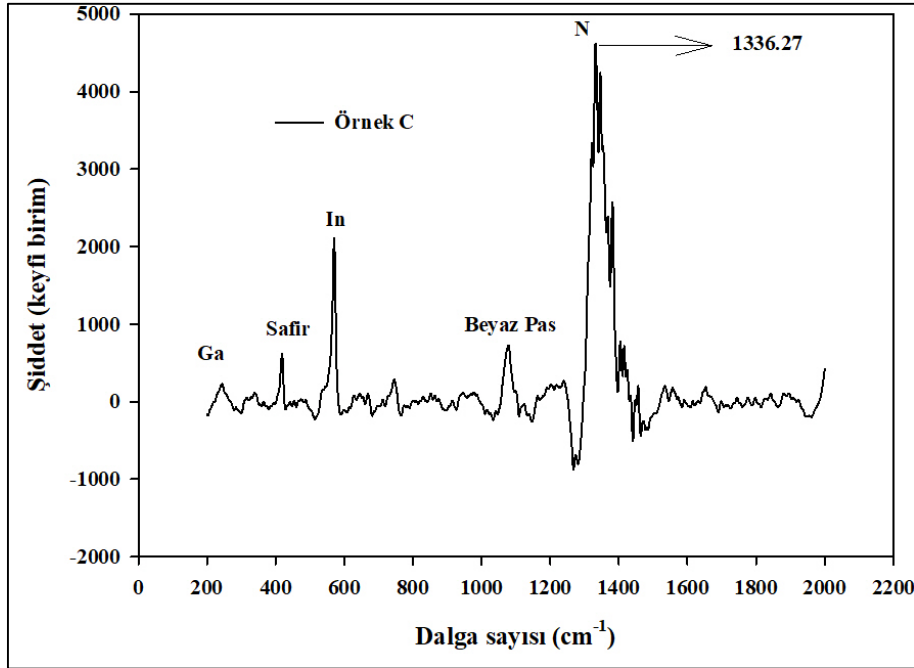
Numunelerin her biri ayrı ayrı 785 nm dalga boyuna sahip lazer ile 60 s taranmıştır. Numunelere ait Raman spektrumları sırasıyla Şekil 4.17-18-19’ da gösterilmiştir.



Şekil 4.17. Örnek A için Raman spektroskopisi



Şekil 4.18. Örnek B için Raman spektroskopisi



Şekil 4.19. Örnek C için Raman spektroskopisi

Bu çalışmanın önceki bölümlerinde olduğu gibi, malzemenin kimliği, stres, kristal boyutu, Raman spektrumu kullanılarak tahmin edilebilir. Raman spektroskopisi, InGaN/GaN yapısı hakkında önemli bilgiler sunmuştur. Ga, N, In ve safir için, pik merkezi, pik yüksekliği, pik alanı ve FWHM değerleri, Çizelge 4.15'te gösterilmiştir. Raman spektroskopisinden bir tane daha elementin varlığı tespit edilmiştir. Bu, havayla uzun süre temas etmekten oluşan beyaz pastır.

Çizelge 4.15. Örnek A ve B için Raman analizi

	Ö.A					Ö.B				
	Ga	Al ₂ O ₃	In	N	Beyaz pas	Ga	Al ₂ O ₃	In	N	Beyaz pas
Pik Merkezi	244	419	571	1336,27	1078	244	419	571	1308,11	1078
Pik Alanı Oranı(%)	3,28	1,95	8,20	17,60	3,24	3,21	2,62	9,47	17,39	6,92
Pik Yüksekliği Oranı(%)	2,22	5,83	10,74	76,03	5,16	5,82	7,98	18,89	45,53	21,76
FWHM	34,09	8,91	12,48	26,69	xxxx	33,83	9,54	10,65	25,37	xxxx

Çizelge 4.15'te görülebileceği gibi, pik şiddeti oranı, pik alanı oranı numunelerdeki element miktarlarını tahmin etmek için kullanılır. Dislokasyon yoğunluğu yüksek olduğu için, pik şiddeti oranı yüzde olarak numunedeki malzeme miktarını belirlemek için daha güvenilirdir.

Raman spektrumundan elde edilen FWHM değerleri kristal boyutu ile ilgilidir. Tek atomların atomik yarıçapını hesaplamak Eş. (4.39) ile mümkündür.

$$r = r_0 \cdot A^{1/3} \quad [18] \quad (4.39)$$

Burada r_0 katsayısı yaklaşık olarak 1.2 fm alınır. A periyodik cetveldeki atom numarasıdır ve r atomik yarıçaptır. Ga ve N için olan atomik yarıçaplar Çizelge 4.15'te FWHM değerleri ile kıyaslanmıştır. Görüldüğü gibi bunlar iyi bir uyum içindedir. Atom numaraları Ga ve N için $Ga > N$ şeklindedir. Aynı şekilde FWHM değerleri de $Ga > N$ gibidir. Eğer Çizelge 4.15 dikkatlice incelenirse örnek A için olan FWHM değerleri genel olarak örnek B'den büyüktür. Bu sonuçta gösterir ki kristal kalitesi örnek A için daha yüksektir.

Raman spektrumundan bir de stres değerleri hesaplanmıştır. Söz konusu malzemeler için baskısız pik merkezi değerleri RRUFF veri tabanından alınabilir. Eğer bu değerler deneysel değerlerden çıkarılırsa ve kalibrasyon sabitlerine bölünürse MPa biriminde stresi elde ederiz. Bu ilişkiyi gösteren eşitlik Eş. (4.40)'da verilmiştir.

$$\sigma(MPa) = \Delta w(cm^{-1}) \quad [19] \quad (4.40)$$

XRD ve Ramandan elde edilen stress değerlerinin kıyaslaması Çizelge 4.16'da verilmiştir. Stresin hesaplanması N pik merkezi kullanılarak yapılmıştır. Çünkü bu numuneler için en şiddetli pik N'indir.

Çizelge 4.16. XRD ve Raman'dan elde edilen stress değerlerinin kıyaslanması

	Ö.A	Ö.B
XRD'den stres(MPa)	-559,9	-597,3
Raman'dan stres(MPa)	1,017	-5,69

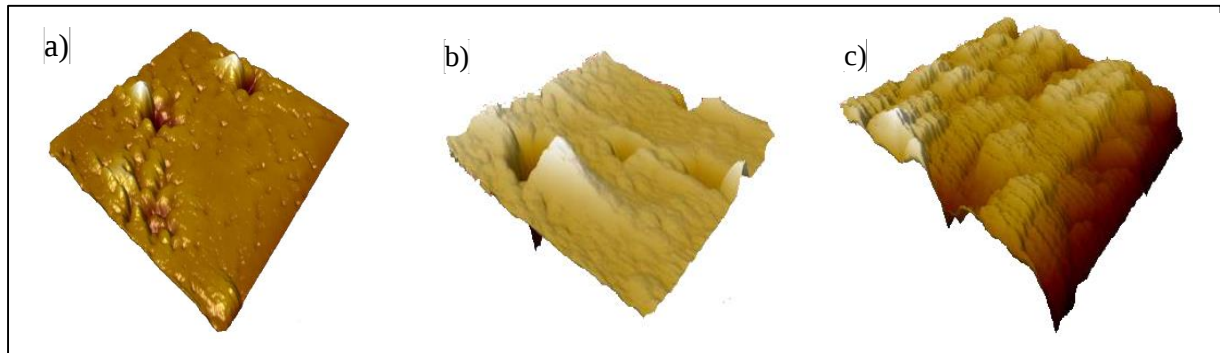
Çizelge 4.16'da görülebileceği gibi XRD ve Raman'dan bulunan stres değerleri arasında büyük fark vardır. Raman saçılmasının doğasında alttaşı bükülmesi veya dislokasyonları algılama gibi bir durum yoktur. Bu yüzden XRD sonuçları daha güvenilirdir. Stres değerlerindeki (-) işareti baskıcı stres olduğunun kanıtıdır.

Yukarıda açıklandığı gibi Raman spektrumunda algılanan bir element daha vardır. Bu da beyaz pastır ($3\text{Zn}(\text{OH})_2\text{ZnCO}_3\text{H}_2\text{O}$). Beyaz pas numunelerin havaya teması ile oluşan bir tabakadır. Örnek A'da beyaz pasın şiddeti daha azdır. Bunun nedeni numunelerin farklı temizlenme süreleridir. Çalışmamızın önceki bölümlerindeki XRD analizine benzer olarak malzemenin kimliği şiddetten, bireysel bant değişimlerinden kristalite, numunenin pozisyonuna göre spektrumdaki değişimlerden ise kompozisyon ve stres belirlenebilir.

Raman spektroskopik verileri mevcut çalışmada InGaN/GaN yapısı hakkında önemli bilgiler sunmuştur. InGaN/GaN/ Al_2O_3 yapısının Raman spektrumu 1340 cm^{-1} civarında keskin bir pik vermiştir. Bu pik InGaN/GaN yapısının üzerine büyütüldüğü Safir (Al_2O_3) yapısıyla veri tabanında örtüşmektedir. Bu titreşim Al_2O_3 'ün bağ gerilmesinden kaynaklanmaktadır. 425 cm^{-1} civarında GaN'ın Ga-N bağından kaynaklanan bir pik daha vardır. Sırasıyla, 570 cm^{-1} 'de InGaN ve 1075 cm^{-1} civarında zamanla oluşan beyaz pas pikleri de görülebilir. Örnek A'da beyaz pas pikinin şiddeti, örnek B ve C'ye nazaran daha azdır. Bunun nedeni numunelerin oksit tabakalarını gidermek için kimyasal işleme tabii tutulmalarıdır. Örnek A 15 dakika, örnek C, 5 dakika kimyasal temizleme işlemine tabii tutulurken, örnek B herhangi bir kimyasal temizleme işlemine sokulmamıştır. Bu yüzden örnek B'deki beyaz pas piki en şiddetlisidir. Bu beyaz paslar AFM görüntülerinde net olarak seçilebilir.

4.6. Morfolojik Özellikler

4.6.1. AFM

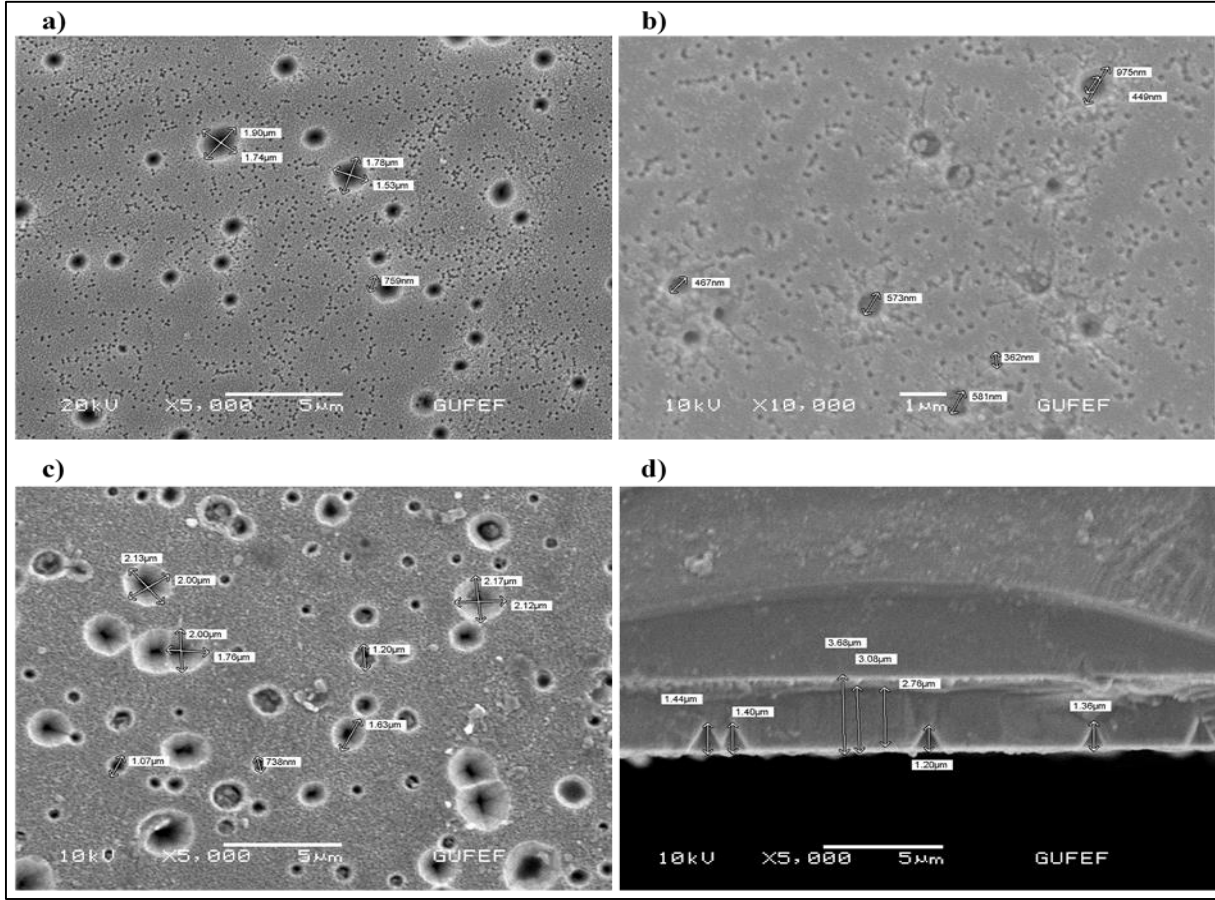


Şekil 4.20. InGaN/GaN güneş pilinin 3D AFM görüntüleri. a) Örnek A b) Örnek B c) Örnek C (oda sıcaklığında)

Şekil 4.20 numune A, B ve C'nin $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ tarama alanında görüntülerini göstermektedir (3D). Numune A'nın yüzeyi numune B ve C'ye göre daha homojendir. Numune A'nın daha pürüzsüz bir yüzey morfolojisi vardır. Yüzey pürüzlülüğünü belirlemede kullanılan RMS değerleri numune A, B ve C için sırasıyla 4,883nm, 10,225nm ve 10,045nm'dir. RMS değerlerindeki farklılıklar artan parçacık boyutu ile ilgilidir. Bu sonuçlar WH metodundan hesaplanan parçacık boyutu değerleri ile uyum içindedir. Numune A ve B'nin yüzey tabakası daha sıkı ve beyaz bölgelere sahiptir. Bu beyaz bölgeler numunelerin havayla teması ile oluşan oksit tabakalardır. Numune A'da daha az beyaz bölge vardır ve koyu renk hakimdir. Numune A'nın görüntüsünde beyaz ve piramit şekilli bölgeler görülebilir. Piramit şeklindeki tepeler Ga ve onun üstündeki beyazlar oksitler olabilir. Her üç numunenin de yüzeyinde siyah noktalar ve rastgele dizilmiş tepeler görülebilir. Bu durum gösterir ki numuneler basamaklar halinde büyütülmüştür. Basamaklar halinde büyütme pürüzsüz yüzey morfolojisi sağlar ve bu durum cihazın performansını iyi yönde etkiler [240]. Numune A, B ve C'nin yüzeyinde rastgele yönelmiş tepeler siyah noktalarla birleşmiştir. Basamaklar halinde büyütülen GaN tabakaların yüzeyinde bu tepelere birleşmiş noktalar vida tipi dislokasyonlarla ilgilidir [240]. GaN tabakaların yüzeyindeki pürüzlülük tepe genişlikleri ile yakından ilişkilidir. Tepe genişliği arttıkça yüzey pürüzlülüğü azalır. Numunelerin yüzey görüntüleri literatürdeki ile benzerdir. AFM görüntüleri InGaN ve GaN güneş pili yapılarının yüzey morfolojisinin iyi bir belirleyicisidir. Bu görüntülerin gösterdiği sonuç, büyütme sırasındaki değişimlerin yüzey morfolojisini etkilediği şeklindedir.

4.6.2. SEM

Şekil 4.21'de Örnek A, B ve C için SEM görüntüleri görülebilir. Bu görüntülerde pinhollar açıkça görülmektedir. Safir ve GaN arası örgü uyumsuzluğu ve termal genleşme katsayıları arasındaki farklılıklar nedeniyle ara yüzde tedirgin edici dislokasyonlar (TD)'ler oluşur. Bu TD'ler taşıyıcı yoğunluğunu destekleyen mikro borular gibi davranır. Bu boruların yüzeydeki uçları pinholları oluşturur. Dislokasyon noktaları (pinhollar) birim alan başına sayılıp dislokasyon yoğunluğu hesaplanabilir. Örnek A, B ve C'de dislokasyon yoğunlukları, 10^8 , 2×10^9 ve $8 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ olarak bulunmuştur. Bu sonuçlar XRD'den hesaplanan dislokasyon yoğunlukları ile uyumludur.



Şekil 4.21. InGaN/GaN MQW yapıların SEM görüntüleri

Ters V şeklindeki bazı örgü boşlukları kesitten olan SEM görüntülerinde görülebilir. Lokal bölgede statik iyon itmesi ve bu ters V'nin sivri ucunda büyüme, iyonların ağırlık etkisi ile çökmesi sayesinde. Bu ilginç ve heyecan verici bir gözlemdir.

5. SONUÇ

InGaN güneş pillerinin yatay ve düşey mozaik uzunlukları, kenar ve vida dislokasyonları gibi mozaik parametreleri HRXRD tekniği ile belirlenmiştir. GaN ve InGaN tabakalar için AFM, SEM, FTIR, PL, geçirgenlik ve Raman özellikleri incelenmiştir. Sonuçların literatürle uyum içinde olduğu görülmüştür. AFM sonuçlarında gözlenen parçacık boyutunun WH metodundan elde edilenle uyum içinde olduğu görülmüştür. FTIR, PL ve geçirgenlik ölçümleri göstermiştir ki bant aralığı hemen hemen literatürle ve önceki çalışmalardakiyle aynıdır. AFM görüntülerindeki beyaz renkli piramite benzer şekiller numunelerdeki Ga üzerinde bir oksit tabakasının oluştuğunun göstergesidir. PL spektrumunda görüldüğü üzere bant aralığı elektromanyetik spektrumda mavi bölgeye doğru kaymıştır. Bütün bu sonuçlara göre yapısal, morfolojik ve optik özelliklerin artan sıcaklıkta birbiri ile uyuştuğunu söyleyebiliriz. Aynı zamanda örnek A'daki InGaN tabakanın diğer numunelere göre daha optimize olduğunu söyleyebiliriz.

Ayrıca bu çalışmada HR-XRD'den elde edilen omega piklerinin FWHM değerleri GaN ve InGaN için ayrı ayrı kıyaslanmıştır. Görülmüştür ki GaN tabakalar için ölçülen FWHM değerleri her üç numune için de birbirleri ile hemen hemen aynıdır. A numunesindeki InGaN tabakanın FWHM değerleri numune B ve C'ye göre daha azdır. Bu durum örnek A'daki InGaN tabakasının daha iyi bir kristal kalitesine sahip olduğunun bir göstergesidir. Bunlara ilave olarak HR-XRD ölçümleri kullanılarak a- ve c- örgü parametreleri, gerilme, zorlama ve kristal boyutu da belirlenmiştir. Örgü parametreleri için hata hesabı da yapılmıştır. Hata yüzdesinin bütün numuneler için %2'den küçük olduğu belirlenmiştir. Örgü parametrelerinin hesabı sırasında GaN tabakalar için kübik sistem referans alınmıştır ve formüllerde τ açısı düzeltilmesi kullanılmıştır. InGaN tabakalar için ise Vegard yasası kullanılmıştır. $\sin\theta$ 'nın $\beta\cos\theta$ 'ya karşı grafiği çizilerek Kristal boyutu ve gerilme hesaplanmıştır. Esneklik sabitleri, Young modülü ve Poisson oranı zorlamayı hesaplamak için iki farklı yöntemde kullanılmış ve sonuçların birbiri ile uyumlu olup olmadığı kontrol edilmiştir. Her üç numune için bulunan farklı sonuçların tabakaların büyütülmesi sırasında meydana gelen kalibrasyon kaymalarından ileri geldiği söylenebilir. Bir de ısısal genleşme katsayıları hesaplanmıştır. Artan sıcaklıkla piklerin pozisyonlarındaki kaymalar grafik olarak verilmiştir. Isısal genleşme katsayıları için bulunan değerlerin de literatürle uyumlu olduğu görülmüştür.

Yapısal özellikler için son olarak InGaN/GaN/Al₂O₃ güneş pili yapısının özellikleri ters uzay haritalaması tekniği kullanılarak da incelenmiştir. RSM' nin tercih edilmesinin sebebi diğer tip taramalara göre evrensel değerlere daha yakın sonuçlar vermesidir. Bu gerçek bu çalışmada da göze çarpmıştır. Örneğin RSM'den faydalananarak elde edilen a- örgü parametreleri evrensel değerlere çok yakındır. Burada mozaik kusurlar da belirlenmiştir. Öncelikle RSM verileri LEPTOS yazılımı yardımıyla w- θ verilerine dönüştürülmüştür. Daha sonra XRD tekniğindeki standart denklemler kullanılarak gerilme, zorlama ve dislokasyonlar hesaplanmıştır. Gerilme örgü parametrelerinden faydalanılarak bulunmuştur. Bununla bağlantılı olarak zorlama, gerilmeden faydalanılarak hesaplanmıştır. InGaN tabaka için olan örgü parametreleri Vegard yasası ile bulunmuştur. Bu tabakadaki In alaşım oranı da belirlenmiştir. Ve Kurtz'un formülü kullanılarak kenar, vida ve karışık tip dislokasyon yoğunlukları hesaplanmıştır. Sonuçların evrensel değerlerle ve önceki araştırmacıların bulduğu sonuçlarla gayet uyumlu olduğu görülmüştür. Buna göre, XRD tekniğinde RSM metodunun kesinlikle daha doğru sonuç verdiği bir kez daha ispatlanmıştır.

HR-XRD sonuçlarına göre hesaplanan a-, c- örgü parametrelerinin üç numune için, incelenen (hkl) düzlemlerine göre, biraz farklı olduğu gözlemlenmiştir. Bu az farklılık büyütme şartlarının benzerliğinden ileri gelir. Bu çalışmada numunelerin incelenmesi için 300-500 °C sıcaklık aralığının seçilmesinin nedeni, bu sıcaklık aralığı dışında FWHM değerlerinde önemli bir değişiklik olmamasıdır.

FTIR ve PL spektrumlarında bant aralığı değerlerinin mavi bölgeye denk geldiği görülmüştür. 390 nm civarında ışık neredeyse tamamen soğurulmuştur. Bu sonuç literatürle uyumludur. Bu çalışmada optik özellikler detaylı incelenmiştir. PL ve Tau metodundan elde edilen yasak enerji bant aralıkları 2-3 eV aralığındadır. Swanepoel metoduna göre, safirin üzerindeki filmin kalınlığı 10000 nm civarındadır. Bu sonuç büyütme şartları ile uyumludur. Kırılma indisi değerleri yaklaşık olarak 1,76 olarak tespit edilmiştir.

Yapıların Raman analizi de yapılmıştır. Raman analizinde kompozisyonun dışında stres değerleri de belirlenmiştir. Ayrıca Raman spektrumunda, yapıların uzun süre havayla temasıyla oluşan beyaz pas pikleri net bir şekilde gözlemlenmiştir. Bulunan stres değerlerinin XRD'den elde edilen stres değerleriyle aynı dereceden olduğu görülmüştür. Raman analizinde detekte edilen beyaz pas AFM görüntülerinde görülebilir.

Literatürde burkulma ve eğim açılarıyla ilgili sadece birkaç çalışma dikkat çekmiştir. Örneğin Lafford ve arkadaşları, alaşımın içeriğinin ve ara tabaka kalınlığının $Al_xGa_{1-x}N/AlN/GaN$ çoklu yapıların, eğim ve burkulma açılarının üzerindeki etkilerini incelemiştir. Wang ve arkadaşları kristal boyutunun, eğim ve burkulma açlarına etkisini, GaN üzerine Metal Organik Kimyasal Buhar Biriktirme yöntemiyle (MOCVD) büyütülen InN'in etkilerini araştırmışlardır. Yine Lafford ve arkadaşları, GaN epitaksiyel tabakalardaki burkulmayı, büyütme sıcaklığının bir fonksiyonu olarak ölçmüşlerdir. Ayrıca optik özellikler açısından Swanepoel (1983), tek tabaka yapı için zarf metodunu ileri sürmüştür. Zarf metodu, optik özellikleri belirlemek için kullanılmıştır. Bu çalışmayı özgün kılan, zarf metodunun çok tabakalı yapıya uyarlanmasıdır. Bulunan sonuçlar ortalama değerlerdir. PL spektrumunda pik merkezinden elde edilen yasak enerji bant aralığı değeri de Tau metodundan elde edilen sonuçla iyi bir uyum içindedir.

İleriye dönük olarak, PL şiddetinin XRD verilerindeki FWHM değerlerine karşı grafiği çizilerek stres hesaplanabilir ve “*XRD vs Raman for InGaN/GaN structures* (2019)” isimli çalışma genişletilebilir. Buna ilaveten Swanepoel zarf metodundan belirlenen sönüm ve soğurma katsayılarından faydalanarak dielektrik özellikler karakterize edilebilir.

KAYNAKLAR

1. İnternet: National Renewable Energy Laboratory. (August, 2011). URL: <http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5/>. Adresinden 16 Ağustos 2011 tarihinde alınmıştır.
2. Olson, J.M., Aljassim, M.M., Kibbler, A., & Jones, K.M. (1986). MOCVD Growth and Characterization of GaN on Si. *Journal of Crystal Growth*, 77(1-3), 515-523.
3. Devos, A. (1992). Endoreversible Thermodynamics of Solar Energy Conversion, *Oxford University Press*, New York.
4. Yu, E.T. and Manasreh, M.O. (1996). III-V Nitride Semiconductors Applications and Devices, Vol. 16.
5. Strite, S. and Morkoc, H. (1992). GaN AlN and InN: A review. *Journal of Vacuum Science and Technology*, B 10(4).
6. Mohammad, S.N. and Morkoc, H. (1996). Progress and prospects of group-III nitride semiconductors. *Progress in Quantum Electronics*, 20(5/6), 361-525.
7. Dridi, Z. B., Bouhafs., Ruterana, P. (2003). First-principles investigation of lattice constants and bowing parameters in wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ alloys. *Semiconductor Science Technology*, 18, 850-859.
8. Wu, X.H. , Brown, L.M., Kopolmek, D. , Keller, S., Keller, B., Denbaars, S.P., Speck, J.S. (1996). Defect structure of metal-organic chemical vapor deposition-grown epitaxial (0001) GaN/ Al_2O_3 . *Journal of Applied Physics*, 80, 3228-3239.
9. Weimann, N.G. and Eastman, L.F. (1998). The role of dislocation scattering in n-type GaN films. *Journal of Applied Physics*, 83, 3656-3669.
10. Ozturk, M.K., Hongbo, Yu., Sarıkavak, B., Korcak, S., Ozelik, S., and Ozbay, E. (2010). Structural analysis of an InGaN/GaN based light emitting diode by X-ray diffraction. *Journal of Materials Science in Electronics*, 21, 185-191.
11. Zauner, A.R.A., Weyher, J.L., Plomp, M., Kirilyuk, V., Grzegory, I., Van Enkevort, W.J.P., Schermer, J.J., Hageman, P.R., and Larsen, P.K. (2000). *Journal of Crystal Growth*, 210, 435-442.
12. Yu, H., Ozturk, M.K., Ozelik, S., and Ozbay, E. (2006). The effect of growth conditions on the optical and structural properties of InGaN/GaN MQW LED structures grown by MOCVD. *Journal of Crystal Growth*, 293, 273-289.
13. Lafford, T. A., Parbrook, P. J., and Tanner, B. K. (2003). Influence of alloy composition and interlayer thickness on twist and tilt mosaic in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heterostructures. *Applied Physics Letters*, 83(26), 5434-5436.
14. Wang, H., Huang, Y., Sun, Q., Chen, J., Wang, L. L., Zhu, J.J., Yang, H. (2006). Effects of grain size on the mosaic tilt and twist in InN films grown on GaN by metal-organic chemical vapor deposition. *Applied Physics Letters*, 89(9), 752-769.

15. Lafont, U., van Zeijl, H., & van der Zwaag, S. (2012). Increasing the reliability of solid state lighting systems via self-healing approaches: A review. *Microelectronics Reliability*, 52(1), 71-89.
16. Chito E. K. (2008). *Revisiting Nitrite Semiconductors: Epilayers, p-type Doping and Nanowires*, Doctor of Philosophy, University of Canterbury, New Zeland.
17. Ruterana, P., Albrecht, M., Neugebauer, J. (1996). *Nitrite Semiconductors Handbook on Materials and Devices*, Materials properties. Vol.1
18. Steven P. D. (1992). *Gallium Nitrite Materials and Technology*, Chapter 3, International Society For Optics and Photonics.
19. Zinki M. (2007). *Thermodynamic Studies on the Synthesis of Nitrites and Epitaxial Growth of InGaN*, MSc Thesis University of Central Florida, Orlando, Florida.
20. Cullity, B. D. and Stock, S. R. (2001). *Elements of X-Ray Diffraction* 3rd edn, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall.
21. Frank, F. C. (1965). *On Miller-Bravais indices and four dimensional vectors*. Acta Crystallogr.
22. Fewster, P. F. (2003). *X-Ray Scattering from Semiconductors*. 2nd edn (London: Imperial College Press)
23. Pietsch, U., Holy, V. and Baumbach, (2004). *T High Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers*. 2nd (New York: Springer)
24. Birkholz, M., Fewster, P. F. and Genzel, C. (1990). *Thin Film Analysis by X-Ray Scattering*. (Weinheim: Wiley- VCH)
25. Poust, B., Heying, B., Hayashi, S., Ho, R., Matney, K., Sandhu, R., Wocotowicz, M. and Goorsky, M. (2005). Scans Along arbitrary directions in reciprocal space and the analysis of GaN films on SiC. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 38 (10A), A93-A98
26. Born, M. and Wolf, E. (1999). *Principles of optics*. 7th edn (Cambridge: Cambridge University Press)
27. Colombi, P., Agnihotri, D. K., Asadchikov, V. E., Bontempi, E., Bowen, D. K., Chang, C. H., Wiemer, C. (2008). Reproducibility in X-ray reflectometry: results from the first world-wide round-robin experiment. *Journal of Applied Crystallography*, 41, 143-152.
28. Fatemi, M. (2005). *Absolute measurement of lattice parameters in single crystals and epitaxial layers on a double crystal x-ray diffractometer*. Acta Crystallogr. A61 301
29. Fewster, P. F. and Andrew, N. L. (1998). *Strain Analysis by x-ray diffraction*. Thin Solid Films.
30. Wilson, A. J. C. (2006). *Determination of lattice parameters*. International Tables for Crystallography C (Berlin: Springer)

31. Fewster, P. F. and Andrew, N. L. (1995). Absolute Lattice Parameter Measurement. *Journal of Applied Crystallography*, 28, 451-458.
32. Deslattes, R. D., Kessler, E. G. Jr., Indelicato, P. and Lindroth, E. (2006). *International Tables for Crystallography C*. (Berlin Springer).
33. Bond, W. L. (1960). *Presission Lattice Constant determination*. Acta Crystallogr.
34. Herres, N., Kirste, L., Obloh, H., Köhler, K., Wagner, J. and Koidl, P. (2002). X-ray determination of the composition of partially strained group III nitride layers using the extended Bond method. *Materials Science Engineering B*, 91-92, 425-432.
35. Darachieva, V., Paskova, T., Paskov, P. P., Monemar, B., Ashkenov, N. and Schubert, M. (2005). Structural Characteristics and Lattice Parameters of hydride vapour phase epitaxial GaN free-standing substrates. *Journal of Applied Physics*.
36. Darakchieva, V., Monemar, B. and Usui, A. (2007). On the lattice parameters of GaN. *Applied Physics Letter*, 91, 528-539.
37. Sanz-Hervas, A., Aguilar, M., Sanches, Rojas, J. L., Sacedon, A., Calleja, E., Munoz, E., Villar, C., Abril, E. C. and Lopez, M. (1997). Observation of non-trigonal lattice distortion in pseudomorphic InGaAs/GaAs superlattices grown on misoriented (111) B GaAs. *Journal of Applied Physics*, 82.
38. Leszczynski, M., Teisseyre, H., Suski, T., Grzegory, I., Bockowski, M., Jun, J., Porowski, S., Pakula, K., Baranowski, J. M., Foxon, C. T. and Cheng, T. S. (1996). Lattice Parameters of Gallium Nitride. *Applied Physics Letter*, 69 (73).
39. Krysko, M., Sarzynski, M., Domagala, J., Grzegory, I., Lucznik, B., Kamler, G., Porowski, S. and Leszczynski, M. (2005). The influence of lattice parameter variation on microstructure of GaN single crystals. *Journal Alloys Compounds*, 401 (1-2), 261-264.
40. Porowski, S. (1998). Bulk and homoepitaxial GaN-growth and characterisation. *Journal of Crystal Growth*, 189/190, 153-162.
41. Van de Walle, C. G. (2003). Effects of impurities on the lattice parameter of GaN. *Physics Review B*, 68 165209.
42. Prystawko, P., Leszczynski, M., Sliwinski, A., Teisseyre, H., Suski, T., Bockowski, M., Porowski, S., Damagala, J., Kirchner, C., Pelzmann, A., Schauler, M. and Kamp, M. (1999). Epitaxy of ternary nitrides on GaN single crystals. *Journal of Crystal Growth*, 198/199 1061-1069.
43. Tanaka, M., Nakahata, S., Sogabe, K., Nakata, H. and Tobioka, M. (1997). Morphology and x-ray diffraction peak widths of aluminum nitride single crystals prepared by the sublimation method. *Japanese Journal of Applied Physics*, 36 1062.
44. Schulz, H. and Thiemann, K. H. (1977). *Crystal structure refinement of AlN and GaN*. Solid State Commun. 23 815.
45. Paszkowicz, W., Podsiado, S. and Minikayev, R. (2004). Rietveld-refinement study of aluminium and gallium nitrides. *Journal of Alloys Compounds*, 382 100.

46. McMurdie, H. F., Morris, M. C., Evans, E. H., Paretzkin, B., de Groot, J. H., Hubbard, C. R. and Carmel, S. J. (1975). *Aluminium nitride Standard X-ray Diffraction Patterns*. (NBS Monograph 25, Sec. 12) (Washington, DC: Institute for Materials Research, National Bureau of Standards) p 5.
47. Iwanaga, H., Kunishige, A., Takeuchi, S. (2000). Anisotropic thermal expansion in wurtzite-type crystals. *Journal of Materials Science*, 35 2451-2459.
48. Singh, N. B., Berghmans, A., Zhang, H., Wait, T., Clarke, R. C., Zingaro, J. and Golombeck, J. C. (2003). Physical vapor transport growth of large AlN crystals. *Journal of Crystal Growth*, 250 107.
49. Paszkowicz, W., Knapp, M., Podsiado, S., Kamler, G. and Peka, G. B. (2002). Lattice parameters of aluminium nitride in the range 10–291 K. *Acta Physics*, Pol. 101 781.
50. Yamaguchi, M., Yagi, T., Sota, T., Deguchi, T., Shimada, K. and Nakamura, S. (1999). Brillouin scattering study of bulk GaN. *Journal of Applied Physics*, 85 8502.
51. Harutyunyan, V. S., Aivazyan, A. P., Weber, E. R., Kim, Y., Park, Y. and Subramanya, S. G. (2001). High-resolution x-ray diffraction strain–stress analysis of GaN/sapphire heterostructures. *Journal Physics D: Applied Physics*, 34 A35.
52. Kisielowski, C., Krüger, J., Ruvimov, S., Suski, T., Ager, J. W., Jones, E., Liliental-Weber, Z., Rubin, M., Weber, E. R., Bremser, M. D. and Davis, R. F. (1996). Strain-related phenomena in GaN thin films. *Physics Review B*, 54 17745.
53. Detchprohm, T., Hiramatsu, K., Itoh, K. and Akasaki, I. (1992). Relaxation process of the thermal strain in the GaN/ α -Al₂O₃ heterostructure and determination of the intrinsic lattice constants of GaN free from the strain. *Japanese Journal of Applied Physics*, 31 L1454.
54. Angerer, H., Brunner, D., Freudenberg, F., Ambacher, O., Stutzmann, M., Hopler, R., Korner, H. J. (1997). Determination of the Al mole fraction and the band gap bowing of epitaxial Al_xGa_{1-x}N films. *Applied Physics Letters*, 71(11), 1504-1506.
55. Lagerstedt, O. and Monemar, B. (1979). Variation of lattice parameters in GaN with stoichiometry and doping. *Physics Review B*, 19 3064.
56. Reeber, R. R. and Wang, K. (2000). Lattice parameters and thermal expansion of GaN. *Journal of Materials Research*, 15 40.
57. Balkas, C. M. and Davis, R. F. (1996). Synthesis routes and characterization of high-purity, single-phase gallium nitride powders. *Journal of the American Ceramic Society*, 79 2309.
58. Deguchi, T., Ichiryu, D., Toshikawa, K., Sekiguchi, K., Sota, T., Matsuo, R. and Azuhata, T. (1999). Structural and vibrational properties of GaN. *Journal of Applied Physics*, 86 1860.

59. Leszczynski, M., Suski, T., Teisseyre, H., Perlin, P., Grzegory, I., Bockowski, M., Jun, J., Polowski, S. and Major, J. (1995). Lattice constants, thermal expansion and compressibility of gallium nitride. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 28 A149.
60. Chaaben, N., Boufaden, T., Fouzri, A., Bergaoui, M. S. and El, Jani, B. (2006). High-resolution x-ray diffraction of GaN grown on Si(1 1 1) by MOVPE. *Applied Surface Science*, 253 241.
61. Leszczynski, M., Grzegory, I., Teisseyre, H., Suski, T., Bockowski, M., Jun, J., Baranowski, J. M., Porowski, S. and Domagala, J. (1996). The microstructure of gallium nitride monocrystals grown at high pressure. *Journal of Crystal Growth*, 169, 235-239.
62. Paszkowicz, W. (1999). *X-ray powder diffraction data for indium nitride*. Powder Diffract. 14 258.
63. Paszkowicz, W., Adamczyk, J., Krukowski, S., Leszczyński, M., Porowski, S., Sokolowski, J. A., Michalec, M. and Łasocha, W. (1999). Lattice parameters, density and thermal expansion of InN microcrystals grown by the reaction of nitrogen plasma with liquid indium. *Philosophical Magazine A*, 79, 1145-1152.
64. Maleyre, B., Ruffenach, S., Briot, O. and van der Lee, A. (2004). Lattice parameters of relaxed wurtzite indium nitride powder obtained by MOCVD. *Superlattice Microstructure*, 36, 527-539.
65. Dyck, J. S., Kash, K., Hayman, C. C., Argoitia, A., Grossner, M. T., Angus, J. C. and Zhou, W. (1999). Synthesis of bulk polycrystalline indium nitride at subatmospheric pressures. *MRS Symposia Proceedings*, 14, 2411-2419.
66. McNeil, L. E., Grimsditch, M. and French, R. H. (1993). Vibrational spectroscopy of aluminium nitride. *Journal of the American Ceramic Society*, 76, 1132-1148.
67. Yonenaga, I., Shima, T. and Sluiter, M. H. F. (2002). Nano-indentation hardness and elastic moduli of bulk single-crystal AlN. *Japanese Journal of Applied Physics*, 41, 4620-4628.
68. Gerlich, D., Dole, S. L. and Slack, G. A. (1986). Elastic properties of aluminum nitride. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 47 437.
69. Tsubouchi, K., Sugai, K. and Mikoshiba, N. (1981). *Ultrasonic Symposium Proceedings* (New York: IEEE) 375.
70. Boch, P., Glandus, J. C., Jarrige, J., Lecompte, J. P. and Mexmain, J. (1982). Sintering, oxidation and mechanical properties of hot pressed aluminium nitride. *Ceramics International*, 8, 34-39.
71. Zoroddu, A., Bernardini, F., Ruggerone, P. and Fiorentini, V. (2001). First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: comparison of local and gradient-corrected density-functional theory. *Physics Review B*, 64, 045208.

72. Chisholm, J. A., Lewis, D. W. and Bristowe, P. D. (1999). Classical simulations of the properties of group-III nitrides. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 11, L235-L240.
73. Kato, R. and Hama, J. (1994). First-principles calculation of the elastic stiffness tensor of aluminium nitride under high pressure. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 6, 7617-7620.
74. Wright, A. F. (1997). Elastic properties of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN. *Journal of Applied Physics*, 82, 2833.
75. Kim, K., Lambrecht, W. R. L. and Segall, B. (1994). Electronic structure of GaN with strain and phonon distortions. *Physics Review B*, 50, 1502-1509.
76. Kim, K., Lambrecht, W. R. L. and Segall, B. (1996). Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN. *Physics Review B*, 53, 16310.
77. Shimada, K., Sota, T. and Suzuki, K. (1998). First-principles study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN. *Journal of Applied Physics*, 84, 4951.
78. Ruiz, E., Alvarez, S. and Alemany, P. (1994). Electronic structure and properties of AlN. *Journal of Applied Physics*, 49, 7115-7119.
79. Reeber, R. R. and Wang, K. (2001). High temperature elastic constant prediction of some group III-nitrides. *MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Res*, 6, 3.
80. Polian, A., Grimsditch, M. and Grzegory, I. (1996). Elastic constants of gallium nitride. *Journal of Applied Physics*, 79, 3343-3349.
81. Yamaguchi, M., Yagi, T., Azuhata, T., Sota, T., Suzuki, K., Chichibu, S. and Nakamura, S. (1997). Brillouin scattering study of gallium nitride: elastic stiffness constants. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 9, 241-248.
82. Schwarz, R. B., Khachatryan, K. and Weber, E. R. (1997). Elastic moduli of gallium nitride. *Applied Physics Letter*, 70, 1122.
83. Tagaki, Y., Ahart, M., Azuhata, T., Sota, T., Suzuki, K. and Nakamura, S. (1996). Brillouin scattering study in the GaN epitaxial layer. *Physica B*, 219/220, 547.
84. Moram, M. A., Barber, Z. H. and Humphreys, C. J. (2007). Accurate experimental determination of the Poisson's ratio of GaN using high-resolution x-ray diffraction. *Journal of Applied Physics*, 102, 023505.
85. Perry, W. G., Zheleva, T., Bremser, M. D., Davis, R. F., Shan, W. and Song, J. J. (1996). Correlation of biaxial strains, bound exciton energies, and defect microstructures in GaN films grown on AlN/6H-SiC (0 0 0 1) substrates. *Journal of Electronics Materials*, 26, 224.
86. Deger, C., Born, E., Angerer, H., Ambacher, O., Stutzmann, M., Hornsteiner, J., Riha, E. and Fischerauer, G. (1998). Sound velocity of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ thin films obtained by surface acoustic-wave measurements. *Applied Physics Letter*, 72, 2400.

87. Azuhata, T., Sota, T. and Suzuki, K. (1996). Elastic constants of III–V compound semiconductors: modification of Keyes' relation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 8, 3111-3118.
88. Davydov, V. Y., Averkiev, N. S., Goncharuk, I. N., Nelson, D. K., Nikitina, I. P., Polkovnikov, A. S., Smirnov, A. N. and Jacobson, M. A. and Semchinova, O. K. (1997). Raman and photoluminescence studies of biaxial strain in GaN epitaxial layers grown on 6H–SiC. *Journal of Applied Physics*, 82, 5097-5102.
89. Łepkowski, S. P., Majewski, J. A. and Jurczak, G. (2005). Nonlinear elasticity in III-N compounds: Ab initio calculations. *Physics Review B*, 72, 245201.
90. Wagner, J. M. and Bechstedt, F. (2002). Properties of strained wurtzite GaN and AlN. *Physics Review B*, 66, 115202.
91. Wang, X., Che, S. B., Ishitani, Y. and Yoshikawa, A. (2006). Effect of epitaxial temperature on N-polar InN films grown by molecular beam epitaxy. *Journal of Applied Physics*, 99, 073512.
92. Wang, K. and Reeber, R. R. (2001). Thermal expansion and elastic properties of InN. *Applied Physics Letter*, 79, 1602-1069.
93. Marmalyuk, A. A., Akchurin, R. K. and Gorbylev, V. A. (1998). Evaluation of elastic constants of AlN, GaN, and InN. *Inorganic Materials*, 34, 691.
94. Ruh, R., Zangvil, A. and Barlowe, J. (1985). Elastic properties of SiC, AlN, and their solid solutions and particulate composites. *American Ceramic Society Bulletin*, 64, 1368.
95. Drory, M. D., Ager, J. W., Suski, T., Grzegory, I. and Porowski, S. (1996). Hardness and fracture toughness of bulk single crystal gallium nitride. *Applied Physics Letter*, 69, 4044-4049.
96. Cimalla, V., Pezoldt, J. and Ambacher, O. (2007). Group III nitride and SiC based MEMS and NEMS: materials properties, technology and applications. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 40, 6386.
97. Khan, M. A., Shatalov, M., Maruska, H. P., Wang, H. M. and Kuokstis, E. (2005). III–nitride UV devices. *Japanese Journal of Applied Physics*, 44, 7191.
98. Angerer, H., Brunner, D., Freudenberg, F., Ambacher, O., Stutzmann, M., Hopler, R., Korner, H. J. (1997). Determination of the Al mole fraction and the band gap bowing of epitaxial $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ films. *Applied Physics Letters*, 71(11), 1504-1506.
99. Lorenz, K., Franco, N., Alves, E., Watson, I. M., Martin, R. W. and O'Donnell, K. P. (2006). Anomalous ion channeling in AlInN/GaN bilayers: determination of the strain state. *Physics Review Letter*, 97, 085501.

100. Schuster, M., Gervais, P. O., Jobst, B., Hösler, W., Averbek, R., Riechert, H., Iberl, A. and Stömmmer, R. (1999). Determination of the chemical composition of distorted InGaN/GaN heterostructures from x-ray diffraction data. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 32, A56.
101. Stepanov, S., Wang, W. N., Yavich, B. S., Bougrov, V., Rebane, Y. T. and Shreter, Y. G. (2001). Influence of Poisson's ratio uncertainty on calculations of the bowing parameter for strained InGaN layers. *MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Res*, 6, 6.
102. Hornstra, J. and Bartel, W. (1978). Determination of the lattice constant of epitaxial layers of III-V compounds. *Journal of Crystal Growth*, 44, 513-519.
103. Pereira, S., Correia, M. R., Pereira, E., Trager-Cowan, C., Sweeney, F. and O'Donnell, K. P. (2002). Structural and optical properties of InGaN/GaN layers close to the critical layer thickness. *Applied Physics Letters*, 81, 1207-1213.
104. Pereira, S., Correia, M. R., Pereira, E., O'Donnell, K. P., Alves, E., Sequeira, A. D. and Franco, N. (2001). Interpretation of double M A Moram and M E Vickers x-ray diffraction peaks from InGaN layers. *Applied Physics Letters*, 79, 1432-1439.
105. Liliental-Weber, Z., Benamara, M., Washburn, J., Domagala, J. Z., Bak-Misiuk, J., Piner, E. L., Roberts, J. C. and Bedair, S. M. (2001). Relaxation of InGaN thin layers observed by x-ray and transmission electron microscopy studies. *Journal of Electronic Materials*, 30, 439-445.
106. Pereira, S., Correia, M. R., Pereira, E., O'Donnell, K. P., Trager-Cowan, C., Sweeney, F. and Alves, C. (2001). Compositional pulling effects in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ layers: a combined depth-resolved cathodoluminescence and Rutherford backscattering/channeling study. *Physics Review B*, 64, 205311.
107. Walukiewicz, W., Ager, J. W., Yu, K. M., Liliental-Weber, Z., Wu, J., Li, S. X., Jones, R. E. and Denlinger, J. D. (2006). Structure and electronic properties of InN and In-rich group III-nitride alloys. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 39, R83.
108. O'Donnell, K. P., Pereira, S., Martin, R. W., Edwards, P. R., Tobin, M. J. and Mosselmans, J. F. W. (2003). Wishful physics—some common misconceptions about InGaN. *Physica Status Solidi a*, 195, 532-540.
109. Aumer, M. E., LeBoeuf, S. F., Moody, B. F., Bedair, S. M., Nam, K., Lin, J. Y. and Jiang, H. X. (2002). Effects of tensile, compressive, and zero strain on localized states in AlInGaN/InGaN quantum-well structures. *Applied Physics Letters*, 80, 3099.
110. Roucka, R., Tolle, J., Chizmeshya, A. V. G., Crozier, P. A., Poweleit, C. D., Smith, D. J., Tsong, I. S. T. and Kouvetakis, J. (2002). Low-temperature epitaxial growth of the quaternary wide band gap semiconductor SiCAlN. *Physical Review Letter*, 88, 206102.
111. Tang, Y. H. and Tsai, M. H. (2005). Electronic structures of wide-band-gap $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ quaternary semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 97, 103702.

112. Masters, C. B. and Salamon, N. J. (1993). Geometrically nonlinear stress–deflection relations for thin film/substrate systems. *International Journal of Engineering Science*, 31, 915-924.
113. Freund, L. B., Floro, J. A. and Chason, E. (1999). Extensions of the Stoney formula for substrate curvature to configurations with thin substrates or large deformations. *Applied Physics Letter*, 74, 1987-1992.
114. Kavouras, P., Komninou, P., Katsikini, M., Papaioannou, V., Antonopoulos, J. and Karakostas, T. (2000). Anisotropic microhardness and crack propagation in epitaxially grown GaN films. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 12, 10241.
115. Korakakis, D., Ludwig, K. F. and Moustakas, T.D. (1997). Long range order in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ films grown by molecular beam epitaxy. *Applied Physics Letter*, 71, 72-80.
116. Behbehani, M. K., Piner, E. L., Liu, S. X., El-Masry, N. A. and Bedair, S. M. (1999). Phase separation and ordering coexisting in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ grown by metal organic chemical vapor deposition. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 75, 2202.
117. Kirste, L., Pavlov, K. M., Mudie, S. T., Punegov, V. I. and Herres, N. (2005). Analysis of the mosaic structure of an ordered (Al, Ga)N layer. *Journal of Applied Crystallography*, 38, 183-190.
118. Northrup, J. E., Romano, L. T. and Neugebauer, J. (1999). Surface energetics, pit formation, and chemical ordering in InGaN alloys. *Applied Physics Letter*, 74, 2319.
119. Albrecht, M., Lymperakis, L., Neugebauer, J., Northrup, J. E., Kirste, L., Leroux, M., Grzegory, I., Porowski, S. and Strunk, H. P. (2005). Chemically ordered $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloys: spontaneous formation of natural quantum wells. *Physical Review B*, 71, 035314.
120. Warren, B. E. (1990). *X-Ray Diffraction* (New York: Dover).
121. Ohring, M. (2002). *Materials Science of Thin Films; Deposition and Structure*. 2nd edn (New York: Academic).
122. Dadgar, A., Strittmatter, A., Bläsing, J., Poschenrieder, M., Contreras, O., Veit, P., Krost, A. (2003). Metalorganic chemical vapor phase epitaxy of gallium-nitride on silicon. In *Physica Status Solidi C: Conferences*, 0, 1583-1606.
123. Clos, R., Dadgar, A. and Krost, A. (2004). Wafer curvature in the nonlinear deformation range. *Physica Status Solidi a*, 201, R75-R81.
124. Halliwell, M. A. G. and Chua, S. J. (1998). Determining substrate orientation using a high-resolution diffractometer. *Journal of Crystal Growth*, 192, 456-461.
125. Datta, R., Kappers, M. J., Vickers, M. E., Barnard, J. S. and Humphreys, C. J. (2004). Growth and characterisation of GaN with a reduced dislocation density. *Superlattice Microstructure*, 36, 393-399.

126. Metzger, T., Höppler, R., Born, E., Ambacher, O., Stutzmann, M., Stömmmer, R., Schuster, M., Göbel, H., Christiansen, S., Albrecht, M. and Strunk, H. P. (1998). Defect structure of epitaxial GaN films determined by transmission electron microscopy and triple-axis x-ray diffractometry. *Philosophical Magazine A*, 77, 1013-1019.
127. Moram, M. A., Kappers, M. J., Zhang, Y., Barber, Z. H. and Humphreys, C. J. (2008). Very low dislocation density, resistive GaN films obtained using transition metal nitride interlayers. *Physica Status Solidi a*, 205, 1064-171.
128. Heinke, H., Kirchner, V., Einfeldt, S. and Hommel, D. (2000). X-ray diffraction analysis of the peak structure in epitaxial GaN. *Applied Physics Letter*, 77, 2145-2152.
129. Vickers, M. E., Kappers, M. J., Datta, R., McAleese, C., Rayment, F. D. R. and Humphreys, C. J. (2005). In-plane imperfections in GaN studied by x-ray diffraction. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 38, A99-A105.
130. Wu, X. H., Fini, P., Tarsa, E. J., Heying, B., Keller, S., Mishra, U. K., DenBaars, S. P. and Speck, J. S. (1998). Dislocation generation in GaN heteroepitaxy. *Journal of Crystal Growth*, 189/190, 231-239.
131. Hordon, M. J. and Averbach, B. L. (1961). X-ray measurements of dislocation density in deformed copper and aluminium single crystals. *Acta Metallurgica*, 9, 237-245.
132. Chierchia, R., Böttcher, T., Figge, S., Diesselberg, M., Heinke, H. and Hommel, D. (2001). Mosaicity of GaN epitaxial layers: simulation and experiment. *Physica Status Solidi b*, 228 403.
133. Lafford, T. A., Tanner, B. K. and Parbrook, P. J. (2003). Direct measurement of twist mosaic in GaN epitaxial films as a function of growth temperature. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 36, A245.
134. Kaganer, V. M., Brandt, O., Trampert, A. and Ploog, K. H. (2005). X-ray diffraction peak profiles from threading dislocations in GaN epitaxial films. *Physical Review B*, 72, 045423.
135. De Keijser, T. H., Langford, J. I., Mittemeijer, E. J. and Vogels, A. B. P. (1982). Use of the Voigt function in a single line method for the analysis of x-ray diffraction line broadening. *Journal of Applied Crystallography*, 15, 308-315.
136. Heinke, H., Kirchner, V., Einfeldt, S. and Hommel, D. (1999). Analysis of the defect structure of epitaxial GaN. *Physica Status Solidi a*, 176, 391-402.
137. Heyring, B., Wu, X. H., Keller, S., Li, Y., Kapolnek, D., Keller, D. P., Den Baars, S. P. and Speck, J. S. (1996). Role of threading dislocation structure on the X-ray diffraction peak widths in epitaxial GaN films. *Applied Physics Letter*, 68, 643-650.
138. Moram, M. A., Vickers, M. E., Kappers, M. J. and Humphreys, C. J. (2008). The effect of wafer curvature on rocking curves of gallium nitride films. *Journal of Applied Physics*, 103, 093528.

139. Gibart, P. (2004). Metal organic vapour phase epitaxy of GaN and lateral overgrowth. *Reports on Progress in Physics*, 67, 667-674.
140. Linthicum, K., Gehrke, T., Thomson, D., Carlson, E., Rajagopal, P., Smith, T., Bachelor, D. and Davis, R. (1999). Pendoeepitaxy of gallium nitride thin films. *Applied Physics Letter*, 75, 196-203.
141. Kappers, M. J., Datta, R., Oliver, R. A., Rayment, F. D. G., Vickers, M. E. and Humphreys, C. J. (2007). Threading dislocation reduction in (0 0 0 1) GaN thin films using SiNx interlayers. *Journal of Crystal Growth*, 300, 70-78.
142. Moram, M. A., Zhang, Y., Kappers, M. J., Barber, Z. H. and Humphreys, C. J. (2007). Dislocation reduction in gallium nitride films using scandium nitride interlayers. *Applied Physics Letter*, 91, 152101.
143. Williams, D. B., and Carter, C. B. (1996). *Transmission Electron Microscopy* (Berlin: Springer)
144. Kobayashi, K., Yamaguchi, A. A., Kimura, S., Sunakawa, H., Kimura, A. and Usui, A. (1999). X-ray rocking curve determination of twist and tilt angles in GaN films grown by an epitaxial-lateral-overgrowth technique. *Japanese Journal of Applied Physics*, 38, L611-L617.
145. Srikant, V., Speck, J. S. and Clarke, D. R. (1997). Mosaic structure in epitaxial thin films having large lattice mismatch. *Journal of Applied Physics*, 82, 4286.
146. Herres, N., Obloh, H., Bachem, K. H. and Helming, K. (1999). X-ray analysis of the texture of heteroepitaxial gallium nitride films. *Materials Science Engineering B*, 59, 202-209.
147. Lafford, T. A., Ryan, P. A., Joyce, D. E., Goorsky, M. S. and Tanner, B. K. (2003). Direct measurement of twist mosaic in epitaxial GaN. *Physica Status Solidi a*, 195, 265-272.
148. Ban, Y. P., Yang, Z. J., Chen, Z. T., Lu, Y., Yu, T. J., Hu, X. D., Xu, K. and Zhang, G. Y. (2006). Reduction of the edge threading dislocation density in n-type GaN by Si delta-doping. *Journal of Crystal Growth*, 286, 255-261.
149. Sun, Y. J., Brandt, O., Liu, T. Y., Trampert, A., Ploog, K. H., Blasing, J. and Krost, A. (2002). Determination of the azimuthal orientational spread of GaN films by x-ray diffraction. *Applied Physics Letter*, 81, 4928.
150. Lee, S. R., West, A. M., Allerman, A. A., Waldrip, K. E., Follstaedt, D. M., Provencio, P. P., Koleske, D. D. and Abernathy, C. R. (2005). Effect of threading dislocations on the Bragg peakwidths of GaN, AlGaIn and AlN heterolayers. *Applied Physics Letter*, 86, 241904.
151. Paduano, Q. S., Drehman, A. J., Weyburne, D. W., Kosłowski, J., Serafinczuk, J., Jasinski, J. and Liliental-Weber, Z. (2003). X-ray characterisation of high quality AlN epitaxial layers: effect of growth condition on layer structural properties. *Physica Status Solidi c*, 0, 2014.

152. Ung'ar, T. and Borb'ely, A. (1996). The effect of dislocation contrast on x-ray line broadening: a new approach to line profile analysis. *Applied Physics Letter*, 69, 3173-3181.
153. Lyons, M. H. and Halliwell, M. A. G. (1985). Double crystal diffractometry of III-V semiconductor device structures. *Institute of Physics Conference Series*, 76, 10-19.
154. Miles, S. J., Green, G. S., Tanner, B. K., Halliwell, M. A. G. and Lyons, M. H. (1989). Assessment of thin heteroepitaxial layers using skew angle asymmetrical x-ray double crystal diffraction. *Materials Research Society Symposium Proceedings*, 138, 539-544.
155. Itoh, N. (1992). X-ray diffraction method for characterisation of thin surface layers and thin epitaxial films. *Applied Physics Letter*, 62, 690-702.
156. Reiher, A., Bl'asing, J., Dadgar, A. and Krost, A. (2004). Depth-resolving structural analysis of GaN layers by skew angle x-ray diffraction. *Applied Physics Letter*, 84, 3537.
157. Hall, W. H. (1949). X-ray line broadening in metals. *Proceedings of the Physical Society A*, 62, 741-752.
158. Williamson, G. K. and Hall, W. H. (1953). X-ray line broadening from fcc aluminium and wolfram. *Acta Metallurgica*, 1, 22-30.
159. Klug, H. P. and Alexander, L. E. (1973). *X-Ray Diffraction Procedures for Polycrystalline and Amorphous Materials* (New York: Wiley).
160. Warren, B. E. and Averbach, B. L. (1950). The effect of cold work distortion on x-ray patterns. *Journal of Applied Physics*, 21, 595-602.
161. Groma, I. (1998). X-ray line broadening due to an inhomogeneous dislocation distribution. *Physical Review B*, 57, 7535.
162. De Keijser, T. H., Mittemeijer, E. J. and Vogels, A. B. P. (1983). The determination of crystallite size and lattice strain parameters in conjunction with the profile-refinement method for the determination of crystal structures. *Journal of Applied Crystallography*, 16, 309-313.
163. Ide, T., Shimizu, M., Shen, X. Q., Jeganathan, K., Okumura, H. and Nemoto, T. (2002). Improvement of film quality using Si-doping in AlGaIn/GaN heterostructure grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy. *Journal of Crystal Growth*, 245, 15-22.
164. Gay, P., Hirsch, P. B. and Kelly, A. (1953). The estimation of dislocation densities in metals from x-ray data. *Acta Metallurgica*, 1, 315-322.
165. Kurtz, A. D., Kulin, S. A. and Averbach, B. L. (1956). Effect of dislocations on the minority carrier lifetime in semiconductors. *Physical Review*, 101, 1285.
166. Chierchia, R., B'ottcher, T., Heinke, H., Einfeldt, S., Figge, S. and Hommel, D. (2003). Microstructure of heteroepitaxial GaN revealed by x-ray diffraction. *Journal of Applied Physics*, 93, 8918.

167. Dunn, C. G. and Koch, E. F. (1957). Comparison of dislocation densities of primary and secondary recrystallisation grains of Si-Fe. *Acta Metallurgica*, 5, 548-553.
168. Wilkens, M. (1970). The determination and density of dislocations in deformed single crystals from broadened x-ray diffraction profiles. *Physica Status Solidi a*, 2, 359-363.
169. Kuřel, R. (2007). Kinematical diffraction by distorted crystals—dislocation x-ray line broadening. *Zeitschrift Kristallographie*, 3–4, 136-162.
170. Krivoglaz, M. A. and Ryaboshapka, K. P. (1963). Theory of x-ray scattering by crystals containing dislocations. *Physics of Metals and Metallography*, 15, 14-21.
171. Hol'y, V., Kubina, J., Abramof, E., Lischka, K., Pesek, A. and Koppensteiner, E. (1993). X-ray double and triple crystal diffractometry of mosaic structure in heteroepitaxial layers. *Journal of Applied Physics*, 74, 1736-1748.
172. Daniš, S. and Hol'y, V. (2006). Diffuse x-ray scattering from GaN/SiC(0 0 0 1) thin films. *Zeitschrift Kristallographie Supplements*, 23, 141-153.
173. Waldrip, K. E., Han, J., Figiel, J. J., Zhou, H., Makarona, E. and Nurmikko, A. V. (2001). Stress engineering during metalorganic chemical vapor deposition of AlGaIn/GaN distributed Bragg reflectors. *Applied Physics Letter*, 78, 3205-3218.
174. Wang, H-M., Zhang, J-P., Chen, C-Q., Fareed, Q., Yang, J-W. and Asif, Khan, M. (2002). AlN/AlGaIn superlattices as dislocation filter for low-threading-dislocation thick AlGaIn layers on sapphire. *Applied Physics Letter*, 81, 604-612.
175. Parratt, L. G. (1954). Surface studies of solids by total reflection of x-rays. *Physical Review*, 95, 359-365.
176. Grundmann, M. and Krost, A. (2000). Atomic structure based simulation of x-ray scattering from strained superlattices. *Physica Status Solidi b*, 218, 417-427.
177. Smeeton, T. M., Kappers, M. J., Barnard, J. S., Vickers, M. E. and Humphreys, C. J. (2003). Analysis of InGaIn/GaN single quantum wells by x-ray scattering and transmission electron microscopy. *Physica Status Solidi b*, 240, 297-310.
178. Fewster, P. (1993). X-ray diffraction from low-dimensional structures. *Semiconductor Science Technology*, 8, 1915.
179. Krost, A., Blasing, J., Lünenburger, M., Protzmann, H. and Heuken, M. (1999). Evaluation of strain and In content in (InGaIn/GaN) multi-quantum wells by x-ray analysis. *Applied Physics Letter*, 75, 689-698.
180. Zhu, A., Kappers, M. J., Costa, P. M. F. J., McAleese, C., Rayment, F. D. G., Chabrol, G. R., Humphreys, C. J. (2006). A comparative study of near-UV emitting InGaIn quantum wells with AlGaIn and AlInGaIn barriers. *Physica Status Solidi a-Applications and Materials Science*, 203(7), 1819-1823.
181. Fewster, P. F. (1988). Interface roughness and period variations in MQW structures determined by x-ray diffraction. *Journal of Applied Crystallography*, 21, 524-539.

182. Lee, H. H., Jang, H. W., Kim, D. H., Noh, D. Y., Yi, M. S., Tang, M. and Liang, K. S. (2003). Structural characterization of InGa_N thin films and multiple quantum wells: an approach of combining various x-ray scattering methods. *Physica B*, 33,6 109-120.
183. Kret, S., Dł'zewski, P., Szczepańska, A., 'Zak, M., Czernecki, R., Kry'sko, M., Leszczyński, M. and Maciejewski, G. (2007). Homogenous indium distribution in InGa_N/Ga_N laser active structure grown by LP-MOCVD on bulk Ga_N crystal revealed by transmission electron microscopy and x-ray diffraction. *Nanotechnology*, 18, 465707.
184. McAleese, C., Costa, P. M. F. J., Graham, D. M., Xiu, H., Barnard, J. S., Kappers, M. J., Dawson, P., Godfrey, M. J. and Humphreys, C. J. (2006). Electric fields in AlGa_N/Ga_N quantum well structures. *Physica Status Solidi c*, 243, 1551-1562.
185. Einfeldt, S., Heinke, H., Kirchner, V. and Hommel, D. (2001). Strain relaxation in AlGa_N/Ga_N superlattices grown on Ga_N. *Journal of Applied Physics*, 89, 2160.
186. Kidd, P. (2003). Investigation of the precision in x-ray diffraction analysis of VCSEL structures. *Journal of Materials Science Materials in Electronics*, 14, 541-552.
187. Van der Laak, N. K., Oliver, R. A., Kappers, M. J. and Humphreys, C. J. (2007). Role of gross well-width fluctuations in bright, green-emitting single InGa_N/Ga_N quantum well structures. *Applied Physics Letter*, 90, 121911.
188. Krysko, M. and Leszczynski, M. (2007). Quantification of In clustering in InGa_N/Ga_N multi-quantum-wells by analysis of x-ray diffraction data. *Applied Physics Letter*, 91, 061915.
189. Lakner, H., Liu, Q., Brockt, G., Radefeld, A., Meinert, A. and Scholz, F. (1998). Investigation of inhomogeneities in (Al, Ga, In)_N heterostructures by STEM and cathodoluminescence. *Materials Science Engineering B*, 51, 44-52.
190. Moon, Y.T., Kim, D.J., Song, K.M., Choi, C.J., Han, S.H., Seong, T.Y. and Park, S.J. (2001). Effects of thermal and hydrogen treatment on indium segregation in InGa_N/Ga_N multiple quantum wells. *Journal of Applied Physics*, 89, 6514.
191. Pereira, S., Correia, M. R., Pereira, E., O'Donnell, K. P., Alves, E., Barradas, N. P., Sequeira, A. D., Franco, N., Watson, I. M. and Liu, C. (2002). Degradation of structural and optical properties of InGa_N/Ga_N multiple quantum wells with increasing number of wells. *Physica Status Solidi c*, 0, 302-312.
192. Huang, D., Reshchikov, M. A. and Morc'ok, H. (2002). Growth, structures and optical properties of III-nitride quantum dots. *International Jurnal of High Speed Electronics Systems*, 12, 79-89.
193. Chamard, V., Metzger, T. H., Bellet-Amalric, E., Daudin, B., Adelmann, C., Mariette, H. and Mula, G. (2001). Structure and ordering of Ga_N quantum dot multilayers. *Applied Physics Letter*, 79, 1971-1982.

194. Chamard, V., Metzger, T., Bellet-Amalric, E., Daudin, B. and Mariette, H. (2002). Investigation of GaN quantum dot stacking in multilayers with x-ray grazing incidence techniques. *Materials Science Engineering B*, 93, 24-39.
195. Chamard, V., Schülli, T., Sztucki, M., Metzger, T. H., Sarigiannidou, E., Rouvière, J.-L., Tolan, M., Adelman, C. and Daudin, B. (2004). Strain distribution in nitride quantum dot multilayers. *Physical Review B*, 69, 125327.
196. Kegel, I., Metzger, T. H., Lorke, A., Peisl, J., Stangl, J., Bauer, G., García, J. M. and Petroff, P. M. (2000). Nanometer-scale resolution of strain and interdiffusion in self-assembled InAs/GaAs quantum dots. *Physical Review Letter*, 85, 1694-1705.
197. Fewster, P. F. (2004). Advances in the structural characterisation of semiconductor crystals by x-ray scattering methods. *Progress in Crystal Growth Characterization Materials*, 48-49, 245-253.
198. Takeuchi, T., Sota, S., Katsuragawa, M., Komori, M., Takeuchi, H., Amano, H. and Akasaki, I. (1997). Quantum-confined Stark effect due to piezoelectric fields in GaInN strained quantum wells. *Japanese Journal of Applied Physics*, 36, L382-L397.
199. Schwartz, U. T. and Kneissl, M. (2007). Nitride emitters go non-polar. *Physical Status Solidi (RRL)*, 1, A44-A52.
200. Waltereit, P., Brandt, O., Trampert, A., Grahn, H. T., Menniger, J., Ramsteiner, M., Reiche, M. and Ploog, K. H. (2000). Nitride semiconductors free of electrostatic fields for efficient White light-emitting diodes. *Nature*, 406, 865-892.
201. Paskova, T. (2008). Development and prospects of nitride materials and devices with nonpolar surfaces. *Physica Status Solidi b*, 245, 1011-1019.
202. Darakchieva, V., Paskov, P. P., Paskova, T., Valcheva, E., Monemar, B. and Heuken, M. (2003). Lattice parameters of GaN layers grown on a-plane sapphire: effect of in-plane strain anisotropy. *Applied Physics Letter*, 82, 703-711.
203. Ghosh, S., Waltereit, P., Brandt, O., Grahn, H. T. and Ploog, K. H. (2002). Electronic band structure of wurtzite GaN under biaxial strain in the M plane investigated with photoreflectance spectroscopy. *Physical Review B*, 65, 075202.
204. Paskova, T., Darakchieva, V., Paskov, P. P., Birch, J., Valcheva, E., Persson, P. O. A., Arnaudov, B., Tungasmita, S. and Monemar, B. (2005). Properties of nonpolar a-plane GaN films grown by HVPE with AlN buffers. *Journal of Crystal Growth*, 281, 55-59.
205. Frank, F. C. (1965). On Miller-Bravais indices and four-dimensional vectors. *Acta Crystallography*, 18, 862-869.
206. Liu, R., Bell, A., Ponce, F. A., Chen, C. Q., Yang, J. W. and Khan, M. A. (2005). Luminescence from stacking faults in gallium nitride. *Applied Physics Letter*, 86, 021908.

207. Venn'egu'es, P., Bougrioua, Z. and Guehne, T. (2007). Microstructural characterization of semipolar gan templates and epitaxial-lateral-ovrgrown films deposited on M-plane sapphire by metalorganic vapor phase epitaxy. *Japanese Journal of Applied Physics*, 46, 4089-4095.
208. Stampfl, C. and Van de Walle, C. G. (1998). Energetics and electronic structure of stacking faults in AlN, GaN, and InN. *Physical Review B*, 57, R15052.
209. Ni, X., Ozgur, U., Fu, Y., Biyikli, N., Xie, J., Baski, A. A., Morkoc, H. and Liliental-Weber, Z. (2006). Defect reduction in (1 1 0) a-plane GaN by two-stage epitaxial lateral overgrowth. *Applied Physics Letter*, 89, 262105.
210. Kim, K-C., Schmidt, M. C., Wu, F., McLaurin, M. B., Hirai, A., Nakamura, S., DenBaars, S. P., and Speck, J. S. (2008). Low extended defect density nonpolar m-plane GaN by sidewall lateral epitaxial overgrowth. *Applied Physics Letter*, 93, 142108.
211. Hashimoto, T., Wu, F., Speck, J. S. and Nakamura, S. (2007). A GaN bulk crystal with improved structural quality grown by the ammonothermal method. *Nature Materials*, 6, 568
212. Tyagi, A., Zhong, H., Fellows, N. N., Iza, M., Speck, J. S., DenBaars, S. P. and Nakamura, S. (2007). High brightness violet InGaN/GaN light emitting diodes on semipolar (1 0 1 1) bulk GaN substrates. *Japanese Journal of Applied Physics*, 46, L129-L139.
213. Paskov, P. P., Schifano, R., Monemar, B., Paskova, T., Figge, S. and Hommel, D. (2005). Emission properties of a-plane GaN grown by metal-organic chemical-vapor deposition. *Journal of Applied Physics*, 98, 093519.
214. Baker, T. J., Haskell, B. A., Wu, F., Speck, J. S. and Nakamura, S. (2006). Characterization of planar semipolar gallium nitride films on sapphire substrates. *Japanese Journal of Applied Physics*, 45, L154-L162.
215. Wang, H., Chen, C., Gong, Z., Zhang, J., Gaevski, M., Su, M., Yang, J. and Khan, M. A. (2004). Anisotropic structural characteristics of (11-20) GaN templates and coalesced epitaxial lateral overgrown films deposited on (10-12) sapphire. *Applied Physics Letter*, 84, 499-512.
216. Paskova, T., Kroeger, R., Figge, S., Hommel, D., Darakchieva, V., Monemar, B., Preble, E., Hanser, A., Williams, N. M. and Tutor, M. (2006). High-quality bulk a-plane GaN sliced from boules in comparison to heteroepitaxially grown thick films on r-plane sapphire. *Applied Physics Letter*, 89, 051914.
217. McLaurin, M. B., Hirai, A., Young, E., Wu, F. and Speck, J. S. (2008). Basal plane stacking-fault related anisotropy in x-ray rocking curve widths of m-plane GaN. *Japanese Journal of Applied Physics*, 47, 5429-5433.
218. Venn'egu'es, P., Chauveau, J. M., Korytov, M., Deparis, C., Zuniga-Perez, J. and Morhain, C. (2008). Interfacial structure and defect analysis of nonpolar ZnO films grown on R-plane sapphire by molecular beam epitaxy. *Journal of Applied Physics*, 103, 083525.

219. Kim, K.-C., Schmidt, M. C., Sato, H., Wu, F., Fellows, N., Saito, M., Fujito, K., Speck, J. S., Nakamura, S. and DenBaars, S. P. (2007). Improved electroluminescence on nonpolar m-plane InGaN/GaN quantum wells LEDs. *Physica Status Solidi (RRL)*, 1, 125-137.
220. Orton, J. W. and Foxon, C. T. (1998). Group III nitride semiconductors for short wavelength light-emitting devices. *Reports on Progress in Physics*, 61, 1-12.
221. Karch, K. and Bechstedt, F. (1997). Ab initio lattice dynamics of BN and AlN: Covalent versus ionic forces. *Physical Review B*, 56, 7404-7412.
222. Li, T., Staddon, C. R., Novikov, S. V., Fewster, P. F., Widdowson, A., Andrew, N. L., Kidd, P., Harrison, I., Winsor, A., Liao, Y. and Foxon, C. T. (2002). X-ray studies of As-doped GaN grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy. *Journal of Crystal Growth*, 235, 103-109.
223. Qu, B., Zheng, X. H., Wang, Y. T., Feng, Z. H., Liu, S. A., Lin, S. M., Yang, H. and Liang, J. W. (2001). X-ray diffraction determination of the fractions of hexagonal and twinned phases in cubic GaN layers. *Thin Solid Films*, 392, 29-36.
224. Schormann, J., As, D. J., Lischka, K., Schley, P., Goldhahn, R., Li, S. F., Löffler, W., Hetterich, M. and Kalt, H. (2006). Molecular beam epitaxy of phase pure cubic InN. *Applied Physics Letter*, 89, 261903.
225. Shen, X. M., Fu, Y., Feng, G., Zhang, B. S., Feng, Z. H., Wang, Y. T. and Yang, H. (2002). Structural characterization of epitaxial lateral overgrown GaN on patterned GaN/GaAs(0 0 1) substrates. *Journal of Crystal Growth*, 246, 69-75.
226. Ozturk, M. K., Çörekçi, S., Tamer, M., Çetin, S. Ş., Özçelik, S., Özbay E. (2014). Microstructural properties of InGaN/GaN light-emitting diode structures with different In content grown by MOCVD. *Applied Physics A-Materials Science&Processing*, 114(4), 1215-1221.
227. Harutyunyan, V. S., Aivazyan, A. P., Weber, E. R., Kim, Y., Park, Y., Subramanya, S. G. (2001). High resolution x-ray diffraction strain-stress analysis of GaN/Sapphire heterostructures. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 34(10A), A35-A39.
228. Halliwell, M. A. G. (1997). X-ray diffraction solutions to heteroepitaxial growth problems. *Journal of Crystal Growth*, 170(1-4), 47-54.
229. Metzger, T., Höpler, R., Born, E., Ambacher, O., Stutzmann M., Stömmers, R., Schuster, M., Gobe, H., Christiansen, S., Albrecht M. and Strun, H. P. (1998). Defect structure of epitaxial GaN films determined by transmission electron microscopy and triple-axis X-ray diffractometry. *Philosophical Magazine A*, 77(4), 1013-1025.
230. Öztürk, M. K., Altuntaş, H., Çörekçi, S., Hongbo, Y., Özçelik, S. and Özbay E. (2011). Strain-Stress analysis of AlGaIn/GaN heterostructures with and without an AlN suffer and Interlayer. *Strain*, 47(s2), 19-27.

231. Öztürk, M. K., Yu, H., Sarıkavak, B., Korçak, S., Özçelik, S., Özbay, E. (2010). Structural analysis of an InGaN/GaN based light emitting diode by X-ray diffraction. *Journal of Materials Science: Materials in Electronic*, 21(2), 185-191.
232. Öztürk, M. K., Çörekçi, S., Tamer, M., Çetin, S. Ş., Özçelik, S., Özbay E. (2014). Microstructural properties of InGaN/GaN light-emitting diode structures with different In content grown by MOCVD. *Applied Physics A-Materials Science&Processing*, 114(4), 1215-1221.
233. Williamson, G. K., Hall, W. H. (1953). X-ray line broadening from filed aluminium and wolfram. *Acta metallurgica*, 1(1), 22-31.
234. Arslan, E., Öztürk, M. K., Duygulu, Ö., Kaya, A. A., Özçelik, S., Özbay, E. (2009). The influence of nitridation time on the structural properties of GaN grown on Si (111) substrate. *Applied Physics A-Materials Science&Processing*, 94(1), 73-82.
235. Vickers, M. E., Kappers, M. J., Datta, R., McAleese, C., Smeeton, T. M., Rayment F. D. G., and Humphreys, C. J. (2005). In-plane imperfections in GaN studied by x-ray diffraction. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 38(A10), A99-A104.
236. Zheng, X. H., Chen, H., Yan, Z. B., Han, Y. J., Yu, H. B., Li, D. S., Huang, Q., Zhou, J.M. (2003). Determination of twist angle of in-plane mosaic spread of GaN films by high-resolution X-ray diffraction. *Journal of Crystal Growth*, 255(1-2), 63-67.
237. Ng, S. S., Yoon, T. L., Hassan, Z., & Abu Hassan, H. (2009). Surface and interface phonon polaritons of wurtzite GaN thin film grown on 6H-SiC substrate. *Applied Physics Letters*, 94(24).
238. Dilute III-V Nitride Semiconductors and Material Systems: Physics and Technology.
239. Torabi, A., Ericson, P., Yarranton, E. J., & Hoke, W. E. (2002). Surface and interface characterization of GaN/AlGaIn high electron mobility transistor structures by x-ray and atomic force microscopy. *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 20(3), 1234-1237.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : BİLGİLİ, Ahmet Kürşat
 Uyruğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 22.01.1974, Osmaniye
 Medeni hali : Evli
 Telefon : 0 (535) 893 08 00
 e-mail : ahmet.kursat.bilgili@gazi.edu.tr



Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Tarihi
Doktora	Gazi Üniversitesi / Fizik	Devam ediyor
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik	2015
Lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik Öğretmenliği	1999
Lise	İstanbul Maçka Anadolu Meslek Lisesi	1992

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2017-2019	Nesibe Aydın Koleji	Öğretmen
2016-2017	Zafer Fen Lisesi	Öğretmen
2008-2016	Kızılay Final Dersanesi	Öğretmen

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

Tezle İlgili Yayınlar

1. Bilgili, A. K., Akpınar, O., Kurtulus, G., Ozturk, M. K., Ozcelik, S., & Ozbay, E. (2019). Lattice Parameters a-, c-, Strain-Stress Analysis and Thermal Expansion Coefficient of InGa_N/Ga_N Solar Cell Structures Grown by MOCVD. Journal of Polytechnic-Politeknik Dergisi, 22(1), 33-39.
2. Bilgili, A. K., Akpınar, O., Kurtulus, G., Ozturk, M. K., Ozcelik, S., & Ozbay, E. (2018). Structural properties of InGa_N/Ga_N/Al₂O₃ structure from reciprocal space mapping. Journal of Materials Science-Materials in Electronics, 29(14), 12373-12380.

3. Bilgili, A. K., Akpınar, O., Ozturk, M. K., Baskose, C., Ozcelik, S., & Ozbay, E. (2019). Investigation of structural, optical and morphological properties of InGaN/GaN structure. *Applied Physics a-Materials Science & Processing*, 125(1).
4. Bilgili A. K., Akpınar, Ö., Öztürk, M. K., Özçelik, S., Özbay, E., “XRD vs Raman for InGaN/GaN structures”, *Journal of Polytechnique* (2019) DOI: 10.2339/politeknik.537733
5. Bilgili, A. K., Akpınar, O., Ozturk, M. K., Ozcelik, S., Suludere, Z., & Ozbay, E. (2019). A detailed study on optical properties of InGaN/GaN/Al₂O₃ multi quantum wells. *Journal of Materials Science-Materials in Electronics*, 30(11), 10391-10398.

Ulusal ve Uluslar Arası Kongre Tebliğleri

1. Bilgili, A. K. (2014, 26 Aralık). 20. Yoğun Madde Fiziği- Ankara Toplantısı, Hacettepe Üniversitesi. (Dinleyici)
2. Bilgili, A. K., Özer, M. (2015, 28-29 Mayıs). Ag/TiO₂/n-InP Schottky bariyer diyodun Akım-Voltaj karakteristikleri. Adım Fizik Günleri IV, Dumlupınar Üniversitesi-Kütahya. (Poster Sunum)
3. Bilgili, A. K., Özer, M., Salamov, B. G., (2015, 25 Aralık).n-InP Üzerinde oluşturulan TiO₂ tabakalı Metal- Yarıiletken kontağın Akım- Gerilim özelliklerinden Parametrelerinin belirlenmesi.21. Yoğun madde fiziği Ankara Toplantısı, Gazi üniversitesi, Ankara. (Poster Sunum)
4. Bilgili A. K., (2016, 17-21 January). *International School of Nitride Materials and Devices*. Bilkent University, Ankara, Turkey.
5. Özer, M., Bilgili, A. K., Salamov, B. G. (2016, 16 Aralık). *Metal- Yarıiletken Schottky Engelli yapılarda Akım iletim mekanizmaları*. 22. Yoğun Madde Fiziği –Ankara Toplantısı (Poster Sunum)
6. Bilgili, A. K., Akpınar, Ö., Gültekin, A., Öztürk, M.K., Özçelik, S., Özbay, E., (2017, 22 Aralık). *MOCVD ile büyütülen InGaN/GaN diyot yapıların a-, c- örgü parametreleri, gerilme ve stres analizleri ve ısısal genleşme katsayıları*. 23. Yoğun Madde Fiziği- Ankara Toplantısı. (Poster Sunum)
7. Bilgili, A. K., Akpınar, Ö., Kurtuluş, G., Öztürk, M. K., Özçelik, S., Özbay, E., (2018, 15 Mayıs). *InGaN-GaN güneş pili üzerine bir çalışma*. 1st Light and Light-Based Technologies Workshop. (Poster Sunum)
8. Bilgili, A. K., Akpınar, Ö., Öztürk, M. K., Özçelik, S., Özbay, E., (2018, 5-9 September) *Turkish Physical Society 34th International Physics Congress*. Herodot Cultural Center, Bodrum, Turkey. (Poster Presentation)
9. Bilgili, A. K., Öztürk, M. K., Özçelik, S., Özbay, E., (2018, 21 Aralık). *InGaN/GaN yapılar için Raman analizi*. Yoğun Madde Fiziği Toplantısı-24. Bilkent Üniversitesi, Ankara, Turkey. (Poster Sunum)

10. Akpınar, Ö., Bilgili, A. K., Öztürk, M. K., Özçelik, S., Özbay, E., (2018, 21 Aralık). *MOCVD yöntemiyle safir alttaş üzerine büyütülen $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ HEMT yapısının, yapısal, optiksel ve elektriksel özelliklerinin incelenmesi*. Yoğun Madde Fiziği Toplantısı-24. Bilkent Üniversitesi, Ankara, Türkiye. (Poster Sunum)
11. Bilgili, A. K., Akpınar, Ö., Öztürk, M. K., Özçelik, S., Özbay, E., (2019, 19 Nisan). *MOCVD yöntemiyle büyütülen $InGaN/GaN$ yapıların SEM analizi*. VIII. Yoğun Madde Fiziği Toplantısı. İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, İzmir, Türkiye. (Poster Sunum)
12. Bilgili, A. K., (2019, 4-8 Eylül). *Investigation of structural, optical and morphological properties of $InGaN/GaN/Al_2O_3$ MQWs*. Turkish Physical Society 35th International Physics Congress. Bodrum, Türkiye. (Sözlü Sunum).

Tez Dışı Yayınlar

1. Bilgili, A. K., Özer, M., (2015), *Ag/TiO₂/n-InP Schottky Bariyer diyodun Akım- Voltaj Karakteristikleri*, Dumlupınar Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi. ISSN: 1302-3055, Özel sayı.
2. Bilgili, A. K. (2017), *YGS-LYS Elektrik ve Manyetizma Soru Bankası*, Fencebir Yayınları.
3. Güzel, T., Bilgili, A. K., Özer, M., (2018), *Investigation of inhomogeneous barrier height for Au/n-type 6H-SiC Schottky diodes in a wide temperature range*, Superlattices and Microstructures doi: <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.10.004>.
4. Bilgili, A. K., Güzel, T., Özer, M., (2019), *Current-voltage characteristics of Ag/TiO₂/n-InP/Au Schottky barrier diodes*, Journal of Applied Physics, 125, 035704; <https://doi.org/10.1063/1.5064637>.
4. Akpınar, Ö., Bilgili, A. K., Öztürk, M. K., Özçelik, S., Özbay, E., (2019), *On the elastic properties of $INGAN/GAN$ LED structures*, Applied Physics A 125:112 <https://doi.org/10.1007/s00339-019-2402-6>.
6. Akpınar, Ö., Bilgili, A.K., Öztürk, M. K., Özçelik, S., Özbay, E., (2019), *Investigation of structural, optical and electrical properties of $Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN$ HEMT grown by MOCVD*, Journal of Polytechnique, DOI: 10.2339/politeknik.583898.
7. Bilgili, A. K., (1996), *Sürücü Devreler*, Balıkesir Üniversitesi Lisans Bitirme Çalışması.

Hobiler

Satranç, Tiyatro, Basketbol, Elektronik Devreler



GAZİ GELECEKTİR..