

152700

T.C.  
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**ZnO KRİSTALİNE İYON DİKME YÖNTEMİYLE  
METAL AŞILANMASI**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Zuhal KARADEMİR**

**Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK**  
**Tez Danışmanı : Doç. Dr. İbrahim OKUR**

**Eylül 2004**

T.C.  
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

# ZnO KRİSTALİNE İYON DİKME YÖNTEMİYLE METAL AŞILANMASI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Zuhal KARADEMİR

172700

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 17/9/2004 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.

Doç. Dr. İbrahim OKUR

Jüri Başkanı

Yrd. Doç. Dr. Özkan

TOPLAN

Üye

Yrd. Doç. Dr. Yusuf

KARAKUŞ

Üye

## TEŐEKKÜR

Bu tezi hazırlamamda çok fazla emeđi geen, bana her konuda yardımcı olan, bilgi ve tecrübelerini benden esirgemeyen sayın hocam Do. Dr. İbrahim Okur'a sonsuz teŐekkürlerimi sunmayı bir bor bilirim.

Lisans ve yüksek lisans öğrenimim süresince bilgi ve tecrübelerinden yararlandığım ve yararlanmaya devam ettiđim SAÜ Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünün tüm öğretim üyelerine teŐekkür ederim.

Hayatım boyunca maddi-manevi desteklerini benden esirgemeyen çok değerli aileme, yardımları ve desteđi için değerli eşime teŐekkürü bir bor bilirim.

Zuhal KARADEMİR

## İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR.....	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	vi
TABLolar LİSTESİ.....	vii
ÖZET.....	viii
SUMMARY.....	ix
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2.	
YALITKANLARDA İYON MENZİLLERİ VE ENERJİ AKTARILMASI.....	2
2.1. İyonik Yalıtkanlarda İtici Potansiyeller ve Nükleer Durdurma.....	2
2.2. Etkileşim Potansiyellerinin Değerlendirilmesi.....	3
2.3. Atomik Çarpışmalarda Saçılma Açısı ve Aktarılan Enerji Hesabı....	7
2.4. Nükleer Durdurma ve Hasar Üretimi .....	8
2.4.1. İkili çarpışmalarla durdurma.....	8
2.4.2. Uzun erişimli Coulomb kuvvetleri varlığında durdurma gücündeki artış.....	9
2.4.3. Fononlar tarafından enerjinin harcanması.....	11
2.4.4. Hasar tesir kesiti.....	12
2.5. Bazı Uygulama Sonuçları.....	13
2.6. İyonik Kristallerde Geliştirilmiş Durdurma Etkisi Konusunda Deneysel Test.....	14
2.7. Yalıtkanlarda Elektronik Durdurma.....	16
2.8. Varılan Sonuçlar.....	19

### BÖLÜM 3.

ANALİTİK ERİŞİM UZAKLIĞI TEORİLERİ.....	21
3.1. Giriş.....	21
3.2. Yavaşlama Süreci Sırasında İyon Hareketinin Yönel Yayılımı.....	21
3.3. Açısının Yayılım Parametresi $\tau$ ile Enerji Kaybı Arasındaki Bağlantı.....	24
3.4. Ortalama İzdüşüm Aralığının Hesaplanması.....	25
3.5. Olası Analitik İşleme Bir Örnek Olarak Ağır-İyon Aralıkları.....	26
3.6. İzdüşüm Girme mesafeleri İçin Diferansiyel Eşitlikler ve Evrensel Algoritma.....	27
3.7. Monte-Carlo Girme Derinliği Hesaplamaları.....	30
3.7.1. Giriş.....	30
3.7.2. TRIM kodunda kullanılan fiziksel varsayımlar.....	31
3.7.3. Atomik çarpışmalar.....	33
3.7.4. Elektronik enerji kaybı.....	35
3.7.5. Çok atomlu malzemelerde hedef atomların seçimi.....	35
3.7.6. Yüzeyden atom koparma.....	36
3.8. İyon Girme Derinliği Ve Hasar Dağılımları.....	37
3.8.1. Giriş.....	37
3.8.2. Girme derinliği hesaplamaları.....	37
3.8.3. Hafif iyon aşılması, ağır iyonların girme derinliği ve hasar profilleri.....	38

### BÖLÜM 4.

SRIM PROGRAMININ TANITILMASI.....	39
4.1. SRIM'in Başlatılması.....	40
4.1.1. SRIM'in bilgisayara kurulması.....	40
4.1.2. SRIM programının kullanımı.....	40
4.2. Problemler ve Sistem Hata Mesajlar.....	42
4.3. Durdurma ve Girme Mesafesi Tabloları.....	43
4.4. Monte-Carlo TRIM Koşturulması ve Komutları.....	44
4.4.1. Monte-Carlo TRIM' e hızlı başlama.....	44
4.4.2. Monte Carlo TRIM kurulum programı.....	45

4.4.2.1. Hesaplama tipi .....	45
4.4.2.2. TRIM Hafıza Sınırlaması.....	47
4.4.2.3. Hesaplama çizim tipleri.....	48
4.4.2.4. İyonun ismi, kütlesi, enerjisi .....	48
4.4.2.5. Hedefin tanımlanması.....	49
4.4.2.6. Hesaplama parametreleri.....	52
4.4.2.7. Hedef atomların bağlanma enerjileri.....	53
4.4.2.8. Giriş verilerini gözden geçirme.....	54
4.5. TRIM programını Yeniden Başlatmak.....	54
<b>BÖLÜM 5.</b>	
<b>ZnO KRİSTALİNE İYON DİKME YÖNTEMİYLE METAL AŞILANMASI VE SONUÇLARI .....</b>	<b>56</b>
5.1. ZnO Kristal Yapısı .....	56
5.1.1. Çinko sülfür yapısındaki ZnO kristali.....	56
5.1.2. Sodyum klorür yapısındaki ZnO kristali .....	57
5.2. ZnO Kristali İle İlgili Yapılan Çalışmalar.....	58
5.3. İyon Dikme Yöntemi.....	61
5.3.1. Temel işlemler.....	61
5.3.2. İyon dikme yönteminin ilgi alanları.....	62
5.4. ZnO Kristaline Metal ve Yarıiletken İyonlarının Ekilmesi.....	64
5.5. Tartışma ve Öneriler.....	67
<b>KAYNAKLAR.....</b>	<b>68</b>
<b>ÖZGEÇMİŞ.....</b>	<b>71</b>

## ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1. SEG hesaplamaları [5,13] ile elde edilen 500 iyon hedef çiftinin perdeleme fonksiyonları.....	5
Şekil 2.2. SEG sonuçları ile daha karmaşık HFS hesaplamalarının karşılaştırılması .....	6
Şekil 2.3. Safirdeki ( $Al_2O_3$ ) Cs, Au, Xe mermileri için enerji eğrilerine karşılık gelen deneysel aralıklar.....	15
Şekil 3.1. İyon hareketinin yönsel değişikliklerinin bir birim küre üzerinde Brownian hareketi olarak gösterilmesi.....	23
Şekil 3.2. Nükleer durdurmanın egemen olduğu ağır iyonlar için basit analitik girme derinliği öngörülleri.....	27
Şekil 3.3. Mevcut “PRAL” girme derinliği algoritmasının LSS teorisi [59] ile karşılaştırılması ve hassasiyet ölçümleri iki yöntemi.....	29
Şekil 5.1. Çinko sülfid yapısındaki ZnO kristali .....	56
Şekil 5.2. Sodyum klorür yapısındaki ZnO kristali.....	57
Şekil 5.3. Başlıca dört iyon demeti bombardıman işlemi şematik gösterimi. (a) dikme, (b) hasar, (c) çıkarılma, (d) atomik karışım.....	63

## TABLULAR LİSTESİ

Tablo 2.1. Serbest elektron atomlar arası potansiyellerinin Moliere-tipi perdeleme fonksiyonları için sabitlenmiş parametreler.....	14
Tablo 5.1. Farklı enerjili metal iyonları için girme derinliği.....	67
Tablo 5.2. $H^+$ ve $He^+$ iyonlarının farklı enerjiler için girme derinliği sonuçları.....	68
Tablo 5.3. Bazı Yarıiletken iyonların farklı enerjiler için girme derinliği sonuçları yüzeyeleşen .....	68
Tablo 5.4. Bazı lantanitlerin ZnO kristalinde farklı enerjiler için girme derinliği sonuçları.....	69



## ÖZET

Anahtar Kelimeler: ZnO kristali, iyon dikme, girme mesafesi, nükleer durdurma.

İyon dikme maddelerin yüzey özelliklerini geliştirmede kullanılan yöntemlerden biridir. Dikilen iyonların yoğunluk ve derinliğinin kolayca kontrol edilebilmesi gibi bazı teknolojik üstünlüklere sahip olması sebebiyle son yıllarda bilimde uygulama alanı bulmuştur. Bu yöntemle arzu edilen element uygun enerji ve doz seçimiyle istenilen yapıya sokulabilir.

İyon dikme yöntemi birçok fiziksel kavram üzerinde çok sayıda etkiye sahiptir. Sadece mekanik ve/veya kimyasal özelliklerini değiştirmekle kalmayıp aynı zamanda malzemelerin elektriksel ve optik özelliklerini geliştirmede de kullanılabilir. İyon dikme yöntemi diğer tekniklere göre dozun ve konumun tam kontrolü ve kristal safsızlık ve bozukluklarına duyarsız olma gibi bir takım avantajlara sahiptir.

Hesaplamalar SRIM programında yapılmıştır. SRIM, (maddedeki iyonların durdurulması ve girme mesafeleri) iyon atom çarpışmalarının kuantum mekaniksel davranışlarını, (10 eV-2 GeV/akb) aralığında iyonların madde içinde durdurulması, aldıkları mesafenin hesaplanmasını içeren programdır.

# **METAL ION IMPLANTATIONS INTO ZnO CRYSTALS**

## **SUMMARY**

**Key words:** ZnO crystal, ion implantation, range, nuclear stopping.

Ion implantation is one of the simplest methods for modifying the surface properties of materials. Since it has some technological merits, i.e. providing easy control of depth and concentrations of implants, it has found many applications in science for the last few decades. This method provides a way of inserting any desired element into the structure as trace impurities by appropriate selection of its energy and dose.

Ion implantation has several effects on many physical aspects. It can not only change the mechanical and/or chemical properties but it is also used to modify the electrical and optical properties of materials.

SRIM is a group programs which calculate the stopping and range of ions (10 eV-2 GeV/akb) into matter using a full quantum mechanical treatment of ion-atom collision.

## BÖLÜM 1. GİRİŞ

Bu çalışmada ZnO kristalini taban madde olarak kullanarak farklı metal iyonlarının değişik enerjilerde iyon dikme yöntemi kullanılarak ekilmesi durumunda elde edilecek girme derinliklerinin teorik hesabı yapılması amaçlanmıştır.

Çalışmanın ilk kısmında (2. Bölüm) yalıtkan maddelerin içinde iyonların hangi menzillere ulaşacağı ve enerji aktarılması ile ilgili teorik bilgilere yer verilmiştir. Bu çerçevede elektronik ve nükleer durdurma kuvvetleri ile ilgili ayrıntılı açıklamalar verilmiş ve örnek bazı uygulama sonuçları ifade edilmiştir.

Tezin bir sonraki aşamasında (3. Bölüm) analitik erişim teorileri ve Monte-Carlo simülasyonunun teorik temelleri kısaca belirtilmiştir. 4. bölümde ise bu çalışmanın temelini teşkil edecek teorik hesaplamalarda kullanılan TRIM programı tanıtılmış ve önemli alt programları ve işlev sahası tanıtılmıştır.

5. Bölümde iyon dikme işlemi ve Cu iyonu temel olmak kaydıyla bazı metal iyonlarının, bazı yarı iletken iyonların ve bazı 3+ grubu elementlerin ZnO kristaline dikilmesi durumunda farklı enerjilerde hangi girme derinliklerinin elde edileceği sonuçlarıyla verilmiştir. ZnO kristaline bu iyonların ekilmesi durumunda hangi girme derinliklerinin elde edileceği deneysel olarak henüz yapılmadığı için, yapılan bu çalışmanın bu dikme işlemlerinde öncülük edeceği açıkça gözükmektedir.

## **BÖLÜM 2. YALITKANLARDA İYON MENZİLLERİ VE ENERJİ AKTARILMASI**

### **2.1. İyonik Yalıtkanlarda İtici Potansiyeller ve Nükleer Durdurma**

Enerjili parçacıklar (iyonlar) maddede hedef atomlara momentum transferiyle (nükleer durdurma) ve hedefin elektronik sistemini uyararak yavaşlarlar. Nükleer durdurma, iyon-atom itici kuvvetleri ve ikili çarpışmalar (2.2–2.6 kesimleri) araştırılarak anlaşılabilir. Elektronik durdurma daha karmaşık bir olaydır ve bu kapsamda sadece kısaca ana hatlarıyla ele alınabilir (2.7 kesimi).

Atomik çarpışmalar konusundaki klasik çalışmalarda [1-4] ve potansiyeller ile nükleer durdurma konusunda yapılmış daha yakın tarihli bir çalışmada, ikili çarpışmalardaki etkileşim, Seitz-Wigner hücresi dışında uygun sayıdaki serbest (iletim) elektronları tarafından tamamen perdelenmiş metallerdeki nötr atomlar veya yüklü atomlar için göz önüne alınmıştır. Bu tür durumlar için büyük sayıda iyon-hedef potansiyelleri hesaplanmış ve bu, sonunda gözden geçirilmiş ve geliştirilmiş bir evrensel potansiyele yol açmıştır [5]. Bu alanda ulaşılmış olan gelişim sonraki kesimde kısaca ifade edilecektir.

Çok yakın zamanlara kadar [6], iyonik kristallerdeki yüklü parçacıkların nükleer durdurma veya hasar üretimine tabi tutulmasına ilişkin hiçbir girişimde bulunulmamıştır. Bu durumda uzun erişimli Coulomb etkileşimi hedef atomlarının yakın komşularından çok daha fazla sayıda hedef atomu için içine sokabilecek ve düşük enerjili mermiler için nükleer enerji kaybı ile hasar üretiminde önemli bir artışa yol açacaktır. Klasik bir işlemde –elektriksel potansiyel göz önüne alınacak olsa bile– Coulomb etkileşimi için nükleer durdurma gücü sonsuz olabilecektir. Gerçekte, kuantum mekanik etkiler durdurma güçlerini sonlu bir değere

sınırlandıracaktır; ancak yine de bunlar çok büyük değerlerdedir. Bu güçlendirilmiş nükleer durdurma ve hasar üretiminin miktar açısından saptanması, bu bölümün ana konularından biri olacaktır.

## 2.2. Etkileşim Potansiyellerinin Değerlendirilmesi

Atomik çarpışmaların ve nükleer durdurmanın değerlendirilmesinin ilk aşaması her zaman etkileşim potansiyelinin saptanmasından oluşmaktadır. Elektronların Coulomb ve kinetik enerjisinin yanı sıra, alışveriş ve korelasyon enerjileri de dikkate alınacak olursa, çarpışan atomların veya iyonların üst üste binen elektronik bulutları konusundaki Thomas-Fermi istatistiksel işleminin [7] oldukça tatmin edici sonuçlar verdiği [5] numaralı referansta gösterilmiştir. Daha karmaşık yaklaşımlarla, örneğin iki-merkezli kendi içinde uyumlu alan hesaplamalarıyla (moleküler Hartree-Fock-Slater, HFS) ile yapılan karşılaştırma mükemmel bir uyum sonucunu vermekte olup, bunun örnekleri 5 ve 13 referanslarındaki şekillerde görülebilir. Bu nedenle bilgisayarla çalışmada daha verimli olan ve –“serbest-elektron-gazı” (SEG) hesaplamaları adıyla da bilinen- istatistiksel yöntemler, bu konunun etkileşim potansiyellerine ulaşmada kullanılmıştır.

Bu SEG potansiyel hesaplamalarının girdileri, hesaplamada yer alan ferdi atom veya iyonların bozulmamış (pertürbe olmamış) elektron dağılımlarından oluşmaktadır. Bunlar ya sayısal olarak saptanmış Hertree-Fock-Slater atomik elektron dağılımlarından, veya atom yada iyonların analitik Lenz-Jensen elektron dağılımlarından seçilmektedir [7,8]. Lenz-Jensen dağılımları, sadece nötral atomlarla birlikte pozitif ve negatif iyonlar için uygun olmaları sebebiyle değil, aynı zamanda nötral Lenz-Jensen atomlarının halihazırda gerçekçi atom-atom çifti potansiyellerini verdiği bilinmesi sebebiyle Thomas-Fermi veya Moliere atomları gibi diğer evrensel atomlar için tercih edilir olmuştur.

SEG çift potansiyellerinin hesaplamalarının ayrıntıları ana hatlarıyla [5] ve [6] referanslarda verilmektedir. Esas itibarıyla SEG hesaplamaları, genellikle sistemin enerjisinin %10 sınırları içerisinde önceden söylenmesine izin veren birinci dereceden pertürbasyon teorisine dayanmaktadır. Bu durumda etkileşen

atomların/iyonların iki elektronik dağılımı  $\rho_1(r)$ ,  $\rho_2(r)$  tekrar düzenlenmeden üst üste binmektedir ve enerji, pertürbe edilmemiş  $\rho_1+\rho_2$  üst üste binmiş elektronik yoğunluklarından saptanmaktadır. Üst üste binme bölgesindeki yüksek elektronik yoğunlukların,  $\rho^{5/3}$  ile orantılı elektronların kinetik enerjisinde bir artış sağlaması sebebiyle sistemin enerjisi artar ve böylece enerji değişimi aşağıdaki hale gelir:

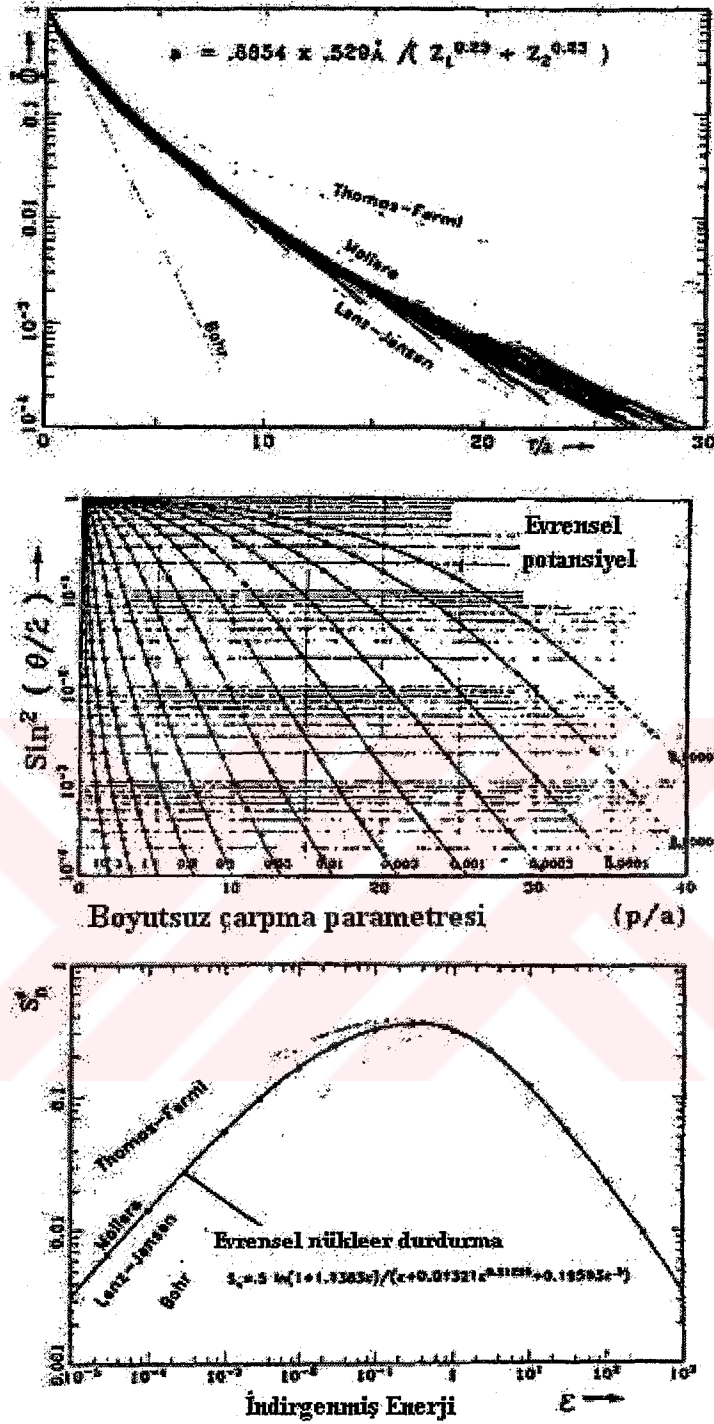
$$\Delta E_{kin} = H_k \iiint [(\rho_1 + \rho_2)^{5/3} - \rho_2^{5/3}] dV > 0 \quad (2.1)$$

Çok yüksek olmayan yoğunluklar için  $\rho^{4/3}$  ile orantılı olan alışveriş ve kolerasyon enerjilerinin etkileri bu enerjiyi biraz düşürür. Her atomun elektronları diğer çekirdeğin potansiyel kuyusuna çekilmekte olduğundan, sistemin (Coulomb ile ilgili) potansiyel enerjisi de azalmaktadır ( $\Delta E_{pot} < 0$ ). Böylece, toplam etkileşim enerjisi, yani sözü edilen tüm enerji değişikliklerinin toplamı, bazı negatif ayarlamalarla, hakim pozitif terim olan  $\Delta E_{kin}$ 'den oluşmaktadır. Nihai sonuç her zaman pozitif (itici potansiyel) olarak görülür, ancak  $Z_1 Z_2 e^2/r$ 'den küçüktür. Böylece bunu bir  $Z_1 Z_2 e^2/r$  'Coulomb terimi', bir  $\phi(r/a)$  'perdeleme faktörü' ( $0 < \phi < 1$ ) ve bir 'perdeleme mesafesi' ile tanımlayabiliriz. Yüzlerce farklı etkileşen atom çiftleri (Biersack, Ziegler, [5,13]) için sonuçlar Şekil 2.1a'daki grafikte işaretlenmiştir. Aşağıdaki

$$a = \frac{0,8854 \cdot a_0}{Z_1 \cdot 23 + Z_2 \cdot 23}, \quad a_0 = 0,529 \text{ \AA} \quad (\text{Bohr yarıçapı}) \quad (2.2)$$

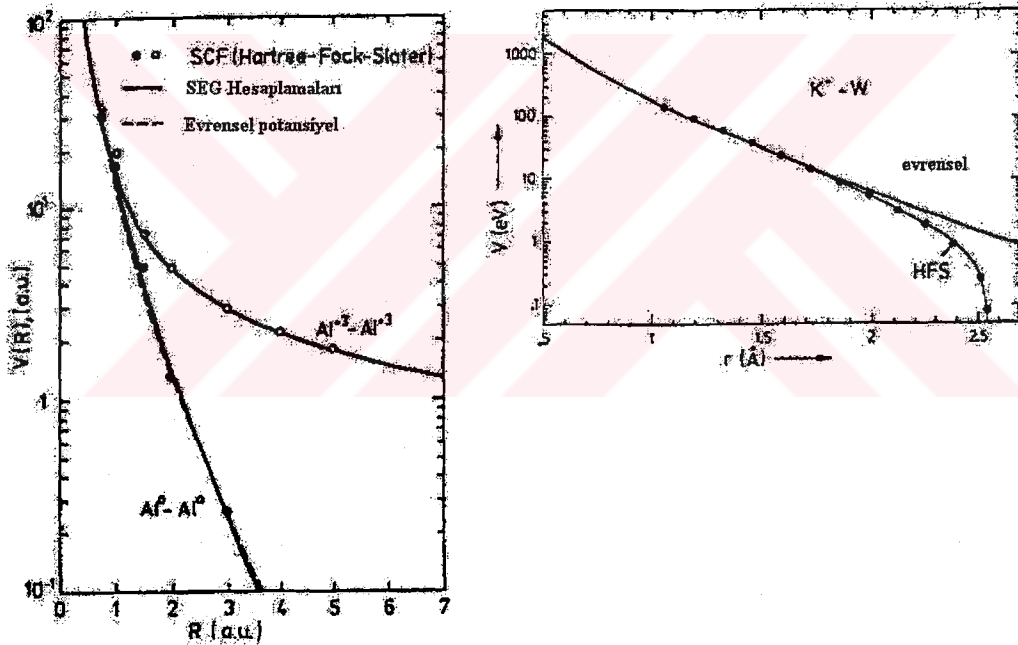
perdeleme uzunluğunu seçerek etkileşen atom çiftleri birbirine çok yaklaştırılabilirler. Bunlar genellikle 'evrensel perdeleme fonksiyonu' diye söz edilen aşağıdaki fonksiyonla yaklaşık olarak tanımlanabilirler:

$$\phi_u = 0.1818 \exp(-3.2r/a) + 0.5099 \exp(-0.9423r/a) + 0.2802 \exp(-0.429r/a) + 0.02817 \exp(-0.2016r/a) \quad (2.3)$$



Şekil 2.1.a) SEG hesaplamaları [5,13] ile elde edilen 500 iyon hedef çiftinin perdeleme fonksiyonları. Bunlar, yeni bir perdeleme uzunluğu kullanılarak, daha sıkı bir gruptandırma şeklinde sıkılaştırılabilirlerdi (metne bakınız). Noktalı çizgiler başka potansiyellerle karşılaştırmak içindir. b) Kütle merkezi sistemindeki saçılma.  $\theta(\epsilon, b)$ ,  $\epsilon$  enerjisi (her eğrideki parametre) ile  $b=P/a$  çarpma parametrelerinin bir fonksiyonu olarak saçılma açısıdır. Daireler saçılma integralinin tam sonuçlarıdır ve çizgiler *sihirli formül*den alınmıştır. c) Yukarıdaki potansiyel ve saçılma kanunundan elde edilen 'nükleer durdurma' gücü (daireler). Pratik uygulamalar için, analitik bir ifade verilmiştir (metne bakınız). Noktalı çizgiler diğer yaygın olarak kullanılan potansiyeller için durdurma güçleridir.

Şekil 2.1a'dan bu fonksiyonun, oldukça gerçekçi potansiyelleri verdiği kabul edilen Wilson, Haggmark, Biersack'ın [5] Kr-C perdeleme fonksiyonuna fiili olarak çok yakın olan, Moliere ve Lenz-Jensen fonksiyonu arasında bir yere yerleştirildiği görülebilir. Deneysel olarak saptanmış olanlarla birlikte [10] çeşitli yaygın perdeleme fonksiyonlarının bir karşılaştırması, ulaşılan gelişmeleri açık bir biçimde göstermektedir: Moliere potansiyeli için ortalama kare sapması 237 iken, aynı değer Lenz-Jensen potansiyeli için 142, Kr-C potansiyeli için 7.1 ve yeni "evrensel" potansiyel için 4.8'dir. Deneysel olarak yapılan testlerin pozitif sonuçlarına ve moleküller HFS sonuçlarına göre, evrensel potansiyel genel kullanım için önerilebilir. Sadece iyonik kristallerde ve daha sonra bölüm 2.4.2'de tartışılacak olan çok özel etkenlere bağlı olarak bazı büyük sapmalar meydana gelebilir.



Şekil 2.2. SEG sonuçları ile daha karmaşık HFS hesaplamalarının karşılaştırılması [42, 43]. Kimyasal bağ oluşumu,  $K^+-W$  durumunda bile mevcut evrensel potansiyel itici bölümü ( $r < 2\text{Å}$ ) oldukça iyi tarif etmektedir.

Yalıtkanlarla (örneğin donmuş nadir gazlarla) ilgili olarak bireysel SEG hesaplamaların ve deneysel olarak saptanmış potansiyellerin karşılaştırılmaları, [13]'te bulunabilir. Bir örnek olarak, He-He ve He-Ar potansiyellerinin tamamen bir eV'un bile altında olduğu söylenebilir. Katı nadir gazlarla birlikte KCl gibi



(elektronların nadir gaz yörüngeleri oluşturduğu) alkali halitler de tabii ki mevcut perturbasyon teorik işleminin en iyi örnekleridir. Kutuplanmanın meydana geldiği ve kimyasal bağların olduğu diğer durumlarda elektronların yeniden sıralanması önemli olmaktadır ve bu hallerde, potansiyelin az enerji bölümünde bazı uyumsuzluklar beklemekteyiz. Şekil 2.2’de, karşılaştırma için HFS hesaplarının [42, 43] mevcut olduğu Al – Al ve K-W örneklerini görmekteyiz ve bunların sonuncusu kimyasal bağ oluşumunun bir örneğidir.

### 2.3. Atomik Çarpışmalarda Saçılma Açısı ve Aktarılan Enerji Hesabı

Etkileşim potansiyelleri saptanmış ve

$$V(r) = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{r} \cdot \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (2.4)$$

ile ifade edilmiş ise kütle merkezi sisteminde çarpışmanın E enerjisi P çarpma parametresinin bir fonksiyonu olarak  $\theta$  saçılma açısının hesaplanmasına girilebilir. Bu hesaplamayı basitleştirmek için tüm uzunlukların  $a$  perdeleme uzunluğu birim yerinde ifade etmek, örneğin,

$$x = r/a \quad \text{ve} \quad b = P/a \quad (2.5)$$

ve aynı zamanda enerjileri, kütle–merkezi sisteminin çarpışmasında mevcut enerji için boyutsuz parametre sonucunu veren birimleriyle

$$\varepsilon = \frac{E_{cm}}{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2/a} = \frac{E/(1 + M_1/M_2)}{Z_1 Z_2 \cdot e^2/a} \quad (2.6)$$

şeklinde ifade etmek standart bir kullanımdır. Semboller standart anlamlarıyla kullanılmaktadırlar:  $r$  çekirdeğe olan mesafe,  $P$  çarpma parametresi,  $e$  temel yük ( $e^2 = 14.4$  eVA), vs.’dir. Bundan sonra, kütle merkezindeki saçılma açısı klasik saçılma veya yörüngesel integralden

$$\theta(\varepsilon, b) = \pi - 2 \int_{x_0}^{\infty} \frac{d(b/x)}{\sqrt{1 - \frac{\Phi(x)}{x \cdot \varepsilon} - \left(\frac{b}{x}\right)^2}} \quad (2.7)$$

formunda elde edilir (burada  $x_0$  paydanın sıfırı, yani çarpışmadaki en küçük uzaklıktır).  $x=x_0$ 'da kutup ve entegrasyonun sonsuz üst limiti, kolay bir sayısal entegrasyon için,  $\chi = \chi_0 / (1 - u^2)$  dönüşümü ile ortadan kaldırılır. Bu hesaplamaların sonuçları siyah noktalar halinde Şekil 2.1b'de gösterilmektedir. Düzgün çizgiler bu noktalara Biersack ve Haggmark tarafından yapılan analitik yaklaşımları göstermektedir (2.3 bölümündeki 'sihirli formül' diye adlandırılmış 2.3 eşitliğine ve [11] referansına bakınız).

$\theta(\varepsilon, b)$ 'den atomik çarpışmada hissedilen merminin "elastik" enerji kaybı veya buna eşit olarak hedef atoma iletilen enerji aşağıdaki gibi saptanmaktadır:

$$T = \gamma \cdot E \cdot \sin^2 \theta/2, \quad \gamma = \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (2.8)$$

Bu 0 ile  $\infty$  arasındaki tüm muhtemel çarpma parametrelerinin dikkate alınmasıyla,  $T(\varepsilon, b)$  katkılarının uygun  $d_\sigma = 2\pi P dP = \pi a^2 d(b^2)$  diferansiyel kesitleri ile hesaba katıldıkları, nükleer durdurma veya hasar üretim tesir kesiti denilen aşağıdaki sonucu vermektedir:

$$S_n(\varepsilon) = \int_0^{\infty} T(\varepsilon, b) \cdot \pi a^2 d(b^2) = \pi a^2 \cdot \gamma \cdot E \cdot \int_0^{\infty} \sin^2 \theta/2 d(b^2) \quad (2.9)$$

## 2.4. Nükleer Durdurma ve Hasar Üretimi

### 2.4.1. İkili çarpışmalarla durdurma

Sonuçlarımızı önceki 'evrensel' olanlarla yani Moliere potansiyellerinden elde edilenlerle karşılaştırmak için T'de görülen E enerjisini (2.8 eşitliği)  $\varepsilon$ 'a

dönüştürürüz ve sonra 2.9 eşitliğinin sağ tarafındaki  $Z_i$ ,  $M_i$ , vs. bütün sabit parametreleri bir 'evrensel' durdurma kesiti oluşturmak amacıyla eşitliğin sol tarafına alırsak:

$$S_n^*(\mathcal{E}) = \varepsilon \cdot \int_0^{\infty} \sin^2 \frac{\theta(\varepsilon, b)}{2} d(b^2) \quad (2.10)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \Phi(x) = 0 \quad (2.11)$$

ile (2.4) eşitliği formundaki perdelenmiş Coulomb potansiyelleri için  $\sin^2 \theta/2$ 'nin değeri artan çarpma parametreleriyle hızlıca sıfıra düşer ve böylece (2.10) eşitliğinin sayısal entegrasyonu için sonsuz bir üst limit yerine sonlu bir  $b^2$  kullanılabilmesi mümkün olur. Söz konusu mevcut enerji rejiminde, tüm nötr atomlar için yeterince büyük bir limit olarak

$$b = b_s = 25 - 4 \cdot 9 \ln \varepsilon \quad (2.12)$$

seçilmiştir. Bu  $b_s$ 'ye aşağıdaki metinde 'standart entegrasyon ağırlığı' denilecektir. Sonuçta ortaya çıkan nükleer durumda kuvveti Şekil 2.1c'de daireler şeklinde çizilmiştir. Bu daireler içinden geçen düzgün çizgiler analitik yaklaşımdır [5] ve formül bir bilgi olarak verilmektedir.

#### 2.4.2. Uzun erişimli Coulomb kuvvetleri varlığında durdurma gücündeki artış

Potasyum klorür iyonik kristalinde  $K^+$  veya  $Cl^-$  ile etkileşen  $K^+$  tepmiş iyonu örneğinde olduğu gibi bir yalıtkanda diğer iyonlarla etkileşen iyonlar için iyonik yükleri perdeleyebilecek hiçbir elektron ve hol bulunmamaktadır. Böylece mermi ve hedef için sırasıyla  $Z_1^*$  ve  $Z_2^*$  iyonik yükleri düşünülürse,

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \Phi(x) = \frac{Z_1^* Z_2^*}{Z_1 Z_2} = \phi_{\infty} \quad (2.13)$$

elde edilir.

Sıfırlanmayan fonksiyonların örnekleri Şekil 2.2'de verilmektedir. Klasik mekanikte, yani (2.7) ve (2.10) eşitliklerinde, bu tür etkileşim sonsuz bir  $S_n$  durdurma kesiti sonucu vermektedir. Bununla birlikte, bu durum, örgüdeki hedef yolların bağlı hallerinin dikkate alınmasıyla düzeltilir: Eğer iyonlar örgü noktalarında yaklaşık  $10^{13}$  /saniye'lik salınım frekansına karşılık gelen potansiyel çukurlarla tutuluyorsa, bu durumda kuantum mekanik kanunları  $\hbar\omega$ 'dan yani bir kaç  $10^{-2}$  eV'tan daha küçük olan enerjilerin bu atomlara transferine izin vermeyecektir. Bu minimum  $T = \hbar\omega$  enerji transferi, hedef iyonları tarafından enerjinin emilemediği bir maksimum  $b_w$  çarpma parametresini tanımlamaktadır. Uzun mesafede etkileşim tamamen Coulomb türü olduğundan (2.7) eşitliğindeki saçılma integrali (2.13) eşitliğindeki  $\phi_\infty$  sabitiyle ve (2.7) eşitliği kullanılarak

$$\sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1}{1 + (2\varepsilon b / \phi_\infty)^2} \quad (2.14)$$

analitik çözümünü vermektedir ve durdurma gücü aşağıdaki gibi olmaktadır:

$$S_n^* = \varepsilon \cdot \int_0^{b_w} \sin^2 \frac{\theta}{2} d(b^2) = \varepsilon \cdot \int_0^{b_s} \sin^2 \frac{\theta}{2} d(b^2) + \varepsilon \cdot \int_{b_s}^{b_w} \sin^2 \frac{\theta}{2} d(b^2) \quad (2.15)$$

Bundan sonra  $S_{n1}$  şeklinde gösterilecek olan ilk integral, önceki paragrafın sayısal işlemlerinden ötürü bilinmektedir. İkinci entegral için,  $b_s \dots b_w$  çarpma parametreleri bölgesinde, genellikle tamamen Coulomb etkileşimi ile karşılaşmaktadır ve (2.14) eşitliği sayesinde aşağıdaki eşitlik elde edilmektedir:

$$\varepsilon \cdot \int_{b_s}^{b_w} \sin^2 \frac{\theta}{2} d(b^2) = \frac{\Phi_\infty^2}{4\varepsilon} \ln \frac{1 + (2\varepsilon b_w / \Phi_\infty)^2}{1 + (2\varepsilon b_s / \Phi_\infty)^2} \quad (2.16)$$

$b_s$  ve  $b_w$  çarpma parametreleri sırasıyla  $T_s$  ve  $\hbar\omega$  transfer edilmiş enerjilerine tekabül ettiğinden (2.16) eşitliğini, (2.8) ve (2.14) eşitlikleri sayesinde, aşağıdaki şekilde yeniden yazabiliriz:

$$S_n^* = S_{nt}^* + \frac{\Phi_\infty^2}{4\varepsilon} \ln \frac{T_s}{\eta_\omega} \quad (2.17)$$

Bu, yalıtkanlarda şimdi  $1/\varepsilon$  ile orantılı olarak azalan enerjiyle ortaya çıkan önemli bir ikinci terimi de içermekte olan (ikili çarpışmalar ve Coulomb etkileşimine dayalı) iyon-iyon etkileşimi için toplam durdurma kuvvetidir.

Örgü titreşimlerinin pratik değerleri için  $\omega = \omega_{L0}$  boyuna optik fonon frekansını seçmiş bulunuyoruz.  $\omega_{L0}$ 'ın seçimi, bir mesafeyi kat eden yüklü bir parçacıktan, dairesel bir elektriksel alanın dairesel bir yörünge boyunca yayıldığı, yani alanın ve yayılmanın yönlerini paralel olduğu, gerekçesiyle doğrulanabilir. Bazı iyonik yalıtkanlar için  $\omega_{L0}$  değerleri [6] referansında sıralanmaktadır ve bu değerler  $4-6 \times 10^{13} \text{ sn}^{-1}$  aralığında değişmektedir

#### 2.4.3. Fononlar tarafından enerjinin harcanması

Yukarıdaki kesimlerde, ikili olaylardaki hedefin tek atomlara/iyonlara enerji transferleri tartışılmıştı. Şimdi hızlı hareket eden iyonlar tarafından oluşturulabilen hareketlere (fononlara) enerji aktarımı tartışılacaktır. [6]'da belirtildiği gibi merminin yüksek hızlarında, iyonik kristallerde yeni bir olayın meydana gelebileceği bulunmuştur. Tek bir hedef iyonla etkileşim zamanı,  $T < \hbar\omega$ 'yi sağlayacak şekilde, yeterli momentum transferi için çok kısa olabilir; ancak geçmekte olan merminin geçici elektriksel alanı, keskin bir biçimde, fotonlarının örgüdeki boyuna optik fononları çekmesine yetecek ölçüde titreşebilir. Bu, eğer etkileşim zamanı  $\tau \approx 2P/v$ 'nin ( $v$  mermi hızı,  $P$  çarpma parametresi)  $\hbar v > \hbar v_{L0}$  koşulunu sağlayacak şekilde bir  $\nu = 1/\tau = v/2P$  frekansına (Fourier dönüştürülmüş titreşiminin ana frekansına) tekabül etmesi halinde gerçekleşecektir; diğer bir ifadeyle tek hedef iyonlarının yeterli enerjiyi almadıkları mesafelerde, bunların büyük sayıda olanları –

toplu bir hareketle– örgü titreşimindeki enerjiyi yine de emebilirler. Bu oldukça büyük  $P_2$  mesafelerine kadar etkili olacak ve aşağıdaki sonucu verecektir:

$$b_2 = \frac{P_2}{a} = \frac{V}{2vL_0 \cdot a} = \frac{c}{2vL_0 \cdot a} \left( \frac{2E}{M_1 \cdot m_u c^2} \right)^{1/2}$$

Burada, 'a' perdeleme uzunluğu,  $c = 3.10^{18}$  A<sup>0</sup> / saniye ışık hızı ve  $m_u c^2 = 931.5$  MeV çekirdeklerin kütesinin durgun enerjisidir.  $P_2$ 'den daha büyük mesafelerde örgü hiçbir enerji kaybı olmadan yavaş ve dönüştürülebilir bir biçimde kutuplu ve kutupsuz olabilecektir (adyabatik kutuplanma). Optik fononlara ilave enerji kaybı büyük bir entegrasyon aralığını kapsayabilir; ancak, -b büyük mesafeleri ve  $\Phi_\infty$  kısmi perdelemesine göre– bu mekanizma sonuçta durdurma kuvvetlerine sadece küçük katkılarda bulunacaktır.

#### 2.4.4. Hasar tesir kesiti

Hasar tesir kesitlerinin hesaplanmasında,  $E_d$  yer değiştirme enerjisini aşan tüm T enerji transferleri hesaba katılmalıdır:

$$S_d^* = \varepsilon \cdot \int_0^{bd(E_d)} \sin^2 \frac{\theta}{2} d(b^2) \quad (2.18)$$

$E_d$ , bir atom veya iyonu kendi örgü noktasından çıkarıp ani yeniden birleşme bölgesine götürebilmek için gerekli kinetik enerji olarak tanımlanmaktadır. Farklı kristaller için  $E_d$  önemli miktarlarda değişiklikler göstermekle beraber seramik malzemeler için 30-90 eV arasında değerler alabilmektedir. Bu büyüklükteki enerjiler sadece ikili olaylarda ve  $T(b_d) = E_d$  olduğu yerde,  $b < b_d$  çarpma parametreleri ile transfer edilebilir. Tipik olarak  $b_d < 10$  ve  $P_d < 1A^0$  değerleri elde edilir. Böylece bu çarpışmaların mermi ve hedefin iyonik karakterlerinden çok az etkilenecek üst üste gelen elektronik kabukların 'normal' itmesi ile idare edileceği söylenebilir. Böylece,  $S_d^*$ 'ın hesaplanması sayısal olarak yapılmalı ve sonuçları herhangi bir malzeme için bulunanlardan, örneğin metallardan çok farklı olmalıdır.

Son paragraf esas itibariyle, yapı kusurlarının doğrudan momentum transferiyle ('çarpışma' veya 'balistik' türü etkiler) ortaya çıktığı seramik malzemelere uygulanmaktadır. Bununla birlikte yapısal bozuklukların aynı zamanda, iyonlaşma veya uyarma enerjilerinin hedef atomlarının/iyonların kinetik enerjisine dönüştürülmesi (Pooley süreci) veya organik bileşiklerdeki değerlik elektronlarına değme ve kimyasal bağların tahrip edilmesi gibi, oldukça farklı mekanizmalarla da meydana getirebildiği başka yalıtkan sınıfları da bulmaktadır.

## 2.5. Bazı Uygulama Sonuçları

Önceki bölümlerde ortaya konan fiziksel olgu şimdi bazı tipik örneklere uygulanacaktır. Seçim biraz gelişmiş güzeldir; ancak, ana özellikleri gösterme amacına hizmet edebilmektedir. Etkileşim potansiyelleri (karışlaştırma için iyon-iyon ve atom-atom) serbest elektron gaz modeli ile (2.2 kesimine bakınız) elde edilmekte ve sonrada 3 üssel terim ihtiva eden bir perdeleme fonksiyonuna uydurulmaktadır:

$$V = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad \Phi = \sum_{i=1}^3 c_i \exp(-b_i \cdot r/a), \quad a = \frac{0.8854 a_0}{(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2})^{2/3}} \quad (2.19)$$

İyon-iyon etkileşimlerinde, perdeleme fonksiyonu büyük mesafeler için (2.13) eşitliğindeki  $\Phi_\infty \neq 0$  sabit değerine yaklaşmaktadır. Bu durumda, (2.19) temsil eşitliği, doğru asimptotik davranışı sağlamak amacıyla, önceden verilmiş  $c_3 = \Phi_\infty$  ve  $b_3=0$  değerleriyle kullanılır. Seçilen durumların sonuçları, karşılaştırma amacıyla bazı iyi bilinen klasik perdeleme fonksiyonları ile birlikte, Tablo 2.1'de sıralanmaktadır

Tablo 2.1. Serbest elektron atomlar arası potansiyellerinin Molire-tipi perdeleme fonksiyonları için sabitlenmiş parametreler:  $\phi(x) = \sum_1^3 c_i \cdot \exp(-b_i \cdot x)$ ,  $c_3 = 1 - c_1 - c_2$  her bir sabitleme için 1 eV'un üzerindeki potansiyel enerjilere ait yaklaşık 30 değer kullanılmıştır[6].

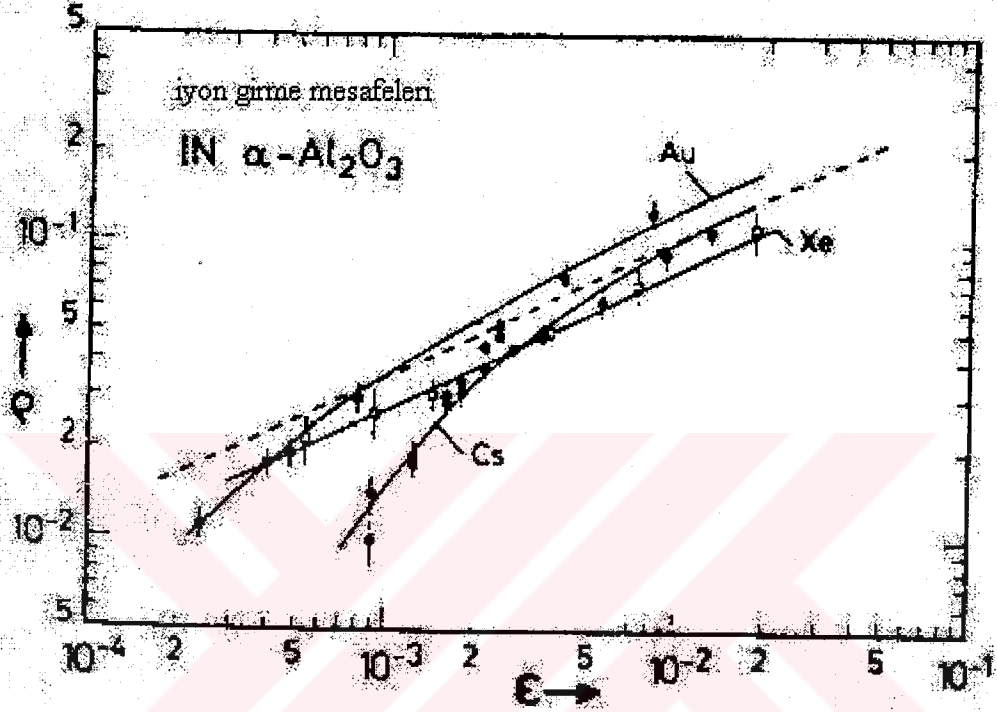
potansiyel	$c_1$	$c_2$	$b_1$	$b_2$	$b_3$
Bohr	1	0	1	0	0
Molire	0.35	0.55	0.30	1.2	6.0
Kr-C	0.190945	0.473647	0.278544	0.637174	1.919249
Al <sup>3+</sup> -Al <sup>3+</sup>	0.053254	0.946746	0.0	0.74	0.0
Al <sup>0</sup> -Al <sup>0</sup>	0.259466	0.697444	0.321063	0.931563	9.845565
He-Cu <sup>0</sup>	0.43675	0.09034	0.39917	5.7214	1.1093
He <sup>+</sup> -Cu <sup>+</sup>	0.01724	0.61131	0.0	0.5232	1.8288
Cl <sup>-</sup> -Cl <sup>-</sup>	0.00346	0.37355	0.0	0.3595	1.3095
Ar <sup>0</sup> -Ar <sup>0</sup>	0.7278	0.2722	0.93081	0.3081	0.0
He-Al <sup>0</sup>	0.050859	0.695714	0.229291	0.620437	2.42645
He-Al <sup>3+</sup>	0.803813	0.196187	0.601562	3.460996	0.0
He-Be <sup>0</sup>	0.024829	0.827418	0.103251	0.749127	2.905352
He-Be <sup>2+</sup>	0.948647	0.051353	0.79233	5.651933	0.0

## 2.6. İyonik Kristallerde Geliştirilmiş Durdurma Etkisi Konusunda Deneysel Test

Düşük enerjilerdeki durdurma güçleri mevcut deneysel tekniklerle doğrudan ulaşılabilir nitelikte değildir. Bununla birlikte, bunlar hassas girme derinliği ölçümlerinden türetilirler. Şu ana kadar yalıtkanlardaki deneysel aralıklar yüksek enerjilerde ölçülmüş olup (2.2 ve 2.3 bölümlerine bakınız); bunlar modern potansiyellerin ve durdurma kuvvetlerinin geçerliliğini teyit etmişlerdir (2.2 ve 2.4 kesimleri). Bununla birlikte son zamanlarda, Izsak, Berthold ve Kalbitzer [12] iyonik kristallerdeki girme derinliği ölçümlerini, gerçekten de önceden söylenen yük etkisinin gözlemlenebilir olduğu, ( $\epsilon < 10^{-3}$ 'e karşılık gelen) çok düşük enerjilere doğru uzatmayı başarmışlardır. Alkali halitler ve hatta toprak alkali halitlerdeki



etkiyi araştırma konusundaki girişimler, bu malzemeler radyasyon etkisi altında süratle bozunduklarından (atom koparma oranları ve kimyasal bozulma son derece yüksektir, örnek için [14]'e bakınız) başarısız olmuştur. Hassas girme derinliği ölçümü için yeteri kadar dengeli tek malzemenin  $Al_2O_3$  (safir) olduğu bulunmuştur.



Şekil 2.3. Safirdeki ( $Al_2O_3$ ) Cs, Au, Xe mermileri için enerji eğrilerine karşılık gelen deneysel aralıklar [44].  $Cs^{+1}$  yük durumuna uygun olarak belirgin bir 'yük etkisini' (küçük erişim mesafeli geliştirilmiş durdurmayı) göstermektedir. Xe nötr (etkisiz iken, Au daha az bir ortalama yüklü taşıyor görünmektedir).

Bu durumda girme mesafeleri 300 eV'a kadar düşük enerjiler için ölçülebilmektedir. Sonuçlar Şek.2.3'da ortaya konmakta ve  $Cs^+$  veya  $Au^+$  gibi iyonlar için beklenen sonuçların açığa çıktığını ancak Xe için ise çıkmadığını açıkça göstermektedir. Etkinin boyutları, bu düşük enerjilerde, Cs için +1, Au için +4 ve Xe için 0 yük durumlarıyla uyumludur. Bu Cs'un katı durum yoğunluklarında muhtemelen her zaman +1 halinde olduğu anlamına gelmektedir.  $2.67 \text{ \AA}$  yarı çapındaki büyük bir Seitz-Wigner hücresinde bile (Cs metali),  $2 \text{ \AA}$  atomik yarıçapına sahip katı Xe açık bir şekilde nötr durumunda kalırken, Cs'un dış elektronu iletim bandına çıkarılmaktadır. Hacim tartışmasının yanı sıra, yalıtılmış atomların ilk iyonlaşma

potansiyelleri de göz önünde alınabilir ve bunlar Cs, Au, ve Xe için sırasıyla 3.89 eV, 9.22 eV ve 12.13 eV'tur. Bu yeni etkinin bize bir katının içinde yavaşlayan iyonların başka türlü ulaşılamayan yük durumları hakkında bazı bilgiler sağlayabilmesi oldukça ilginçtir.

## 2.7. Yalıtkanlarda Elektronik Durdurma

Yalıtkanlarda elektronik durdurma sadece enerjili parçacıkların yavaşlaması ile ilgili değildir; söz konusu iyonun (ve tepki veren hedef atomların) hedefin elektronik sistemine enerji transferi de radyasyon etkileri üretiminde önemli bir faktördür. Metaller ve yarı iletkenlerin tersine, elektronik uyarma ve iyonlaşma yalıtkanlarda kalıcı hasarlara neden olabilir; iyonik kristaller anyon yükü durumlarındaki değişikliklere karşı hassastırlar (Pooley süreçleri yüksek bir oranda nokta hasarları üretirler ve yüzeyde büyük bir atom koparması meydana getirirler [14]). Organik moleküller, tahrip etme veya polimerleşme yoluyla ('zincir kesme', 'çapraz bağlama') değerlik elektronlarının çekimi/koparılmasına yanıt verirler. Minerallerde iyonlaşma kazanabilir yolların oluşumuna neden olabilir [47]. Doğal olarak, bütün etkilerin bu metinde kapsanması mümkün değildir.

Burada, bu bölümde kastedildiği anlamda ve teorik bir giriş olarak, ileride yer alan bölümlerdeki durma mesafeleri ve iyonlaşma dağılımlarını açıklamada kullanılacağı kadarıyla elektronik durdurmanın bazı ana fiziksel kavramlarını açıklama girişiminde bulunulacaktır.

(i) *Proton durdurma*: Tarihsel gelişim itibariyle, ilk elektronik durdurma kuvvetleri protonlar gibi nokta yükler için hesaplanmışlardır. Şu anda ilgilendiğimiz parçacık hızları için, yani  $E/M < 1$  MeV/akb için, Lindhard'ın yaklaşımı [48] en kullanışlı yöntem olarak ortaya çıkmıştır. Lindhard, bu hareketi bir nokta yükten oluşan serbest elektronların (düzgün bir pozitif taban üzerinde) sonsuz homojen bir plazmada hareketi olarak ele almıştır. Bu kavram daha sonra, her hacim elemanının –boyut açısından sonlu da olsa– bağımsız bir sonsuz plazma gibi davrandığı varsayılarak ('yerel yoğunluk yaklaşımı'), gerçek (sabit olmayan) elektronik yoğunluklarda uygulanmıştır. Bu model nitelik olarak doğru özellikleri vermektedir; yani alçak

enerjilerde hızla orantılı bir durdurma kuvveti, 100 keV/akb civarında bir maksimum durdurma ve sonrada –yüksek enerjilerde– iyi bilinen Bethe durdurma kuvvetine doğru kademeli bir birleştirme [49] sonucuna yol açmaktadır.

Yerel yoğunluk yaklaşımı elektronik durdurmanın bir ana özelliğini de çok açık bir biçimde göstermektedir; İyon hızı ne kadar düşük olursa, yüksek yoğunluk bölgelerinin (yani hedef atomlarının iç yörüngelerinin) durdurma kuvveti katkıları da o oranda az olmaktadır. Bu, düşük hızlarda, sadece dış yörüngelerin veya hatta değerlik ya da iletkenlik elektronların elektronik durdurmadan sorumlu oldukları anlamına gelmektedir. Buda bizi doğrudan doğruya özel yalıtkan etkileri konusunda bazı düşüncelere götürmektedir: Donmuş nadir gazlar veya alkali-halitler gibi bazı yalıtkanlarda, hiçbir iletkenlik veya bağ elektronu mevcut değildir; dış yörünge elektronları sıkıca bağlıdır ve iletkenlik bandından geniş bir boşlukla ayrılmışlardır. Bu durumda, (belirgin bir kritik hızın altında) yavaş bir mermi hedef elektronlarını uyaramayabilir ve elektronik durdurma bu tür yalıtkanlarda tamamen ortadan kaybolabilir.

Yüksek bir hassasiyet gerektiren pratik uygulamalar için, durdurma kuvvetleri farklı bir yaklaşımla yine de elde edebilir: Proton ve  $\alpha$  parçacığı durdurma kuvvetleri konusundaki çok büyük miktardaki verinin varlığı sebebiyle (şu anda 10,000'in üzerinde), bu bilgilerin gözlemlere dayalı olarak kullanılması teorik yaklaşımlar geliştirmekten daha kolay olabilmektedir. Ziegeler ([13], sayfa 165), Biersack ve arkadaşlarınıninkine [50] benzer bir parametrelendirme kullanarak, en basit şekliyle

$$1/S_e = 1/S_{L0} + 1/S_{Hi}, \quad S_{L0} = c_0 \sqrt{E}, \quad S_{Hi} = \frac{C_1}{E} \log \left( \frac{C_2}{E} + C_3 E \right) \quad (2.20)$$

formülünü kullanarak K ve H deneysel durdurma kuvvetleri için, bugüne kadar teorik olarak ulaşılamamış olan, '%5'den daha iyi bir doğruluk' bulunduğunu öne sürmektir. Bu elementler için en son geçerli deneysel durdurma katsayıları [13] referansında sıralanmaktadır.

(ii) *Ağır iyon durdurma kuvvetleri.* Ağır bir iyon için elektronik durdurma gücü temel olarak aşağıdaki formülle saptanmaktadır:

$$S_e(V) = Z^2_{eff}(V) \cdot S_p(V) \quad (2.21)$$

Burada  $Z_{eff}(v)$  saçılan hedef elektronları için merminin etkin yükü ve  $S_p(v)$ , ağır iyon ile aynı  $v$  hızındaki protonlar için durdurma gücüdür (protonun +1 nokta yükünü temsil ettiği varsayılmıştır).  $Z_{eff}$ 'in fiziksel anlamı, en iyi şekilde, farklı uzaklıklarda hareket eden iyonda saçılan hedefin elektronları tarafından görülen ortalama mermi yükü olarak tanımlanabilmektedir. Böylece,  $Z_{eff}$ 'in değerinin  $Z^* < Z_{eff} < Z$  sınırları içine düşmesi beklenmektedir ve burada  $Z$  (iyon çekirdeğine yakın elektronun saçılmalarından sorumlu) çekirdek yükü ve  $Z^*$  ise (çekirdekten büyük mesafelerde saçılan elektronlardan sorumlu) iyonun yük durumudur. Orta mesafelerde çekirdek yükü, kolay matematiksel işlem için genellikle basit bir  $e^{-r/\Lambda}$  perdelemesiyle yaklaşım yapılan, elektronların soyulmamış kesimi tarafından kısmen perdelenmektedir. Bütün muhtemel olaylara (çarpışma parametreleri) göre uygun ortalamayla  $Z_{eff}$  aşağıdaki gibi elde edilir [53 ve 13]:

$$Z_{eff} = Z^* + 0.5 \cdot (Z - Z^*) \cdot (v_0 / v_F)^2 \cdot \ln \left[ 1 + (2\Lambda v_F / a_0 v_0)^2 \right] \quad (2.22)$$

Burada  $v_F$  hedef malzemenin Fermi hızını ve  $v_0$  da Bohr hızını göstermektedir (genellikle  $v_F = v_0$ ).

Bu modelin gelişiminde tarihsel olarak önemli aşamalar aşağıdaki gibidir: Bohr [51] merminin, mermi hızından daha düşük yörünge hızlarına sahip olan tüm elektronlarının soyulduğunu belirtmiştir. Northcliff [52] soyulma kavramını, Thomas-Fermi atomlarını mermiler şeklinde kullanarak, iyonun kısmi yük durumunu aşağıdaki gibi sadece tek bir parametrenin,  $y = v/v_0 Z^{2/3}$ , bir fonksiyonu olarak veren hedeften bağımsız genel bir analitik formüle sokabilmiştir:

$$q = Z^* / Z = q(y/v_0 Z^{2/3}) \quad (2.23)$$

Bundan sonra, Brandt ve Kitagawa [53] iki iyileştirme sunmuşlardır: (1) Soyma formülünde (2.23)  $v$  iyon hızını, iyonun hareket eden hedef elektronlarına göre  $v_r$  ortalama göreceli hızıyla değiştirmişlerdir (bir Fermi gazı olmasının nedeniyle, düşük enerji durdurma gücünden sorumlu olan bağ veya iletim elektronlarını dikkate alarak). (2) Kalan soyulmamış elektronlarla nükleer yükün  $e^{-r/\Lambda}$  perdelemesini sunmuşlar, Thomas-Fermi kavramlarından  $\Lambda$  perdeleme uzunluğunu saptamışlar ve (2.22) eşitliğini elde etmişlerdir. Son olarak, Ziegler ve diğerleri [13] referansında uygulanmış formüllerden bir çoğunu, büyük veri tabanlarıyla mümkün olan en iyi uyumu sağlayacak şekilde iyileştirmişler; özellikle (2.23) soyma formülünün yeniden tasarlanması ve yukarıdaki Thomas-Fermi  $\Lambda$  değerinin bireysel olarak ayarlanması gerekmiştir. Ziegler ve diğerleri tüm tasarlananların güvenilir bir biçimde çalışmasını, sonunda aşağıdaki aşamaları tanımlayarak ve tüm formülleri ortaya koyarak sağlamışlardır [13]: 1) göreceli hız  $v_r$  yi hesaplamak, 2)  $Z^*$  iyonun yük durumunu saptamak, 3)  $\Lambda$  perdeleme uzunluğunu elde etmek, 4)  $Z_{\text{eff}}$ 'i elde etmek için perdeleme formülü (2.22)'yi uygulamak, 5)  $S_p(v)$  proton durdurma kuvvetini hesaplamak, 6) nihai sonuç olan  $S_e = Z_{\text{eff}}^2 S_p$  'yi bulmak.

## 2.8. Varılan Sonuçlar

(i) İyonik parçaları olan yalıtkanlarda, mermi iyon ile hedef iyonları arasındaki Coulomb kuvvetleri herhangi bir etkin perdelemenin yokluğu sebebiyle büyük mesafeler boyunca etkili olurlar. Etkileşim aralığı sadece, transfer edilmiş enerjisinin bağlı hedef iyonunun  $\eta\omega$ 'dan büyük olması demek olan kuantum mekanik gereksinimlerle sınırlandırılır [6].

(ii) Eğer mermi yük durumunu düşük enerjilerde sürdürürse, düşük enerjilerde iyonik kristallerde şiddetli bir şekilde gelişmiş nükleer durdurma olabilir. Bu, şu ana kadar deneysel olarak Au ve  $\text{Cs}^+$  iyonları için ispatlanmıştır; ancak düşük enerjilerde nötr olduğu görülen Xe gibi nadir gaz mermilerinde bu söz konusu değildir.

(iii) Coulomb kuvvetlerinin –özellikle hafif iyon olaylarında– yokluğu nedeniyle gerçekçi potansiyeller ve durdurma kuvvetleri, sıklıkla kullanılan Thomas-Fermi veya Moliere potansiyellerinden daha düşüktür (tipik örnekler He-Cu, He-Be).

Bunlar Biersack ve Ziegler'in daha yakın tarihli çift-atomik potansiyelleriyle daha iyi tanımlanırlar [5,13].

(iv) Temel hedefler için saptanmış olan elektronik durdurma kuvvetlerinin yalıtkanlara da iyi uygulanabildikleri görülmüştür. Birçok yalıtıkandaki geniş elektronik yasak enerji bant aralığı sebebiyle oldukça düşük hızlı mermilerin enerjilerini elektronik sisteme aktaramamaları beklenebilir. Yalıtkanlardaki bu tür bir azalan durdurma kuvveti etkisi, şu ana kadar herhangi bir deneysel veriyle saptanabilmiş değildir.



## **BÖLÜM 3. ANALİTİK ERİŞİM UZAKLIĞI TEORİLERİ**

### **3.1 Giriş**

Uzaysal erişim uzaklığı dağılımları için teorik düşünceler, 1963'de Lindhard, Scharff ve Schiott'un önemli çalışmasıyla [3] başlamış ve bu şekilde sık sık LSS teorisine atıfta bulunulmuştur. Onların yaklaşımı daha sonra da çeşitli araştırmacılar tarafından uygulanmış ve geliştirilmiş olup ilk izdüşümsel durma mesafesi hesaplamalarını ortaya çıkarmıştır [17, 20, 54, 59].

Son yıllarda, katılardaki enerjili iyonların (ve geri tepme atomlarının) yavaşlaması ve saçılması dikkate alınmıştır. İzdüşümsel durma mesafesi ve sapmaların hesaplanması için, son zamanlarda bilinen durdurma kuvvetlerine ve enerji kaybı dağılımına dayalı hızlı bir algoritma geliştirilmiştir [15]. Basit kavramlara dayandığından ve mevcut diğer teorilerle ve izdüşümsel alanlardaki deneysel sonuçlarla iyi bir uyum içinde olduğundan, bu yöntem aşağıda tartışılacaktır. Yöntem, çok-atomlu maddeler [16] dahil yarı iletkenlerdeki iyon durma mesafelerinin sıralandırılmasında önceden uygulanmıştır. Durdurma gücünde ve mesafelerinde ulaşılan hassasiyet şimdi, halen mevcut deneysel verilere göre %10 daha iyi bir standart sapmaya karşılık gelmektedir.

Eğer 3-boyutlu uzayda hasar veya iyonlaşma dağılımları gibi radyasyon etkilerinin daha ayrıntılı olarak bilinmesi gerekiyorsa, Monte-Carlo simülasyonlarının kullanılmasının en uygun yöntem olacağı düşünülmektedir.

### **3.2. Yavaşlama Süreci Sırasında İyon Hareketinin Yönel Yayılmı**

Her bir uzunluk elemanının (ortalama) izdüşümleri toplanarak, iyonların (ortalama) izdüşüm aralıkları elde edilmek isteniyorsa; bunun için, yavaşlama süreci sırasında

iyon hareketinin ortalama yöne bağlı kosinüs değerinin bilinmesi gerekmektedir. Bir hedef atomla her çarpışmada iyon, enerji kaybetmekte ve aynı zamanda yön değiştirmekte olup, söz konusu T 'nükleer' enerji kaybı (hedef atoma momentum transferi sebebiyle)  $\theta$  sapma açısıyla aşağıdaki gibi doğrudan ilişkilidir:

$$T = \frac{4M_1M_2E}{(M_1 + M_2)} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (3.1)$$

Burada  $M_1$  ve  $M_2$  sırasıyla iyon ve hedef atomun kütlelerini göstermektedir.

İyon hareketinin yönlerini kutupsal ve azimut açıları olan  $\psi$  ve  $\theta$  ile gösterilebilir ve bunlar, birim kürede noktalar olarak, kutuptaki iyon hareketinin başlangıç yönüyle ( $\psi=0$ ) ölçülmek istenilen izdüşüm açısı boyunca x-eksenine karşılık gelmek üzere, Şekil 3.1.(a)'daki gibi belirtilebilir. Her çarpışmayla hareketin yönü, gelişigüzel ve birbirini izleyen sapmalar arasında herhangi bir ilişki olmaksızın değiştiğinde, yönsel küremiz üzerindeki kürenin noktalarını x-ekseni (kutupsal eksen) üzerine iz düşürülürse, iyon hareketinin yönsel kosinüsüne karşılık gelen, -1 ve +1 arasında değerler elde edilir, (Şekil 3.1(b)).

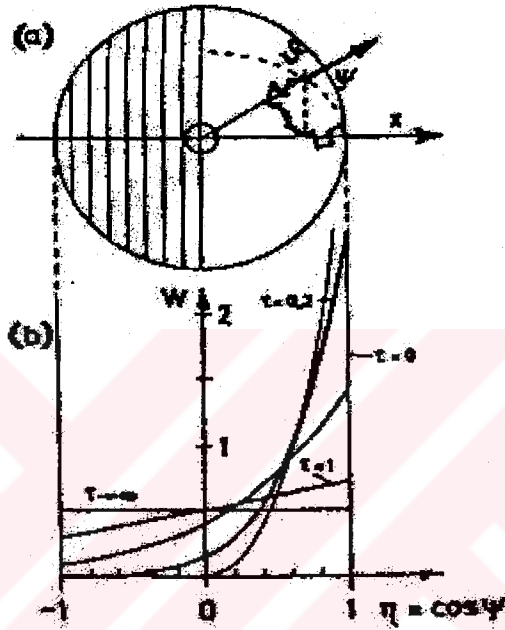
Şimdi  $\psi$  kutupsal açısı veya  $\eta = \cos\psi$  yönsel kosinüsü için  $\omega$  olasılık dağılım fonksiyonu göz önüne alındığında, aşağıdaki durumlar gözlemlenebilir. (i) Bu, başlangıçta  $\psi=0$  ve  $\eta=1$ 'de merkezlenmiş bir delta fonksiyonudur, (ii) olasılık dağılımı daha sonra, iyon yavaşlarken difüzyon türü bir dağılım göstermektedir ve son olarak da (iii) bu hareket, iyon başlangıç yönünü tamamen unutana ve her hareket yönü eşit ölçüde mümkün olana kadar, yani yörüngesinin sonuna kadar sürmektedir. Bu aşamada olasılık dağılımı bir  $\psi$ ,  $\theta$  küresi boyunca sabittir ve  $\eta$  için -1,+1 aralığında da sabit kalacaktır (Şekil 3.1(a)'da gösterilen dilim eşit yüzey alanlarına sabittir).

Bu niteliksel resim daha katı bir matematiksel tanıma kolaylıkla dönüştürülebilir: Birim küre üzerindeki bu olasılık hareketi difüzyon (yayılm) eşitliğine göre meydana gelmektedir:



$$\frac{\partial w}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{\partial w}{\partial \eta} \right] \quad (3.2)$$

Burada  $\eta = \cos \psi$  ve  $\tau$ , sıradan dağılımdaki  $Dt$ 'ye eşdeğerdir. Bu eşitliğin çözümü Legendre polinomlarının terimleriyle elde edilebilmekte ve Şekil 3.1 (b)'deki eğrileri vermektedir.



Şekil 3.1 İyon hareketinin yönsel değişikliklerinin bir birim küre üzerinde Brownian hareketi olarak gösterilmektedir. Başlangıçta ( $\tau < 1$ ), iyon ileriye doğru hareketi tercih etmektedir yavaşlama sürecinin sonuna doğru ( $\tau > 1$ ), tüm hareketler eşit olasılıklı hale gelmektedir ve küre üzerinde (a) veya yönsel kosinüste (b) düzgün bir dağılım oluşmaktadır.

İzdüşüm durma mesafelerinin değerlendirilmesinde  $w(\eta, \tau)$  dağılım fonksiyonlarının açık bir şekilde bilinmesi gerekmektedir. Amaca uygun olarak, basit bir ifadeye götüren ve (3.2) eşitliğinden elde edilen  $\eta(\tau)$  yönsel kosinüsün ortalama değerinin bilinmesi yeterli olacaktır [15]:

$$\bar{\eta}(r) = \int_{-1}^{+1} \eta W(\eta, \tau) d\eta = \exp(-2\tau) \quad (3.3)$$

Bu sonuç yine ve bu kez matematiksel olarak, ilk ileri hareketin,  $\bar{\eta} = \langle \cos \psi \rangle = 1$ , yavaşlama sürecinde artan  $\tau$  ile, son izotropik harekete doğru ( $\bar{\eta} = \langle \cos \psi \rangle = 0$ ) nasıl değiştiğini göstermektedir.

### 3.3. Açısal Yayılm Parametresi $\tau$ ile Enerji Kaybı Arasındaki Bağlantı

$\tau$  ile nükleer enerji kaybı arasındaki ilişkiyi kurma sorumluluğu hala daha bulunmaktadır. (3.2) ve (3.3) eşitliklerine yerleştirilmesi yoluyla, sıradan uzay-zaman difüzyonundaki  $Dt$ 'ye veya  $\int Ddt$ 'ye tekabül ettiği görülmektedir. Birim küre üzerindeki yüzey dağılımı durumunda  $\tau$  iki boyutlu Einstein ilişkisi kullanılarak değerlendirilebilir;

$$\delta\tau = \frac{1}{4} \delta\phi^2 \quad (3.4)$$

Bu, düzlemde ve -iyi bir yaklaşımla- birim kürenin küçük yüzey bölgelerinde de geçerlidir.  $\delta\phi^2$ ,  $\delta\tau$  (veya  $D\delta t$ ) artımlarına bağlı olarak kürenin üzerindeki (ortalama) uzaklığın karesidir. Eğer bu aralıkta  $n$  sayıda çarpışma meydana gelecek olursa (uzaklıkların kareleri eklenerek), aşağıdaki formül yazılabilir:

$$\delta\tau = \frac{1}{4} \delta\phi^2 = \frac{1}{4} \sum_1^n \phi_i^2 \approx \frac{1}{4} \sum_1^n \frac{\theta_i^2}{(1 + M_1/M_2)} \approx \frac{1}{4} \frac{M_2}{M_1} \frac{\sum T_i}{E} \quad (3.5)$$

Burada ' $\approx$ ' sembolü, iki durumda da küçük açı yaklaşımlarını göstermek üzere, iki kez kullanılmıştır: (i)  $\phi$  lab açılarını,  $\phi_i$  kütle merkezi açılara dönüştürmek için, ve (ii)  $\theta_i$ , saçılma açısını (3.1) eşitliğine göre ilişkilendirmek amacıyla  $T_i$  aktarılan enerjiyle ilişkilendirmek için (3.5) eşitliği, açısal dağılım ve nükleer enerji kaybı  $\delta E_n$  arasındaki doğal bağlantıyı göstermek üzere, daha kısa bir biçimde aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir:

$$\delta_\tau = \frac{\mu}{4} \frac{\delta E_n}{E}, \quad \mu = \frac{M_2}{M_1} \quad (3.6)$$

Nükleer ve toplam durdurma güçleri için standart sembollerden  $S_n(E)$  ile  $S_t(E)$ 'yi ve mermi enerjisindeki toplam değişiklik için de  $\delta E$ 'yi kullanarak, formülün son hali elde edilebilir:

$$\delta\tau = -\frac{\mu}{4} \frac{S_n}{S_t} \frac{\delta E}{E}, \quad \tau(E_0, E) = -\frac{\mu}{4} \int_{E_0}^E \frac{S_n}{S_t} \frac{dE}{E} \quad (3.7)$$

Burada  $E_0$  iyonun ilk enerjisidir. Yukarıda bahsedildiği gibi işlem, şu ana kadar  $\delta\tau \sim \Sigma T_i \sim S_n$  sonucuna yol açan kuvvet serilerinin sadece ilk terimine karşılık gelen küçük-açı yaklaşımlarına dayandırılmıştır. Bundan ötürü  $\tau$ , şu anda sadece, önceki teorilerde olduğu gibi [3] doğal olarak tek bir değişkene bağlı bir diferansiyel kesitten başka hiçbir bilgi içermeyen,  $S_n(E)$ 'ye bağlıdır. Hassasiyeti bunun ötesine doğru ilerletmek için,  $\Sigma T_i$ ,  $\Sigma T_i^2$ ,  $\Sigma T_i^3 \dots$  terimleriyle ve sonunda da nükleer enerji kayıplarında  $S_n$   $Q_n$  ve daha yüksek momentlere götürecek geliştirmeler (3.4) ve (3.5) eşitliklerinde yapılmalıdır ve buna [15] referansında ulaşılmıştır.

### 3.4. Ortalama İzdüşüm Aralığının Hesaplanması

Ortalama izdüşüm aralığı olan  $\bar{X}$ 'e şimdi -(3.3) ve (3.7) eşitliklerinin uygulanmasıyla- doğrudan ulaşmak, toplam yol uzunluğu  $s$ 'ye ulaşmak kadar kolaydır:

$$S = \int dS = \int_0^{E_0} \frac{dE}{S_t(E)} \quad (3.8)$$

$$\bar{X} = \int \langle \cos\psi \rangle ds = \int_0^{E_0} \exp(-2\tau(E_0, E)) \frac{dE}{S_t(E)} \quad (3.9)$$

İyon yörüngesinin her yol uzunluk elemanı, buna karşılık gelen yönsel kosinüsle çarpılarak, x-ksenine iz düşürülmektedir.  $E_0$  enerji iyonların ortalama hesaplanabilmesine rağmen, x'e karşılık E değerlerinin elde edilmesinin daha pratik yöntemlerinin ilerideki bölümlerde geliştirileceğinden bahsedilmesi gerekiyor.

Uygulama alanlarında, örneğin yarı iletken aşılmasında, farklı bir terminolojinin sıklıkla kullanıldığına burada dikkat edilmelidir:  $s = R$ ,  $X = R_p$ ,  $\sigma_x = \Delta R_p$ .

### 3.5. Olası Analitik İşleme Bir Örnek Olarak Ağır-İyon Aralıkları

Düşük enerjili ağır iyonlar için, nükleer durdurma egemen yavaşlatma sürecidir. Eğer (3.7) eşitliğinde  $S_t \approx S_n$  kullanılırsa;

$$T = \frac{\mu}{4} \ln \frac{E_0}{E}$$

değerini elde ederiz ve izdüşüm aralığı da, (3.9) eşitliğinden,

$$\bar{X} = \int_0^{E_0} \frac{e^{-2r} dE}{S_t} = \int_0^{E_0} \left( \frac{E}{E_0} \right)^{\mu/2} \cdot \frac{dE}{S_t(E)} = \left( \frac{E}{E_0} \right)^{\mu/2} \cdot s(E) \Big|_0^{E_0} - \int_0^{E_0} \frac{\mu}{2E_0} \cdot \left( \frac{E}{E_0} \right)^{\mu/2-1} \cdot s(E) dE \quad (3.10)$$

olur. Son aşamada kısmi entegrasyon kullanılmıştır. Bu ara sonuçta ilk terim sadece toplam yol uzunluğunun kendisi olan  $S(E_0)$  değerini, ikinci terim ise ileriye doğru düz bir uçuş yolundan açılmal sapmaya bağlı olarak azalmayı göstermektedir. Düşük enerji rejiminde durdurma güçleri ve girme derinlikleri geniş enerji bölgeleri boyunca kuvvet kanunlarına uyarlar. Bundan ötürü, (3.10) eşitliğinde aşağıdaki sonucu elde etmek için  $s \approx E^b$  kullanılabilir:

$$\bar{X} = s(E) - \frac{\mu_s(E_0)}{2B + \mu} = \frac{s}{1 + \mu/2B} \quad (3.11)$$

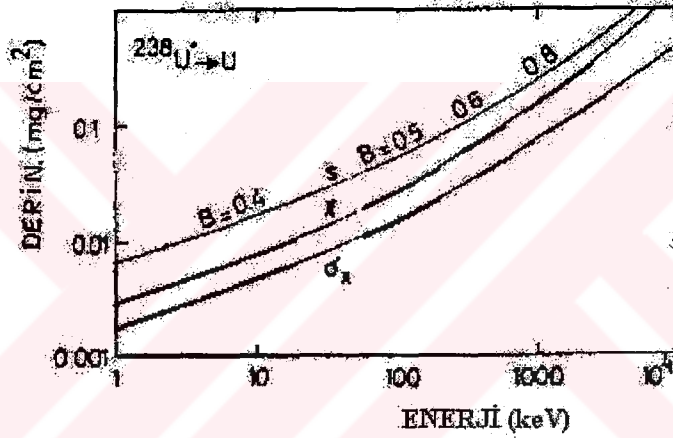
Bununla birlikte, girme derinliği değişiminin ikinci anı,

$$\overline{X^2} = \frac{s^2}{1 + \mu/B}$$

ifadesinden elde edilebilir ve bu da aşağıdaki izdüşümsel girme derinliği aralık dağılımı değişimini (varyansı) verir:

$$\sigma_x^2 = \overline{X^2} - \bar{X}^2 = \frac{(\bar{X}\mu/2B)^2}{1 + \mu/B}$$

Bu basit ifadeler, diğer karmaşık hesaplamalarda karşılaştırıldığında oldukça tatmin edici sonuçlar vermektedir. Sonuçların (kalın çizgiler), Littmark ve Ziegler tarafından [17] elde edilen taşıma eşitliğinin sonuçları (yumuşak çizgiler) ile karşılaştırıldığı bir örnek Şekil 3.2'de gösterilmektedir.



Şekil 3.2 Nükleer durdurmanın egemen olduğu ağır iyonlar için basit analitik girme derinliği öngörülürü. Kalın çizilmiş çizgiler  $\bar{X} = s/(1 + \mu/2B)$  ve  $\overline{X^2} = s^2/(1 + \mu B)$ 'den, ince çizilmiş çizgiler de LSS teorisinden elde edilmişlerdir [17].

### 3.6. İzdüşüm Girme mesafeleri İçin Diferansiyel Eşitlikler ve Evrensel

#### Algoritma

Bazı durumlarda kullanıcı,  $S_e$  ve  $S_n$  için, daha önce kullanılmış olanların dışında gelişmiş güzel seçilmiş fonksiyonları uygulamak isteyebilir veya birden fazla elementi içeren bileşim hedefleriyle uğraşmak zorunda kalabilir. İzdüşümsel girme derinliklerinin bu türden daha genel hesaplamaları için,  $\bar{X}(0) = 0$ 'dan başlayarak

tekrarlı bir yolla verilen  $x(E_0)$  değerinden  $\bar{X}(E_0 + \Delta E_0)$ 'ı hesaplayacak şekilde geliştirilebilir. Buna en kolay biçimde, integral sınırı içinde sadece bir kez ve  $\tau(E_0, E)$  fonksiyonu içinde de bir kez görülen  $E_0$ 'a göre (3.9) eşitliğinin diferansiyeli yoluyla ulaşılabilir ve aşağıdaki iki terimle ifade edilen sonuçlar elde edilir:

$$\frac{d\bar{X}}{dE_0} = \frac{e^{-2\tau(E_0, E_0)}}{S_t(E_0)} + \int_0^{E_0} \frac{\partial e^{-2\tau(E_0, E)}}{\partial E_0} \frac{dE}{S_t(E)} \quad (3.12)$$

$\tau(E_0, E)$  için (3.7) eşitliğinden  $\tau(E_0, E_0) = 0$  ve

$$\frac{\delta\tau}{\delta E_0} = \frac{\mu S_n(E_0)}{4 S_t(E_0) E_0}$$

elde edilir. Bu, (3.12) eşitliğinde kullanılarak aşağıdaki sonuca varılır:

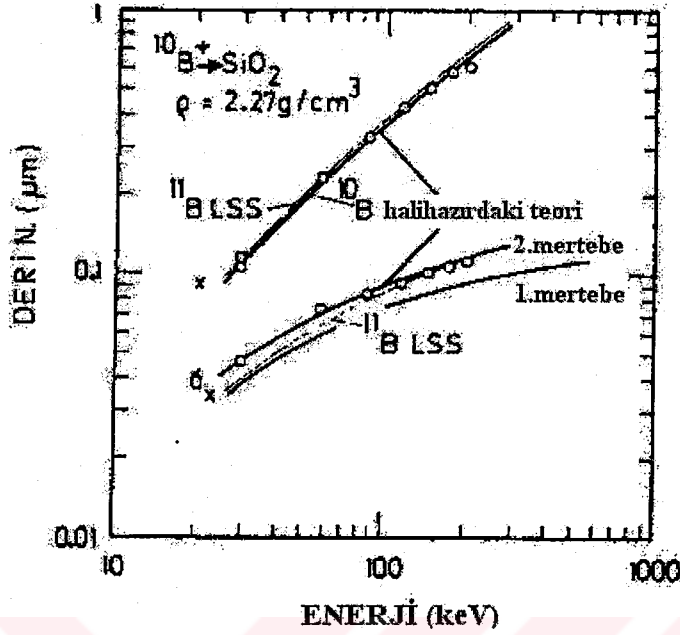
$$\frac{d\bar{X}}{dE_0} = \frac{1}{S_t(E_0)} - 2 \frac{\mu S_n(E_0)}{4 S_t(E_0) E_0} \cdot \int_0^{E_0} e^{-2\tau(E_0, E)} \frac{dE}{S_t(E)}$$

Son integral (3.9) eşitliğine göre  $\bar{X}$ 'ya eşittir ve bundan dolayı aşağıdaki sonuç elde edilir:

$$\frac{d\bar{X}}{dE_0} = \frac{1}{S_t} - \frac{\mu S_n}{2 S_t E_0} \bar{X} \quad (3.13)$$

Bu  $\bar{X}(0) = 0$  başlangıç koşuluyla  $\bar{X}(E_0)$  için lineer bir diferansiyel eşitlik olup standart bilgisayar programlarıyla kolayca çözülebilir. örneğin  $dX/dE_0$  yerine  $[\bar{X}(E_0 + \Delta E_0) - \bar{X}(E_0)]/\Delta E_0$  konarak girme derinliği algoritması elde edilebilir:

$$\bar{X}(E_0 + \Delta E_0) = \bar{X}(E_0) + \left( 1 - \frac{\mu S_n \bar{X}(E_0)}{2 E_0} \right) \frac{\Delta E_0}{S_t} \quad (3.14)$$



Şekil 3.3. Mevcut “PRAL” girme derinliği algoritmasının LSS teorisi [59] ile karşılaştırılması ve hassasiyet ölçümleri [19]. izdüşüm girme derinliği dağılımı LSS’de ve birinci dereceden PRAL öngörülerinde biraz düşük olmakla birlikte, izdüşümsel girme derinliklerinin tümü uyum içindedir. PRAL’de ikinci mertebe terimlerin dahil edilmesi deneysel verilerde iyi bir uyum sonucunu vermektedir (bkz. sonraki bölüm)

Deneysel olarak iyi sonuçlar vermiş olan silikondiyoksit içine bor aşılması (implantasyon) durumu için (3.14) eşitliğinin uygulanmasına bir örnek Şekil 3.3’te verilmektedir. Şu andaki sonuçların LSS sonuçlarıyla ve deneylere [19] uyumu oldukça tatmin edicidir. Mevcut teorik modelde varyanslar (uzunlamasına olarak  $\sigma_{\chi^2} = \overline{X^2} - \overline{X}^2$  ve dairesel olarak  $\sigma_r^2 = \overline{r^2}$ ) aşağıdaki eşitlikler kullanılarak elde edilir:

$$\frac{dr^2}{dE} = \left( \overline{X^2} - \overline{X}^2 \right) \frac{\mu S_n}{ES_t} \quad (3.15)$$

$$\frac{d}{dE} (\overline{X^2} + \overline{r^2}) = \frac{2\overline{X}}{S_i} \quad (3.16)$$

Bunlardan sonuncusu daha yüksek terim iyileştirmelerinde bile kullanılacak kadar doğrudur. Yine, lineer diferansiyel eşitliklerin sonlu-diferansiyel eşitlikler şeklinde değiştirilmesi ile, E'den E+ΔE'ye kadar bilinmeyen üç değişkenin  $\overline{X}$ ,  $\overline{X^2}$  ve  $\epsilon = \overline{X^2} + \overline{r^2}$  artımlarına izin veren 3 eşitlik elde edilir. Bu algoritma 0'dan seçilen bir maksimum artıma kadar tüm enerjiler için bir izdüşüm girme derinliği tablosunun elde edilmesinde etkin bir yöntem sağlar. Son iki eşitlikte, izleyen tüm eşitliklerde de olduğu gibi, E'nin yavaşlama süreci sırasındaki değişken enerji değil, iyonun başlangıç enerjisini göstermesi için, E<sub>0</sub>'daki indis kaldırılmıştır.

### 3.7. Monte-Carlo Girme Derinliği Hesaplamaları

#### 3.7.1. Giriş

Malzemelerdeki enerjili iyonların yavaşlaması ve dağılımlarının bilgisayar simülasyonuna uygulandığı kadarıyla, Monte-Carlo yöntemi, karmaşık hedeflerdeki en gerçekçi girme derinliği ve hasar profillerinin elde edilmesinde son yıllarda geniş biçimde kullanılmıştır. Monte-Carlo simülasyonu taşıma teorisinde dayalı mevcut analitik formülasyonlara göre önemli bazı avantajlara sahiptir. Yüzeylerin ve arabirimlerin açık bir biçimde hesaba katılmalarına, çok-atomlu hedeflerde her sayıdaki farklı hedef atomlarıyla elastik dağılmanın işlenmesine ve son olarak da bu tür dağılımların birkaç anı yerine tüm dağılım fonksiyonlarının üretilmesine izin vermektedir. Atom koparma, balistik karıştırma ve hata üretimi konusundaki tüm bilgileri veren geri tepme dizilerini dahil etmek de kolaydır. Bu yöntemle ilgili başlıca kısıtlama, bunun bilgisayarda zaman alan bir işlem oluşudur. Bu nedenle mevcut bilgisayar zamanı ile istenen istatistiksel hassasiyet arasında sık sık bir çelişki oluşmuştur. Bununla birlikte, daha önce gerekli sayısal süreçlerin yerine analitik ifadelerin kullanıldığı birçok yerlerde, örneğin TRIM programında [11], artık modern bilgisayarların kullanılması ve aynı zamanda da daha etkin programların uygulanması bu problemi büyük ölçüde gidermiştir.



Geçmişte literatürde Monte-Carlo yöntemine dayalı birçok iyon taşıma kodu tanımlanmış olup en çok başvurulanları [22-25] referanslarında belirtilmektedir. Kristal veya amorf hedeflerin göz önüne alınmalarının dışında bunların ana farklılıkları, nükleer saçılmaların işlenmesi ve elektronik enerji kayıplarında yatmaktadır. TRIM programı [11] saçılma integral sonuçlarını yüzde ikiden daha iyi bir oranda yeniden üretecek şekilde bir analitik şema kullanırken, örneğin HARLOWE kodu [22], klasik saçılma integralinin hassas bir sayısal değerlendirilmesiyle veya bu tür önceden hesaplanmış integrallerin yer aldığı tabloya bakılarak saçılma açısını saptamaktadır. Bazı diğer Monte-Carlo kodları, Lindhard-Nielsen-Scharff yaklaşımına dayalı yayılma biçimciliğini veya gerçek etkileşim potansiyellerine bazı izlenebilir analitik yaklaşımları kullanmaktadırlar. Bununla birlikte, bu yüksek hassasiyetlere ulaşamamıştır ve bu nedenle, bunlar bundan sonraki tartışmalarımızdan çıkarılmıştır.

### 3.7.2. TRIM kodunda kullanılan fiziksel varsayımlar

Tartışmalar, atomik çarpışmalardaki itici potansiyeller için modern girdileri kullanmakta olan ve aynı zamanda Ziegler ve diğerlerinin [13],  $Z_1$  ve  $Z_2$  dalgalanmalarını oldukça gerçekçi biçimde yeniden üreten, yarı gözlemsel elektronik durdurma kuvvetlerini uygulamakta olan en son TRIM programları üzerinde yoğunlaştırılacaktır.

Diğer simülasyon programlarında olduğu gibi TRIM programı da, bir hedefte büyük sayıdaki bireysel iyon geçmişlerini izlemektedir. Her geçmiş, iyonun verilen bir konum, yön ve enerjisi ile başlamaktadır. Bundan sonra iyon, çarpışmalar arasında düz ve serbest bir uçuş yolu olduğu varsayımıyla, hedef atomlarla oluşan bir çarpışma dizisi boyunca izlenmektedir. Parçacığın enerjisi, her serbest uçuş yolundan sonra elektronik enerji kaybı miktarı kadar ve daha sonra da (çarpışmada sonra), çarpışmada hedef atoma momentum transferini sonucu olan, söz konusu nükleer enerji kaybı kadar düşmektedir. Her iyonun geçmişi, ya enerji önceden belirlenmiş bir değerin altına düştüğünde veya parçacık hedefin ön veya arka yüzeyinin dışına çıktığında, sona ermektedir. Hedef, gelişigüzel yerlerdeki atomlarla amorf olarak kabul edilmektedir ve bu, kristal örgütün yönsel özelliklerini ihmal edildiği anlamına

gelmektedir. Bundan ötürü, bu, uygulamada amorf malzemeler içine aşlamayı tarif etmektedir ve, bir kısım iyonun kristal yapılarda belirli yönlerde açık geçişlere (düzlemsel veya aksenel olarak) yönelebildiği düşük-doşlu ve düşük-enerjili aşlamalarda önemli hale gelebilen kanallama etkilerini göz ardı etmektedir. Yüksek enerjilerde, kabul açıları küçük olmakta, ancak bununla beraber kanallama da sürmektedir.

Taşıma teorisiyle yapılan işleme benzer biçimde, Monte-Carlo simülasyonları da, iyon geçmişinin hedef atomlarla birbirini izleyen bir ikili olaylar dizisince tayin edilmesi anlamına gelen, ikili bir modele dayanmaktadır. Bu varsayım, hedef çekirdeğinden büyük uzaklıklarda bile meydana gelebilecek sapmaların bulunduğu düşük enerjilerde bozulabilir. Bu durumda iyon aynı zamanda birden fazla hedef atomlarla etkileşime girebilir ve bu tür çarpışmaların, aradaki çok küçük serbest-uçuş yollarıyla, birbirinden ayrı olarak işlenmesinden doğan hatalar ortaya çıkabilir. Bununla birlikte bu yolla ortaya çıkan hataların miktarına ilişkin bir çalışma bu güne kadar yapılmamıştır. TRIM programının pratik uygulamalarında, örneğin ortaya çıkan koparma (sputtering) sonucunun (birkaç eV'luk geri tepme atomlarının yüzeyin dışına atılması) incelenmesinde, TRIM sonuçları deneysel verilerle [26] oldukça tatmin edici bir uyum sergilemektedirler.

Yüksek enerjilerle TRIM kodları, serbest-uçuş yollarında doğal bir artışı hesaba kattıklarından, oldukça etkindir ve bir parçacığın fark edilebilir çarpışmalar arasındaki serbest uçuş yolu yüksek enerjilerde uzun olup yavaşlama süreci sırasında düzenli olarak azalır. TRIM programı çok yüksek enerjilerle çalışmak için gerekli koşulları içerir ve yüksek enerjiler için göreceli elektronik enerji kaybı ile saçılmayı da barındırır. 1 MeV/akb'nun altındaki iyon enerjileri için elektronik saçılmanın, izdüşümsel girme derinliği profilleri için küçük bir öneme sahip olduğu da bulunmuş olup genellikle ihmal edilmektedir. Bununla birlikte, bireysel çarpışmalarda en yakın yaklaşımını uzaklığına bağımlı olan elektronik enerji kaybının işlenmesi seçeneği kullanılarak, düşük enerjilerde bir tür saçılma ortaya konabilir.

Burada tarif edilmekte olan bilgisayar programı farklı içeriğe sahip çok tabakalı hedefler için geçerlidir. Program, iyon durma mesafesi ve enerji kaybının bir ve iki

boyutlu dağılımları kadar, düzlemsel hedeflerin yansıtma ve iletim özelliklerini de vermektedir. Temsili bazı hesaplamaların sonuçları bu bölüm boyunca sunulmakta olup, varsa deneysel veriler ve diğer analitik hesaplamalarla karşılaştırılmaktadır.

### 3.7.3. Atomik çarpışmalar

İyonun hedef atomlar tarafından saçılması, sadece hedef atoma momentum transferi yoluyla söz konusu iyonun önemli bir yavaşlatılma işlemi olmayıp, aynı zamanda parçacık yörüngesinin geometrisini de tayin etmektedir. Önceki programlarda sapma açılarının hesaplanması; kesin, ama bilgisayarda zaman alan, klasik saçılma integralinin sayısal bir değerlendirmesi şeklinde yapılmıştır. Diğer programlar, özellikle ağır iyonlar ve düşük enerjiler için başarısız olan bazı kaba yaklaşımlara dayalı analitik formülasyonlar kullanmışlardır. TRIM programında, sık sık 'sihirli formül' diye nitelendirilen, yüksek doğrulukta bir basit analitik ifade kullanılmaktadır. Bu formülde, verilen  $p$  çarpışma parametresi en yakın yaklaşımın hesaplanmış  $r$  uzaklığı ile aynı uzaklıktaki potansiyelin birinci türevi demek olan itici kuvvetle (en yakın mesafedeki) kinetik enerjiden elde edilen  $\rho$  eğrilik yarı çapından oluşturulan bir üçgenin basit geometrisi temel alınır. Deneysel olarak saptanmış bir  $\delta$  düzeltme terimi,  $\theta$  kütle merkezi sisteminde saçılma açısı için bulunan aşağıdaki formül de resmi tamamlamaktadır:

$$\cos \theta/2 = \frac{p + \rho + \delta}{\rho + r_0} \quad (3.17)$$

Bu eşitliğin sonuçları Şekil 3.1b üzerinde kesiksiz çizgiler halinde ve saçılma integralinin kesin sonuçları ile karşılaştırmalı olarak (2.7) eşitliğinde verilmektedir.

Özellikle düşük enerji iyonları konusunda, güvenilir sonuçlar elde etmek için, uygun gerçekçi bir itici potansiyel kullanmak kritik derecede önemlidir (bkz. Bölüm 2.1). Bu tür potansiyeller geleneksel olarak Coulomb etkileşimini ve bir  $\phi$  perdeleme fonksiyonunu içerecek şekilde aşağıdaki gibi yazılmaktadır:

$$V = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi(r/a) \quad (3.18)$$

Evrensel olarak uygulanabilir perdeleme fonksiyonları arasından, evrensel perdeleme fonksiyonu olarak anılan (2.3) eşitliği [5 ve 13], bir çok nedenle TRIM programı için seçilmiştir: Her şeyden önce bu, bireysel olarak hesaplanmış yüzlerce iki atomlu potansiyellere dayanmaktadır; ikinci olarak, deneysel olarak saptanmış yüzden fazla potansiyelle iyice karşılaştırılmıştır [10]; üçüncü ve son olarak da, bu tür bir potansiyel kullanılırken girme mesafesi öngörülleri ile deneyler arasında oldukça iyi bir uyum saptanmaktadır.

Bilgisayar verimliliği bakımından, evrensel perdeleme fonksiyonu ve sihirli formül  $E \gg Z_1 Z_2 e^2 / a$  enerji değerlerinde kullanılmamaktadır. Bu tür yüksek enerjilerde, tüm fark edilebilir sapmalar ve enerji transferleri, perdelenmemiş Coulomb potansiyeline çok yakın potansiyelin bulunduğu yerlerdeki oldukça küçük çarpışma parametrelerinde oluşmaktadır. Bu durumda, sapma açısı ve transfer edilen enerjilerin basit bir analitik yolla elde edilebildiği, düşük enerji bölgesi için sihirli formülün yaptığı gibi, yüksek enerji rejiminde yaklaşık olarak aynı doğruluğu sağlayan, ve  $r^{-1.5}$  ile  $r^{-2}$  Coulomb potansiyelleri arasında değişen potansiyel değerleri kullanılarak bilgisayar zamanından tasarruf edilebilir.

Kütle merkezi sistemindeki bilinen  $\theta$  saçılma açısından, laboratuvar sistemindeki iyonun yörüngelerinden  $\psi$  sapma açısı aşağıdaki formülle elde edilir:

$$\psi = \arctan \frac{\sin \theta}{\cos \theta + M_1 / M_2} \quad (3.19)$$

Üç boyutlu uzayda yeni iyon yönünü saptamak için, (kutupsal)  $\psi$  açısının yanı sıra, amorf malzemeler için 0 ile  $2\pi$  arasında rasgele seçilmiş bir başka  $\phi$  (azimut) açısına da gerekmektedir. Çarpışmadaki hedef atoma transfer edilen enerji (2.8) eşitliği ile verilmektedir

### 3.7.4. Elektronik enerji kaybı

Bütün iyon taşıma teorileri ve modellerinden olduğu gibi, TRIM programı da elektronik enerji kaybını nükleer enerji kaybından bağımsız olarak ele almaktadır. Bizim durumumuzdaki elastik ve elastik olmayan enerji kayıpları arasındaki bağlantıların ihmal edilmesinin nedenleri iki aşamalıdır: Uygulamaya ait neden, esas itibariyle, özellikle daha önce tartışılan genişletilmiş serbest uçuş yolları kavramı vasıtasıyla, bilgisayar verimliliğinin artırılmış olmasıdır. Daha önemli olan diğer neden ise, katılarda elektronik enerji kaybının çarpışma parametresi bağımlılığı konusunda tatmin edici teorik tanımlamaların ve deneysel verilerin bulunmamasıdır.

Çarpışma parametresi bağımlılığı ve dağılımı ihmal edilerek, elektronik enerji kaybı basit bir şekilde aşağıdaki ifadeyle elde edilebilir:

$$\Delta E_e = LNS_e(E) \quad (3.20)$$

Burada  $S_e(E)$  elektronik durdurma tesir kesiti,  $N$  atomik yoğunluk,  $L$  ortalama serbest uçuş yoludur. Ziegler ve diğerlerinin [13] oldukça karmaşık yarı deneysel durdurma kuvvetlerini en verimli bir şekilde uygulamak için, sıfır ile iyonun başlangıç enerjisi arasında eşit uzaklıkta dağılmış iyon enerjileri için 1000 durdurma gücü değerini önceden hesaplayan bir (alt-program) kullanılmaktadır. Basit olmayan hedefler için, her hedef atom örneğinin onun bulunma oranı orantılı bir biçimde durdurma gücüne katkıda bulunacağını belirten, Bragg kuralı kullanılmaktadır. Tabii ki, bu durdurma güçleri her farklı hedef tabakası için hesaplanmak zorundadır. Aşağıdaki geri tepme atomlarının hareketi durumunda da, durdurma gücü değerlerinin her hedef katmanındaki olası her geri tepme örneği için ayrıca saptanması gerekecektir. Böylelikle, gerçekçi durdurma güçlerinin kullanımı, bilgisayar bellek talebini önemli ölçüde arttırmaktadır.

### 3.7.5. Çok atomlu malzemelerde hedef atomların seçimi

Hedef atomların seçimi TRIM kodunda, mevcut olma olasılıklarının sitokiyometrik (bulunma yüzdesi olarak) varlıklarıyla orantılı olduğu, örneğin bir  $\text{SiO}_2$  hedefinde

oksijenin varlığının silisyumun iki katı olduğu, varsayılarak rasgele sayılarla yapılmaktadır. Bu hiçte basit (önemsiz) değildir ve uygulamada, hafif atomların ağır olanlardan daha küçük bir kesite sahip oldukları ve bu nedenle ağır bileşiklerle kendi ağırlık değerlerinin ötesinde çarpışmalara katlandıkları konusyla ilgilidir. Temel görüş, ağır atomlarla karşılaştırıldığında hafif atomlar için daha küçük  $P_{max}$  değeri almak gibi, herhangi bir gelişigüzel kesintide bulunmaksızın, potansiyellerin duruma hakim olmalarına izin vermektir. Bu, bütün hedef atomları için yeterince büyük çarpma parametrelerine izin vermek; ancak, örneğin verilen büyük bir çarpma parametresinde, daha düşük bir etkileşim potansiyeli olan hafif bir hedef atomunun, ağır atomlara göre sadece minimum bir sapma ve enerji transferine yol açmasını beklemek anlamına gelmektedir. Bu kavram, atomik yarıçapların ve aynı zamanda da üst üste binen katı durum HFS atomlarından hesaplanan etkileşim aralıklarının, hafif atomlar için hiçbir şekilde ağır atomlardan daha küçük olmadıkları gerçeğiyle de desteklenmektedir. Hafif ve ağır hedef atomları arasındaki farkın, etkileşim aralığında değil, potansiyelin büyüklüğünde olduğu görülmektedir.

### 3.7.6. Yüzeyden atom koparma

Sadece iyon aşılması değil, aynı zamanda atom koparılması da (koparma yoluyla aşındırma, koparma birikimi) önemli bir teknolojik araç olmuştur. Koparma etkilerine araştırmak için, TRIM programı, iyonlar kadar geri tepme atomlarını da izleyecek şekilde geliştirilmiştir. Bu sürüm, TRIM-SP [26], modern yüksek hızlı bilgisayarların varlığıyla da bağlantılı olarak, istatistiksel bakımdan anlamlı sonuçlar elde etmek için yeteri kadar iyon geçmişinin işlenebildiği, bilgisayar açısından yeterince verimli bir hale gelmiştir. Hatta bu program, son derece düşük koparma ürünlerinin (Y) bulunduğu fizyon araştırmasında bile kullanılabilir hale gelmiştir.

Eğer bir geri tepme atomu bir  $x < 0$  konumuna, yani yüzeyin dışına, hareket edecek olursa, bu atom kopma için bir aday olarak kabul edilmektedir. Onun yüzeye dik olan (normal) enerji bileşenini, düzlemsel yüzey potansiyeli ile düşürdükten sonra, yani yüzey bağlama enerjisi  $E_s$ 'yi çıkardıktan sonra, onun ya katı yüzeye geri döndüğünü (ve bundan sonraki çarpışmaları izlediğini) veya azalan enerjiyle ve yansıyan yayılma açısıyla kopmuş olup, TRIM-SP programının son çıktısında kullanılmak

üzere ilgili bilgileriyle (örnekler, olaya giren veya yansıtılan iyondan sonuçlanan PKA veya SKA, enerjisi ve açılar, başlangıç noktasının derinliği, vs.) kaydedilen bir parçacık olarak yüzeyi terk ettiği görülecektir [26,32,40].

### 3.8. İyon Girme Derinliği Ve Hasar Dağılımları

#### 3.8.1. Giriş

İyon aralığı ve hasar dağılımları -yalıtkanlarda aynı zamanda iyonlaşma dağılımları da- modern uygulamalar için giderek daha fazla ilginç olmaktadır. Uzunlamasına ve enlemesine profillerin ikisinde de, yaygın olarak kullanılan Pearson IV ve Gauss dağılımlarına göre kuvvetli sapmalar bulunmuştur ve bunlar, hareket eden geri tepmelerin iyonlaşma ile hasar üretimine katkılarının kapsandığı Monte-Carlo sonuçlarıyla gösterilecektir. Ağır iyonların hafif hedefler üzerine geldiği durumlarda, geri tepmelerin akışı iyon demeti akışından daha büyük olabilir ve iyonlaşma ile hasar profilleri, geri tepmenin hareketine bağlı olarak büyük ölçüde gelişebilir. Bu bölümde, iki-boyutlu iyon aşılması ile hata ve iyonlaşma dağılımlarının bazı ana özellikleri özetlenecektir. Hasar ve ikincil iyonlaşmanın dağılımları, geri tepmeler tarafından enerji taşınmasını içeren veya dışarıda tutan, teorik modeller için karşılaştırılmaktadırlar.

#### 3.8.2. Girme derinliği hesaplamaları

Mevcut aralık hesaplamalarında ( $E < 1\text{MeV}$ ), alışılmış varsayımlar merminin bir defada her zaman sadece bir hedef atomla etkileşime girmesi (ikili olay modeli), elektronik durdurmanın muntazam bir yavaşlama olması ve enerji kaybı sapmalarının ihmal edilebilir olmasıdır. Aşağıdaki örnekler için, bu varsayımlar ve standart ZBL [13] potansiyelleri ile durdurma güçleri kullanılmaktadır. Burada dağılımlarını tam olarak öngörmek için uygulanmakta olan TRIM Monte-Carlo simülasyonlarında [11,40], başka hiçbir basitleştirici varsayım veya yaklaşım kullanılmamaktadır. Girme derinliği dağılımlarının ilk momentlerinin süratle tahmini için yarı-analitik PRAL kodu [15] uygulanabilir, ancak -diğer yarı-analitik yollar gibi- yaklaşımlar kullanılarak, (örneğin seriye açma gibi genişletilmesi) hassasiyetten fedakarlık etmek

zorunda kalınır ve bu da daha yüksek girme derinliği momentlerinde bilinmeyen sapmalara yol açabilir.

### 3.8.3. Hafif iyon aşılması, ağır iyonların girme derinliği ve hasar profilleri

Hedef atomlara transfer edilen enerji ana çarpışma noktasına yakın bir yerde yerleşmiş hasara yol açar. Geri tepme atomları tarafından üretilen iyonlaşma (ikincil iyonlaşma) çok küçüktür. İyonların bir veya birkaç büyük açı saçılma olayları (tekli veya çoklu saçılma) aralık dağılımında geriye yüzeye doğru uzanan bir kuyruğa veya iyonların bazı geriye doğru saçılmalarına yol açar. Bununla birlikte çoğu iyonlar çok küçük sapmalarla (çoklu saçılma), biraz çökmüş bir uzaysal bir dağılımda durduruluncaya kadar, ileriye doğru hareket ederler.

Üç-boyutlu uzayda dağılım arka sınırına yakın bir yerde bazen bir şemsiye şeklini andıran tepe noktası gösterir. Küçük açı saçılması ve elektronik durdurmanın hakimiyeti hafif iyonların (100 keV veya üzeri), dik bir tepeye ve iyon aralıklarında keskin bir üst limite yol açan, küçük dalgalanmalarla çok düzenli bir şekilde yavaşlamasına neden olur- elektronik yayılımın genişleme etkisi 1 MeV' a kadar düşük bir değerdedir. Keskin sınırlar, tüm parçacık yörüngelerin sonlu bir hacim içerisinde içerildiği bir zarfın oluşturulmasına izin verir.

Ağır iyonun hafif durdurma malzemesi içine nüfuzu, ( $M_1 > M_2$ ) önceki duruma göre, laboratuvar sisteminde büyük saçılma açılarının ve aynı zamanda da, geriye doğru iyon akışlarının olmaması nedeniyle farklıdır. Uygulamada, silisyuma  $Bi^+$  iyonlarının aşılması gibi durumlarda, 20 keV'tan 200 eV'a kadar yavaşlatıldıktan sonra bile, hafif iyon aşılmasında izotropik hareket yerine hala ileri doğru bir Bi akışı bulunabilir. Örneğin iyonları biraz daha izlersek (mesela 25 eV' tan 5 eV'a kadar), hafif iyonlar izotropik olarak (girme derinliği dağılımını enlemesine ve boylamasına artırarak) yayılmışken, ağır iyonların hala ileriye doğru (ortalama izdüşümsel girme mesafesini artıracak şekilde) hareket ettikleri bulunur.



## BÖLÜM 4. SRIM PROGRAMININ TANITILMASI

SRIM, (Maddede İyonların Durdurulması ve Girme Mesafeleri) madde içindeki iyon-atom çarpışmalarının kuantum mekaniksel davranışlarını, (10 eV-2 GeV/akb) aralığında iyonların madde içinde durdurulması ve aldıkları mesafelerin hesaplanmasını içeren bir programdır (bu bölüm içinde hareketli atom **iyon** ve bütün hedef atomları **atomlar** olarak isimlendirilecektir). Bu hesaplama istatistiksel bir algoritmanın kullanılmasıyla oldukça etkin kılınmıştır. Kullanılan istatistiksel algoritmada iyonların hesaplanan çarpışmalar arasında sıçramalar yapmalarına izin verilmekte ve akabinde çarpışmaların meydana gelen boşlukta bir ortalaması alınmaktadır. Üst üste gelen elektron kabukları arasındaki değiş-tokuş ve korelasyon etkileşmelerini de içerecek şekilde iyon ve atom perdelenmiş bir Coulomb çarpışması yapmaktadırlar. İyon, hedef içinde elektron uyarımları ve plazmonları meydana getirecek uzun erişimli çarpışmalarda bulunacaktır. Bunlar, (varsayılan değerler tablolar halinde sağlandığında) program koşturulurken hedefin toplu elektronik yapısı ve atomlar arası bağ yapısının bir tanımını içerecek şekilde ifade edileceklerdir. Hız bağımlı yük hali hesaplaması ve hedefin toplu elektron denizi sebebiyle oluşan uzun erişimli perdelemeyi içerecek şekilde, hedef içinde iyonun yük durumu etkin yük kavramının kullanılmasıyla betimlenir. Hesaplamanın geniş bir anlatımı J.F. Ziegler, J.P. Biersack ve U. Littmark tarafından yazılan “The Stopping and Range of Ions in Solids” (Pergamon Pres, NY, 1985) (yeni baskı 1996’da yapılmıştır) adlı kitapta bulunabilir.

TRIM (Maddede İyonların İlerlemesi) programı bu program içine konulmuş oldukça ileri bir programdır. TRIM, her biri farklı maddelerden oluşan sekize kadar tabakadan meydana gelmiş bileşik madde formundaki karmaşık hedefleri de hesaplamasına konu edebilmektedir. Program sonuçta meydana gelecek iyonların 3 boyutlu dağılımını ve iyon enerji kaybıyla ilişkili (hedef hasarı, çıkarılma, iyonlaşma ve foton üretimi gibi) bütün kinetik olguları hesaplayabilmektedir. Hedefteki atom

dizileri ayrıntılı bir şekilde izlenmektedir. Programa istenilen zamanda müdahale edilebilmekte, yani istendiğinde koşturma işlemi durdurulabilmekte ve daha sonra kaldığı yerden çalıştırılabilmektedir. Hesaplamayla ilgili çizimler kaydedilebilmekte ve ihtiyaç duyulduğunda istenilen bölgeye çağırılabilir.

#### 4.1.SRIM'in Başlatılması

##### 4.1.1. SRIM'in bilgisayara kurulması

Orjinal SRIM diski, bütün sırim dosyalarını sıkıştırılmış bir şekilde bulundurmaktadır. Ayrıca SRIM'in yeni versiyonu internetten [www.srim.org](http://www.srim.org) adresinden indirilebilmektedir. Programın toplam hafıza ihtiyacı 5 Megabyte civarındadır.

##### 4.1.2. SRIM programının kullanımı

SRIM iki ana ve birkaç özel amaçlı programdan oluşur. Bu iki ana hesap programı;

- *Basit hedeflerde iyonların girme mesafesi ve durdurulması tabloları.* Hızlı bir şekilde tabloyu getirmek için SRIM dosyası girilir ve T programı başlatılır. Baş sayfa görüldüğünde herhangi bir tuşa basılır ve sonraki menüden S yada R'den biri seçilir. Tablolar, fotodirenç, plastik, cam, biyolojik hedef, beton, paslanmaz çelik vs. gibi kompleks maddeler için hazırlanmıştır. Kısa bir adımda DOS'dan SR (durdurma ve girme mesafesi tabloları) girilir. "Stopping and ranges tables" seçeneği görülür.
- Bütün etkilerin tamamen 3-boyutlu dağılımların üretilmesiyle çok katmanlı kompleks hedefler ile iyonların etkileşimlerinin hesaplandığı Monte Carlo İletim hesaplamaları TRIM olarak bilinir. Bu program "Quick Start into Monte-Carlo TRIM" seçeneği ile başlatılır.

Bu programlara aşağıda tanımlanan SRIM ana menü içerisinde girilir. Yardımcı programlar "Identification of the disk program/files" bölümünde tanımlanmıştır ve kaydetme, yazdırma, renk değiştirme vs. işlemlerinin nasıl yapılacağı belirtilmiştir.

Aynı zamanda program disketi üzerinde, diğer programlarla bağlantılı durdurma kuvvetlerini izinli hale getiren ve içerilen fiziği gösteren TRIM iletim programıyla durdurma kuvveti programının kaynak-kodu bulunmaktadır. SRIM'e başlamak için SRIM girilir ve sadece T komutu yazılır.

Bu T programı diğer bütün programlara ulaşmayı sağlar. SRIM baş sayfasına girdiğinizde herhangi bir tuşa bastığınız zaman SRIM'in ana menüsüne ulaşırsınız. Eğer hata olursa "system error message" komutunu görürsünüz. Ana menü size aşağıdakileri seçmenize olanak sağlar:

- Yardım ekranı SRIM'in fiziği ve tarihçesini gösterir. Buna ulaşmak için H tuşuna basılır.
- Katı içindeki iyonların girme mesafesi ve durdurulma tabloları (bu program için S veya R'ye basılır). Burada çok çabuk (1 dakikadan daha kısa) ve çok doğru bir şekilde hesaplama yapılır.

Bu tablolar fotodirençli, plastik, biyolojik hedef, beton, paslanmaz çelik vs. gibi kompleks maddeler için hazırlanmıştır. STOP.EXE olarak bilinen yardımcı program, katılardaki iyonlar gibi durdurma verilerinin daha karmaşık hesaplamalarını yapmak için SRIM diski üzerinde bulunur.

- Monte-Carlo TRIM'in gösterimi. TRIM seçeneklerinin neler olduğunu öğrenmek amacıyla birçok deneme yapmak için oldukça öğreticidir. Bu program D tuşuyla koşturulur.
- Kompleks katılarda iyonların meydana getirdiği hasar ve girme mesafelerinin Monte-Carlo hesaplamaları (aralık tuşuna bas). Burada 4 ana bölüm vardır:
  - 1) İyon ve hedefin kurulumu
  - 2) Hesaplamanın koşturulması
  - 3) Dağıtım şemalarına bakmak için hesaba ara verilmesi
  - 4) İstenilen bütün detayları veri dosyasına kaydetme

Bu program "Quick Start into Monte-Carlo TRIM" ile başlatılır.

Monte-Carlo TRIM çok yönlüdür. Program 10 eV-2 GeV/akb enerji aralığındaki iyon enerjileri ile on ikiye kadar farklı sayıda elemente sahip hedef atomlarıyla ilgili simülasyon yapabilmektedir. Dosyalar, geçen iyonlar, geri saçılan iyonlar ve çıkarılmış (sputtered) atomlar veya her bir iyon-hedef çarpışması için oluşturabilir. Bu program iyon durma mesafelerini hesaplamada oldukça hassastır. Bununla beraber, iyon girme mesafelerini hesaplayana iki farklı program (SR VE TRIM) nadiren uyuşmaz.

#### 4.2. Problemler ve Sistem Hata Mesajları

Aşağıdaki hatalar meydana gelebilir:

- SRIM OS/2 bilgisayarlarında (version 2.+) koşturulur. Eğer problem çıkarsa 'OS/2 ve UNIX bilgisayarlarında SRIM'i çalıştırmak' kısmına bakılabilir.
- Programlar hiç çalışmayabilir. Renkli bir ekrana, bir eş-işlemci yongasına (çipine) ve 410 k civarında boş belleğe ihtiyaç vardır. SRIM baş sayfası gözüktükten sonra program boş belleğinizde analiz yapar ve bir problem olup olmadığını bildirir. Eğer bir mesaj alınmazsa ana menü içinde sağa gidilir ve sonra tamam tuşuna basılır. Eğer yeterli boş bellek yoksa hafıza temizlemek için CONFIG.SYG ve AUTOEXEC.BAT seçenekleri işaretlenir. Durdurma ve iyon mesafesi tabloları sadece 230 k bellek kullanır ve ana menüden S veya R ile koşturulur.
- Kayıp disk dosyaları. SRIM 8 veri dosyasına ihtiyaç duyar. Eğer bunlardan biri eksikse, program bunu bildirir. TRIM.IN dosyası TRIM programı kurulumu tarafından oluşturulur.
- Diğer bütün hatalar, bir hata mesajıyla sonuçlandırılacaktır.
- 7 yada 253 hata numaralarının anlamı hafızada yer kalmamış demektir. Daha fazla boş belleğe ihtiyaç var demektir.

### 4.3. Durdurma ve Girme Mesafesi Tabloları

İyonların durdurulması ve girme mesafelerinin tabloları, ana menüden S veya R komutlarını kullanarak yada DOS'ta SR yazarak elde edilebilir.

İyon durdurma tabloları Monte-Carlo TRIM programındaki aynı değerleri verir. Kompleks maddelerden yapılmış katı yada gaz hedeflerde, 10 eV - 2 GeV enerjilerle, her iyon için durdurma istenebilir. Farklı bir durdurma birimi seçilebilir ve son tablo bu diğer durdurma birimlerine dönüştürme sabitlerini içerir. Bu durdurma güçlerinin tabloları disk üzerine kaydedilebilir ve diğer programlarda kullanılmaya hazır hale getirilebilir. Durdurma güçleri esasında daha önce bahsi geçen kitaptan çıkarılmıştır. (bak ZBL). Bu değerler 1988'de tamamıyla tekrar gözden geçirilmiş ve kitabın 1995 baskısında bu haliyle yayınlanmıştır. Durdurma değerleri STOP96.BAS programı kullanılarak hesaplanır ve SCOEF.95A, SCOEF.95B ve SCOEF.GAS.95 veri takımları kullanılır. Bunlar SRIM diski üzerinde dosyaların içindeki kapsamlı açıklamalarıyla birlikte bulunmaktadır.

İyon girme mesafesi tabloları, yukarıda verilen durdurma gücü listelerinin her ikisini de kapsar ve iyonların uzunlamasına ve yanlamasına sapmaları hakkında da fikir edinmemizi sağlar. Bu mesafeler PRAL programı kullanılarak hesaplanır (Projected Range Algorithm). Bu mesafe hesabı genellikle TRIM kullanarak bulunan girme mesafelerinden yüzde birkaç fark ile harikulade doğrudur. TRIM'le hesaplanan mesafelerde her zaman bir sabit nokta göz önünde bulundurulmalıdır. İyonlarla hedef atomlar arasındaki fiziksel etkileşimler PRAL programından daha detaylı olarak incelenir. Eğer iyon mesafelerinin bir tablosu istenirse, Monte Carlo TRIM ve PRAL tarafından hazırlanan girme mesafesi tabloları kullanılarak birkaç girme mesafesi elde edilebilir. Saçılma değerleri (son iyon dağılımının genişliği) hafif iyonlar için yaklaşık % 20, ama ağır iyonlar için 2 katından çoktur.

#### 4.4. Monte-Carlo TRIM Koşturulması ve Komutları

##### 4.4.1. Monte-Carlo TRIM' e hızlı başlama

Monte Carlo programı olan TRIM (maddede iyonların ilerlemesi), SRIM programına dahil olan programların en geniş kapsamlı olanıdır. Monte Carlo TRIM programında birkaç deneme programının koşturulması, bu programın neler yapabileceğini görmek açısından faydalı olacaktır. DOS formatında T komutu işletilir ve daha sonra ana sayfayı temizlemek için boşluk tuşuna basılır. Menüde, D yazılarak örnek koşturma başlatılır. Bu TRIM'in kullanılabilir 12 seçeneğini gösterecektir. Uygulamada kullanılacak bir seçenek seçilir. Bu, diskiniz üzerine TRIM (Monte Carlo) için kontrol dosyasını içinde bulunduran TRIM.IN veri dosyasını yazacaktır ve sonra otomatik olarak TRIM programı başlayacaktır. TRIM programında, yeni yada eski hesaplar sorulacak olursa, yeni için N tuşuna basılır. TRIM, TRIM.IN veri dosyasını okuyacaktır ve gerekli olan durdurma gücü tablolarını hesaplayacaktır. Sonra, iyon/hedef bilgilerini gösterecek ve hesabı başlatacaktır. İyon hareketleri hedefle çarpışma süresinde, ekran üzerinde gösterilecektir. Hesaplama birkaç iyonun hareketi bitene kadar devam eder. Sonra ara tuşuna basılır. Bu, dağılım düzen seçeneği'ni getirecektir. Bu düzen (menü), hesapların farklı durumlarının planlarını gösterir. Bu, sonraki analizler için kullanılabilen, (T komutu kullanılarak) veri dosyalarını da meydana getirmeyi sağlayacaktır. Görmek için bütün komutlar denenebilir. TRIM hesaplamasına devam etmek için boşluk yada R tuşuna basılır. Q ile bu menüden çıkılır. Hesabı nasıl kaydedileceği daha sonra gösterilecektir. DOS'a tekrar geri dönmek için N seçilip tekrar T'ye basıldığında DOS'tan TRIM'e geçilir.

TRIM'in (Monte-Carlo) ne olduğu hakkında bir fikir sahibi olunduktan sonra, yeni bir hesaplama yapılabilir. TRIM kurulum programına girmek için, DOS'ta T'ye ve ardından boşluk tuşuna basılır. Bu TRIM kurulum programını kullanmada ilk deneme için her sorudan sonra tamam (enter) tuşu'na basılır. Her soru için ayarlı değerler parantez içinde gösterilir. Eğer TRIM kurulumunda sorun varsa, TRIM mantıklı açıklamalar yapar. Kurulum programı aşağıda tanımlanmıştır. Kurulum programı bir TRIM.IN dosyası yazar ve bunu TRIM.EXE olarak bilinen bir ana programa bağlar (eklerde TRIM.IN veri dosyasının örnekleri sunulmuşlardır. "Yeni

yada eski TRIM” sorusu görüldüğünde ana programda bulunduğu anlaşılır). Tamam tuşuna basıldığında TRIM bir durdurma güçleri tablosu yapmaya başlar ve daha sonra hesaplamanın ilerlemesini gösteren iyon hareketlerini sergiler. Hesaplama esnasında kullanılabilen geçiş tuşları sağ üst köşede gösterilmiştir. Yardım düzenini hızlı bir şekilde getirmek için hesaplama sırasında H tuşuna basılır. Herhangi bir anda boşluk tuşuna basılabilir; bu durumda TRIM hesaplamayı kesecektir (hesaplamayı durdurmak birkaç saniye alabilir; çünkü TRIM bir kompleks çarpışma çığ işlemi hesaplamasını yarıda kesemez). Bu kesinti çizim düzenini getirir böylece hesaplamanın ilerlemesi de görülebilir. Çizimler görüntülendikten sonra R yada tamam tuşuna basarak hesaplamaya devam edilebilir. TRIM hesaplaması herhangi bir zamanda kesilebilir ve daha sonra R yerine düzenden (menu'den) Q'ya basılarak yeniden başlatılabilir.

#### 4.4.2. Monte Carlo TRIM kurulum programı

TRIM DOS'ta T komutuyla başlatılır. Sonra (Menu'den) boşluk tuşuna basılırsa yeni TRIM başlar. Bu TRIM'in kurulum programına ulaşmayı sağlar. Kaçış (Escape) tuşuna basılarak kurulum programı yeniden başlatılabilir. TRIM'in kurulum işlemi ilk bakışta Radyasyon Fiziği alanında Doktora seviyesinde olmayı gerektirir gözükmele beraber, kurulu (hazır) değerler işlemi yürütecek bütün değerleri içerdiğinden kolaylık sağlamaktadır. Aşağıdaki açıklamalar bütün sorulara cevap verecek seviyededir. Daha ileri seviyede açıklama için daha önce ismi geçen kaynak kitaba bakılmalıdır. Kurulum programında Tamam tuşuna basıldığında (ve hazır değerler kabullenildiğinde) TRIM programı koşturmaya hazır demektir. Aşağıdaki sorular kurulum programında sorulacaktır:

##### 4.4.2.1. Hesaplama tipi

- **Hasarın iyon dağılımı ve hızlıca hesaplanması** - Bu hesaplama çeşidi, çıkarılma (sputtering) veya hedef hasarları dikkate alınmıyorsa kullanılmalıdır. Bu seçenekle hesaplanan hasar, Kinchin-Pease formül tarzı üzerine kurulmuş hızlı istatistiklerle hesaplanacaktır. Şu bilgiler tam tamına hesaplanacaktır: Hedefteki iyonların son dağılımı, hedef içerisinde iyonların

kaybettiği (iyonlaşma) enerjisi, geri tepen atomlara aktarılan enerji, geri saçılan iyonlar ve geçen iyonlar. Aşağıdaki Full Damage Cascade seçeneği kullanıldığında her bir iyon için bulunan sonuçlar özdeş olacaktır.

- **Tamam hasar çığıyla ayrıntılı hesaplama** - Bu seçenek, bütün geri tepen iyonları, herhangi bir hedef atomunun en düşük yer değiştirme enerjisinin altına düşene kadar izler. Böylece hedefteki tüm çarpışma hasarları incelenir. Bunun tek bir istisnası 2000'i aşan atoma sahip oldukça nadir çığlardır. Bu durumda TRIM kendine ayrılan hafızayı doldurur ve tek bir çığda 2000 atomluk sınırın aşıldığıyla ilgili bir mesaj verir. Mesajdan sonra hesaplama devam eder.
- **Yüzeyden çıkma hesabı** – Yüzeyden kaçışın tam davranışı, yukarıdaki tam kayıp çığ işlemi hesabında bulunmaktadır. Bununla beraber, özel çizimler saçılmanın fiziksel özelliklerini anlamada yardımcı olmak için kullanılır. Bu çizimler, burada yada hesaplama sırasında istenebilir. Bunlar yüzey bağlanma enerjileri üzerindeki saçılma miktarının küçük etkilerini analiz etmek için hesaplanır. Bu parametreler saçılmanın merkezidir ve bu değerleri hesaplamak bazen zordur. Bir hedefin yüzey bağlanma enerjisinin hesaplanmasında normal başlangıç değerleri olan, ilk değerler tablosu TRIM'de hazırdır. Önceki seçenekteki maddelerle aralarında çok önemli fark yoktur.
- **Nötron/elektron/foton çığ işlemi** - Bu seçenek sadece hedefteki hasar çığı işlemini hesaplamak için kullanılır. Geri tepme çığ işlemini başlatan atomlar hakkındaki kinetik bilgileri içeren TRIM.DAT dosyası girdi olarak kullanılır. TRIM.DAT dosyası, nötronlar, elektronlar yada protonlar tarafından hedef atomlara aktarılan enerjiyi hesaplayan diğer bazı programlar tarafından oluşturulmuştur. Daha sonra TRIM, bu dış bilgiyi alır ve geri tepme çığı tarafından hedefte meydana getirilen hasarı hesaplar. Bu, "nötron/elektron/fotonlardan kaynaklanan radyasyon hasarları" kesiminde özel bir TRIM uygulaması olarak açıklanmıştır. Bu seçenek seçildiğinde,



hangi hasar hesaplanmak isteniyorsa buna ait bir alt-düzen (menu) oluşturulur.

- **Çeşitli iyon enerjileri/açı/konumlar** - Bu seçenek, çeşitli enerjilerdeki iyonlarla yada hedef yüzeyinde açılardan yönünün değiştirilmesiyle yada değişik hedef derinlikleri ile TRIM hesabının yapılması ile ilgilidir. Bu seçenek başlangıç konum, yön ve iyon enerjisi için TRIM.DAT dosyasına ihtiyaç duyar. Bu seçenek tercih edilirse, hesaplanmak istenen hasar için bir alt düzene (menu'ye) de ihtiyaç olabilir.
- **Çok Katlı Özel Biyolojik Hedefler** - TRIM, ICRU ve ICRIP hedef isimlerini kullanarak 8 katlı kompleks biyolojik hedeflerin hesaplanmasını yapar.

#### 4.4.2.2. TRIM Hafıza Sınırlaması

TRIM, DOS sınırlamasından dolayı 640 k bellek ile sınırlıdır. PC'de kullanılabilir ne kadar bellek olduğunu ve hesaplamaların nasıl sıkıştırılacağı gösterilecektir. Eğer Windows 95 yada 95/2 kullanılıyorsa, kullanılabilir toplam 640 k bellek vardır. Eğer DOS kullanılıyorsa, bundan dolayı mevcut olan programlar kullanılabilir belleği azaltacaktır. TRIM kullanabilecek ne kadar bellek kaldığını hesaplamaya çalışır ve gösterir. Eğer çarpışma çığ işlemlerinin detaylarıyla ilgilenilmiyorsa, belleği aşmadan çığ işlemi hasar etkilerini kestiren "Kinchin-Pease" hesaplama tipi kullanılabilir. Bu hesaplama çeşidi en çok kullanıcı tarafından tercih edilen hesaplama çeşididir ve TRIM'i 8 kadar katmana ve 12 farklı elementten oluşan bir yapı için hesaplamaya izin verir.

Eğer hedefte çarpışma çığlarının oldukça belirgin bir hesabı isteniyorsa, o zaman TRIM kurulum programının ilk ekranında bu belirtilir. Bu hesap çeşidi, daha fazla bellek alır ve üç katman ve en fazla 4 elementle hesabı sınırlamayı gerektirir. Daha karmaşık hedeflerde tam çığ işlemi ile TRIM kullanmak mümkündür ve bu şu seçenekte tanımlanmıştır: 'Çok katlı hedefler için TRIM nasıl kullanılır?'

#### 4.4.2.3. Hesaplama çizim tipleri

TRIM hesaplaması esnasında, ekran hareket eden iyonların iki boyutlu bir gösterimiyle bütün hasar çıkış işlemlerini gösterecektir. Bu yapmak istenilenlerin hesaplanıp hesaplanmadığını çabucak gösterir. Aşağıdaki çizim seçenekleri kullanılabilir. P tuşuna basarak, hesaplama esnasında diğer bir çizime geçilebilir. TRIM'in koordinat sistemi hedefin derinliği olan X eksenini ile sınırlandırılmıştır ve Y eksenini ile Z eksenini enine koordinatlarıdır.

- X Y düzleminde gösterim
- X Z düzleminde gösterim
- Sadece X Y düzlemindeki iyonlar
- Y Z düzleminde gösterim
- Yukarıdaki dört maddenin hepsi aynı anda
- Yukarıdakilerin hiç birisi (animasyon yok!)

Son seçenek TRIM hesaplamalarındaki hızı 3 katı artırabilir; bu yüzden birçok kullanıcı çizimlerin gösterimlerinden birini kullanarak TRIM'e başlar ve sonra hesaplamasının bütünü için P tuşunu kullanarak bu moda geçiş yapar. Son seçenek TRIM'i UNIX yada OS/2 gibi bazı işletim sistemlerinde koşturmayı gerektirir.

#### 4.4.2.4. İyonun ismi, kütlesi, enerjisi

İyon ismi girilir; örneğin, oksijen için O, Helyum için He (TRIM harflerinin durumuna önem vermez). İyon kütlesi için, TRIM doğada en çok bulunan izotopların kütlesini alır. Bununla beraber her hangi bir kütle de girilebilir (birim = akb). İyon enerjisi için, herhangi bir değer girilebilir (birim = keV). TRIM, 10 eV ile  $2 \times 10^9$  eV/akb arasındaki her hangi bir değeri kabul edecektir. 2 GeV/akb'nin üzerindeki iyonlarda, durdurma gücünün tam değerini hesaplamak için TRIM programında kesin yoğunluk düzeltilmesi içerilmemektedir. TRIM'in herhangi bir nükleer reaksiyon analizini içermediğine dikkat edilmelidir. 5MeV/akb'nin üzerindeki enerjiye sahip iyonlar için

elastik olmayan enerji kayıplarının mümkün olabileceği ve bunun programda dikkate alınmadığı unutulmamalıdır.

#### 4.4.2.5.Hedefin tanımlanması

- **Katı yada gaz hedef** – TRIM, gaz hedefleri katı hedeflerden farklı olarak ele alır. Burada hedef tipleri ifade edilmelidir. Eğer hedefin, gaz ve katı karışımından oluşmuşsa, o zaman, “katı/gaz karışımı hedefler ile TRIM’ in kullanılması” özel bölümüne bakılmalıdır. Kuartz hedefteki katı formdaki oksijen gibi normal gazlar içeren hedefler, katı olarak düşünülmelidir. İyonların katı fazdaki atomlarla etkileşimi gazlardaki atomlardan farklı olarak ele alınır.
- **Hedef elementler** – Hedefi oluşturan değişik elementleri, iyonlarda yapıldığı şekilde (Si = silisyum örneğinde olduğu gibi) veri olarak girilir. 12’ye kadar hedef element girilebilir (tam çıkış işlemi ile TRIM hesaplamak isteniyorsa bu sayı dörtle sınırlıdır). Özel TRIM uygulamalarından biri, çıkış işlemi meydana getiren iyon demetleri ile katmanların karışımını izlemektir. Örneğin; bir silikon tabandaki  $SiO_2$  karışımının bir yüzey katmanından silikon atomları izlenmek istenirse, Si hedef elementi iki kere belirtilmelidir; bir kez yüzey katmanı için ve bir kez taban için. TRIM iki Si atomunu ayrı tutacaktır ve çeşitli analitik çizimlerde bunlardan herhangi biri ayırt edilebilecektir.
- **Bileşikler tablosu** – TRIM tek katmanlı basit hedefler için bilinen bileşiklerin ansiklopedik bir bilgisine sahiptir. Hedef elementler için T’ye basılarak bu tabloların içine girilebilir. Bu tablo, tipik yoğunluklar ve bağlanma bilgilerini de içerir. Özellikle hidrokarbonlar gibi birçok hafif alaşımlar için bu bağlanma bilgisi, daha sonra durdurma güçleri hesabında yapılacak düzeltmelerde kullanılacaktır. Bu tablo kullanıldığında, hedefle ilgili bilgi giriş adımlarının bir çoğu atlanabilir. Bileşikler tablosunun sadece tek katmanlı hedefler için kullanıldığı not edilmelidir. Karışık, çok katmanlı

hedefler için katman bilgilerini doğrudan girmek zorunluluğu vardır ve tablolar kullanılmamaktadır. Referans veri için örneğin, fotodirenç yada paslanmaz çeliğin sitokiyometrisine göz atmak için bu tablo kullanılmak istenirse, bu tabloya girilebilir ve daha sonra ESC tuşuna basarak kurulum programı tekrar başlatılabilir.

- **Katmanların derinliği ve sitokiyometrisi** - Hedef elementler listesi bir kere girildiğinde, hedef tabakaları kurulmuş olur (sekiz katın üzerindeki için eğer tam çığ işlemine ihtiyaç duyulmazsa). İlk hedef kalınlığı girilir. Birim Angstrom'dur. Bununla beraber kısaltmalar kullanılarak, kilometre, metre, milimetre, mikron birimleri de kullanılabilir. Örneğin; 25u=25micron demektir. Her bir tabaka için, bu tabakadaki her bir elementin miktarı girilmelidir. TRIM bu girdileri normalleştirir; böylece istenilen birim kullanılabilir. Örneğin;  $SiO_2$  hedefi için, aşağıdakiler kullanılabilir: Si(1), O(2), Si(100), O(200), Si(33), O(67) vs.. Bu tabakada bulunmayan her bir elementin sitokiyometrisi için bir sıfır girilir.
- **Katman Yoğunluğu** - Her katmanın bir yoğunluğu vardır (birim= $g/cm^3$ ). TRIM onların değişken sitokiyometrisi tarafından ağırlık verilen elementsel hedef yoğunluğunun bir karışımını kullanarak yoğunluk değerlerini tahmin edecektir. Bununla beraber, uygun yoğunluk değerleri dikkatle işaretlenmelidir.
- **Katmanın ismi** - Her katman bir çizim üzerinde tanımlanır ve bütün veri dosyalarında kullanılan isim buraya girilir. Silisyum gibi basit bir isim kullanılabilir; yada  $SiO_2$  veya Si(33) - Ge(67) gibi daha ayrıntılı isimler kullanılabilir. TRIM özel komutları, \$ (üst indis) ve @ (alt indis) kullanılarak ekran üzerinde alt indis ve üst indis yazılabilir.  $SiO@2$  yazıldığında ekranda  $SiO_2$  şeklinde görülecektir.
- **Katman derinliğinde küçük hatalar** - Çok ince katmanlar için, katmanların sınırlarında oluşan hasar dağılımlarındaki küçük çukur veya tepeler bazı

kullanıcıların canını sıkmaktadır. Bunlar meydana gelebilir çünkü; derinlik girdisinde bir katmandan diğerine ani geçişlerin (örneğin; 1000 A°) olabileceği TRIM'de varsayılmıştır. Bununla beraber bu bir atomik katmanın sınırı ile tamamen uyuşmayabilir. Bu mesaj başlıca, bu iki sınır değeri (yani tabaka derinliği ile bir atomik sınır değeri) çakışmadığında, sınırın hemen kenarındaki atomlar için hesaplanan verilerde bazı kusurların olabileceğini hatırlatmaktadır.

- **Veri ve çizimler için derinlik penceresi** – Bu girdi son ortalamalarda kullanılan veri depolarının büyüklüğünü belirler. TRIM, 100 eşit derinlik deposu içinde bu pencereyi ayırır ve hesaplama için ortalama verilerinde depolar (örneğin, iyonlaşmada enerji kaybı). Çok ince hedefler için bu önemli bir düşüncedir. Derinlik penceresi, ince ayrıntılar için hedefteki küçük bir derinlik bölgesini genişletmek amacıyla TRIM'i hesaplar. Örneğin; TRIM ana menünün DEMO seçeneğindeki bir seçenek, hemen hemen 8mm civarında bir girme mesafesine sahip olan Be içindeki 10 MeV'lik H atomu içindir. Bu DEMO için, derinlik penceresi 7.99-8.00 mm'de ayarlıdır. Bu, her bir iyonun yolunun hemen sonundaki çarpışmaları detaylandıran çizim üzerinde görebilmek için ve de 0.1  $\mu m$  'lik derinlik dilimlerinde son çarpışma detaylarına sahip olmak için hesaplama yapar. Eğer depolardaki sonuçlardan daha küçük yalnız tek katlı atom girilirse bu istekten dolayı bir uyarı verilecektir (100 A°luk bir derinlik penceresi 1A°luk veri deposu yapacaktır).
- **Toplam hedef kalınlığı** – TRIM'i çalıştırmak ve iyonların hepsinin tamamen hedef içine gittiğini gözlemlemek, bütün iyonları durdurmak için istenilen kalınlığı eksik hesaplanmış olma sebebiyle can sıkıcı olabilir. Burada durmak ve girme mesafeleri tablosunu görebilmek amacıyla PRAL iletim programını çalıştırma fırsatı bulunmaktadır. Bu program, iyon girme mesafelerinin bir tablosunun istenilen TRIM ana menüsünden çağırılan programla aynıdır. Eğer bu seçenek işaretlenirse, kurulum programından çıkılmış olur. PRAL kullanarak iyon girme mesafelerinin bir tablosunun getirilme işlemi bitirildiğinde programın tekrar başlatılması gerekir.

#### 4.4.2.6. Hesaplama parametreleri

- **İyon sayısı** – Bu seçenek, hesaplanacak olan iyonların sayısını girmeyi sağlar. Bu sayı (bir çok farklı kullanıcı tarafından istenilen) 9999999 iyonun üzerine çıkabilir. Normalde, (99999) seçildiğinde ve uygun istatistik olduğu zaman TRIM'e ara verilir. Bazı kullanıcılar bir iyon sayısı seçtikten sonra programı durdurmak isteyebilir. Böylece, farklı TRIM hesaplamaları doğrudan karşılaştırılabilir. Eğer TRIM hesaplaması tekrarlanırsa (önceki hesaplamadaki sayılar değiştirilmediği sürece) her iyon özdeş olacaktır. Eğer hesaplama tamamlanmak isteniyorsa (istenilen bütün iyonlar bittiğinde) bu hesaplama TDATA.SAV düzenleme dosyası kullanılarak devam edilebilir (TDATA.SAV TRIM kurulum programında açıklamaların sonunda tanımlanmıştır).
- **Hesaplamaları otomatik kaydetme** - Bazı TRIM hesaplamaları günlerce sürebilir, bu durumda TRIM otomatik olarak belli aralıklarla kendi kendine kaydeder. Çizimler menüsü üzerinde S komutunu kullanılarak hesaplama sırasında bu sayıyı değiştirebilir. Bu 1 ile 32000 arasındaki bir sayı olabilir.
- **Rastgele Sayı Özü** - Bu sayılar değişmediği müddetçe TRIM aynı hesaplamaları yapacaktır. 0 ile 999999999 arasındaki tüm tam sayılar girilebilir. Rasgele sayı teorisinde sihirli sayı olan 742938285 sayısı varsayılan (default) olarak atanmıştır. Bununla beraber, üç benzer ama farklı hesaplama sahip olmak istenirse öz sayısı olan 1'i 2 ya da 3'e değiştirmek gerekir.
- **Geri saçılan/aktarılan/çıkan atomlar** – Bu, tek iyon istatistikleri için veri dosyalarını aktif hale getirir. Böylece geri saçılan yada aktarılan her bir iyonun veya çıkan her bir hedef atomun kinetiği hakkında veri kaydedilir. Bu dosyalar B, T ve S tuşları kullanılarak hesaplama sırasında getirilebilir (tek iyon dosyaları yada geri saçılan atom kinetiği kesimine bakınız).

- **Geri tepme çarpışma dosyası** - Bu her iyon/atom çarpışması için veri dosyalarını aktif hale getirir. Bu dosya, hızlı bir şekilde elde edilebilir ve dikkatli kullanılmalıdır. (1000 çarpışma disk üzerinde yaklaşık 64 kB yer alacaktır). Büyük çıkış işlemli bazı durumlarda, bir iyon verinin >1MB'ını meydana getirecektir.
- **İyon geliş açısı** – Bu iyonun hedef yüzeye yönelmesi ile ilgili gelme açısını değiştirir. Normalde iyon hedef yüzeyine diktir; x-ekseni üzerinde  $0^\circ$  olarak tanımlanır. Bu açı  $0 - 89.9^\circ$  arasındaki herhangi bir açı ile değiştirilebilir. İyon doğrultusundaki değişikliğin XY düzleminde olduğu farz edilir.

#### 4.4.2.7. Hedef atomların bağlanma enerjileri

Bu, TRIM kullanıcılarının çoğunun bilgisinin dışındadır. İstenilen değerlerin çoğu, sadece hedeflerin küçük bir sayısı için bilinir. TRIM varsayılan değerler olarak en uygun değerleri atamaktadır.

- **Yer değiştirme enerjisi** – Bu, geri tepen merminin örgü kuvvetlerini yenme ve başlangıç konumundan bir atomik boşluk öteye gitmesi için sahip olması gereken enerjidir. Eğer geri tepen atom bir örgü mesafesi kadar yerini değiştirmiyorsa, kendi başlangıç konumuna geri sıçrayacak ve bu geri tepme enerjisini fononlara aktaracaktır. Tipik değerler yarı iletkenler için 15 eV ve metaller için 25 eV civarındadır. Polimerler gibi kırılğan maddeler için bu değerler 2-5 eV kadar küçük olabilmektedir. Yer değiştirmenin fiziksel yapısını anlayan kullanıcılar için, farklı hedef atomlarının her birisinin enerjileri tek tek girilmelidir. Si üzerinde  $\text{SiO}_2$  gibi aynı elementi içeren çok katmanlı hedeflerde Si elementi, farklı katmanların farklı yerdeğiştirme enerjilerini belirtmek amacıyla iki farklı hedef atomu olarak (yani iki kez) girilmelidir.
- **Yüzey bağlanma enerjisi** - Eğer çıkarılma (sputtering) olayıyla ilgileniliyorsa, bu parametre çıkarılma ürününün (hedef yüzeyini terk eden hedef atomları sayısının) anahtarıdır. Bu, hedef atomların, hedef yüzeyinden

ayrılması için gerekli olan enerjidir (birim=eV). Bunun, radyasyon hasarları, yüzey gevşemesi, yüzey pürüzlülüğü vs gibi etkilerle üretilen yüzeye ait bütün non-lineer etkilerin içerilmesi sebebiyle, yüzey atomlarına ait geleneksel kimyasal bağlanma enerjisinden farklı olduğu not edilmelidir. Tipik olarak, süblimleşme sıcaklığı bu enerji için iyi bir tahmindir. Tek elementli hedefler için TRIM her elemente ait varasyılan bir enerji tablosu kullanacaktır. Bir özel çıkarılma hesaplaması esnasında, çıkarılma menüsü size yüzey bağlanma enerjisindeki küçük değişimlerin çıkarılma verimini nasıl değiştirdiğini gösterecektir.

- **Örgü bağlanma enerjisi** – Bu enerji örgüden ayrılma ve hedeften geri tepme olduğunda her geri tepen hedef atomun kaybettiği enerjidir. Tipik olarak 1-3 eV mertebesindedir. Fakat gerçek değerler birçok bileşik için bilinmemektedir. Bu enerjinin fononlara aktarıldığı varsayılmaktadır. Örgü bağlanma enerjisi, maalesef çıkarılma ürünü hesaplamalarında bir miktar daha fazla önemlidir. Bağlanma enerjisini 1'den 3 eV'a çıkarmak çıkarılma verimini 2 katı düşürebilecektir.

#### 4.4.2.8. Giriş verilerini gözden geçirme

Bu TRIM için kurulum programının son ekranıdır. Bütün giriş değerleri görüntülenir. Eğer herhangi bir yanlışlık varsa, kurulum programının başlangıcında yeniden başlatmak için ESC tuşuna basılır. Eğer tamam tuşuna basarsanız bu veri TRIM.IN dosyası olarak diske dosyalanacaktır ve program ana TRIM programına geçecektir. "New TRIM or OLD TRIM" sorusu görüldüğü zaman ana TRIM programında bulunduğu anlaşılır. Programı her an durdurmak için Ctrl+Break tuşuna basılabilir.

#### 4.5. TRIM programını Yeniden Başlatmak

Eğer kaydedilmiş bir TRIM hesabı daha sonraki bir tarihte başlatılmak istenirse, ana menüden (eski TRIM) O seçilir ve daha sonra ana TRIM programı tarafından 'New TRIM or Old?' sorusu sorulduğu zaman O tuşuna basılır. TRIM sürekli olarak eski verilerin üzerine yazar. Küçük değişikliklerle yeni bir TRIM hesaplaması yapılmak



istendiğinde TRIM.IN dosyası sadece bu deęişiklikleri işaretleyecek şekilde düzenlenmelidir. Bu, genelde programı yeniden başlatmaktan daha hızlı olacaktır.

TRIM hesaplamasını tamamladıktan sonra daha fazla iyon için hesaplama yapmak arzu edilirse TDATA.SAV dosyası düzenlenmelidir. Bu dosya hali hazırdaki TRIM hesaplamasına ait bütün bilgileri içerecektir. Tavsiye edilen bunda deęişiklikleri yapmaktır. İyon sayısı deęiştirildikten sonra TRIM'i Old TRIM olarak yeniden başlatmakla hesaplama eklenen ilk iyondan devam edecektir.



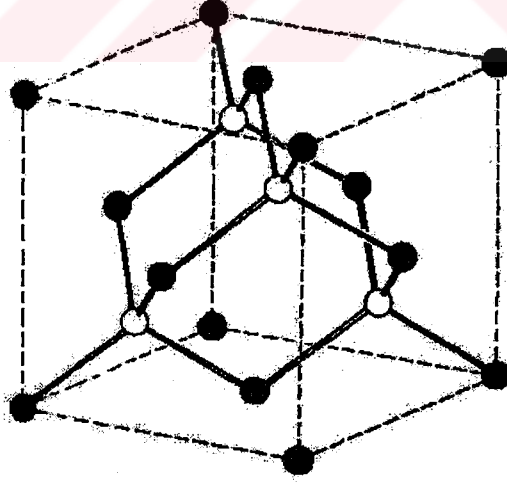
## BÖLÜM 5. ZnO KRİSTALİNE İYON DİKME YÖNTEMİYLE METAL AŞILANMASI VE SONUÇLARI

### 5.1. ZnO Kristal Yapısı

ZnO kristali; çinko sülfür ve sodyum klorür kristal yapıları şeklinde iki fazda kristalleşebilir. Bu iki kristal yapının özelliklerine kısaca değinilecektir.

#### 5.1.1. Çinko sülfür yapısındaki ZnO kristali

Çinko-blend yapı olarak da bilinen çinko sülfür yapısı yüzey merkezli kübik (fcc) örgü tipinde olup elmasın yapısındadır. fcc örgülerinden birinde Zn atomları, diğerinde ise O atomları yerleştirilmesi sonucu meydana gelir.



Şekil 5.1. Çinko sülfür yapısındaki ZnO kristali

Şekil 5.1'de gösterildiği gibi çinko atomları kübün köşe ve yüzey merkezlerinde, O atomları ise cisim köşegeninde yer almaktadır. ZnO kristalinin birim hücrelerinde 4

molekül vardır. Her bir O atomu eşit uzaklıklardaki köşeleri oluşturan 4 farklı Zn atomuna bağlanarak bir düzgün dört yüzlü oluşturur.

Atomların koordinatları şöyledir:

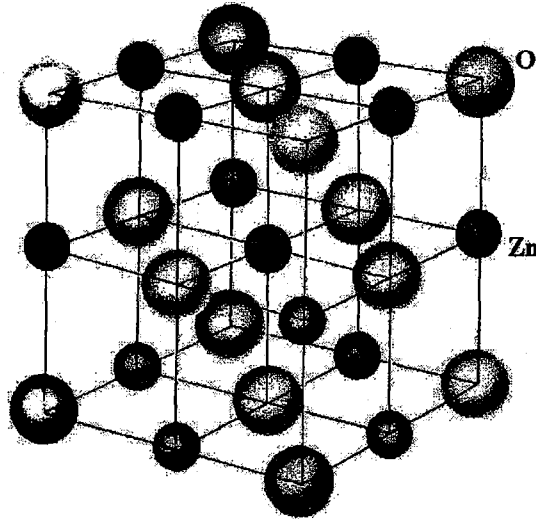
$$\begin{array}{l} \text{Zn:} \quad 000 \qquad 0\frac{1}{2}\frac{1}{2} \qquad \frac{1}{2}0\frac{1}{2} \qquad \frac{1}{2}\frac{1}{2}0 \\ \text{O:} \quad \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} \qquad \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4} \qquad \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4} \qquad \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4} \end{array}$$

Elmas yapısı yakın komşu atomların belirlediği hat üzerinde merkezde bir tersinme (inversion) simetrisi oluşturur. Fakat ZnO yapısı tersinme simetrisine sahip değildir. ZnO'yu elmastan ayıran en önemli fark budur.

### 5.1.2. Sodyum klorür yapısındaki ZnO kristali

Şekil 5.2'de görüldüğü gibi sodyum klorür yapısının örgüsü yüzey merkezli kübiktir. Her iyon karşıt yüklü altı en yakın komşuya sahiptir. Her bir küpte dört ZnO birimi olup atomların koordinatları şöyledir:

$$\begin{array}{l} \text{Zn:} \quad \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} \qquad 00\frac{1}{2} \qquad 0\frac{1}{2}0 \qquad \frac{1}{2}00 \\ \text{O:} \quad 000 \qquad \frac{1}{2}\frac{1}{2}0 \qquad \frac{1}{2}0\frac{1}{2} \qquad 0\frac{1}{2}\frac{1}{2} \end{array}$$



Şekil 5.2. Sodyum klorür yapısındaki ZnO kristali

## 5.2. ZnO Kristali İle İlgili Yapılan Çalışmalar

ZnO kristali ile ilgili yapılan çalışmalar üç grupta toplanabilir:

1. İnce film olarak ZnO'nun taban madde üzerine konulması ile yapılan çalışmalar:
  - ZnO ince filmlerinin cam taban üzerinde sodyum zinkat kullanılarak kimyasal çökeltme yöntemiyle hazırlanması ve bu filmlerin opto-elektronik aygıtlar, UV lazerleri, yeşil LED'ler, mikro elektronik ve mikro makine teknolojisi kullanımında kalite ölçümü.
  - ZnO:F:Al geçirgen ince filmlerinin düşük dirençliliği.
  - Elektrokimyasal olarak büyütülmüş ZnO ince filmlerinin band aralığı enerjisinin ayarlanması (kalınlık elektro çökeltme potansiyeli ayarlanmasıyla).
  - Çökeltmeli ZnO ince filmlerindeki lüminesans özelliklerinin iyileştirilmesi.
  - Nötronla bombardıman edilmiş ZnO ince filmlerinde ekili bulunan dönüştürülmüş (transmuted) izotoplar.
  - ZnO tabanlı nano kristal ince filmlerindeki yük taşıyıcılarının durulmasının ultra hızlı durulma dinamikleri.
  - Atomik tabaka çökeltmesi yoluyla üretilen ZnO ince filmlerinin fotolüminesans çalışmaları.
  - Puls (atma) lazer çökeltmesi ile yöntemiyle hazırlanmış ZnO ince filmlerinin optik özellikleri.
  - Magretron püskürtmesiyle oluşturulmuş ZnO:Al ince filmlerinin geçirgen iletkenlik özellikleri.
  - L-MBE yöntemiyle safir (gök yakut) üzerinde büyütülmüş nano kristal ZnO ince filmlerinin oda sıcaklığında saldıği ultraviyole lazer ışınımı.
  - Metal organik kimyasal buhar çökeltme ile üretilen ZnO ince filmlerin ikinci harmonik üretimi.
  - Si tabanları üzerine püskürtülmüş  $Zn_{1-x}Cd_xO$  filmlerinin fotolüminesans ve yapısal özellikleri arasındaki ilişki.
  - ZnO tabakalı Si(111) katmanları üzerinde büyütülmüş GaN filmlerinin mikro yapı ve içerik analizi.

2. ZnO'nun taban malzemesi olarak kullanılıp içine zenginleştirilmiş madde koyulması ile yapılan çalışmalar:

- İndiyumla zenginleştirilmiş ZnO nano kuşakları.
- Al ve Mn ile zenginleştirilmiş ZnO geçirgen iletken oksit filmlerinin hazırlanması ve karakteristiklerinin belirlenmesi.
- $TeO_2-Nb_2O_5$  ve ZnO camlarının yapısı ve nonlinear optik performansları. ( $TeO_2-Nb_2O_5$  ve ZnO camlarının ZnO içeriğinin bir fonksiyonu olarak nonlinear optik performansı araştırılmıştır.  $\chi^{(3)}$  üssel mertebeden non-linear optik alınganlığı DFWM dejenere dört dalga karıştırma yöntemi kullanılarak ölçülmüştür.)
- N ile zenginleştirilmiş ZnO tabakalarının (0001) $GaN/Al_2O_3$  tabanları üzerinde moleküler demet çökeltimi yoluyla oluşturulması ve karakteristiklerinin belirlenmesi.
- Antimon (Sb) ile zenginleştirilerek ZnO nano maddelerinin kontrollü büyütülmesi
- ZnO tabanlı varistörlerin termal iletkenlik özelliklerinin lazer atması yöntemi kullanılarak belirlenmesi.
- Plazma destekli moleküler demet katmanı oluşturma yöntemiyle üretilen ZnO-epitabakalarının yüksek elektron hareketliliği.
- Al+N beraber zenginleştirilmesi yoluyla p-tipi ZnO filmlerinin hazırlanması.
- Zenginleştirici NO'nun kullanıldığı p-tipi ZnO ince filmlerinin düşük basınçlı MOCVD büyütmesi.
- RF plazma sistemi kullanılarak ZnO ultra ince parçacıkları içine tungsten sokulması [38].
- Güneşle zenginleştirilmiş ZnO nano kristallerinin karakteristik özellikleri ve foto katalitik aktiflikleri.
- Buhar fazı büyütmesi yoluyla sentezlenmiş ZnO nano-kuşaklarının TEM gözlemleri. (TEM: Transmission elektron microscopy = geçirmeli elektron mikroskopisi).

- ZnO varistör seramiklerinin gümüş ve bakır elektrotlarının akım gerilim karakteristiklerinin incelenmesi.
- ZnO varistörlerinin mikroyapı ve elektriksel özelliklerinin incelenmesi.
- Çinko kaplanmış  $LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O_4$  elektrotlarının X-ışını kırınımı ve elektro-kimyasal direnç spektroskopisi.
- ZnO-Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-TeO<sub>2</sub> camlarının optik çift kararlılığı.
- Karbon nano-tüpleri kullanılarak ZnO nano-çubukları sentezlenmesi.
- Eu'lu (öropyum)  $ZnO/Y_2O_3$  nano-yapılarının lüminesant polimer elektrolit bileşiklerinde doldurucu olarak kullanılması.
- Er (erbiyum) ile zenginleştirilmiş ZnO kristal filmlerinin büyük piezo optik etkisi.
- Yb'lu (iterbiyum) kurşun-çinko-oksit camların termal kararlılık spektrumları ve lazer özellikleri [39].

Nd (Neodyum), Pm (Promedyum), Sm (Samaryum), La (Lantan), Ce (Seryum), Pr (Proseodyum), Eu (Öropyum), Gd (Godolinyum), Tb (Telbiyum), Dy (Disporyum), He (Hermiyum), Er (Erbiyum), Tm (Tuliyum), Yb (İtterbiyum), Lu (Lutesiyum) periyodik cetvelde 3<sup>+</sup> grubunda yer alan elementlerdir. Lantanitler olarak adlandırılırlar ve lazer aktif elementlerdir. ZnO ile ilgili çalışmalarda bu elementler de lazer aktif özelliklerinden dolayı rahatlıkla kullanılabilirler.

### 3. İyon Dikme Çalışmaları (Ion Implantations)

- ZnO'nun elektrik iletkenliği üzerinde iyon dikme ile hidrojen koyulmasının etkileri.
- B<sup>+</sup> iyonu dikilmesi ile tamamen ayrılmış n-ZnO/P-Si fotodiyotları.
- Ag dikili ZnO iyonlarının örgü noktaları ve kararlılığı.
- Mn ve Co dikili ZnO kristalinin özellikleri.
- In dikili ZnO üzerinde tavlama etkisi.
- Sol-gel metodu ile yapılmış, Er dikili ZnO filmlerinin optik karakteristikleri.
- Negatif Cu iyonu dikili ZnO'nun optik özelliklerinin değiştirilmesi.
- Er dikili ZnO'nun örgü noktasının yeri ve optik aktifliği.

### 5.3. İyon Dikme Yöntemi

İyon dikme, maddelerin yüzey özelliklerini geliştirmede kullanılan yöntemlerden biridir. Dikilen iyonların yoğunluk ve derinliğinin kolayca kontrol edilebilmesi gibi bazı teknolojik üstünlüklere sahip olması sebebiyle son yıllarda bilimde uygulama bulmuştur. Bu yöntemle arzu edilen element uygun enerji ve doz seçimiyle yapıya sokulabilir. İyon dikmenin bir yan etkisi radyasyon hasarı meydana getirmesidir. Birçok durumda hızlı iyon grubunca üretilen düzensizlikler faydalı olabilir. ‘Radyasyon hasarı’ istenilmeyen etkiler imajını verdiği için şanssız bir şekilde kullanılmıştır. Fakat gerçekte, tersi doğrudur. Örneğin; bu hasarlı maddeler hasarlı bölgeyle tanımlı optik dalga kılavuzlarını belirlerler ve radyasyon hasarı kullanılan madde ve iyona bağlı olarak kimyasal reaktifliği değiştirebilir. Ayrıca bu yapısal değişimler, dalga kılavuzu lazerleri ve optik anahtar gibi bazı optik cihazların ortaya çıkmasını sağlayabilir. İyon dikme yöntemi, modern optikte anahtar rol gören materyallerin elektro-optik ve non-lineer özelliklerini şekillendirmede kullanılabilir.

#### 5.3.1. Temel işlemler

Şekil 5.3’de şematik olarak tanımlanan iyon bombardımanından açığa çıkacak dört temel işlem bulunmaktadır. keV enerjili bir iyon hem hedef atomları (çekirdek çarpışmaları) ve hem de elektronlarla (elektronik çarpışmalar) bir dizi enerji kaybına yol açan çarpışmalar yapacaktır. Bu iyon yüzeyin birkaç yüz atom tabakası altında durgun hale gelecektir. Genelde son iyon derinlik dağılımı yaklaşık Gauss formunda olacak ve bu eğrinin piki en muhtemel izdüşümsel iyon durma mesafesini temsil edecektir. Gelen iyonların dozu arttırıldığında dikilmiş atomların yoğunluğu, hedefin üst yüzey kompozisyonunu geliştirecek şekilde artacaktır.

5.3.a ve 5.3.b şekilleri örgü atomlarının normal konumlarından çıkarıldığı radyasyon hasarını göstermektedir. Ağır bir iyon, iyon yolunu çevreleyen bir hacim içinde bulunan yüzlerce örgü atomunu yerinden edebilir. Yer değiştirmiş atomların sayısı ve dağılımını hesaplamak için çarpışma süreçlerini temel alan bazı basit modeller kullanılmakla beraber iyon bombardımanıyla açığa çıkan yapısal kusurlar ‘pik’ veya ‘yüksek enerji terki’ etkileri gibi daha kompleks süreçlerle kontrol edilir. En olası

hasar mekanizması nükleer enerji soğurmasıyla olmakla beraber yalıtkanlarda elektronik enerji kaybindan kaynaklanan yer deęiřtirme olasılıęı da bulunmaktadır.

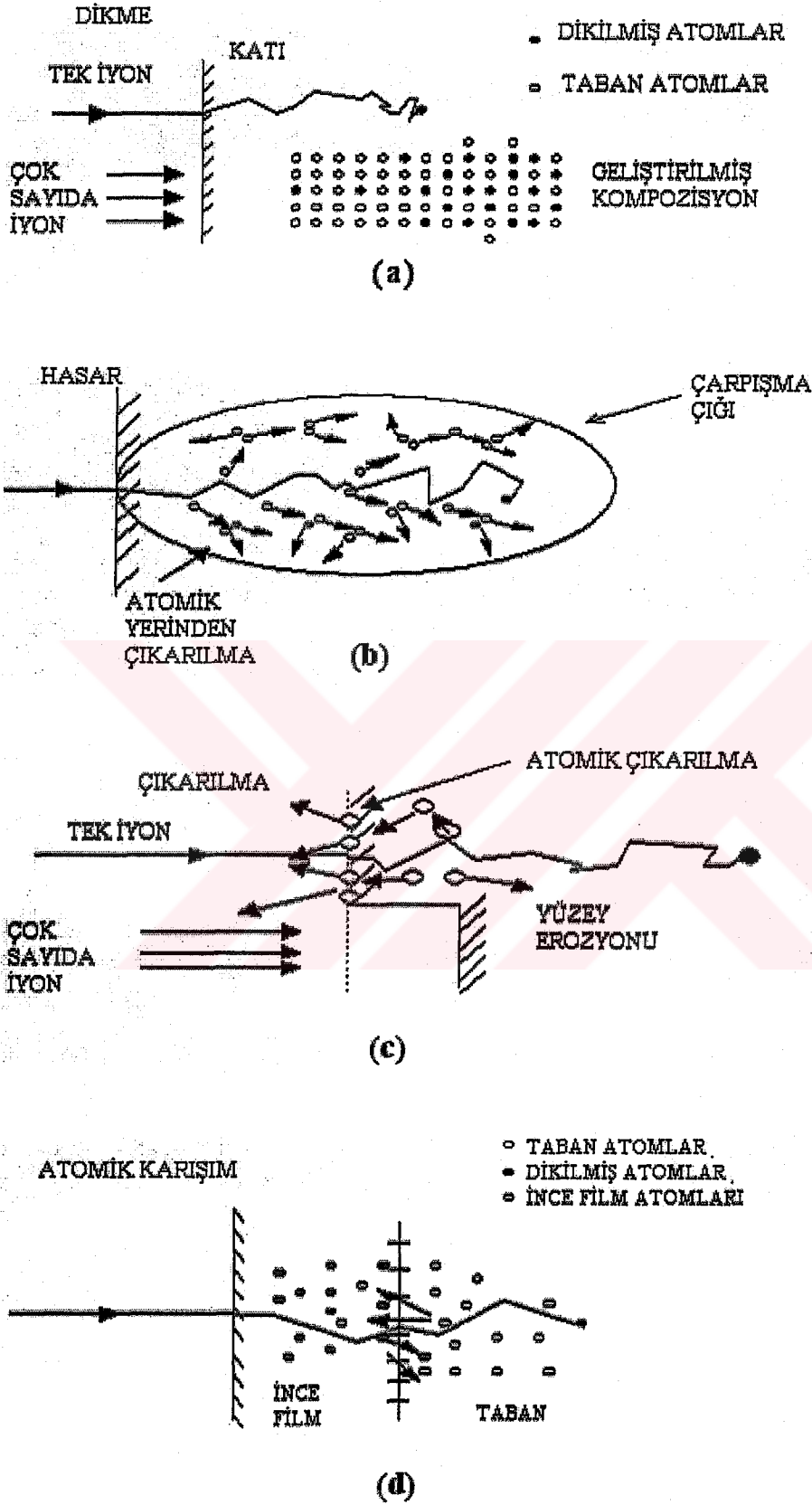
5.3.c řekli hedef atomlarının iyon bombardımanı sırasında yüzeyden çıkarılmalarını (sputtering) göstermektedir. Normalde her bir gelen iyon hedef atomlarının bir veya daha fazlasını çıkarabilir. Bu çıkarma işleminde halihazırda dikili olan atomlar da yerlerinden edilebilir. Bu etki iyon dikme yöntemiyle numunelere koyulabilecek iyon yoğunluęuna bir sınır koymaktadır. Çıkarılma işlemi çarpışma süreçleri kullanılarak açıklanabilir. Enerji pikleri, elektronik etkiler ve karmaşık difüzyon etkiler gibi dięer süreçler zenginleřtirilmiř çıkarılma, ciddi non-lineerlikler ve bileřięin bazı temel elementlerinin tercihli dıřa atılmasına sebep olabilir.

5.3.d řeklindeki atomik karışma sürecinde basit çıę karışımı veya daha karışık demet etkili difüzyon süreçleri meydana gelebilir. Yarı kararlı fazlar ve nadir alařımlar uygun sıcaklıklarda iyon karıştırma ile üretilebilir.

### **5.3.2. İyon dikme yönteminin ilgi alanları**

İyon dikme yöntemi birçok fiziksel kavram üzerinde çok sayıda etkiye sahiptir. Sadece mekanik velveya kimyasal özellikleri deęiřtirebilmekle kalmayıp aynı zamanda malzemelerin elektriksel ve optik özelliklerini geliřtirmede de kullanılabilir. İyon dikme yöntemi dięer tekniklere göre dozun ve konumun tam kontrolü ve kristal safsızlık ve bozukluklarına duyarsız olma gibi birtakım avantajlar sunduęundan yukarıda bahsedildięi gibi oldukça geniř bir malzeme geliřtirme alanına sahiptir.





Şekil 5.3 Başlıca dört iyon demeti bombardıman işleminin şematik gösterimi. (a) dikme, (b) hasar, (c) çıkarılma, (d) atomik karışım.

İyon dikme yöntemiyle geliştirilebilecek mekanik özelliklere kaplama, sertlik ve aşındırma gösterilebilir. İyon dikme yöntemiyle yapılan ilk çalışmalarda doğrudan metal yüzeyler hedef alınmıştır. İyon demeti orijinal konumunda bulunan atomların bir çoğunu yerinden eder, çıkarır veya yeni atomlar yerine sokularak daha sert malzeme üretimi gerçekleştirilebilir. Deneyle küçük iyon dozları kullanılarak iyon dikme yöntemi ile elektriksel iletkenliğin kontrolünün ve yarı iletkenlerde elektriksel yalıtımın mümkün olduğunu göstermiştir.

Optik olarak uygun yarı iletken ve yalıtkan malzemeler de iyon bombardımanı ile geliştirilebilirler. Cam kendine has özellikleriyle beraber üzerinde çalışılacak ilginç bir yalıtandır. Örneğin; nano boyutlu metal veya yarıiletken parçacık içeren camlar üçüncü mertebeden non-lineer alınganlıklar sebebiyle oldukça ilgi çekmişlerdir. Dalga kılavuzu özellikleriyle beraber düşünüldüklerinde bu camlar optik anahtarlar gibi opto-elektronik aygıtlar olarak kullanılabilirler. Kıırma indisi ve yansıma terimlerinde konuşulacak olursa; yarı iletken ve yalıtkanlar üzerinde, lazerler, dalga kılavuzları ve bilgi depolama üniteleri yapacak şekilde önemli gelişmeler yapılmış ve bu, opto-elektronikte oldukça geniş ve önemli bir alanın doğmasına sebep olmuştur.

#### **5.4. ZnO Kristaline Metal ve Yarıiletken İyonlarının Ekilmesi**

ZnO kristaline  $Cu^{+}$  iyonlarının değişik enerjilerde dikilmesi ve bu durumun TRIM2003 kodu hesap sonuçları Tablo 5.1'de verilmiştir. Tabloda farklı enerjilere sahip Cu iyonlarının girme derinlikleri hesaplamaları ile ilgili sonuçlar verilmiştir. Elde edilen sonuçların deneysel doğrulaması daha sonra TÜBİTAK projesi (Proje Yürütücüsü: Doç.Dr. Nurdoğan CAN) çerçevesinde yapılacaktır. Bu enerjilerle ilgili olarak literatürde deneysel olarak gerçekleştirilmiş tek bir deneysel çalışmaya rastlanmıştır. Bu çalışmada 60 keV enerjili bakır iyonları tek kristal formundaki ZnO'nun (0001) oksijen yüzeyine gömülmüş ve 34 nm'lik girme derinliği elde edilmiştir [39]. Bu çalışmada bu enerji için girme derinliği 34.1 nm olarak hesaplanmıştır. Bu yapılan hesaplamaların oldukça gerçekçi olduğunu göstermektedir. Hatanın %5 ve daha düşük olması beklenmektedir. Başka enerjiler ve iyonlarla ilgili ayrıntılı girme derinliği hesabı yapılmadığından bu sonuçların

yapılacak deneylerde enerji seçiminde kullanılabilceği ve amaçlanan derinlik konusunda belirleyici olacağı gözükmektedir. Tablo 1’de ayrıca başka metallerin bu enerjilerdeki girme derinlikleri hesaplamaları da artan Z sırasında verilmişlerdir.

Tablo 5.1. Farklı enerjili metal iyonları için girme derinliği

İyon	60 keV		120 keV		240 keV		300 keV	
	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)
Mn (Z=25)	382 (D) 113 (Y)	172 147	740 220	309 279	1426 386	544 491	1801 473	669 604
Fe (Z=26)	368 (D) 114 (Y)	164 146	697 202	288 257	1388 381	535 485	1728 448	637 576
Co (Z=27)	362 (D) 108 (Y)	158 139	680 187	285 238	1313 356	503 455	1647 427	614 545
Ni (Z=28)	348 (D) 102 (Y)	157 131	660 186	272 238	1254 339	496 433	1598 416	599 530
Cu (Z=29)	341 (D) 98 (Y)	150 126	629 172	256 220	1215 316	472 404	1524 384	559 494
Ag (Z=47)	254 (D) 62 (Y)	97 79	431 101	163 129	777 179	285 228	951 211	346 171
Pt (Z=78)	216 (D) 42 (Y)	66 53	339 65	105 82	558 102	174 129	661 119	203 152
Au (Z=79)	215 (D) 42 (Y)	65 53	338 65	103 82	556 100	168 127	656 117	199 149
Hg (Z=80)	215 (D) 42 (Y)	65 53	337 63	102 80	552 99	168 125	653 115	168 146

D: Derinliğine, Y: Yanlamasına

Elde edilen bu yapıların dalga kılavuzu olarak kullanılabilmeleri için girme derinliklerinin en azından kullanılacak ışığın dalga boyu mertebesinde olma zorunlulukları bulunmaktadır. Ayrıca fiber optik teknolojisiyle uyum için >5mikron şartı da aranabilir. Bu çerçevede yüksek enerjili iyon dikme olasılığı kullanılması avantaj sağlayabilecektir (Tablo5.2).

Tablo 5.2. H<sup>+</sup> ve He<sup>+</sup> iyonlarının farklı enerjiler için girme derinliği sonuçları

İyon	300 keV		600 keV		1000 keV		2000 keV	
	Erişim mesafesi (µm)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (µm)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (µm)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (µm)	Sapma (µm)
H (Z=1)	2,60(D)	2249	6.01	3446	12.10	4385	34.00	1.00
	2.74(Y)	3600	4.16	5532	6.90	9354	1.61	2.30
He (Z=2)	1.45(D)	2535	2.29	2998	3.35	2775	6.13	3.05
	2.96(Y)	3638	3.20	4091	3.49	4439	4.03	5.11

D: Derinliğine, Y: Yanlamasına

Yarıiletken katkılamanın non-lineer uygulamalarda sıkça kullanılan bir başka yol olması sebebiyle bu tip çalışmalarda bulunacak araştırmacılara yol gösterici olabilmesi amacıyla değişik yarıiletken iyonların ZnO kristalinde girme derinlikleri, yine artan Z sırasında hesaplanmış ve Tablo 5.3'te verilmişlerdir.

Tablo 5.3. Bazı Yarıiletken iyonların farklı enerjiler için girme derinliği sonuçları

Element	60 keV		120 keV		240 keV		300 keV	
	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)
Si (Z=14)	687	332	1414	617	3149	1026	3734	1335
	267	337	510	649	968	1165	1142	1420
Ge (Z=32)	317	136	579	234	1098	419	1358	508
	86	111	150	191	272	348	340	435
Sn (Z=50)	250	93	423	157	750	267	907	323
	58	74	95	121	163	208	194	247
Pb (Z=82)	214	63	336	100	546	167	645	195
	42	53	62	79	98	124	114	145

D: Derinliğine, Y: Yanlamasına

Kristal ve amorf yapıların lazer aktif elemanlar (3+ grubu elementleri) için taban madde olarak kullanılması sebebiyle bu çalışmanın son parçası olarak bu elementlerden bazılarının ZnO kristaline iyon dikme yöntemiyle sokulmaları durumu da incelenmiş ve hesaplama sonuçları Tablo 5.4'te sunulmuşlardır.

Tablo 5.4. Bazı lantanitlerin ZnO kristalinde farklı enerjiler için girme derinliği sonuçları

İyon	60 keV		120 keV		240 keV		300 keV	
	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)	Erişim mesafesi (Å)	Sapma (Å)
Nd (Z=60)	232(D)	81	382	134	650	228	790	266
	50(Y)	64	80	102	133	170	159	202
Eu (Z=63)	229(D)	77	374	128	630	218	764	251
	49(Y)	63	76	97	127	161	148	189
Er (Z=68)	224(D)	73	361	119	601	200	725	233
	46(Y)	59	72	91	115	147	137	176

D: Derinliğine, Y: Yanlamasına

### 5.5. Tartışma ve Öneriler

Kristallere yarıiletken madde dikilmesi günümüz optoelektronik araştırmalarının vazgeçilmezleri arasındadır. Metal iyonları üçüncü mertebeye non-lineer optik katsayılarının büyük olması ve non-lineer kırma indisindeki hızlı değişimleri sebebiyle yarıiletken iyonlara nispeten daha sıklıkla araştırmalarda kullanılmakla beraber; bazı yarıiletken maddelerin non-lineer etkileri yine de yüksek mertebeli olabilmektedir. Bu sebeple ileri bir araştırma olarak ZnO kristaliyle, başka teknolojik uygulamalarda kullanılabilen taban madde sağlayıcı kristallere yarıiletkenlerin iyon dikme yöntemiyle sokulması durumunun deneysel verilerle test edilmesi ve doğrulanması gerçekleştirilebilir.

## KAYNAKLAR

- [1] N. Bohr, M.-Fys. Meed. Dan. Vid. Selsk. 18 (1948), No. 8
- [2] O.B. Firsov, Soviet Phys. JETP 5 (1957) 1192, JETP 6 (1958) 534, JETP 7 (1958) 308, JETP 9 (1959) 1076
- [3] J. Lindhard, M. Scharff, H. E. Schiott, Mat.-Fys. Meed. Dan. Vid. Selsk. 33 No. 14 (1963), and J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 36, No. 10 (1968)
- [4] J.P. Biersack, Report of the Hahn-Meitner-Institut Berlin, HMI-B 37 (1963), and Z. Physik 211 (1968) 495
- [5] W.D. Wilson, L.G. Hagmark, J.P. Biersack, Phys. Rev. B 15 (1977) 2458, J.P. Biersack, J.F. Ziegler, Nucl. Instr. Meth. 194 (1982) 93, and J.P. Biersack, J.F. Ziegler pp.122-156 in: Springer Series in Electrophysics, Vol. 10 (Springer Berlin 1982)
- [6] J. P. Biersack, M. Städele, Rad. Eff. 64 (1982) 51
- [7] P. Gombas, "Die statistische Theorie des Atoms", Springer-Verlag, Wien, 1949
- [8] C. Varelas, J. P. Biersack, Nucl. Instr. Meth. 79 (1970) 213
- [9] M. Städele, J. P. Biersack, to be published
- [10] D.J.O'Connor, J.P. Biersack, Nucl. Instr. Meth. B15 (1986) 14
- [11] J.P. Biersack and L.G. Hagmark, Nucl. Instr. Meth. 174 (1980) 257
- [12] K. Izsak, J. Berthold, S. Kalbitzer, Nucl. Instr. Meth. B15 (1986) 34
- [13] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, Vol. 1 of the series "Stopping power and Ranges of Ions in matter" (edit. J.F. Ziegler), Pergamon Press, New York (1985)
- [14] J.P. Biersack, E. Santner, Nucl. Instr. Methods 132 (1976) 229, and J. de Physique 37 (1976) C7-541

- [15] J.P. Biersack, Nucl. Instr. Meth.182/183 (1981) 199, and J.P. Biersack, Z. Phys. A (Atoms and Nuclei) 305 (1982) 95
- [16] J.P. Biersack and W. Krüger, range tables in "Ionenimplantation", by H. Ryssel and G. Ruge, B.G. Teubner Pres, Stuttgart 1978, and ion implantation tables in Londolt-Börnstein, New Series, Vol. 17, p.159-165, Springer, Berlin (1984)
- [17] U. Litmark and J.F. Ziegler, Phys. Rev. A 23, (1982) 64
- [18] F. Jahnel, H. Ryssel, G. Prinke, K.Hoffman, K. Müller, J.P. Biersack and R. Henkelman, Nucl. Instr. Methods 182/183 (1981) 223
- [19] I. Manning, G.P. Mueller, Comp. Phys. Comm. 7 (1974) 85
- [20] M.T. Robinson and O.S. Oen , Appl. Phys. Lett. 2 (1963) 30
- [21] M. T. Robinson and I.M Torrens Phys. Rev. B9(1974) 5008
- [22] M.L Roush, F.Davarya, O.F. Goktepe and T.D. Andreadis, Nucl. Instr. Methods. 209/210 (1983) 67
- [23] M. Hautala, Phys. Rev. B30 (1984) 5010
- [24] J.P. Biersack and W.G. Eckstein, Appl. Phys. 34 (1984) 73
- [25] J.P. Biersack, Fusion Technologie 6 (1984) 475; W. Ecktein, J.P. Biersack, Appl. Phys. A37 (1985) 95
- [26] W. Ecktein, J.P. Biersack, Z. Physik A310 (1983) 1, Appl. Phys. A 38 (1985) 123, Z. Physik B 63 (1986) 109, Z. Physik B 63 (1986) 471
- [27] H. Sabelli, R. Benedek, T.L. Gilbert, Phys. Rev. A20 (1979) 677
- [28] P.J. v.d. Hoek, A.D. Tenner, A.W. Klein, E.J. Baerends, Phys. Rev. B (1986) in print
- [29] S.Kalbitzer, H. Oetzman, Rad. Eff. 47 (1980) 57
- [30] Pelas, C. Peron, Nucl. Instr. Methods B1 (1984) 387
- [31] J. Lindhard, Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 28, No. 8 (1954)
- [32] H. A. Bethe, Ann. Physik 5 (11930) 325
- [33] J.P. Biersack, Lectures held at Free University Berlin, 1969/70, and C. Varelas, J.P. Biersack, Nucl. Instr. Meth.79 (1970) 213
- [34] N. Bohr, Phys. Rev. 59 (1941) 270

- [35] L.C. Northcliffe, Phys. Rev. 120 (1960) 1744
- [36] W. Brandt, M. Kitagawa, Phys. Rev. 25B (1982) 5631
- [37] J.F. Gibbons, W.S. Johnson, S.W. Moylroie, "Projected Range Statistics", Second Edition, Dowen, Hutchinson, Ross, Stroudsburg, Pa, 1985
- [38] Townsend, P.D., Kelly, J.C., Hartley, N.E.W., Ion Implantation, Sputtering and Their Applications, Academic Pres, London, 1976
- [39] Kono, K., et.al, Nuc.Inst.and Meth.in Phys.Res.B, Vol:206 (2003), pp 291-4.





## ÖZGEÇMİŞ

1978 yılında İzmit'te doğdu. İlk ve orta öğrenimini Gölcük'te tamamladı. 1997 yılında Sakarya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünü kazandı. 2001 yılında fizik bölümünden başarıyla mezun oldu. Aynı yıl içinde SAÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda Yüksek Lisans öğretimine başladı. Halen özel bir eğitim kurumunda fizik öğretmeni olarak görev yapmaktadır.



ZUHAL KARADEMİR