

SiC ALTlikli TEK TABAKA GRAFENİN
1.8 MeV ENERJİLİ PROTON RADYASYONUNA MARUZ
BIRAKILMASI İŞLEMİNİN SRIM MONTE CARLO KODU
KULLANILARAK MODELLENMESİ VE MEYDANA
GELEN ETKİLERİN İNCELENMESİ

NAHİDE KARABULUT

YÜKSEK LİSANS TEZİ

DİSİPLİNLERARASI NÜKLEER ENERJİ VE ENERJİ SİSTEMLERİ
ANABİLİM DALI

T.C.
SİNOP ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

SiC ALTlikli tek tabaka grafenİN 1.8 MeV enerjİli
proton radyasyonuna maruz bırakılması İŞleminİN
SRIM monte Carlo kodu kullanılarak modellenmesi ve
meydana gelen etkİlerin İncelenmesi

NAHİDE KARABULUT

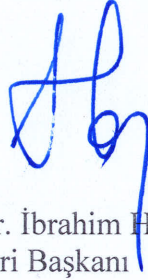
YÜKSEK LİSANS TEZİ
DİSİPLİNLERARASI NÜKLEER ENERJİ VE ENERJİ SİSTEMLERİ
ANABİLİM DALI

DANIŞMAN
Yrd. Doç. Dr. Hatun KORKUT

SİNOP – 2016

T.C.
SİNOP ÜNİVERSİTESİ REKTÖRLÜĞÜ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ

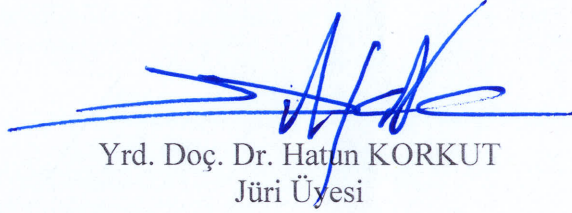
Nahide KARABULUT, tarafından hazırlanan “SiC Altlıklı Tek Tabaka Grafinin 1.8 MeV Enerjili Proton Radyasyonuna Maruz Bırakılması İşleminin SRIM Monte Carlo Kodu Kullanılarak Modellenmesi ve Meydana Gelen Etkilerin İncelenmesi” başlıklı bu çalışma, 07.11.2016 tarihinde yapılan savunma sınavı sonucunda başarılı bulunarak jürimiz tarafından YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.



Doç. Dr. İbrahim HAN
Jüri Başkanı



Doç. Dr. Tuncay BAYRAM
Jüri Üyesi



Yrd. Doç. Dr. Hatun KORKUT
Jüri Üyesi

Yukarıdaki imzaların adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

Doç. Dr. Turgay KORKUT
Enstitü Müdürü

**SiC ALTILIKLI TEK TABAKA GRAFENİN
1.8 MeV ENERJİLİ PROTON RADYASYONUNA MARUZ BIRAKILMASI
İŞLEMİNİN SRIM MONTE CARLO KODUYLA MODELLENMESİ
VE MEYDANA GELEN ETKİLERİN İNCELENMESİ**

ÖZET

Grafen, karbon atomlarının tek tabaka halinde dizilerek bal peteği formunda oluşturduğu iki boyutlu bir malzemedir. Elektrik ve ısıyı çok iyi iletmektedir. Çok dayanıklı bir malzeme olmasına karşın oldukça esnektir, özelliklerini kaybetmeden rahatlıkla eğilip bükülebilir. Sahip olduğu bu özelliklerinden dolayı çok dikkat çekici bir malzeme olan grafen son zamanlarda üzerinde en çok çalışılan yarıiletken malzemelerin başında gelmektedir. Yapılan çalışmalar onun özelliklerinin daha iyi analiz edilebilmesini ve sentezlenebilmesini amaçlamaktadır. Bunların yanı sıra grafenin radyasyona gösterdiği tepki merak konusudur. Bu çalışmada SRIM (madde içindeki iyonların durdurulması ve dizilimi) Monte Carlo programını kullanarak SiC yarıiletkeni üzerine büyütülmüş 4.5 µm kalınlıklı tek tabaka grafene 1.8 MeV enerjiye sahip proton radyasyonu gönderilerek onun bu radyasyondan nasıl etkilendiği incelendi. Proton-grafen/SiC etkileşimleri ile ilgili atom dağılımları, iyon dağılımları, hedef iyonizasyonları, fononlar ve hasar durumları gibi bazı parametreler incelendi.

Anahtar Kelimeler: Grafen, proton radyasyonu, DPA, kusur oluşumu

MODELLING OF 1.8 MeV ENERGETIC PROTON IRRADIATION OF MONOLAYER GRAPHENE GROWN ON SiC BY THE USE OF SRIM MONTE CARLO CODE AND INVESTIGATION OF ITS GENERATED EFFECTS

ABSTRACT

Graphene is a two-dimensional material in the form of honey combs created by arranged in a single layer of carbon atoms. It excellently conducts electricity and heat. Although it is a very durable material, it is very flexible. It can be squirmed easily without losing its properties. Graphene, which is the remarkable material, is one of the most studied semiconductor because of these characteristics, recently. Conducted researches aim to better analyzing and synthesising of its properties. In addition to all these properties, graphene's reaction to radiation is also object of interest. Effects of 1.8 MeV proton radiation to 4.5 nm thickness monolayer graphene on the SiC substrate were investigated by SRIM (stopping and range of ions in matter) Monte Carlo programme. Regarding that proton-graphene/SiC interactions several parameters were given such atom distributions, ion distributions, target ionization, phonons and damage events were simulated.

Keywords: Graphene, proton irradiation, DPA, defect formation

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım süresince destek ve yardımlarını esirgemedi kendimi geliştirebilmem adına sürekli ilgilenen tez danışmanım ve saygıdeğer hocam Sayın Yrd. Doç. Dr. Hatun KORKUT' a teşekkür ederim.

Grafen formlarını şekle çevirerek bana yardımcı olan Ağrı İbrahim Çeçen Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Arş. Gör. Sara TAŞKESENLİOĞLU' na teşekkür ederim.

Eğitim hayatım boyunca hiçbir fedakarlıktan kaçınmayarak bana destek olan başta annem ve babam olmak üzere bütün aileme şükranlarımı sunarım.

Ayrıca her türlü desteği sunarak her durumda yanımda olan eşim Abdulkerim KARABULUT' a teşekkürlerimi sunarım.

Nahide KARABULUT

Kasım, 2016

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
İÇİNDEKİLER	iv
SEMBOLLER ve KISALTMALAR LİSTESİ.....	vii
ŞEKİLLER ve ÇİZELGELER LİSTESİ	ix
1. GİRİŞ	1
2. GENEL BİLGİLER	3
2.1. Grafen	3
2.1.1. Grafenin Özellikleri	6
2.1.1.1. Grafenin Elektriksel Özellikleri.....	6
2.1.1.2. Grafenin Optik Özellikleri	8
2.1.1.3. Grafenin Termal Özellikleri.....	8
2.1.2. Grafeni Sentezleme Teknikleri ve Yöntemleri	8
2.1.3. Grafenin Teknolojide Kullanım Alanları.....	9
2.2. Radyasyon.....	13
2.2.1. Radyasyon Türleri.....	13
2.2.1.1. Enerjilerine Göre Radyasyon.....	13
2.2.1.1.1. İyonlaştırıcı radyasyon.....	13
2.2.1.1.2. İyonlaştırıcı Olmayan Radyasyon.....	14
2.2.1.2. Türüne Göre Radyasyon	14
2.2.1.2.1. Elektromanyetik Radyasyonlar	14
2.2.1.2.2. Parçacık Radyasyonları.....	15
2.2.1.2.3. Serbest Nötronlar	15
2.2.1.3. Kaynağına Göre Radyasyon	15
2.2.1.3.1. Doğal Radyasyon Kaynakları	16
2.2.1.3.2. Yapay Radyasyon Kaynakları	17
2.2.2. Radyoaktif Bozunma Türleri	17
2.2.2.1. Alfa (α) Bozunumu	19
2.2.2.2. Beta (β) Bozunması	19
2.2.2.3. Gama (γ) Bozunumu.....	20

2.2.3. Elektromanyetik Radyasyonun Madde İle Etkileşimi	21
2.2.3.1. Fotoelektrik Olay	22
2.2.3.2. Compton Saçılması	25
2.2.3.3. Çift Oluşumu.....	26
2.2.4. Radyasyon Birimleri	27
2.2.5. Radyasyon Dozu	29
2.2.6. Radyasyonun Biyolojik Etkileri.....	29
2.2.7. Radyoaktif Parçacıklarla İlgili Çalışmalar ve Durdurma Teorisine Genel Bakış. 30	
2.2.7.1. Radyoaktif Parçacıklarla İlgili İlk Çalışmalar (1899-1920)	30
2.2.7.2. Kuantum Mekanikliği ve Durdurma Teorisi (1930-1935).....	33
2.2.7.3. Fizyon Parçalanmalarının Analizleri (1938-1941)	33
2.2.7.4. Serbest Elektron Gazındaki Parçacığın Durdurması (1947-1960)	35
2.2.7.5. Durdurma ve Ağır İyonların Dizilimi İçin Teoriler (1963-1985).....	38
2.3. Atom Başına Yer Değiştirme (DPA)	39
2.4. Radyasyonun Elektronik Malzemelere Etkileri ve Kusurlar	40
2.4.1. Radyasyon Hasarı	40
2.4.1.1. İlk Çarpışmayla Yeri Değişen Atom (PKA).....	41
2.4.1.2. Radyasyon Hasar Modeli.....	42
2.4.2. Radyasyonun Kristal Yapıda Meydana Getirebileceği Kusurlar.....	45
2.4.2.1. Nokta Kusurlar.....	47
2.4.2.2. Çizgisel Kusurlar	49
2.4.2.3. Düzlemsel Kusurlar	50
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	52
3.1. SRIM Teorisi	52
3.1.1. TRIM Hesaplama Çeşitleri	52
3.1.1.1. İyon Dağılımı ve Hasarın Hızlı Hesabı.....	52
3.1.1.2. Tam Hasar Kaskatlarıyla İle Ayrıntılı Hesaplama	52
3.1.1.3. Tekkatman Çarpışma Adımları.....	52
3.1.1.4. Yüzey Bombardımanı Hesaplaması.....	53
3.1.1.5. Nötron / Elektron / Foton Kaskatları	53
3.1.1.6. Farklı İyon Enerji / Açık / Pozisyonları	53
3.1.1.7. Elementlerin Periyodik Tablosu	54
3.1.1.8.İyonun Geliş Açısı	54

3.1.1.9.Hedef Tanıtma	55
3.1.1.10. Hedef Atomların Hasar Enerjileri.....	56
3.1.1.11.Yüzey Bağlanma Enerjisi	57
3.1.1.12.Örgü Bağlanma Enerjisi.....	57
3.1.2. Hesaplama Parametreleri	57
3.1.2.1. Çıktı Disk Dosyaları	59
3.1.2.2.TRIM de Kullanılan Bilimsel Terimler	60
3.1.2.2.1.Geri Tepme Sürecinin Fiziği.....	60
4. BULGULAR.....	63
4.1. Giriş	63
4.2. SRIM Hesaplamaları.....	64
5. TARTIŞMA	66
6. SONUÇ	71
KAYNAKÇA.....	73
ÖZGEÇMİŞ	79

SEMBOLLER ve KISALTMALAR LİSTESİ

SEMBOLLER

A	Kütle numarası
α	Alfa parçacığı
β	Beta radyasyonu
Bq	Becquerel, radyoaktivite birimi
c	Işık hızı
C	Coulomb
Ci	Curie, radyoaktivite birimi
e	Elektron
E	Enerji
E_d	Yer değiştirme eşik enerjisi
E_f	Fotonun enerjisi
E_k	Kinetik enerji
eV	Elektron volt
γ	Gama radyasyonu
Gy	Gray, soğrulmuş doz birimi
h	Plank sabiti
I	Akım şiddeti
$I_{\max}$	Doyma akımı
keV	Kilo elektron volt
λ	Dalga boyu
m_e	Elektronun kütlesi
MeV	Mega elektron volt
μ	Mikro, büyüklük alt birimi (10^{-6})
n	Nötron
P	Momentum
p	Proton
π	Pi bağları
q	Yük miktarı
R	Röntgen

S	Durdurma gücü
SI	Uluslararası birim sistemi
σ	Karbon atomları arasındaki bağ
Sv	Sievert, eşdeğer doz birimi
T	Atomdan nötrona aktarılan enerji
θ	Saçılma açısı
V_0	Bohr hızı
V_k	Kesme potansiyeli
ν	Frekans
W	Metalin iş fonksiyonu
Z	Atom numarası

KISALTMALAR

AFM	Atomik kuvvet mikroskobu
DPA	Atom başına yer değiştirme
EMR	Elektromanyetik radyasyon
FET	Alan etkili transistör
RAD	Soğrulan radyasyon dozu
RBE	Rölatif biyolojik etki
REB	Röntgenin fiziksel eşdeğeri
REM	İnsanda röntgen eşdeğeri
PKA	İlk çarpışmayla yeri değişen atom
SRIM	Maddede iyonun dizilimi ve durdurulması

ŞEKİLLER ve ÇİZELGELER LİSTESİ

ŞEKİLLER

Şekil 2.1. Grafen tabanlı formlar; sarı renkli yapı sıfır (0) boyutlu fullenler, pembe renkli yapı bir (1) boyutlu karbonnanotüpler, mor renkli yapı üç (3) grafittir. Üstte ise görülen bu şekillerin grafen üzerindeki görünüşleri yer almaktadır.

Şekil 2.2. Grafenin örgü yapısı ve birinci Brillouin bölgesi

Şekil 2.3. Radyasyon türlerinin giriciliği

Şekil 2.4. Radyasyonun madde içinde ilerleyişi

Şekil 2.5. Fotoelektrik olayın şematik gösterimi

Şekil 2.6. Compton olayının şematik gösterimi

Şekil 2.7. Çift oluşumu olayının şematik gösterimi

Şekil 2.8. Kinchin ve Pease çarpışma modeli

Şekil 2.9. Kristallerde meydana gelen noktasal kusurlar

Şekil 3.1. Elementlerin periyodik tablosu

Şekil 4.1. Simülasyon ekranının enine görünümü

Şekil 5.1. İyon Dağılımları

Şekil 5.2. Atom dağılımları

Şekil 5.3. Hedef iyonizasyonu

Şekil 5.4. İyonlar ve geri tepmeler tarafından fononların oluşumu

Şekil 5.5. Hedefteki hasar durumları

ÇİZELGELER

Çizelge 2.1. Radyoaktif bozunma türleri

Çizelge 2.2. Radyasyon birimleri

Çizelge 2.3. Yerdeğiştirme Eşik Enerjileri (E_d)

Çizelge 2.4. Kristallerde mümkün olan kusurlar

1. GİRİŞ

Teknolojideki gelişmeler devasa adımlarla ilerleyerek her geçen gün ıgır açacak yeniliklerin kapısını aralamaya devam etmektedir. Geliştirilen elektronik cihazların boyutları ise sürekli olarak küçölmeye giderek atomik mertebe sınırlarına dayanmış durumdadır. Yarı-iletken teknolojisinde kullanılan malzemelerin özellikleri kaybedilmeden daha da küçöltölmesi mümkün olmadığından bu durum araştırmacıları yeni, özel ve bu duruma uygun yarı-iletken malzeme arayışına itmektedir. Günümüzde bu konuda grafen sahip olduđu özellikleri sayesinde araştırmacıların dikkatini çekmeyi başarmıştır. Grafen aşağıda daha da detaylı bir şekilde bahsedeceğimiz çok önemli ve sıradışı özelliklere sahiptir ve bilinen ilk iki boyutlu malzemedir. Karbon atomlarının tek tabaka halinde bal peteđi formunda dizilmesiyle elde edilen grafen iki boyutlu bir malzemedir (Slonczewski ve ark., 1958). Elektriđi ve ısıyı mükemmel şekilde ileten grafen çok esnek ve dayanıklı bir yapıya sahip olması bakımından da teknolojiye çok geniş bir kullanım alanı bulmaktadır. Haliyle bu durumda onun üzerine yapılan araştırmalar yoğunluk kazanmaktadır. Yapılan çalışmaların birçođu grafenin özelliklerinin daha iyi analiz edilmesi üzerine olmaktadır. Grafenle ilgili bilimsel çevrelerde cevap aranan en önemli soru ise onun daha düşük maliyetli ve daha seri üretiminin nasıl yapılabileceđidir. Grafen üzerine yapılan çalışmalar çok daha eskilere dayanmasına rağmen onun sentezlenebilmesi çok yakın zamanda gerçekleştirilebilirken seri üretime ise henüz geçilememiştir. Bu sıkıntı aşıldıktan sonra grafen teknolojiye çok geniş bir kullanım alanı bulabileceđi gibi planlanan uygulamaların başında fotovoltaiik hücreler, katlanabilir elektronik araçlar, optik cihazlar gelmektedir. Grafen olduđa küçük bir alanda elektrik üretimi sağlayabiliyor olması küçöltölmüş bilgisayar ve transistör araştırmaları için çok önemlidir. Cihazların kullanım süresini de etkilemekte olan grafen cihazların şarj ömrünü oldukça uzatabilmektedir.

Bugünkü elektronik teknolojisi oldukça düşük kaliteli ve çok pahalı ürünlerle kullanılmaktadır ve dokunmatik ekranların ana bileşeni indiyum kalay oksittir. Fakat bu iletken çok pahalı bir malzeme olmakla birlikte az bulunan bu malzemenin rezervide önümüzdeki birkaç yıl içinde tükenme tehlikesiyle karşı karşıyadır. Yapılan araştırmalar bize göstermiştir ki oldukça büyük bir kapasiteye sahip olması ve bol miktarda bulunması bakımından grafen dokunmatik ekranlar için indiyum kalay oksite alternatif

bir malzeme olarak dokunmatik ekran teknolojisinde rahatlıkla kullanılabilir. Elektriksel algılama yöntemini kullanarak dokunuşlarımıza cevap veren dokunmatik ekran televizyonlar ve bilgisayarların ekranları bu amaçla elektriği ve ısıyı iyi bir şekilde ileten iletken ve şeffaf bir malzemeyle kaplanması gerekmektedir. Dayanıklı, esnek, yüksek kaliteli, ekonomik, elektrik ve ısı bakımından oldukça iyi bir iletken malzeme olan grafen bu iş için biçilmiş kaftan niteliğindedir.

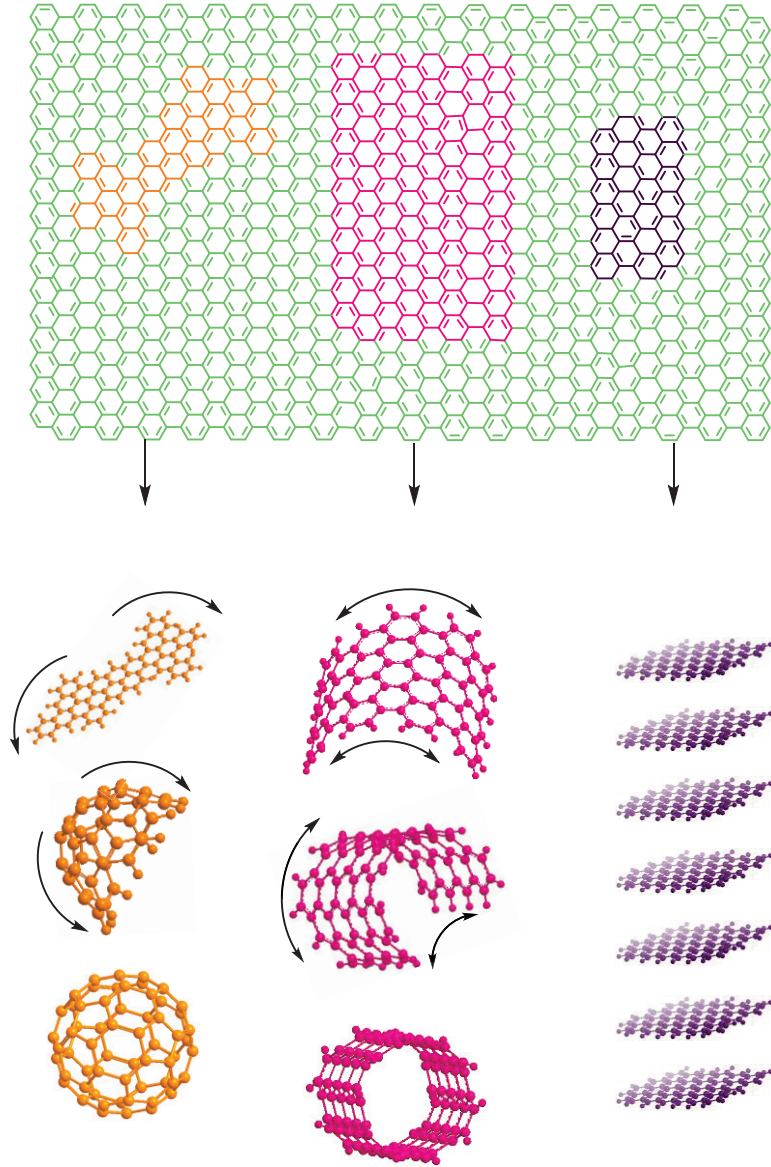
İçindeki elektronların rahatlıkla hareket edebiliyor olması grafeni entegre devreler için alternatif bir malzeme haline getirirken çok sıkı kafes dokusuna sahip olması bakımından içinden en küçük atomların geçişine dahi izin vermemesi ondan sensör olarak yararlanmamıza imkan tanımaktadır (Geim, 2012). Grafendeki elektronların ışık hızına yakın hızlarla hareket edebiliyor olması çok daha hızlı bilgisayarlar üretilebilmesine imkân tanımaktadır.

Garfene radyasyonun etkileri ise merak edilen bir diğer konudur. Radyasyon madde ile etkileştiğinde enerjisini maddeye aktararak onun iyonlaşmasına neden olur. Maddenin yapısında bir takım değişiklikler oluşturarak kusur olarak adlandırdığımız yapıları oluşturur. Radyasyonun maddeler üzerine etkisi radyasyonun türüne ve enerjisine göre değişmektedir. Bu çalışmada grafen SRIM-TRIM Monte Carlo Kodunu kullanılarak proton radyasyonuna maruz bırakıldı ve onun bu radyasyon karşısındaki davranışları gözlemlenerek rapor edildi. SRIM-TRIM Monte Carlo Kodu diğer benzer kodlar gibi gerçeğe yakın modellemeler yaparak, risk almadan minimum maliyetle çalışmalar yürütebilmemize olanak tanıyan bir araçtır. Simülasyon sistemleri üzerinde değişik kararları deneyerek en iyi sonucu bulmamıza imkân sağlar. Bu programın en önemli avantajları arasında uzun sürede sonuç alınabilecek sistemleri çok daha kısa sürede çözümleyebilmesi ve tekrardan kullanıma olanak tanımasıdır. Bu sistemler aynı zamanda bize kurulan deney sisteminde deneylerin herhangi bir anda durdurularak yeniden başlatabilmemize ve deney üzerinde tam bir kontrol kurabilmemize olanak sağlar. Bu çalışmada grafen malzemeyi proton radyasyonu maruz bırakarak elde edilen sonuçlar yorumlandı. 4,5 μm kalınlıklı SiC altlık üzerindeki tek katmanlı grafen üzerine 1.8 MeV proton radyasyonu etkileri bu program aracılığıyla araştırıldı. Proton-grafen/SiC etkileşimleri hakkında atomik dağılımlar, iyon dağılımları, hedef iyonlar, fononlar ve hasar etkileri gibi birçok parametre araştırıldı.

2. GENEL BİLGİLER

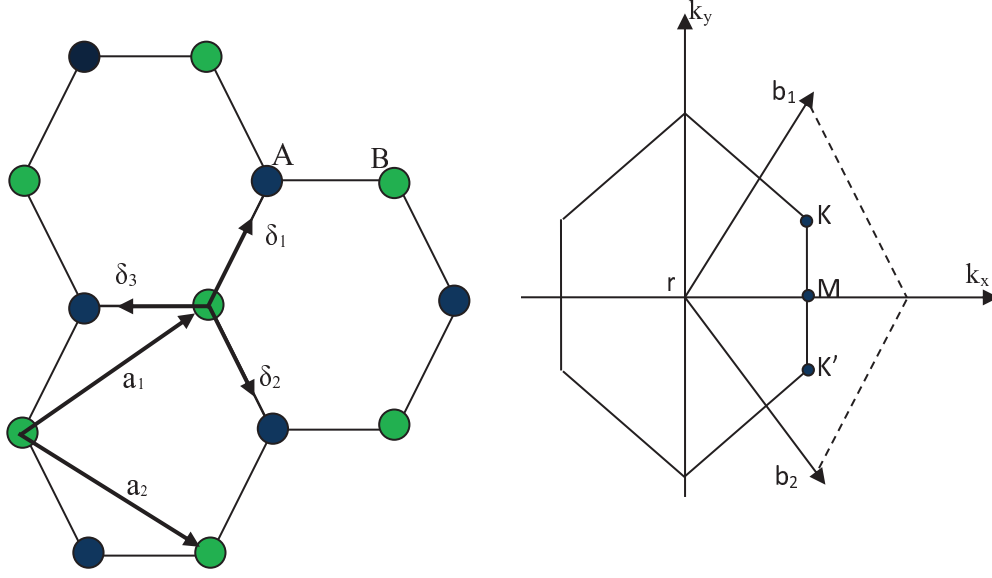
2.1. Grafen

Yaşam için temel bir madde olan karbon atomu doğada çok yaygın olarak bulunmaktadır ve periyodik tablonun en ilginç elementlerinden biridir. Atom numarası altı olan karbon atomu periyodik tablonun IV-A grubunda ilk sırada yer alır. Elektronik dağılımı $1s^2 2s^2 2p^2$ olan karbon atomu dört tane değerlik elektronuna sahiptir. Karbon atomunun elektronlarından ilk ikisinin ($1s^2$) bağlanmaya hiç katkısı bulunmaması ve bu elektronlarla geri kalan elektronları arasındaki farkın büyük olması karbonun farklı yapılar oluşturabilmesini ve bu durumun sadece karbona ait bir özellik olması onun çok ayrıcalıklı bir element olmasını sağlamaktadır. Karbon atomlarının birbirleriyle yapmış oldukları bağlarda bağlanma geometrisine bağlı olarak çok farklı fiziksel ve kimyasal özelliklere sahip birbirinden farklı malzemeler oluşturabilirler. Kendi aralarında bağlanmaya katılan atomların sayısına göre üç farklı bağ kurabilen karbon atomunun valans elektronları sp^1 , sp^2 ve sp^3 şeklinde ifade edilen üç farklı formda bulunabilirler ve karbonun bağlanma geometrisini temsil ederler. sp olarak ifade edilen bağlanmada karbon atomları birbirleriyle doğrusal bir geometri oluşturarak bağlanırlar ve her atomda iki bağ bulunmaktadır. sp^2 şeklinde gösterilen bağlanmada karbon atomları üçgen bir geometri oluşturmakla birlikte her atomda üç bağ bulunmaktadır ve iki boyutlu grafen bu bağlanmanın bir ürünüdür. sp^3 bağlanmasında ise karbon atomları elmasta olduğu gibi kendi aralarında pramit bir yapı oluşturarak bağlanırlar ve her atomda dört bağ bulunmaktadır. Karbon atomunun 0 (sıfır) boyuttan üç boyuta kadar izomerleri (aynı atom sayısına sahip elementten farklı yapıların oluşması) bulunabilen tek element olması onu ayrıcalıklı bir malzeme yapmaktadır. Karbonun sıfır boyutlu (0) ve bir boyutlu (1B) yapıları nanometre ölçekli olduklarından nano yapılar olarak adlandırılırken, makroskobik düzeydeki yapıları ise elmas, karbon fiberler, karbin, karbolitler ve grafittir. Karbon atomu futbol topu gibi yuvarlanarak küresel olarak düzenlenmesiyle sıfır boyutlu fullorenleri, silindir gibi rulolanarak bir boyutlu karbon nanotüpleri, iki boyutlu tabakalar halinde dizilerek grafeni, grafenin üst üste tabakalar halinde yığılmasıyla oluşturduğu üç boyutlu yapı ise grafiti oluşturmaktadır (Slonczewski ve ark., 1958).



Şekil 2.1. Grafen tabanlı formlar; sarı renkli yapı sıfır (0) boyutlu fullenler, pembe renkli yapı bir (1) boyutlu karbonnanotüpler, mor renkli yapı üç (3) grafitir. Üstte ise görülen bu şekillerin grafen üzerindeki görünimleri yer almaktadır

Bunlar arasında grafen diğer diğer allotropların elektriksel özelliklerini anlayabilmemizi sağlar. Karbon atomlarının bal peteği ya da kümes teli şeklinde iki boyutlu kristal yapısı olan grafen karbon atomlarının en ilginç formlarından biri olarak dikkat çeker.



Şekil 2.2. Grafenin örgü yapısı ve birinci Brillouin bölgesi (Neto 2009)

Karbon atomları kendi aralarında en kuvvetli bağ olarak bilinen kovalent bağlarla bağlanırken, grafiti oluşturan grafen tabakalar birbirine zayıf Van der Waals bağlarıyla bağlanırlar. Bu yüzden grafit tabakaları arası bu bağlar kolaylıkla kırılarak grafen elde edilebilir. Örneğin, kurşun kalem olarak kullandığımız grafit ile yazı yazarken kâğıt üzerinde sürtünmesi sonucu kolaylıkla bu tabakalar arası bağ kırılarak grafen elde edilebilir. Buna rağmen grafenin sentezi 2004 yılına kadar gerçekleştirilememiştir. Bunun başlıca nedeni Landau (1937) ve Peierls (1935) gibi önemli fizikçilerin iki boyutlu malzemelerin teorik olarak kararlı olamayacağını ve bu kararsızlığın düşük sıcaklıklarda bile kristalin dağılmasına yol açacağını düşünmüş olmalarıdır. Bu düşünce yapılan teorik ve deneysel çalışmalarla uzun süre desteklenmiştir, fakat 2004 yılında A. Geim ve K. Novoslov ilerde daha detaylı bahsedeceğimiz kaydırma yöntemini kullanarak grafen sentezlemeyi başarak grafen teknolojisinde bir sıçrama gerçekleştirmişler ve 2010 yılında bu çalışmalarlarıyla ilgili Nobel Fizik Ödülünü almayı hak kazanmışlardır.

Grafen, karbonun bal peteği ya da kümes teli şeklinde oluşturduğu altıgen örgülü iki boyutlu kristal yapısıdır. Olağan üstü fiziksel ve kimyasal özellikler göstererek çıkır açacak teknolojilerin önünü açan grafen son zamanlarda üzerinde en çok çalışılan iki

boyutlu malzemelerin başında gelmektedir. Çelikten üç yüz kat daha dayanıklı olan grafen çok sert olmasının yanısıra oldukça esnek bir özelliğe sahiptir. Grafenin sahip olduğu elektronların fotonlar gibi yüksek hızlarla hareket ediyor olması grafeni dahada çekici hale getirmiştir. Karbon atomlarının 1s ve 2p orbitallerinin hibritleşmesi ile 120^0 açılı sp^2 melezleşmesi yaparken boşta kalan p_z orbitali grafene olağan üstün özellikler göstermesini sağlamaktadır. Sadece bir atom kalınlığındaki tabakalardan oluşan ve saydam bir madde olan grafende C-C bağ arası uzaklığı yaklaşık 1,42 Angstrom'dur. Elektrik ve ısıyı çok yüksek düzeyde ileten grafenin sahip olduğu güçlü karbon bağları onu bilinen en kuvvetli materyallerden biri yapmaktadır.

Grafen tabakası içindeki her bir karbon atomu sp^2 hibritleşmesi yaparak en güçlü bağ olarak tanımlanan kovalent bağla bağlanırlar. Karbon atomunun dört valans elektronundan üçü en yakın komşu karbon atomları ile üç σ (sigma) bağı yapar, kovalent σ bağları bağlı atomlar arasında güçlü bağlar oluştururlar ve yapının dayanıklılığından sorumlu olmakla birlikte elektriksel iletme katkısı bulunmamaktadır. Elektrik alana dik olarak yönelen dördüncü elektron $2p_z$ orbitalinde olup elektriksel iletimden sorumludur ve π bağı olarak adlandırılan bağla bağlanırlar. π ve π^* olmak üzere ikiye ayrılan bu bağlardan π valans bandına karşılık gelirken π^* iletkenlik bandına karşılık gelir ve grafenin elektriksel iletkenliğinden sorumludurlar.

2.1.1. Grafenin Özellikleri

2.1.1.1. Grafenin Elektriksel Özellikleri

Her ne kadar grafenin keşfi çok yakın bir tarihe dayansa da grafenin elektriksel özellikleri araştırılmaya 70 yıl önce başlanmıştır. Grafen hakkındaki ilk çalışmayı onu tek katmanlı yapı olarak adlandıran P.R. Wolloce (1947) yaparak grafenin enerji-bant yapısını incelemiş ve elde ettiği bilgileri üç boyutlu grafiti anlamak için kullanmıştır. Grafendeki yük taşıyıcıları kütlesiz gibi davranması bakımından fotonlara benzer bir özellik göstermektedirler. Elektronlar katı haldeki madde içerisinde ışık hızından çok daha düşük hızlarla hareket ederler. Göreceli olmayan parçacık denkleminde (Schrödinger denklemi) uygun hareket ederler. Fakat grafendeki elektronlar için durum oldukça farklıdır. Grafendeki elektronların hızları da oldukça küçük olmakla beraber onlar Schrödinger denklemi yerine ışık hızına yakın fermiyonları betimleyen Dirac

denklemine uygun hareket ederler (Novikov, 2007). Grafen ve göreceli parçacıklar için ifade edilen denklemler arasındaki temel fark hız değeridir. Grafendeki yük taşıyıcılarının etkin kütleleri sıfır olduğu için grafendeki elektronlar kütesiz fermiyonlar olarak adlandırılmaktadırlar.

Grafene gösterilen yoğun ilginin asıl nedeni onun elektriksel alan etkisi gösterdiğinden transistör olarak kullanılabilecek olmasıdır. Grafenden yapılan bir transistörden alınan sonuçlar bize grafenin iletkenliği kapı voltajının bir sonucu olarak değişmekte ve artan kapı gerilimiyle özdirenç azalırken; azalan kapı gerilimiyle özdirençin artması bize bu iki parametrenin ters orantılı olarak değiştiği gerçeğine götürmektedir(Novoselov, 2005). Uygulanan pozitif gerilimle elektronların büyük bir kısmı harekete geçerken negatif gerilimle hollerin büyük bir konsantrasyonu harekete geçmektedir. Bu da bize tek duvarlı karbon nanotüplerle grafenin kapı gerilimine bağlılığının oldukça farklı olduğunu göstermiştir. Artan kapı voltajıyla iletkenliği azalmaya başlayan karbon nanotüpler sadece hol taşıyıcılarını içeren p-tipi yarıiletken olarak düşünülürken, grafen hem hol hem de elektron taşıyıcılarını içerecek p-tipi ve n-tipi yarıiletken özelliği gösterebilmektedir (Ni ve ark., 2007). Yani grafen her iki yük taşıyıcısını da içerebilen özel bir maddedir. Dışarıdan uygulanan kapı gerilimiyle bu yük taşıyıcılarının kontrol edilebiliyor olması elektronik uygulamalar için grafenin silisyumun yerini alarak yarıiletken teknolojisinde yeni atılımların önünü açmaktadır (Novoselov ve ark., 2004).

Bu bilgilere ek olarak düşük sıcaklıklarda uygulanan manyetik alan altında elektrik alan etkisinin kuantize olduğunu bu durumda grafenin kuantum Hall etkisine sahip olduğunu göstermektedir (Zhang ve ark., 2005). Grafenin olağan dışı Hall etkisine sahip olması ve onun hiçbir zaman sıfır iletkenlik göstermemiş olması grafeni alışılmış bir metalden kesin olarak ayırmaktadır.

Grafenin sahip olduğu elektronlar oda sıcaklığında herhangi bir çarpışma olmadan uzun mesafeler alabilmektedirler. Karbon atomunun bağ yapması için 4e'nu bulunmaktadır. Grafende bu 4 elektrondan yalnızca üçü bağ yapımına katılırken boşta kalan dördüncü elektron kristalde serbestçe dolaşarak grafene yüksek iletkenlik kazandırmaktadır.

2.1.1.2. Grafenin Optik Özellikleri

Grafenin kalınlığı yaklaşık olarak 0,34 nm olup bu kalınlık grafenin optik mikroskopla görülebilmesini zorlaştırabilmektedir (Ni ve ark., 2007). Grafen tabakaların görünebilirliği üzerine yapılan çalışmalarda görünebilirlik doğrudan dielektrik tabakaların kalınlığına bağlı olduğu düşünülmüştü (Geim ve ark., 2007). Fakat 2008’de A.Geim ve ark. gerçekte durumun böyle olmadığını ispatlayarak farklı allttaşlar üzerinde tek tabaka grafeni görüntüleyebilmeyi başarmışlardır (Teo ve ark., 2008). Görünebilirlik, alanın yüzeyi ile alana depolanan grafenin kontrast farklılığından kaynaklanırken, tek tabaka grafen sadece tek bir tabaka olmasına rağmen gelen ışığın %2.3 ünü soğurabilmektedir ve tabaka sayısının artması grafenin görünebilirliğini daha artırmaktadır (Park ve ark., 2009). Grafen yüzeyi üzerinde ışığın soğrulması grafen içinde elektron-hol çiftinin oluşmasına neden olurken ve bir dış alan ya da bir iç alan uygulandığında elektron ve holler ayrılarak foto akım meydana gelmektedir (Xia ve ark., 2009).

2.1.1.3. Grafenin Termal Özellikleri

Termal iletim elektronik aygıtların güvenilirliği için kilit bir faktördür. Karbonun allotropları olan grafit, elmas ve karbon nanotüpler güçlü bir kovalent bağa ve fonon saçılmasına sahip olduklarından yüksek termal iletkenlik göstermektedirler. Karbon nano tüplerin en yüksek termal iletkenliğe sahip olduğu bilinirken son zamanlarda grafenin incelenmesiyle onun gösterdiği termal iletkenlik dengeleri değiştirmiştir (Balandin ve ark., 2008). Farklı metotlarla üretilen grafenlerinde termal iletkenlikleri birbirlerinden farklı olduğu tespit edilmiştir (Klemens ve ark., 2011).

2.1.2. Grafeni Sentezleme Teknikleri ve Yöntemleri

Grafen örgüsü içinde yer alan karbon atomları güçlü kovalent bağlarla bağlı iken, grafiti oluşturan grafen tabakaları zayıf Van der Walls bağları ile bağlıdır. Bu yüzden bu bağlar çok kolay kırılır ve grafen katmanlar birbiri üzerinden çok rahatlıkla kaydırılarak grafen tabakalar elde edilebilir. A.Geim ve K.Novosolov kaydırma tekniğini kullanarak Selo Bant yardımıyla grafen elde etmeyi başarmışlardır.

Grafen elde etmek için başlıca dört farklı teknik kullanılmaktadır: **(1) Mekanik ayrılma**; selobant tekniği olarakta adlandırılan ve A. Geim ve arkadaşları (2004) tarafından kullanılan bu yöntemde grafit tabakalar selobant aracılığıyla ayrıştırılarak Si alttaş üzerine aktarılır. **(2) Epitaksiyel büyüme**; vakum ortamında yüksek sıcaklıklarda SiC'dan Si atomlarının buharlaştırılması sonucu kalan karbon atomlarının bir alttaş üzerine büyütülmesi sonucu grafen elde edilmesine dayanan bir tekniktir (Huang ve ark., 2009). **(3) Kimyasal buhar biriktirme**; karbon nanotüplerin üretilbildiği (Kocabas ve ark., 2009) alt tabaka temelli sentezleme tekniklerinden bir diğeri olan bu teknikle yüksek sıcaklıklarda hidrokarbon gazına maruz bırakılan bir geçiş metali üzerinde (Cu, Co, Pt) karbon doyuma ulaşarak film oluşmaktadır. **(4) Kimyasal ayrıştırma**; grafit tabakaların arasına sitrik asit gibi kimyasalların katılması ile grafen tabakaların şişerek birbirinden ayrıştırılması sağlanan tekniktir.

2.1.3. Grafenin Teknolojide Kullanım Alanları

Silisyum tabanlı teknoloji günümüzde artık kendi sınırlarına dayanmıştır. Silikonun yerini alabilecek yeni bir yarıiletken madde arayışı günümüzde araştırmacıların temel gündemleri arasında yer almaktadır. Elektronik cihazların boyutları her geçen gün daha da küçülmekte, silisyum teknolojisi ise bu ihtiyacı karşılayamamaktadır. Araştırmalar bize silikona göre her bakımdan çok daha üstün özellik gösteren grafeni işaret etmektedir. Grafen bilinen ilk iki boyutlu malzeme olması bakımından teknolojik uygulamalar açısından oldukça dikkat çekicidir. Grafen çok sert, çok dayanıklı, oldukça esnek bir malzemedir. Ayrıca ısıyı, ışığı ve elektriği mükemmel derecede iyi iletmektedir.

Yüksek kalitede seri üretimi henüz yapılamayan grafenin kullanım alanı oldukça geniştir. Gerekli kalitede ve çoklukta üretimi sağlandıktan sonra elektrikli araç teknolojisinden uçak ve otomobil sanayisine ve hatta çelik yelek yapımında bile kullanılması planlanmaktadır. Grafen yarıiletkeni; transistörlerde, güneş pillerinde, fotodiyotlarda, şeffaf diyotlarda, hidrojen depolamada aygıtlarında, yakıt hücrelerinde, entegre devre bileşeni olarak ve ısı transferinde etken malzeme olarak kullanılmaktadır. Bunların dışında grafenin organik ekran, sensör, sentetik yüzey deseni oluşturma ve uzay teknolojisi gibi farklı birçok alanda kullanımı mümkündür.

- **Grafen Transistör:** Grafenin akla gelen ilk uygulaması olan grafen transistör A.Geim ve K.Novoselov tarafından bir atom kalınlığında ve elli atom genişliğinde geliştirilmiştir. Dik bir şekilde uygulanan elektrik alana tepki gösteren grafenin FET yapımı için uygun bir malzeme olduğu söylenebilir. Oda sıcaklığı şartlarında sorunsuz bir şekilde çalışabilen bu transistör günlük hayatta kullanılan elektronik aletlerin gelişimi için çok büyük bir öneme sahiptir. Silisyum yarıiletkeninin boyutları çok küçük olarak seçildiğinde kararlılığını yitiren bir malzeme olduğu için silisyum tabanlı teknoloji günümüzde ehemmiyetini kaybederken atomik seviye kalınlıklarındaki grafenin silisyum yerine kullanılabilecek bir malzeme olacağı kaçınılmazdır.
- **Grafen ve Pil Teknolojisi:** Grafen, yapısal özellikleri ile çok sağlam olmakla birlikte elektriksel özellikleri bakımından pil teknolojisine uygunluğuyla çığır açacak bir malzeme olarak önemini pekiştirmektedir.
- **Grafen Sensörler:** Grafenin elektrik ve optik özellikleri sensör teknolojisinde de kullanılabilme imkânını doğurmaktadır ve bu imkân çok büyük öneme sahip gelişmelerden biridir. Grafen çok sıkı kafes dokusuna sahip olduğundan içinden en küçük atomların geçişine dahi izin vermeyerek sensör teknolojisi açısından oldukça önemli bir özellik göstermektedir.
- **Grafen ve Hidrojen Depolama:** Grafen tabanlı malzemelerin pil teknolojisinde olduğu gibi hidrojen depolamada teknolojisinde de kullanılabilir olması oldukça önemli roller üstlenebileceği düşüncesini ortaya çıkarmaktadır. Dünyayı tehdit eden küresel ısınma ve fosil yakıtların gün geçtikçe azalması araştırmacıları yeni ve uzun ömürlü sonuçlar doğuracak arayışlara itmektedir. Hidrojenin verimli bir şekilde depolanıp gereken yerlerde kullanılması için oldukça yoğun araştırmalar yürütülmektedir.
- **Grafen ve Spintronik:** Günümüzde oldukça önem kazanmaya başlayan araştırma alanlarından bir diğeri de spintronik teknolojisi elektronun yüküne ek olarak sahip olduğu spinleride kullanmaktadır. Günümüzdeki bilgi depolama teknolojisi açısından büyük bir öneme sahip olan spintronik teknolojisinde yarımetal malzemeler oldukça önemlidir.

Compagnini ve ark.(2009) tarafından yapılan çalışmada SiO₂ üzerine kaplanmış grafen tabakalardaki kusurları anlayabilmek için kontrollü bir şekilde 500 keV enerjiye sahip C⁺ iyon radyasyonu kullanılmıştır. Raman spektroskopisi ve atomik kuvvet mikroskopunun (AFM) birlikte kullanılması tek tabakalı, iki tabakalı ve çok tabakalı grafende oluşan bozuklukların oluşum mekanizmalarını açıklamaya olanak sağlar. Karbon nanomalzemeler temel bilimlerde ve uygulamalı teknolojide günden güne çok önemli bir hale gelmektedir. Bu malzemeler çok ince tellerin, küçük boyutlu tüplerin ve istenilen şekil ve boyutlarda ultra ince yaprakların kontrollü bir şekilde elde edilmesine olanak sağlar. Tek tabaka ve birkaç tabakalık grafendeki kirlilik ve kusurların araştırılması bu tür malzemelerin davranışlarını tahmin etmek ve anlamak için kritik öneme sahiptir. Aslında, bu kusurların kasıtlı / kasıtsız varlığı grafen tabanlı aygıtların elektronik iletim özelliklerini güçlü bir şekilde etkiler (Chen ve ark., 2008). Bununda ötesinde grafendeki kontrollü elde edilmiş kusurlar fiziksel, kimyasal ve mekanik özellikleri uygun hale getirmek için kullanılabilir (Krashennnikov ve ark., 2007).

Son zamanlarda grafen tabakaların elektronik özellikleri ve kristal düzenleri ile ilgili plazma düzenlemeleri (Kim ve ark., 2008) ve elektron demeti ışınlamalarının (Teweldebrha ve ark., 2009) etkileri araştırılmaktadır. Sadece birkaç çalışma grafene enerjili iyon ışınlaması hakkında bilgi verir (Tapaszto ve ark., 2008). Lucchese ve ark.(2010) 90 keV gibi düşük enerjili Ar⁺ iyon bombardımanına maruz bırakılmış grafende oluşan kusurları araştırmak için Raman saçılımını kullanmışlardır. Raman spektroskopisi farklı karbon yapılarıdaki kusurların tanımlanması için geniş çapta kullanılır (Tuinstra ve ark., 1970; Dillon ve ark.,1984; Ferrari ve ark., 2000; Cançado ve ark., 2006). Compagnini ve ark.(2011) 500 keV enerjiye sahip C⁺ iyonları ışınlanmasına maruz bırakılmış grafen tabakaların deneysel sonuçları olan Raman spektroskopisi dataları ile yoğunluk fonksiyonel teorisi tabanlı teorik sonuçları karşılaştırmış ve son derece uyumlu sonuçlar elde ettiklerini duyurmuşlardır. Krashennnikov ve ark.(2007) enerjili protonlar ve grafen nano-yapılar arasındaki çarpışmaların mikroskobik mekanizması inceledi ve atıcı enerjisi ve etki parametresinin bir fonksiyonu olarak transfer edilen enerjinin elektronik ve iyonik derecesini gösterdi.

Mathew ve ark.(2011) uzay ve güneş pili uygulamalarında grafen aygıtların kullanımı yaklaşık olarak bilinmekte ve şiddetli uzay şartlarında bu aygıtların kararlılığı grafen ve MeV enerjili protonların etkileşimleri açısından umut verici bir hal

almaktadır. SRIM kodu hesaplamaları nükleer ve elektronik teknolojilerinde başarılı bir şekilde araştırıldı (Gomez-Guzman ve ark., 2012) ve çok ince grafen film hedefi araştırmalarında başarıyla uygulandı (Prevel ve ark., 2012). Korkut ve ark. SRIM kodu kullanarak SiC üzerine yerleştirilmiş iki katmanlı grafene 500 keV enerjiye sahip proton radyasyonunun etkilerini simüle etmişler ve grafende meydana gelen hasarları ve yer değiştirmeleri incelemişlerdir (Korkut ve ark., 2014). Childres ve ark. grafenin elektronik iletim özelliklerine 30 keV enerjiye sahip elektron ışın radyasyonunun etkilerini araştırmışlar ve altlık malzeme ve enerjili elektron demeti arasındaki etkileşimlerden dolayı grafende meydana gelen hasarları incelemişlerdir. Sonuç olarak grafende meydana gelen ışınlama kaynaklı kusurları gösteren Raman spektroskopisini kullanarak grafenin mobilitesinin önemli derecede azaldığını belirlemişlerdir (Chidres ve ark., 2010).

Lehtinen ve ark.(2010) yoğunluk fonksiyonu teorisi ve atomlarla ilgili analitik potansiyel tabanlı bilgisayar simülasyonları kullanılarak grafene iyon radyasyonunun etkilerini araştırmışlar ve birkaç on elektron volt ile megaelektron volt aralığında enerjilere sahip çeşitli iyonların grafende meydana getirdikleri kusur konsantrasyonlarını ve türlerini tanımlamışlardır. Oda sıcaklığında maddelerin elektronlar veya iyonlarla radyasyona maruz bırakılması, amorfizasyon ve hollerin fazlalaşmasına yol açarak sürekli kusur oluşumunda artışa neden olur. Ve bu durum, esasen sadece ilgili yapıda bir karbon atomu için yerdeğiştirme eşiği üzerinde bir enerjinin varlığında meydana gelir (Smith ve ark., 2001). Aslında grafende dengesiz kusurların oluşumuna sebep olabilecek üç mekanizma vardır: (1) kristal büyütülmesi, (2) elektronlar veya iyonlar gibi enerjili parçacıklarla ışınlama ve (3) kimyasal işlemler (Banhart ve ark., 2011). Enerjik iyonlar ve grafen parçalarının çarpışmaları; çekirdek için klasik moleküler dinamikleri ile birleştirilmiş gerçek-uzay, sonlu-farklar, zamana bağlı yoğunluk fonksiyonel teorisi (TDDFT) çerçevesinde incelenmiştir. İtici enerji aktarılan enerjinin büyük bir miktarı, itici enerjisinin bir fonksiyonu olarak kusur oluşum mekanizmasının nasıl olduğunu anlamak için hesaplandı. Sonuç olarak valans elektronları ile hızlı protonların mümkün olmayan etkileşimlerinden dolayı grafende kusurların oluştuğu tespit edilmiştir (Bubin ve ark., 2012).

2.2. Radyasyon

Radyasyon bir kaynaktan çıkan ve elektromanyetik dalgalar ya da parçacıklar şeklinde yayılan bir enerjidir. Maddenin yapıtaşı olan atom; proton ve nötronlardan oluşan bir çekirdek ve onun etrafında dönen elektronlardan oluşmaktadır. Çekirdeğinde dengeli sayıda proton ve nötron bulunmayan atomlar radyoaktif atom olarak adlandırılır ve genelde atom numarası 83'ten büyük olan atomlar radyoaktiftir. Herhangi bir maddenin çekirdeğindeki nötron sayısı proton sayısına göre çok çok fazla ise çekirdekte kararsızlık oluşur ve fazla nötronlar parçalanır. Bu parçalanma proton-nötron sayısı dengeye gelene kadar devam eder. Parçalanma sırasında ortaya alfa (α), beta (β), gama (γ) olarak adlandırılan ve çıplak gözle görülemeyen ışınlar çıkar ve radyasyon olarak adlandırılır.

2.2.1. Radyasyon Türleri

Radyasyon enerjisi, türü ve kaynağına göre üç farklı parametre kullanılarak incelenmektedir(Korkut doktora tezi, 2010).

- Enerjisi: Düşük ve yüksek enerjili
- Türü: Parçacık radyasyonu ve elektromanyetik radyasyon
- Kaynağı: Doğal ve yapay radyasyon

2.2.1.1. Enerjilerine Göre Radyasyon

Enerjilerine göre radyasyon temel olarak iyonlaştırıcı ve iyonlaştırıcı olmayan radyasyon olarak iki başlıkta toplanır.

2.2.1.1.1. İyonlaştırıcı radyasyon

Radyasyon α , p , e , n , γ , β , X-ışını ve fisyon parçacıklarını içerir. Bunlardan α , β , p ve e yüklü iken, n , γ ve X-ışını yüksüzdür. Yüklü ve yüksüz parçacıkların madde içinde geçerken gösterdiği davranışlar birbirinden farklıdır. Yüklü parçacıklar madde içinden geçerken coulomb etkileşimine girdiklerinden direkt iyonlaştırıcı parçacık olarak adlandırılırlar. γ ve X-ışını gibi parçacıkların elektriksel etkileşimi olmadığı için madde içinde rahatlıkla ilerleyebilmektedir. Bundan dolayı α , β , γ ve X-ışınından giricilik özelliği en fazla olan γ ve X-ışınıdır. Yüklü parçacıklar madde içinden

geçerken elektronlarla etkileşerek enerjisinin büyük bir kısmını kaybederek yavaşlar ve böylece elektronu uyaracak enerjisi kalmaz. Yavaşlayan parçacıklar nötr bir atomdan elektron yakalar, böylece proton hidrojene, α ise He'a dönüşür. Yüklü parçacıklarda ağır ve hafif yüklü olmak üzere ikiye ayrılır. Bunlarda p ve α ağır parçacık, pozitron ve negatron ise hafif parçacıklardır. Kütlelerinden dolayı parçacıkların hava içindeki menzilleri de birbirinden farklıdır. Aynı enerjiye sahip p ve α parçacıklarından α daha ağır olduğu için hava içindeki menzili p'a göre çok daha kısadır.

2.2.1.1.2. İyonlaştırıcı Olmayan Radyasyon

İyonlaştırıcı olmayan radyasyon, bir atom veya molekülden bir elektron koparabilecek yeterli enerjiye sahip olmayan radyasyonlardır ve optik ve EMR nitelikli radyasyon olarak ikiye ayrılır. Optik radyasyonlara ultraviyole ışınlar girmektedir ve bu ışınların asıl kaynağı güneştir. Güneş tam doğarken yayılan bu ışınların giriciliği çok zayıf olduğu için vücuda giremeseler de deri ve göze temas ederek bu bölgelerde hasara neden olurlar.

EMR nitelikli radyasyon sınıfına ise; radyo dalgaları, mikro dalgalar, cep telefonları, radyo ve tv alıcıları, radarlar, trafolar, bilgisayarlar, akım taşıyan kablolar ve mikro dalgaların yaydığı radyasyon girmektedir. Elektromanyetik spektrumun alt tarafında yer alan bu radyasyon çeşitlerinin dalga boyları büyük, enerjileri ve frekansları düşüktür. Enerjileri girdikleri madde içindeki atomlardan elektron koparmaya yetmediği için iyonlaşmaya neden olmazlar. Sadece bir elektronu uyararak elektronun bir üst enerji seviyesine geçmesine neden olabilirler.

2.2.1.2. Türüne Göre Radyasyon

Türüne göre radyasyon elektromanyetik, parçacık radyasyonu ve serbest nötronlar olmak üzere üçe ayrılır.

2.2.1.2.1. Elektromanyetik Radyasyonlar

Gama ve X-ışınlarıdır. Dalga boyları küçük olan bu radyasyonların enerjileri yüksektir. Gama ve X-ışınının elektrik yükleri olmadığı için madde içinde rahatlıkla ilerleyebilirler. Ayrıca manyetik alanda sapmaya uğramazlar. Gama ışınları radyoaktif

bozunmalar ya da nükleer reaksiyonlar sonucu oluşan kararsız atom çekirdeklerinden yayılan elektromanyetik dalgalarıdır.

X-ışınları ise sürekli spektrum oluşturunca bu yeterli kinetik enerjiye sahip elektriksiz olarak yüklü parçacıkların aniden frenlenmesi ile oluşur. Sürekli spektrumun nedeni hedefe çarpan elektronun hızlı bir şekilde yavaşlamasıdır. Frenleme sonucu elektronların sahip olduğu kinetik enerji ışımaya dönüşür. Karakteristik X-ışınları ise hedef malzemenin atomlarından kaynaklanır. Merkezinde çekirdek etrafında elektronların dolaştığı bir atomu ele aldığımızda hedefi bombardıman eden elektronlardan biri yeterli enerjiye sahipse K kabuğundaki bir elektrona çarparak onu kabuktan çıkarabilir. Böylece yüksek enerjili uyarılmış atom haline dönüşür. Daha dıştaki elektronlardan biri enerji yayarak K kabuğuna atlar atom temel haline döner. Bu esnada yayılan karakteristik X-ışınını oluşturur.

2.2.1.2.2. Parçacık Radyasyonları

Alfa ve beta ışınları parçacık radyasyonlarını oluşturmaktadır. Atomun çekirdeğinde meydana gelen bu radyasyonlar bir kütleye sahiptir. Alfa parçacıkları + yüklü He çekirdeklerinden meydana gelirken yükü ve kütlesinden dolayı madde içindeki giriciliği oldukça küçüktür. Bir kâğıt parçası tarafından rahatlıkla durdurulabilmektedir. Beta parçacıkları ise hem “+” hem de “-” yüklerden oluşturmaktadırlar ve ince bir su tabakası ya da metal bir levha tarafından durdurulabilir.

2.2.1.2.3. Serbest Nötronlar

Radyasyonla oluşan yüksüz parçacıklar olup her maddeye kolay bir şekilde girerler ve doğrudan iyonlaştırıcı etkileri bulunmamaktadır. Parçacık radyasyonu olmalarına rağmen yükleri bulunmadığı için ayrı bir şekilde incelenirler. Girdikleri madde içinde nötronlarla etkileşerek alfa, beta, gama gibi ışınlara neden olurlar.

2.2.1.3. Kaynağına Göre Radyasyon

Yeryüzündeki tüm canlı ve cansız varlıklar doğal radyasyon kaynağı iken insanlar tarafından üretilen radyasyon kaynakları ise yapay radyasyon kaynağı olarak

tanımlanır. İnsanoğlu varoluşundan bu güne kadar bir şekilde sürekli olarak radyasyona maruz kalmaktadır. Dünyanın oluşumundan itibaren tabiatta yerini alan çok uzun ömürlü radyoaktif elementler yaşadığımız çevrede doğal bir radyasyon düzeyi oluşturmaktadır. Geçtiğimiz yüzyılda bu doğal düzeyin yanında teknolojik gelişmeler sonucu yapay radyasyonda doğadaki yerini almaya başlamıştır. Özellikle nükleer bomba denemeleri radyasyonun miktarını oldukça artırmaktadır. Radyasyon kaynakları doğal ve yapay olmak üzer ikiye ayrılır.

2.2.1.3.1. Doğal Radyasyon Kaynakları

Dış uzayda meydana gelen kozmik ışınların bir kısmı dünyaya ulaşmadan atmosfer tarafından tutulsa da bir kısmı yeryüzüne ulaşarak doğal radyasyon oluşturmaktadır. Yüksek enerjili kozmik ışınlar atmosferdeki atom ve moleküllerle çarpışması sonucu başta proton olmak üzere nötron, elektron ve pozitron gibi parçacıklar meydana getirirler. Eğer bu parçacıklar yeterli enerjiye sahip olurlarsa yeryüzüne ulaşarak dünyanın radyasyon miktarının artmasına neden olurlar. Deniz seviyelerinden yukarı çıkıldıkça kozmik ışınlardan dolayı maruz kalınan radyasyon miktarında artış olmaktadır. Doğal ve uzun ömürlü radyoaktif element içeren fosil yakıtlar yakılmadıkları sürece herhangi bir tehlike içermezken yakıldıkları zaman doğaya bir miktar radyasyon karışmasına neden olarak doğal radyasyon miktarını artırmaktadırlar. Ayrıca vücudumuzda bulunan radyoaktif elementlerden dolayı da bir miktar radyasyon açığa çıkmaktadır. Yiyecek, içecek ve teneffüs ettiğimiz hava ile birlikte maruz kaldığımız radyasyonda doğal radyasyon kaynakları arasında sayılabilmektedir.

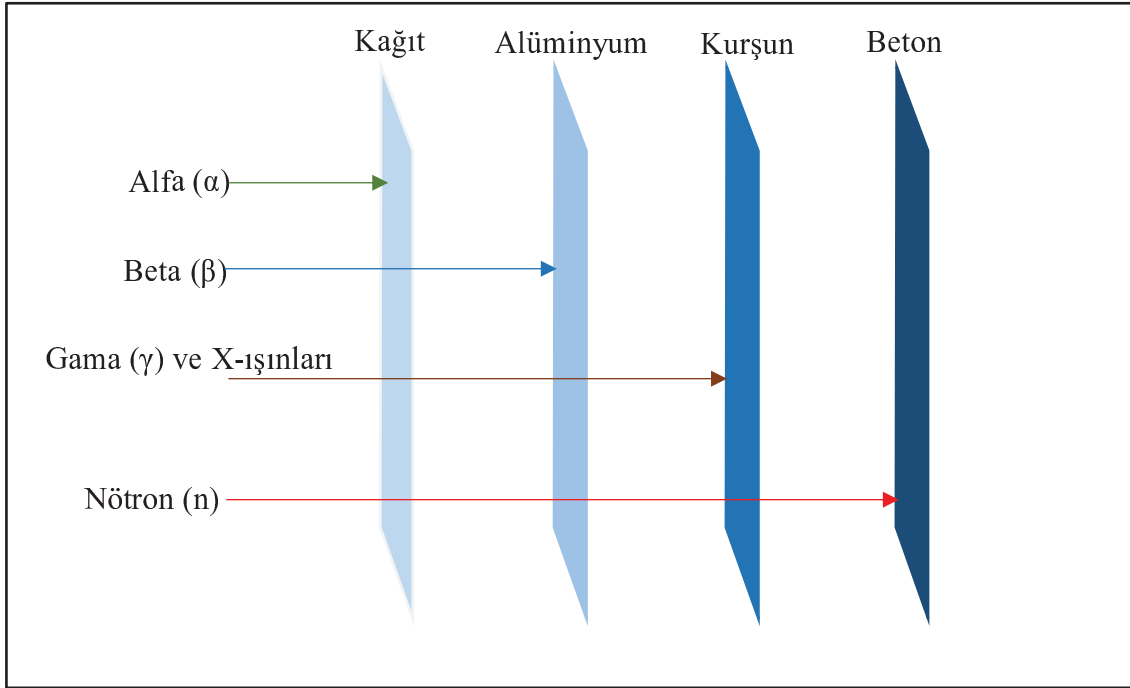
Doğal radyasyon miktarını asıl artıran nedenlerin başında gelen ise radon gazının atom numarası 86'dır ve periyodik cetvelin soygazlar sınıfında yer alır. Kaya, toprak ve sudaki doğal uranyum radyoaktif elementinin bozunması sonucunda oluşur. Bu bozunma zincirinin ana atomları bütün doğal malzemelerde bulunabildiğinden radon gazı tüm yüzey, kaya ve toprak parçalarının yanı sıra yapı malzemelerinden de ortama salınarak doğal radyasyon miktarında ciddi bir artışa neden olmaktadır.

2.2.1.3.2. Yapay Radyasyon Kaynakları

Teknolojinin gelişesi sonucu bazı radyasyon kaynakları yapay yollarla üretilmektedir. Yapay radyasyon kaynakları da doğal kaynaklar gibi belirli miktarda radyasyon dozuna maruz kalınmasına neden olur; fakat burada maruz kalınan radyasyonun dozu ve miktarı ayarlanabilmektedir. Tıbbi, zirai, endüstriyel amaçla kullanılan X-ışınları ve yapay radyoaktif maddeler, nükleer bomba denemeleri sonucu meydana gelen nükleer serpintiler, nükleer güç üretiminden salınan radyoaktif maddeler ile bazı güç üretiminden salınan radyoaktif maddeler ile bazı tüketici ürünlerinde kullanılan radyoaktif maddeler bilinen başlıca yapay radyasyon kaynaklarıdır.

2.2.2. Radyoaktif Bozunma Türleri

Radyoaktif çekirdekler kararsız durumda olduklarından kendiliğinden bozunuma uğrayarak kararlı hale geçmek isterler. Bu bozunma alfa, beta ve gama bozunumu olmak üzere üç şekilde gerçekleşir. Bu ışımların enerji ve yükleri farklı olduğu için madde içerisindeki giricilikleride farklılık göstermektedir. Bu parçacıklardan pozitif yüklü alfa giriciliği en düşük olandır. Madde içinde atomlarla coulomb etkileşimine girer. Kütlesi diğer parçacıklara göre çok daha büyük olduğundan çok kısa mesafede durdurulabilir. Gama, X-ışını ve nötronun ise yükü bulunmadığı için madde içinde rahatlıkla ilerleyebildiğinden menzilleri oldukça uzundur. Bu parçacıklardan alfa bir kâğıt tarafından durdurulabilirken enerjisi alfaya göre çok daha yüksek olan nötron kurşun levhadan bile geçebilmektedir. Parçacıkların giricilikleri şekil-2.3' te gösterilmiştir.



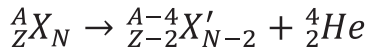
Şekil 2.3. Radyasyon türlerinin giriciliği

Çizelge 2.1. Radyoaktif bozunma türleri

Karakteristik	Radyasyon (1 MeV' lik Kinetik Enerji)				
	Alfa (α)	Beta (β) Elektron (e)	Proton (p)	Foton (γ) veya X-ışını	Nötron (n)
Sembol	${}^2_4\alpha$ veya He^{+2}	${}^0_{-1}e$ veya β	${}^1_2p$ veya H^{+1}	${}^0_0\gamma$	${}^1_0n$
Yük	+2	-1	+1	nötr	nötr
İyonlaşma	Direkt	Direkt	Direkt	Dolaylı	Dolaylı
Kütle (akb)	4,001506	0,0005485 8	1,007276	-	1,008665
Hız (cm/s)	$6,944 \times 10^8$	2.82×10^{10}	$1,38 \times 10^9$	$c = 2,998 \times 10^{10}$	$1,38 \times 10^9$

2.2.2.1. Alfa (α) Bozunumu

Çekirdeğin kararsızlığı hem proton hem de nötron fazlalığından kaynaklanıyorsa çekirdek alfa parçacığı yayımlayarak bozunur. Bu bozunma sırasında iki proton ve iki nötron yayımlanması sonucu atom numarası iki kütle numarası dört azalır. Bu bozunmada proton ve nötron sayıları ayrı ayrı korunurken toplam enerji de korunmalıdır. Rutherford alfa parçacığının gerçekte helyum çekirdeği olduğunu göstermiştir.



Ortaya çıkan enerjinin büyük bir kısmını momentumun korunumu nedeniyle küçük kütleye sahip olan alfa parçacığı alır. ${}^4_2He$ yüksek enerjili olsada kütlesi ağır olduğu için menzili kısadır. Yani madde içinde çok ilerleyemeyerek durduğu için giriciliği küçüktür. Alfa bozunmasının enerji spektrumu kesiklidir ve 4 MeV ile 10 MeV arasında değişir.

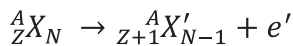
2.2.2.2. Beta (β) Bozunması

Beta bozunması üç farklı şekilde gerçekleşir.

- **β^- bozunması:** Radyoaktif maddenin kararsızlığı çekirdekteki nötron fazlalığından kaynaklanıyorsa çekirdekteki enerji fazlalığını gidermek için nötronlardan birini proton ve elektron haline dönüştürür ve proton çekirdekte kalırken elektron çekirdekten dışarı atılır.



Bu yüksek hızlı elektron beta parçacığı olarak adlandırılır. Bu şekilde beta emisyonu yapan radyonüklidin atom numarası bir artarken kendinden bir sonraki elementin izobarına dönüşür.



- **β^+ bozunması:** Atomdaki kararsızlık nötron azlığından veya proton fazlalığından kaynaklanıyorsa protonlardan biri nötron ve pozitif yüklü elektrona yani pozitrona dönüşür.

$$p \rightarrow n + e^+ + \nu$$

Nötron çekirdekte kalırken, pozitron dışarı fırlatır. Pozitron yayımlanan radyonüklidin proton sayısı bir eksilir ve kendinden bir önceki elementin (izobar) atomuna dönüşür. Bu yayımlanma sırasında kütle numarası değişmez.

$${}^A_ZX_N \rightarrow {}^A_{Z-1}X'_{N+1} + e^+ + \nu$$

- **Elektron Yakalama Olayı:** Atomun kararsızlığı çekirdekteki proton fazlalığından kaynaklanıyorsa çekirdek kendine yakın K ya da L yörüngelerinden bir elektron yakalar. Elektron protonla birleşerek nötron ve nötrino oluştururlar. Çekirdekten parçacık salınmaz fakat proton sayısı bir eksilir. Kütle numarası ise aynı kalır. Elektron yakalanması sonucu yörüngede boşalan elektronun yerine üst yörüngeden elektron geçer ve bu esnada frenleme (bremstrahlung) radyasyonu olarak adlandırılan X-ışını yayar.

$$p + e^- \rightarrow n + \nu_e$$

$${}^A_ZX_N + e^- \rightarrow {}^A_{Z-1}X'_{N+1} + \nu_e$$

Gerçekleşen bu üç bozunmada da proton ve nötron sayıları değiştiği halde kütle numarası sabit kalmaktadır. Ayrıca bu bozunmalarda nötrino ve antinötrino denilen yüksüz ve kütsüz parçacıklar oluşur. Beta bozunmasında yayımlanan elektronlar sürekli spektrum oluşturmaktadırlar.

2.2.2.3. Gama (γ) Bozunumu

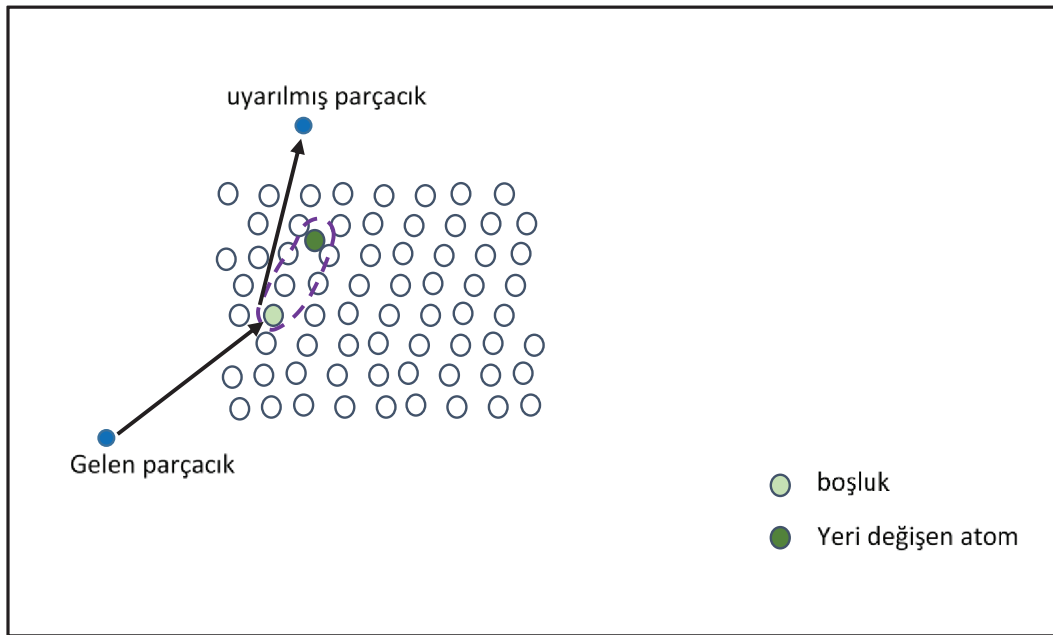
Çekirdek enerji fazlalığı dolayısıyla veya nükleit bozunma olayı ile radyasyon yayımlandıktan sonra çekirdek hemen kararlı hale geçemez, bozunmada oluşan nükleit hala yarı kararlı durumdadır. Bu fazla kalan uyarılma enerjisini hemen elektromanyetik özellikte olan bir gama radyasyonu şeklinde yayımlar. Bu şekilde bozunan yarı kararlı nüklidin atom ve kütle sayılarında bir değişme olmaz.

2.2.3. Elektromanyetik Radyasyonun Madde İle Etkileşimi

Gama ve X-ışını gibi bütün elektromanyetik radyasyonlar birçok olayda parçacıklara benzer davranış gösterdiği için, çok küçük enerji paketleri anlamına gelen bu radyasyonların birim elemanına foton adı verilmiştir. Radyasyonun belli bir frekansı için bütün paketlerde taşınan enerji aynıdır ve

$$E = h \cdot f \quad (2.1)$$

şeklinde ifade edilir.



Şekil 2.4. Radyasyonun madde içinde ilerleyişi

Fotonlar, içinden geçtikleri ortamın (maddenin) atomları ile rastgele yaptıkları karşılıklı etkileşimler sonucu ortama enerji bırakarak absorblanabileceği bir saçılıma da uğrayabilirler. Elektromanyetik radyasyonun madde ile etkileşiminde rol oynayan en önemli üç olay:

- Fotoelektrik olay
- Compton saçılması
- Çift oluşumu olaylarıdır.

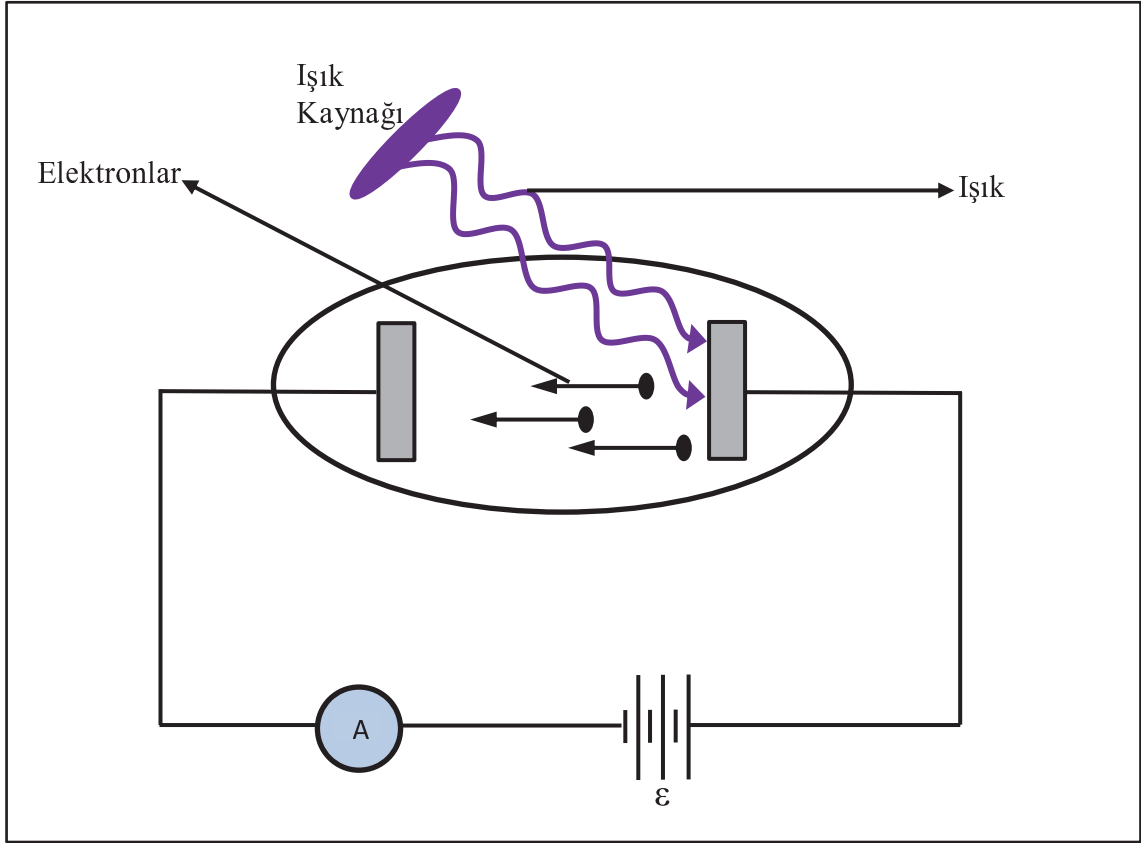
2.2.3.1. Fotoelektrik Olay

Işığın elektronegatifliği yüksek bir metal üzerine çarparak ondan e^- koparması olayı fotoelektrik olay olarak adlandırılır. Bu olay sonucu kopan elektron fotoelektron adını alırken elektronu koparan ışın ise foton olarak tanımlanır. Işığın metal yüzeye çarpmasıyla kopan elektron levhalar arasında var olan potansiyel fark nedeniyle diğer levhaya gider ve böylece devrede bir akım oluşur. Dalga boyu λ , frekansı f olan bir fotonun enerjisi;

$$E=hf=hc/\lambda \quad (2.2)$$

olarak ifade edilir.

Verilen bir metalden elektron koparmak için minimum bir enerjiye ihtiyaç vardır ve bu enerji elektronun bağlanma enerjisine eşittir ve E_b ile gösterilir. Bu enerjiyi sağlayan ışığın frekansına eşik frekansı, dalga boyuna ise eşik dalga boyu denir. Bir fotonun metalden elektron koparabilmesi için enerjisinin E_b 'den büyük olması gerekir. Bu durumda frekansı eşik frekansından küçük ya da dalga boyu λ_b den büyük fotonlar elektron koparamaz. Fotoelektrik etki devreye potansiyel uygulandığı ve uygulanmadığı durumlara göre farklılık göstermektedir.



Şekil 2.5. Fotoelektrik olayın şematik gösterimi

Devrede potansiyel gerilim yaratacak herhangi bir gerilim bulunmadığı durumda üç farklı durum söz konusu olur. Fotonun enerjisi bağlanma enerjisinden küçük olduğunda elektron kopmaz ve akım geçmez. Fotonun enerjisi bağlanma enerjisine eşit ise elektron kopar ve serbest kalır, fakat anoda gidecek enerjisi kalmadığı için akım oluşmaz. Fotonun enerjisi bağlanma enerjisinden büyükse e^- kopar ve kalan $E - E_b$ enerjisi ile anoda ulaşırsa akım oluşur. Bu akım minimum akım I_0 olarak adlandırılır.

$$E = h \cdot f \quad (2.1)$$

gelen fotonun enerjisi olarak ifade edilir ve bağlanma enerjisi,

$$E = h \cdot f_0 \quad (2.2)$$

$$E = E_B + E_K \quad (2.3)$$

$$hf = hf_0 + E_{Kmax} \quad (2.4)$$

Devrenin minimum akımı I_0 ; gelen fotonun enerjisi, foton sayısı (ışık şiddeti) katot yüzeyi ile doğru orantılı iken, anot-katot arası uzaklık ve metalin bağlanma enerjisiyle ters orantılıdır.

Devrede potansiyel gerilim varken katot(-), anot(+) uca bağlanmış ise anottan katoda doğru bir E alanı oluşur. Fotonların katottan kopardığı fotoelektronlar, bu elektrik alan vasıtasıyla anoda daha kolay giderler. Burada enerjinin korunumu gereği sisteme dışarıdan gelen enerji yani fotonun ve üretcin sağladığı enerjinin bir kısmı elektronun kopması için bağlanma enerjisine harcanır; kalan kısmı ise elektrona kinetik enerji olarak aktarılır.

$$E_{\text{fot}} + qeV = E_b + E_K \quad (2.5)$$

Üretcin gerilimi akımı belirli bir I_{max} değerine kadar artırılabilir. Bundan sonra gerilim artsada kopan tüm fotoelektronlar anoda ulaştığından akım artmaz. Bu akıma maximum akım ya da doyma akımı denir. Fotoelektronların hepsinin anoda ulaşmasını sağlayan potansiyel farka da doyma potansiyel farkı denir. Doyma akımı I_{max} ışık şiddetiyle doğru orantılıdır. Maximum akıma ulaşmışsa diğer değişkenlere bağlı değildir.

Devrede potansiyel gerilim varken katot(+), anot(-) uca bağlandığında katottan anoda doğru bir elektrik alan oluşur. Bu elektrik alan kopan fotoelektronların anoda gitmesini zorlaştırır. Üretcin gerilimi arttıkça bir süre sonra fotoelektrik akım kesilir. Fotoelektrik akımın durmasına neden olan bu potansiyel farkına kesme potansiyeli (V_k) denir. Gelen fotonun enerji ne kadar büyük olursa fotoelektronlara aktardığı kinetik enerji de o kadar büyük olur. Bu sebepten bu fotoelektronu durdurmak için daha büyük bir kesme potansiyeli gerekir. Ayrıca metalin bağlanma enerjisi ne kadar az olursa fotoelektronlara aktarılan kinetik enerjisi de o kadar büyük olur ve kesme potansiyeli yine artar.

Kesme potansiyeli; gelen fotonun enerjisiyle doğru, metalin bağlanma enerjisiyle ters orantılıdır. Fotoelektronların durması için fotoelektronlara aktarılan kinetik enerji, üretcin fotoelektron üzerine sağladığı potansiyel enerji eşit olmalıdır. Bu durumdaki potansiyel kesme potansiyelidir.

$$q_e \cdot V_k = E_{\text{max}} \quad (2.6)$$

$$q_e. v_k = \frac{1}{2} m_e V_{max}^2 \quad (2.7)$$

Einstin'in fotoelektrik denklemi

$$h\nu = h\nu_0 + \frac{1}{2} m_e v_{max}^2 \quad (2.8)$$

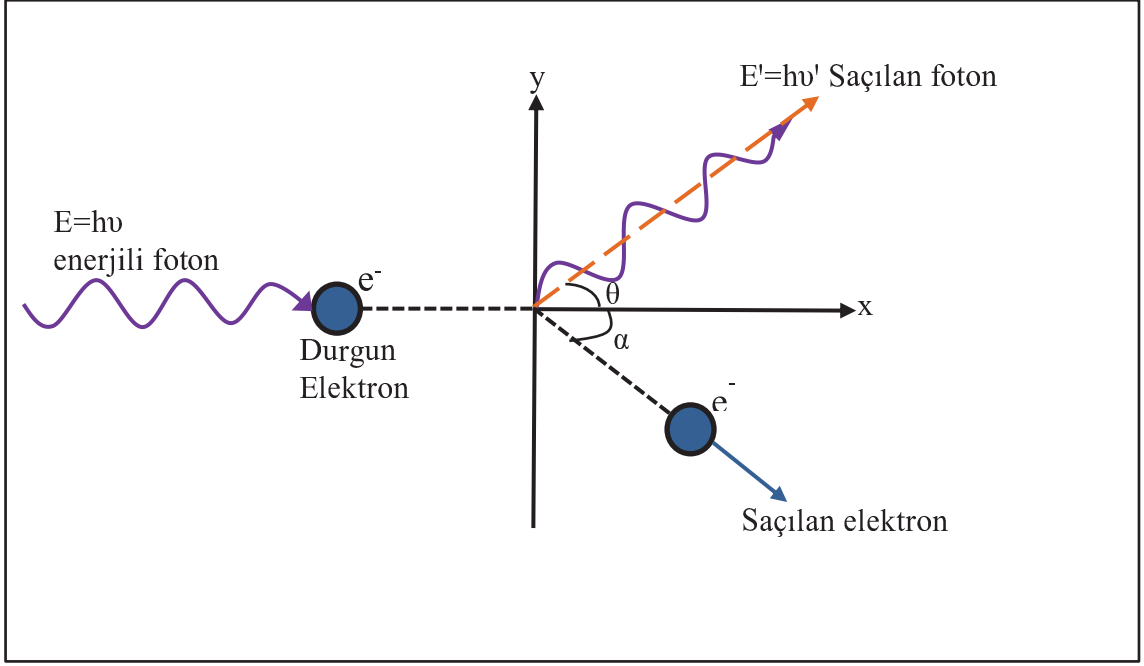
$$h\nu = w + q_e V_k \quad (2.9)$$

2.2.3.2. Compton Saçılması

Atoma zayıf olarak bağlı bulunan dış yörünge elektronları, enerjisi kendisine göre çok daha büyük olan bir X-ışınıyla etkileştiğinde saçılmaya uğramaları sonucu meydana gelen olaydır. Bu çarpışma sonucu foton elektrona çarpıp saçılırken elektronda başka bir tarafa saçılır. Bu olay iki bilardo topunun esnek çarpışmasına benzetilebilir. Elektronun belirli bir kütlesi mevcut olduğundan momentumun korunumu gereği fotonun tüm enerjisini alması mümkün değildir. Elektronla foton arasında saçılırken oluşan açı gelen fotonun enerjisine bağlıdır. Compton saçılmasında toplam enerji ve toplam momentum korunurken, çarpışma sonrası fotonun enerjisi, frekansı ve momentumu azalır dalga boyu ise artar. Foton ışık hızıyla hareket ettikleri için çarpışma öncesi ve sonrası fotonun hızında bir değişim olmaz. Gelen fotonun dalga boyuyla saçılan foton dalga boyu arasında meydana gelen farkı;

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos\theta) \quad (2.10)$$

denklemleriyle ifade edilir. Bu ifadedeki h/mc compton dalga boyunu verir.



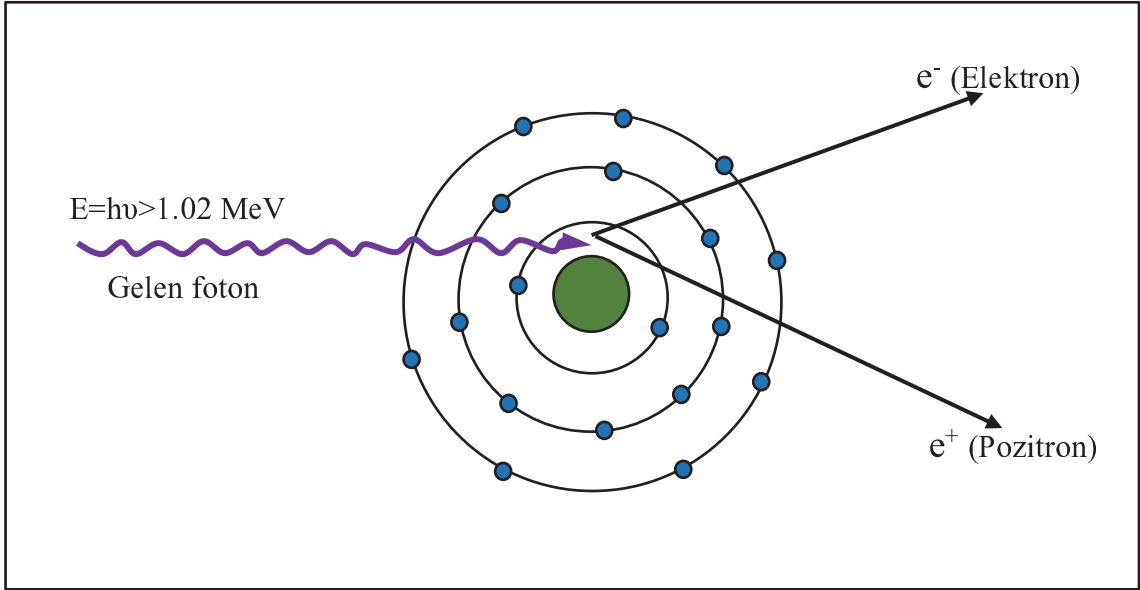
Şekil 2.6. Compton olayının şematik gösterimi

2.2.3.3. Çift Oluşumu

Enerjisi yeteri kadar büyük olan foton çekirdeğe çok yakın geçtiğinde fotonun enerjisi biri pozitif diğeri negatif yüklü iki parçacığa dönüşür. Foton yok olurken bir elektron-pozitron çifti oluşur. Yani elektromanyetik dalgadan madde oluşur. m_{e+} pozitronun kütlesi, m_{e-} elektronun kütlesi, T_{e+} pozitrona aktarılan kinetik enerji, T_{e-} elektrona aktarılan kinetik enerji olmak üzere;

$$h\nu = m_{e+} + m_{e-} + T_{e+} + T_{e-}$$

Çift oluşum olayını meydana gelebilmesi için fotonun enerjisinin en az 1,02 MeV olması gerekmektedir. Foton bundan daha büyük bir enerjiyle geldiğinde fotonun geriye kalan enerjisi elektron ve pozitrona kinetik enerji olarak aktarılır.



Şekil 2.7. Çift oluşumu olayının şematik gösterimi

2.2.4. Radyasyon Birimleri

- **Röntgen:** Bir ortamda bulunan radyasyon düzeyini belirlemek için o ortamda mevcut bulunan radyasyon miktarı ölçülür. Bu, X veya gama ışınının havada neden olduğu iyonizasyon miktarıdır. 1 Röntgen (R) 0,001293 gramlık havada 1 elektrostatik birimlik iyon oluşturan X veya gama ışını miktarı olarak tanımlanır. Radyasyonun şiddetini değil sayısal olarak miktarını ölçer. Mili ve mikro alt birimleri mevcuttur.
- **REP(Röntgenin Fiziksel Eşdeğeri):** X ya da gama ışınının 1 gram havada oluşturduğu iyonizasyona eşdeğer iyonizasyonu 1 gram dokuda oluşturan radyasyon miktarı olarak tanımlanır.
- **RAD (Absorbe Edilen Radyasyon Dozu):** Radyasyona maruz kalan 1 gram materyalde absorbe edilen 100 erglik enerji 1 rad olarak tanımlanır. Herhangi bir radyasyonu ölçebilir fakat şiddetini veya sayısını ölçmez. Uluslararası sistemde bunun yerine son zamanlarda Gray birimi kullanılmaktadır ve 1 Gray 1 kg materyal başına absorbe edilen 1 joule'lük enerjiye karşılık gelmektedir. 1 Gray 100 rad'a karşılık gelmektedir.
- **RBE (Bağıl Biyolojik Etkinlik):** Farklı radyasyon tiplerinin farklı biyolojik ortamlarda değişik etkiler gösterdiğini belirtmek için kullanılan bir terimdir. Yani

absorbe edilen X ya da gama ışınının eşdeğer biyolojik etki oluşturacak başka bir absorbe edilen radyasyona oranını ölçer.

$RBE = X$ veya gama ışını ile oluşturulan doz/ilgili ışın ile oluşturulacak doz

- **REM (İnsanda Röntgen Eşdeğeri):** Rem, rad olarak alınan dozun RBE çarpımına eşittir. X ve gama ışınları için Rem ve Rad eşittir. Rad, absorbe edilen radyasyon dozu; Rem biyolojik doz birimidir. Uluslararası birim sistemine göre son zamanlarda Rem yerine Sivert (Sv) kullanılmaktadır. 1 Sivert 100 Rem'e eşittir. Röntgen en sık olarak alan ölçerlerde; Rad, dokuların aldığı radyasyon miktarını birim olarak ölçmede; Rem ise radyasyonla çalışan kişilerin maruz kaldıkları değeri cep dozimetreleri ile ölçmek için kullanılır.
- **CURIE (Ci):** Radyoaktivite miktarını yani bir çekirdeğin bir başka çekirdeğe bozunmasını birim zaman başına ölçer. 1 saniyede $3,7 \times 10^{10}$ bozunma gösteren radyoaktivite birimine 1 Curie denir. Uluslararası sistemde Becquerel cinsinden ifade edilir. Bir saniyede bir bozunma gösteren aktivite birimi 1 Becquerel cinsinden ifade edilir.

Çizelge 2.2. Radyasyon birimleri

Büyüklik terimi	Eski (Özel) Birim	SI Birimi (Yeni Birim Sistemi)	Dönüşümler
Aktivite	Curie (Ci)	Becquerel (Bq)	$1 \text{ Ci} = 3,7 \times 10^{10} \text{ Bq}$
Işınlama Dozu	Röntgen (R)	Coulomb/kilogram (C/kg)	$1 \text{ R} = 2,58 \times 10^{-4} \text{ C/kg}$
Soğrulmuş Doz	Rad	Gray (Gy)	$1 \text{ Rad} = 0,01 \text{ Gy}$
Doz Eşdeğeri	Rem	Sievert (Sv)	$1 \text{ Rem} = 0,01 \text{ Sv}$

2.2.5. Radyasyon Dozu

Malzeme ve dokular tarafından absorbe edilen toplam radyasyon miktarı olarak tanımlanır. Radyasyon dozunun meydana getireceği etki maruz kalınan radyasyon miktarına, çeşidine ve süresine bağlı olarak değişmektedir. Soğurulmuş, eşdeğer ve etkin olmak üzere üç çeşit radyasyon dozu kullanılmaktadır (Korkut, 2010)

- **Soğurulmuş Doz:** Birim kütle başına depolanan enerjinin bir ölçüsüdür ve her türlü radyasyona uygulanır (Korkut, 2010).
- **Eşdeğer Doz:** Vücutta toplanan enerjinin ifadesidir. Düşük doz düzeylerinde radyasyonun tipine enerjisine göre biyolojik hasarlarını da içeren bir kavramdır. Radyasyon korunmasında kullanılan bir birimdir. Birimi sievert=1 joule/kg (Korkut, 2010).
- **Etkin Doz:** Doku veya organların aldığı dozun tüm vücut için yüklediği riski ifade etmek için kullanılan bir kavramdır (Korkut, 2010).

2.2.6. Radyasyonun Biyolojik Etkileri

İnsan vücudu günlük yaşamında çeşitli nedenlerle radyasyona maruz kalabilmektedir. Güneş, fön makinesi, elektrikli ısıtıcı, tıbbi görüntüleme cihazları birer radyasyon kaynağıdır. İnsan bu kaynaklardan gelen radyasyonu dokularla etkileşmesi sonucu alabileceği gibi radyoaktif maddeleri ağız yoluyla alması sonucu da radyasyon alabilir. Radyasyonun insan vücuduna etkileri alınan radyasyonun şiddetine ve süresine bağlı olarak uzun ya da kısa vadede ortaya çıkabilir. Radyasyon madde içerisinden geçerken etkileşerek nasıl iyonlaşmaya sebep oluyorsa benzer etkileri insan vücudundan geçerkende oluşturarak canlıya zarar verebilir. Radyasyonun etkileri radyasyonun tipine, dozuna, ortamın özelliklerine, maruz kalınan süreye bağlı olarak değişir. Bu etkiler deride kızarıklık oluşturmaları gibi hafif sonuçlar doğurabileceği gibi ölümle sonuçlanabilen daha ağır neticelerde doğurabilir. İyonlaştırıcı radyasyonun enerjisi çok büyük olduğundan içinden geçtiği maddeyi iyonlaştırarak DNA yapısında değişikliklere yol açar. Doku ve organlara kalıcı hasarlar verebilir. Canlıda genetik bozukluk oluşturarak kalıtsal hastalıklara neden olurken gelecek nesillere geçen genetik bozukluklara da neden olabilir.

Radyasyonun bu etkilerinden dolayı radyoaktif maddelerin doğaya rasgele bırakılması ekolojik dengeyi etkilemektedir. Radyasyonun zararlarından kaçınmak için tıbbi görüntüleme cihazlarıyla araya zaman girmeden üst üste çekim yaptırmaktan kaçınılması gerekmektedir. Aynı zamanda radyasyonla deney yapan bilim adamlarının, radyoloji bölümünde çalışan uzmanların, nükleer santraller çalışanlarının gerekli önlemleri almaları hayati önem taşımaktadır.

2.2.7. Radyoaktif Parçacıklarla İlgili Çalışmalar ve Durdurma Teorisine Genel Bakış

Radyoaktif parçacıkların keşfinden(1895) bilgisayar fiziğinin atılım yaptığı 1970'lere kadar olan son yüzyıllık süreci gözden geçirelim.

İyon: Hareket eden atom, ister yüklü ister nötr olsun; atom numarası Z_1 , kütlesi M_1 , enerjisi E ve hızı E/M_1 dir. Bu hız sadece bağıl hızları karşılaştırmak için kullanılır. Bu yüzden karesinin olması gerçeği genellikle ihmal edilir.

Atom: Atom numarası Z_2 , kütlesi M_2 olan herhangi bir hedef atom.

Durdurma Gücü: dE/dx olarak tanımlanır ve hedef içindeki iyonun enerji kaybının birim mesafedeki (x) enerji kaybına oranıdır. Madde içinden geçen yüklü parçacıkların enerjisini kaybetme hızına durdurma gücü denir.

Katı içerisinde iyonun yavaşlama teorisinin gelişimi, hem iyon hem de hedefin tanımlanma probleminin karmaşık olmasından dolayı zor oldu. İyon katı içerisine nüfuz ettikten sonra, elektronlarının bazılarında sıyrılır ve yük durumu hedefin bir fonksiyonu haline gelir. Hedef, iyonun gelişini hisseder ve elektronları hareket eden iyon etrafında polarize olur. İyonun yük durumu, daha ileriki hedef etkileri olan polarize olmuş hedefle modifiye edilir. Hedef atomların bazıları girilebilir durumların kuantum dışlamalarına sebep olan iyonun elektron bulutu boyunca nüfuz eder. Son olarak, bu etkilerin tümü sabit bir şekilde değişen iyon hızına bağlıdır.

2.2.7.1. Radyoaktif Parçacıklarla İlgili İlk Çalışmalar (1899-1920)

Radyoaktif materyallerden enerji yüklü parçacıkların emisyonunun keşfinden hemen sonra, bu parçacıkların durdurma işleminde nasıl yavaşladığı üzerine bir ilgi

oluştı. 1898-1899 tarihleri arasındaki çalışmaları sayesinde Marie Curie “les rayons alpha sont des projectiles materiels susceptibles de perdre de leur vitesse en traversant la matiere” hipotezini ortaya çıkarmıştır. Metalik filmin kalınlığını değiştirerek, metalin yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak parçacığın enerji kaybını bulabilmiştir. Çoğu bilim adamı, bu parçacıklar filmlere nüfuz edebildiği için böyle deneylerin sonucunda atomun sırlarını ortaya çıkarabileceğini fark etmişlerdir. Parçacık enerji teorisini ortaya çıkarmak için gerçekleşen ilk denemeler henüz doğru bir atom modeli var olmadığı için sonuçsuz kalmıştır.

İki nokta yükün saçılması için ilk teorik yöntem, elektrik üzerine olan kitabında J. J. Thomson tarafından ortaya atıldı. Geleneksel parçacık enerji kaybı sembollerinin çoğu, enerji yüklenmiş parçacıklar arasındaki klasik coulomb saçılması için kapsamlı bir yöntemi tanıtan kitabına dayanabilir. Fakat, bu çalışmada gerçek durdurma gücünü hesaplamaya teşebbüs etmemiştir.

Maddeyle radyoaktif parçacık etkileşimlerinin yeterli oranda deneysel kanıtı, bir atom modeli geliştirmek için girişimde bulunan kişilerin odak noktalarından biri olan durdurma gücü teorisini gerçekleştirmek için sonraki on yıl içerisinde bir araya getirilmiştir. 1909’da Geiger ve Marsden, ince bir altın folyonun içerisinde geçen alfa parçacıklarının nüfuz etmesini ve arka tarafından ortaya çıkan izlerin yörüngesel yığılmalarını tespit etmeye çalışıyorlardı. Onlar, iletilmiş ışının açısal yayılması sayesinde folyo içindeki yüklerin dağılımını belirlemeyi umuyorlardı. Onların geri saçılan parçacıkları arama önerisini kimin yaptığıyla ilgili çelişkili tartışmalar vardı, ancak daha sonraki şaşırtıcı veriler atomik yapı boyunca zıt yönde hareket eden akım olduğunu ortaya çıkarmıştır. Onlar ağır alfa parçacıklarının yaklaşık %0.1 inin hedeften geri yansıdığını ve veri istatistiklerinin analizinden böyle yansıma olaylarının izole olmuş tek çarpışmalardan kaynaklandığını rapor etmişlerdir. İki yıl sonra, Rutherford teorik olarak geri yansımanın gerçekte basit bir olay yüzünden olduğunu gösterebilmiştir ve bunu ve elektron yansıma verilerini analiz ederek Al atomlarının çekirdeğinin yaklaşık 22’ lik bir yüke ve Pt’ nin 138’ lik bir yüke sahip olması gerektiğini hesaplayabilmiştir.

Cavendish laboratuvarının prestijli yöneticisi J. J. Thomson ve Rutherford’ un Manchester Laboratuvarı için Cavendish laboratuvarını terk eden daha çiçeği burnunda doktora öğrencisi bilim adamı Niels Bohr, hemen hemen ardı ardına madde tarafından

yüklenmiş parçacıkların durdurulması analizlerini yayınladılar. Bu çalışmalar, atom modeli üzerine onların farklı fikirlerinin çoğunu göstermektedir. Thomson, Geigerin (Geiger ve ark., 1909) alfa parçacığı geri yansıma ölçümlerini ve atomik pozitif yükün atom içinde yoğunlaştırılması gerektiğini vurgulayan Rutherford' un ağır parçacık yansıma teorisini akıl almaz bir şekilde göz ardı etmiştir. Ama ağır pozitif yüklü çekirdeğe sahip nükleer atom Bohr' un fikirlerinin temelini oluşturmaktadır.

Bohr' un ilk çalışması önemlidir, çünkü ilk kez durdurmanın birleştirilmiş bir teorisi denenmiştir ve biz bu çalışmada durdurma teorisinin önemli kısımlarına rastlayabiliriz:

- Enerji yüklü bir parçacık (bir nokta yük) bir katının kuantize olmuş elektron plazmasına (inelastik enerji kaybı) enerji kaybettirmesinin nasıl olduğu?
- Bu ilişkiyi parçacık tarafından neden oluşan elektron plazmasının bozukluklarıyla nasıl birleştirildiği?(hedef polarizasyonu)
- Plazma içinde sınırlı hareket eden atom için nokta yüklü plazma ilişkisini onunla nasıl ilişlendirilir?
- Niçin hareket eden atomun iyonizasyon ilişkisi tahmin edilebilir ve nasıl hem iyonize hem de elektron plazması içinde olduğu zaman onun elektronlarını tanımlanabilir?
- Onun geçtiği ağır hedef çekirdeklere sahip hareket eden atomun gösterilen coulomb saçılması nasıl hesaplanır?
- Yukarıdakilerin hepsi için düzeltmeler nasıl yapılabilir?

Bunlar karşılaşılan problemlerin bir listesidir, ve bilimsel odaklar dış bilimsel zorlamalar yüzünden yıllardır onlar arasında gidip gelmektedir. Örnek verecek olursak, (a) 1920' lerde kuantal saçılmanın gelişimi, (b) 1930-40' larda nükleer fizyon çalışması, (c) 1950' lerde nükleer fizik çalışması, (d) 1960' larda materyal dönüşümü için iyon aşılması için teknolojik uygulamalar ve 1970' lerde materyal analizlerinde iyon ışınlarının kullanımı. Bu inişli çıkışlı ilgi, problemin tekrarlayan önemi yüzünden ve katılardaki enerji yüklü atomların giriciliğinin hesaplanmasındaki zorluklar yüzünden devam etti. Aşağıdaki alanda tarihi mihenk taşlarının bazılarını inceleyeceğiz.

Hem Thomson hem de Bohr parçacığın hızının, onun enerjisinden daha önemli olduğu sonucuna vardı. Bohr' un orjinal bulgularından birisi maddeden geçen iyonların

enerji kaybının iki bileşene ayrıldığını ifade etmesidir: nükleer durdurma (atomik pozitif çekirdek ortamındaki enerji kaybı), elektronik durdurma (ışık elektronları ortamındaki enerji kaybı). Bohr, ilk makalesinde, elektronik durdurmanın radyoaktif kaynaklar tarafından emilmesi gibi enerji yüklü ışık iyonları için nükleer durdurmadan daha büyük olduğunu fark etti. Bu sonuç hedef elektronlar ve çekirdeğin miktarı ve sadece bağlı kütleyi hesaba katarak geri tepme kinematiklerine bağlıdır.

Bohr, harmonik osilatörlere transfer edilen enerjiyi hesaplayarak ve optik spektrumlardan elde edilen yörünge sıklığına hedef elektronları bırakarak atomik yapı ile durdurma teorisini ilişkilendirdi. O, ağır atom hedefleri için deneysel olarak elde edilmiş durdurma gücünü bu hedeflerdeki çoğu elektronun gösterilen optik verilerden çok daha sıkı olduğunu ortaya çıkardı. Bohr, ayrıca fark etti ki, Thomson'un enerji kaybı işlemi hesaplamaları madde içindeki iyonun yük durumuyla ilgili bilgi kısıtlılığından dolayı ciddi anlamda yetersizdi, örneğin hedef ortamıyla etkileşimindeki etkili yük durumu.

2.2.7.2. Kuantum Mekaniği ve Durdurma Teorisi (1930-1935)

Durdurma gücünü anlamada büyük bir ilerleme 20 yıl sonra Bethe (Bethe, 1930; Bethe, 1932; Bethe ve ark., 1934) ve Bloch (Bloch, 1933)' un problemleri kuantum mekaniği perspektifinden bakarak tekrar gündeme taşıdığı zaman gerçekleşti ve onlar kuantize olmuş bir ortamda çok hızlı parçacıkları durdurmak için temel eşitlikler üzerine Bohr yaklaşımlarını ortaya çıkardılar. Bu teorik yaklaşım, $10 \text{ MeV/akb} - 2 \text{ GeV/amu}$ hızına sahip ışık parçacıklarının enerji kaybını değerlendirmek için temel bir metot olarak etkisini sürdürmektedir. Hızdaki bu sınırlama, bu hızlar altında iyon fırlatıcısının tamamıyla onun elektronlarından kurtulamadığı (teoriyle kabul edilen) ve bu hızlar üstünde ilave bağlı düzenlemeler olduğu içindir.

2.2.7.3. Fizyon Parçalanmalarının Analizleri (1938-1941)

1930' ların sonunda nükleer parçalanma sonucu ortaya çıkan enerji yüklü ağır parçacıkların ve nükleer fisyonun keşfi ile enerji kaybı üzerine yeniden bir ilgi ortaya çıkmıştır. Bohr (Bohr, 1940), Lamb (Lamb, 1940), Knipp (Knipp ve ark., 1941), Teller ve Fermi (Fermi, 1940) tarafından çeşitli çalışmalar yayınlanmıştır.

Fizyon parçalanma verilerinden sunulan problem kısmi olarak soyulmuş ağır iyon etkileşimlerinin nasıl saptandığıdır. Bu “etkili yük” problemi olarak adlandırılır, çünkü eğer fırlatıcı için iyonizasyonun derecesi tahmin edilebilirse, geleneksel durdurma gücü teorileri kullanılabilir. Bohr; iyonun, iyon hızından daha düşük hıza sahip bütün elektronlardan sıyrılabilceğinin düşünülebileceğini ifade etmiş ve Thomas Fermi atomunu kullanarak;

$$Z_1^* = Z_1^{1/3} V/V_0 \quad (2.11)$$

olduğunu göstermiştir. Burada Z_1 iyonun atom numarası, Z_1^* hedef elektronlar için enerji kaybındaki etkili yük, V iyonun hızı ve V_0 Bohr hızıdır ($\approx 2 \times 10^8$ cm/s). Lamb (Lamb, 1940) Bohr ile aynı problemi düşündü ve benzer bir etkili yük yaklaşımı önerdi, fakat iyonların elektronlarının hızından ziyade enerjiye bağlı kaldı. Lamb, Thomas-Fermi atomlarını hesaba katarak durdurma gücü için benzer fakat daha az detaylı bir yöntem ortaya koydu. O, hedef elektron hız dağılımının fizyon parçalanmasının durmasını önemli ölçüde değiştirdiğini göstermiştir.

Fermi (Fermi, 1940) Lamb ve Bohr ile aynı şekilde düşünmüştür, fakat katının dielektrik plazmasına sahip yüklenmiş bir parçacığın ve parçacık tarafından ortamın elektriksel kutuplanması arasındaki ilişkiyi değerlendirmeye odaklanmıştır. Hedef ortamın bu kutuplanması ilk olarak Swann tarafından ortaya atılmıştır ve Fermi bu sıkıntılı problemi hesaplanabilir hale getirmiştir. O, durdurucu gücün evrensel olarak hedef yoğunluğuna orantılı, eşit –kütle- geçişi esasına göre olduğunu göstermiştir. Ölçeklenmiş durdurma gücü için detaylı bir örnek de Knipp ve Teller (Lamb, 1940) tarafından gösterildi ve bu bilim adamları başarılı bir şekilde H durdurma değerlerine eşit He iyon durdurma gücünü ölçeklendirmek için Bohr ve Lamb’ ın etkin yük konseptini kullanmışlardır.

Bu teorik çalışmalar fizyon parçacık probleminin sınırlı başarısı olarak kabul edileb. Temel olarak durdurma gücü için baskın etkiler hedef materyal ve iyonun hızıdır. Eğer iyonun durdurulmasını bilirsek, örneğin bir protonun durdurulması, bu iyonun materyal içindeki farklı iki hızdaki durdurulması orantılı olacaktır. Bu kanun çok sayıda iyon ve hızlarına uygulanabilir. Gerçekte, o öyle sık kullanılıyordu ki, onun teorik eksiklikleri itiraz eden birkaç makale yazılmıştır.

2.2.7.4. Serbest Elektron Gazındaki Parçacığın Durdurması (1947-1960)

1950'lerde hem yavaş parçacıklardan kuantize olmuş elektron plazmalarına enerji transferleri ve hem de hedef çekirdeğin enerji kayıpları ile ilgili temel makaleler vardır. Serbest bir elektron gazındaki parçacık durdurma çalışması, hedefin elektronlarını bir iyonun enerji kaybını hesaplamanın ilk adımını oluşturuyordu. Bu problem, optik veri analizleri ile hesaplanan yörünge frekanslarına sahip yüklü harmonik osilatörler olarak elektronları kabul eden Bohr'un ilk makalelerinde değerlendirilmiştir. Parçacığın elektron plazmasıyla bu etkileşimi kuantize olmuş plazma ve daha sonra Bethe (Bethe, 1930; Bethe, 1932) ve Bloch (Bloch, 1933) tarafından yapılan Thomas-Fermi atom modeline dönüştürüldü. Göreceli parçacık durdurma gücünün ($>10\text{MeV/akb}$) mükemmel bir derlemesi Ahlen (Ahlen, 1980) tarafından gerçekleştirildi.

Daha sonra Fermi, hızlı yüklenmiş bir parçacığın hedefin klasik elektron ortamını nasıl polarize edeceğini ve parçacık/plazma etkileşimini değiştireceğine odaklandı (Fermi, 1940). Bu çalışma Fermi ve Teller tarafından dejenere serbest elektron gazına uyarlandı ve onlar yavaş parçacıklar için enerji kaybının parçacığın hızıyla orantılı olduğunu keşfettiler. Bohr (Bohr, 1948), parçacığın ötesinde enerjinin bir çarpışma uyarıcısı olacağını izah etti ve bu durum Bohr (Bohr, 1948), Neufeld ve Ritchie tarafından derinlemesine değerlendirildi. Yüklü bir elektron plazmasına nüfuz eden yüklü bir parçacık durumunun tam bir teşhisi Lindhard (Lindhard, 1954) yaklaşımı serbest elektron gazına sahip nispi olmayan parçacık ilişkilerine odaklanır bu yaklaşımı izleyen çıkarımlar üzerine tam bir değerlendirme sağlamaktadır:

- Serbest elektron gazı, toplam yük nötralliğine sahip düzenli pozitif zeminde sıfır sıcaklıktaki elektronlardan oluşur (tek elektronlar düzlem dalgalar ile tarif edilmektedir).
- Önceki elektron gazı sabit yoğunluktadır ve bu da metallerdeki iletkenlik elektronlarına yakın bir yaklaşım olarak düşünülebilir.
- Homojen elektron gazındaki yüklü parçacık etkileşimi küçük bir karışıklıktır.
- Bütün parçacıklar göreceli değildir.

Linhard yaklaşımı literatürde oldukça fazla atıf aldı, çünkü bu yaklaşım katılara iyon nüfuz etmesinin ilk genel teorisini oluşturmaktaydı (Lindhard, 1963) ve maddedeki iyonların elektronik durdurmasını hesaplamak için bir temel olarak kullanılmaktaydı.

Hedef çekirdeğin enerji kaybı, temel olarak iki çarpışan atom arasında gözlenmiş Coulomb çarpışmalarının çalışmasıdır. 1950'lerde, hedef çekirdeğe iyonun elastik enerji kaybında büyük ilerlemeler gerçekleştirildi. Bohr, gözlenmiş Coulomb potansiyelini hesaplamak için Thomas-Fermi modelini kullanan 1948'deki ilk çalışmaların çoğunu özetledi (Bohr, 1948), atomlar arasındaki $V(r)$;

$$V(r) = (Z_1 Z_2 e^2/r) \exp(-r/a) \quad (2.12)$$

ile ifade edildi. Burada Z_1 ve Z_2 atom numaralarıdır, r onların ayrıklığıdır ve a bir ayırma parametresidir. Bu ayırma parametresi takip eden teorisin büyük bölümünde önemli bir kavramdır. Bu, önemli oranda dış elektronlar üzerine nükleer pozitif yükün etkisini azaltarak bir atomun boyutunu artırır, çünkü iç elektronlar çekirdek yükünün bir miktarını korur. Bu ayrıklık parametresi sonradan, iç elektron ayrıklığından dolayı bir noktadan potansiyelin azalması olan "ayrıklık fonksiyonu"na neden olur. Ayrıklık parametresi belirlenir belirlenmez klasik ışıma ve enerji transferi hesaplanabilir. Bohr mantıklı bir tahminin aşağıdaki gibi olabileceğini belirtmiştir:

$$a = a_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2} \quad (2.13)$$

Ama bu yaklaşım türetilmemiştir. Firsov çok daha pratik bir yaklaşım elde etti ve iki çarpışan Thomas-Fermi atomlarının (Firsov, 1958) atomlar arası potansiyellerini elde etmek için sayısal teknikler kullandı. Atomik ayrımın bir fonksiyonu olarak potansiyelin sayısal değerlerini bulduktan sonra, Firsov, Thomas-Fermi ayrıklık uzunluğunu kullanarak bu potansiyelleri ayarladı ve en uygunun aşağıdaki gibi elde edildiğini buldu.

$$a = a_0 / (Z_1^{1/3} + Z_2^{1/3})^{2/3} \quad (2.14)$$

1950'lerde dikkat çeken başka bir problem, malzemenin içinden geçtiği sırada iyonizasyon derecesiydi. Daha önceden bahsedildiği gibi, Bohr ve diğerleri, iyonların iyon hızından daha az olan yörünge hızının elektron kaybettiğini ortaya çıkarmıştır. O, iyon yük kesrinin, Z_1^*/Z_1 ;

$$Z_1^*/Z_1 = V/(V_0 Z_1)^{2/3} \quad (2.15)$$

olduğunu ifade etti.

Bu ilişki, atomların elektronik yük yoğunluklarının $Z^{-1/3}$ le orantılı olan uzunluğun ortak birimiyle benzer olduğunu varsayan Thomas-Fermi atomundan gelmektedir. Yük yoğunluğu Z^2 ile orantılıdır ve $Z^{7/3}$ olarak toplam bağlanma enerjisi ölçeği ile orantılıdır. Bu yüzden elektron başına bağlanma $Z^{4/3}$ ile ölçeklenir ve elektron hızları $Z^{2/3}$ ile orantılıdır. Lamb elektron bağlanma özelliğinin önemli bir kriter olduğunu ileri sürmektedir (Lamb, 1940), fakat Bohr, onun elektron hızı olduğunu kabul eder. Northcliffe aynı hızda ve aynı hedefte protonların durdurma gücüyle her bir iyon/hedef/enerji deneysel durdurma gücüne bölerek çok sayıda deneysel veri elde etmiştir. Bu oran düzensizlik teorisinde $(Z_1^*)^2$ olarak ölçeklenmelidir ve burada Z^* iyonunda geride kalan elektronların sayısıdır. Bohr, çok miktarda verinin arasındaki ilişkiyi kullanarak açıklanabileceğini ileri sürdü, bu ilişki;

$$(Z^*/Z) = 1 - a \exp \left[\frac{b}{Z^{2/3}} \cdot \frac{v}{v_0} \right] \quad (2.16)$$

ile ifade edilir ve burada a ve b uygun sabitlerdir. İfade Bohr ilişkisi olarak genişletilir (a=1 varsayıldı). 1950'lerin sonuna kadar olan durum aşağıdaki gibi özetlenebilir:

- Kuantize olmuş elektron plazmasında yüklü bir parçacığın enerji kaybının iyi bir yöntemidir bu teori. Teori yük hakkında ortamın hem kutuplanmasını hem de atomik maddede elektronlara elektron plazması ile parçacık etkileşiminin genişleme tartışmasını içerir.
- İki atom arasındaki saçılma çarpışması boyunca transfer edilen enerji ve atomlar arası potansiyellerin iyi bir hesabı yapılmıştır.
- Orta hız aralığı ($3v_0 < v_i < 30v_0$) için katılarda ağır iyonların etki yükünün iyi bir değerlendirmesi yapılmıştır ve burada v_i iyon hızıdır ve v_0 Bohr hızıdır.

Çözülmesi gereken problemler:

- Sonlu boyutlu bir iyonla etkileşme için elektron plazma nokta yük etkileşim teorisini nasıl genişletilir?
- Hareketli bir iyonun etkin yükü temel olarak nasıl ortaya çıkar? (burada etkin yük iyon yük durumu ve hedef kutuplanmasının toplamının bir kombinasyonu olarak tanımlanabilir.)

- Ve son olarak, istatistiksel atomlardan ziyade çok daha gerçekçi Hartree-Fock atomlarını kullanmak için yukarıdakilerin hepsi nasıl değiştirilir?

2.2.7.5. Durdurma ve Ağır İyonların Dizilimi İçin Teoriler (1963-1985)

1963' te durdurma ve oran teorisine ilk kez bütünleştirilmiş bir yaklaşımla Lindhard, Scharff and Schiott (Lindhard, 1963) tarafından yapıldı ve onların yaklaşımı LSS-teorisi olarak adlandırıldı. Bu çalışma bütün parçaları bir araya getirdi ve köprüleme yaklaşımları yapıldı ve böylece durdurma ve dizilim dağılımlarının hesaplamaları, ilk defa, tek model içinde gerçekleştirildi. Bu dikkate değer başarı, LSS teorisinin büyük eş değerlerinin bazılarında detaylı bir şekilde elde edilerek sonraki baskılarıyla birlikte Lindhard ve çalışma arkadaşları tarafından 10 yılın üzerinde çalışmanın bir sonucudur. LSS teorisi istatistiksel atom tabanlı durdurma ve dizilim teorisinin zirve noktasıdır. Bu teori ile iki çarpan içinde katılarda iyonların oranını tahmin etmek mümkündür ve o, maksimum durdurma gücünün üzerinde ve çok geniş sayıda atomik örnekte uygulanabilir olduğu için dikkate değer bir başarıdır. O Thomas-Fermi atomlarına bağlı olduğu için, ne tam soyulmuş (yalın) ne de nötr olan ara bölgedeki çok elektronlu atomlar için geçerlidir. Teori doğal olarak bombardıman etkisi göstermez.

1960 ve 1970'lerde sayısal metotları geleneksel teorik yaklaşımlarla birleştirerek yeni ilerlemeler sağlandı. Bilgisayarların kullanımı teorideki çok daha gerçekçi Hartree-Fock atomlarının birleşmesine imkân tanıdı ve önemli gelişmelere neden oldu. Bu önemli adımlar elektronik durdurmada Rousseau, Chu ve Powers (Rousseau ve ark., 1970) tarafından ve nükleer durdurmada Wilson, Haggmark ve Biersack (Wilson ve ark., 1977) tarafından başlatıldı.

Bu teorik adımları tahmin etmenin bir yolu birinin durdurma gücünü hesaplayabileceği doğruluğu tahmin etmektir. 1930'larda Bethe-Block'un çalışmasından sonra yüksek hızlı protonların durdurulması hemen hemen %20'ye kadar hesaplanabildi. 1950'lerin sonlarına kadar Whaling (Whaling, 1958) tarafından yayınlanan kapsamlı bir çalışma yok denecek kadar az bir protondan daha ağır herhangi bir şeyi hesaplayabileceğini izah ediyordu. Bu görüş, düşük enerjili yoğun iyonların durdurulması yaklaşımını ortaya çıkaran 1963' deki LSS teorisi sayesinde aniden

değiştirdi. Bu yaklaşımla, çoğu durdurma gücü iki veya üç çarpanla hesaplanabiliyordu ve temel elementli hedeflerdeki bu iyonların oranları iki çarpanla hesaplanabiliyordu.

LSS teorisi atom-atom çarpışmalarının istatistiksel modelleme tabanlı kapsamlı teorilerin sonuncusudur. Gelecek 20 yılda durdurma ve dizilim hesaplamalarındaki gelişmeler, sayısal teknikleri kullanarak ve de Bohri Firsov ve Lindhard tarafından kullanılan yaklaşımların bazılarını ortadan kaldırarak gerçekleştirildi. Önde gelen uygulamalardan birine sahip olan yeni bir teorik bakış açısı Brandt ve Kitagawa (Brandt ve ark., 1997) tarafından ortaya atıldı ve onlar burada katılar içinde dolaşan iyonların iyonizasyon derecesi ile ilgili önerilerini yeniden ele aldı. Bohr'a göre iyonun anlık hızından daha az yörünge hızına sahip iyon elektronlarının, onun yüksek hızlı iç elektronlarından ayrılarak yalın hale geleceğiydi. Brandt ve Kitagawa'ya göre bu yalın hale gelme (soyulma) kriteri, katının sadece fermi hızına yakın iyonların elektron hızını dikkate almak için modifiye edilmesi gerekliliğiydi. Onlar daha sonra doğruluğu kanıtlayacak bu yeni kavramın tam değerlendirmesine olanak sağlayacak oluşumu geliştirmek için çabaladılar.

2003'deki durdurma gücü ağır iyonlar için %5 - %6 doğrulukla ve yüksek hızlı hafif iyonlar için %2'den daha iyi oranda hesaplanabilir. Amorf elementel hedefler için dizilim dağılımı hemen hemen aynı doğruluğa sahiptir. Maddedeki iyonların dizilim ve durdurma alanlarında daha kapsamlı bilgi edinmek için aşağıdaki bilimsel makaleler tavsiye edilir. Bohr' un (Bohr, 1948) klasik görüşü ilk 50 yıllık çalışmada öğrenilen her şeyi içine alır ve nispeten anlaması kolaydır. Diğer görüşlerse Fano (Fano, 1963); Martin, Jackson (Martin ve ark., 1962, Jackson, 1975), Bichsel (Bichsel, 1970), Sigmund (Sigmund, 1975), Ahlen (Ahlen, 1980), Ziegler ve arkadaşları (Ziegler, 1978; Ziegler, 1980; Ziegler ve ark., 1982, Ziegler ve ark., 1984) ve Uluslararası Radyasyon Birimleri ve Ölçümleri Komisyonu tarafından ortaya atılmıştır.

2.3. Atom Başına Yer Değiştirme (DPA)

Radyasyon hasarının hesaplanan bir ölçüsü olan DPA; radyasyonun tipini, dozunu ve radyasyona tepki gösteren malzemenin bazı ölçülerini içerir. DPA, bu hasar enerjisi tarafından kendi örgü konumundan durgun arayer konumuna kalıcı olarak kaç atomun geçebileceği olasılığı açısından ışınlanan parçacıklar tarafından kaplanan

malzemenin hasar enerjisinin bir ölçüsüdür. Her bir ayrı radyasyon hasar olayı, ana zincir atomu yeterli enerjiye sahip olsun olmasın çarpışmada bir çağlayan üreten komşu atomlara enerji verir. Çarpışma çağlayanının etkilenen kısmında birçok atomun kendi örgü konumundan yeri değişir, fakat birkaç piko saniye içinde yer değiştiren atomların birçoğu boş konumlarına yerleşir ve böylece oluşan hasarın birçoğu düzelir. Çağlayan bölgesi sakinleştikten sonra kalıcı olarak yeri değişen atomların sayısı başlangıçta yeri değişen atom sayısının çok küçük bir kısmıdır. Bu küçük kısım kısmen hesaplanan DPA değeri için ortaya çıkan kusurun verimi olarak adlandırılır ve malzemeye, radyasyon kaynağına ve radyasyon şartlarına bağlı olarak değişir. Tipik olarak nükleer reaktör uygulamaları ve dozları için ısıtılmış radyasyondaki gerçek hasar hesaplanan DPA ile ölçeklenir. Böylece DPA farklı nükleer reaktör ortamlarında aynı malzemenin ısıtılmasında radyasyon hasarının etkileri ile ilişkili son derece kullanışlı bir parametredir.

2.4. Radyasyonun Elektronik Malzemelere Etkileri ve Kusurlar

2.4.1. Radyasyon Hasarı

α , β ve γ ışınları gibi yüksek enerjili radyasyonların yanı sıra elektron, proton ve nötron gibi yüksek enerjili parçacıkların kristal örgüler ile etkileşimleri boşluklar, kendiliğinden oluşan arayer durumları, iyonlaşma ve elektron uyarımları gibi bozukluklar/kusurlarda artışa neden olur. Işınlama nedeniyle malzemede oluşan mikroskobik kusurlar radyasyon hasarı olarak adlandırılır. Malzemenin makroskobik özelliklerini modifiye eden bu kristal kusurları radyasyon etkileri olarak adlandırılır.

Özellikle yüksek enerjili ($E \geq 0.1$ MeV) nötronlarda, yoğun nükleer radyasyonun yol açtığı radyasyon kusurları aşağıda sıralanmıştır.

- Boşluklar
- Arayer durumları
- Maddede gerçekleşen değişim ile oluşan kirlilik atomları
- Yüksek enerjili durumlardaki atomların bölgelerindeki termal yüklü alan
- Birincil ve ikincil çarpışan atomlar tarafından oluşturulan kendiliğinden arayer oluşumu, boşluklar, yer değiştiren atom bölgelerinde oluşan uzanım bölgesi
- Kümelenmiş boşluk bölgelerindeki tükenim alanları

- Atomlardan yoksun büyük alanlardaki eksiklikler
- B, Ni ve Fe elementlerini içeren $B_{10}+n_1 \longrightarrow Li_7+He_4$; $Ni(n,\gamma)Ni_{59}$ & $Ni_{59}(n,\alpha)Ni_{56}$ gibi reaksiyonlardan (n, α) elde edilen He gibi gazla doldurulmuş sabit boşluklardan oluşan çukurlar.
- Kendi yerinde bulunan sabit atomlar ve hareket ederek yeri değişen arayer atomları arasındaki çarpışmalardan sonra boş kalan yerleri dolduran arayer atomlarının dağılımları ve örgü titreşimleri boyunca onların enerjilerinin yok olması ile oluşan yerdeğiştiren çarpışmalar.

2.4.1.1. İlk Çarpışmayla Yeri Değişen Atom (PKA)

Yüksek enerjili nötron gibi yoğun bir radyasyonla kendi örgü pozisyonundan ayrılan ya da yeri değişen ve boşluk oluşturarak uzak bir arayer pozisyonuna yerleşen bir örgü atomu PKA olarak adlandırılır. Bu süreç Frenkel çiftlerinin oluşmasına yol açar. Yeterli enerjiye sahip bir nötron, yerdeğiştirme çağlayanlarına yol açan çarpışmaları oluşturan bu PKA'lerden bir dizi üretir. PKA'lar tarafından yeri değişen atomlar ikincil çarpışan atomlar olarak adlandırılır. Böylece yüksek enerjili bir nötron, çok sayıda atomik yerdeğiştirme ile sonuçlanan çok sayıda ikincil çarpışmaya yol açan birçok PKA'nın oluşmasına neden olabilir.

Amacımız basit modeller kullanarak atom başına yerdeğiştirmeyi (DPA) hesaplamaktır ve böylece değerlendirilen DPA'nın malzemelerin mekaniksel, fiziksel, termal ve elektriksel vb. makroskobik özelliklerinde değişikliğe neden olabildiğini göstermektir. Çoğu atomik yer değiştirmeler nötron-kafes etkileşimleri nedeniyle meydana gelir fakat çukurlara yakınlığından dolayı radyasyonun çoğu sırasında kendi yeri dışındaki kusurların büyük bir kısmı tavlandığı için sadece küçük bir kısmının geride kalabileceğine dikkat etmek gerekmektedir.

2.4.1.2. Radyasyon Hasar Modeli

Kinchin ve Pease modeli atomik yerdeřiřtirmeleri hesaplamak için basit bir modeldir. Bu modeli tartıřmadan önce yüksek enerjili bir nötron (kütlesi m) ve kütleri M olan örgü atomu arasındaki çarpıřmayı düşünelim.

E_n =nötronun enerjisi olmak üzere, atom nötrondan aktarılan T enerjisi ile savrulur. Fakat E_d (yerdeřiřtirme eřik enerjisi) eřik enerjisi vardır ve T enerjisi aktarılan atomun yeri deęiřecektir ve sadece $T > E_d$ durumunda atom PKA haline gelir (E_d çok küçüktür ve deęeri ~ 25 eV dir).

Saçılma iřleminde harcanan enerji önemsiz kabul edilirse artık nötron ($E_n - T$) lik bir enerjiye sahip olacaktır. ($E_n - T$) enerjili bir nötron ve T enerjili bir PKA dięer çarpıřan atomları (daha fazla çarpıřmayı) meydana getirir.

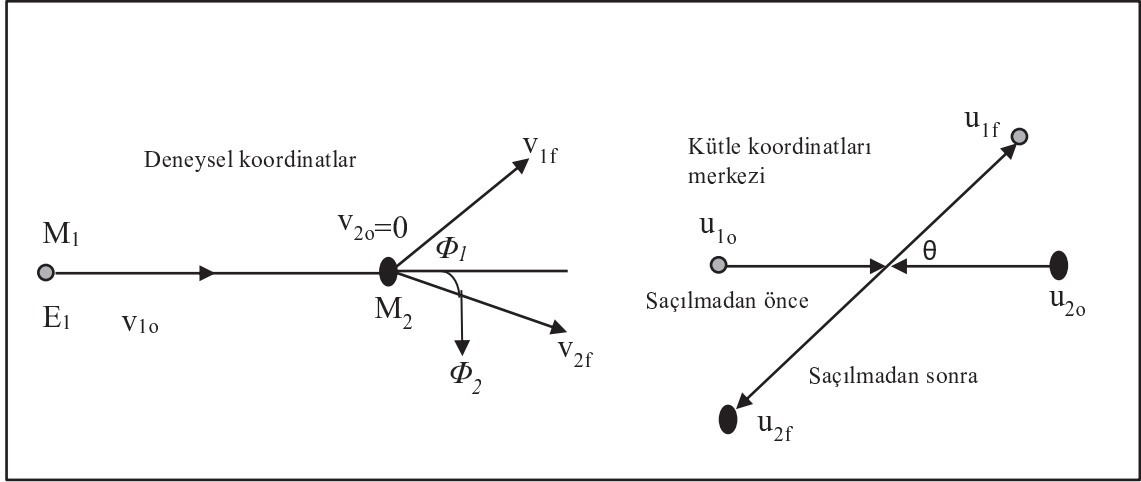
Çizelge 2.3. Yerdeęiřtirme Eřik Enerjileri (E_d)

<i>Element</i>	Cu	Al	Ag	Au	Pt	Ni	Fe	Mo
<i>E_d, eV</i>	22	16	28	36	37	24	24	37

İzotropik elastik saçılmalar için:

$$v_{2f}^2 = \frac{2M_1^2}{(M_1 + M_2)^2} V_{10}^2 (1 - \cos\theta) \quad (2.17)$$

$$E_2 = \frac{1}{2} M_2 V_{2f}^2 = \frac{2M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_{10} (1 - \cos\theta) \quad (2.18)$$



Şekil 2.8. Kichin ve Pease çarpışma modeli

$$E = T = \frac{1}{2} \Lambda E_n (1 - \cos \theta) \quad (2.19)$$

ve burada θ saçılma açısıdır.

$$Or. T_{max} = \Lambda E_n \quad (2.20)$$

Ve

$$\bar{T} = \frac{1}{2} \Lambda E_n \quad (2.21)$$

burada,

$$\Lambda = \frac{4A}{(1+A)^2} \quad (2.22)$$

$\Phi(E_n) = E_n$ enerjili nötronların akısını ifade etmektedir. Atomik yerdeğiştirmelerin oranı, R_d , hedef atomlarının sayısı (N) ve E_n enerjili nötronlar için yerdeğiştirme kesitleri ile orantılıdır.

$$R_d = N \sigma_d(E_n) \Phi(E_n) \quad (2.23)$$

$$DPA = \frac{R_d t}{N} = t \int_{E_d/\Lambda}^{\infty} \sigma_d(E_n) \Phi(E_n) dE_n \approx t \int_0^{\infty} \sigma_d(E_n) \Phi(E_n) dE_n \quad (2.24)$$

0' dan ∞ arasında deęişen enerjili nötronlar için. [$E_n < E_d/\Lambda$ ye sahip nötronlar atomlarda herhangi bir yerdeęişme meydana getirmez, çünkü $T \geq E_d$ olmalıdır. (yani $\Lambda E_n \geq E_d$ ile verilen maksimum transfer edilebilir enerji bir çarpışan atom meydana getirir)]

Atomik yerdeęiřtirmelerin $[(v(E))]$ sayısının toplamı ile verilen yerdeęiřtirme kesiti, E_d (gerekli minimum enerjidir) ile $T_{\max}(=\Lambda E_n)$ arasında E enerjili PKA' lar tarafından meydana getirilir. Etkileşim olasılığı E_n enerjili bir nötronla etkileşiminden dolayı (E, dE) enerjili bir PKA oluşumu için diferansiyel enerji transfer kesiti $\sigma_n(E_n, E)dE$ ile verilir.

$$\sigma_d(E_n) = \int_{E_d}^{\Lambda E_n} \sigma_d(E_n, E) v(E) dE \quad (2.25)$$

Not: Burada, yerdeęiřtirme meydana getirmek için PKA'nın minimum enerjisi E_d 'dir. ($\Lambda=1$, çünkü benzer atomlar arasındaki çarpışmalardır) ve PKA'nın maksimum enerjisi $T_{\max}(=\Lambda E_n)$ dır.

Kinchin ve Pease modeli ařaęıdaki varsayımlara dayanmaktadır:

- 2 cisimli elastik çarpışmalar
- Katı küre modeli
- Sadece $T \geq E_d$ durumunda atomik çarpışmalar meydana gelir
- Bir örgü atomunun yeri deęiřtięinde enerji harcanmaz
- Malzemelerde atomik dizilim rastgeledir (kristalografi yoktur)
- Ortadan kaybolmaz

K-P modeline göre,

$$v(E) = \frac{E}{2E_d} \quad (2.26)$$

veya

$$R_d = N \int_{E_d}^{\infty} dE_n \Phi(E_n) \int_{E_d}^{\Lambda E_n} \sigma_d(E_n, E) v(E) dE \quad (2.27)$$

Elastik saçılma teorisinden,

$$\sigma_d(E_n, E) = \frac{E_n^{el}(E_n)}{\Lambda E_n} \quad (2.28)$$

Burada elastik çarpışma kesiti nötron enerjisine, E_n , zayıf bir şekilde bağlıdır. Dolayısıyla,

$$R_d = \frac{N\Lambda\sigma^{el}(\overline{E_n})}{4E_d} \overline{E_n} \Phi \quad (2.29)$$

$$DPA = \frac{R_d t}{N} = \sigma_{el} \frac{\Lambda \overline{E_n}}{4E_d} \Phi_t \quad (2.30)$$

Burada, Φ toplam bütünleşmiş nötron akısıdır ve,

$$\Phi = \int_0^\infty \Phi(E_n) dE_n \quad (2.31)$$

ile ifade edilir.

Nötronların ortalama ağırlıklı enerjisi,

$$\overline{E_n} = \frac{\int_0^\infty E_n \Phi(E_n) dE_n}{\int_0^\infty \Phi(E_n) dE_n} \quad (2.32)$$

Radyasyon uygulanan malzemelerde çeşitli şekillerde deformasyonların meydana geldiği literatür incelendiğinde göze çarpmaktadır. Radyasyon malzeme içerisine nüfuz ettiğinde kristal atomlarıyla etkileşerek farklı şekillerde hasarlar oluşturur ve bu hasarlar kusur olarak tanımlanır. Kristal yapıyı oluşturan bu atomların radyasyona karşı göstermiş olduğu bu refleksif durum iyi bir şekilde anlaşıldığı takdirde malzemenin özellikleri hakkında bilgi sahibi olunmasını sağlar.

2.4.2. Radyasyonun Kristal Yapıda Meydana Getirebileceği Kusurlar

Kristallerin atomik düzeyde kusursuz olduğu varsayılrsa da gerçekte durum biraz daha farklıdır ve çeşitli kristaller eksik ya da fazla atom veya kirlilik atomu gibi mükemmel dizilimi bozan bol sayıda kusur içermektedir. Atomların düzenli sıralanışından sapması sonucu oluşan ve kristal malzemenin birçok özelliğinde değişiklik meydana getiren yapılar kusur olarak adlandırılır. Kristal yapı kusuru bir veya daha fazla, boyutu atom çapı mertebesinde olan kafes düzensizlikleri için kullanılan bir kavram olup bir ya da iki atom boyutunda olanlar noktasal, bir boyutlu çizgisel ve iki boyutlu düzlemsel olmak üzere üç tip kusur mevcuttur. Yarıiletken kristaller de bu kusurlar, kasıtlı olarak oluşturulabileceği gibi kristal büyütme işlemi

sırasında istenmeyen kusurlarda oluşabilir. Kristal sistemlerin özelliklerinde belirleyici olan onların sahip oldukları periyodik örgü düzeni olmakla beraber kristale katılanan katkı atomları veya kusurlarda kristalin özelliklerini önemli derecede etkilemektedir.

Yer değiştiren atom olarak adlandırılan kristal kusurları örgüde gerçek atomun yerini bir başka yabancı atomun alması sonucu oluşurken en genel halde bir kusur atomik boyutta, kristal yapıda örgü noktasında atom eksikliği sonucu oluşabilir. Sonlu bir sıcaklıkta titreşim sonucu yer değiştiren atomlar sıcaklığın daha da artmasıyla kendi örgü noktalarını kalıcı olarak terk ederek yerlerinde bir boşluk oluştururlar. Yine atomik düzeni bozan fazladan bir arayer atomu atomik sıralamada bulunabilir.

Periyodik düzenden sapma sadece birkaç tane atomun civarında yerleşmesiyle oluşan kusurlar nokta kusur olarak adlandırılırken, ideallikten sapma mikroskobik bölge boyunca genişlemişse bu örgü kusuru olarak adlandırılır. Kristalde noktasal, çizgisel ve düzlemsel olmak üzere üç tip örgü kusuru bulunmaktadır.

Çizelge 2.4. Kristallerde mümkün olan kusurlar

Kusur tipi	Kusur detayı
Noktasal Kusurlar	
1- Schottky kusuru 2- Frenkel kusuru 3- Arayer atomu	Atomun olması gereken yerde olmaması Atomun kendi yerinde bir boşluk bırakarak arayer bölgesine yerleşmesi Arayer bölgesinde fazla bir atomun bulunması
Çizgisel kusurlar	
1- Kenar dislokasyonları 2- Vida dislokasyonları	Kayma düzlemi Burgers vektörüne dik Kayma düzlemi Burgers vektörüne paralel
Düzlemsel kusurlar	
1- Tanecik sınırlar 2- Yığinsal kusurlar	Polikristal bir katıda iki kristal bölgesi arasındaki sınır Ardışık yığılmalara sahip sıkı paketlenmiş iki parça arasındaki sınır

Çizgisel kusurlar bir kristalde bir çizgi boyunca ilerleyen kusurlardan oluşurken, düzlemsel kusurlar ise iki boyutlu yani bir alan genişliğince oluşan kristal kusurlarını ifade eder. Kristalde bu kusurlardan başka atomik yerdeğistirmeler sonucu oluşan atomaltı ölçekli elektronik kusurlarda bulunmaktadır ve bu kusurlar katılarda elektriksel iletkenlikten sorumludur. Eksik atom içeren katı çözeltilerde anyon ve katyon boşlukları

ve de katı çözeltilerdeki arayer atomları katılarda elektronik iletimden ve difüzyondan sorumlu kusurlardır. İyon boşlukları ise schottky kusuru olarak adlandırılır. Bir arayer iyonu ve bunun sonucunda oluşan boşluğun meydana getirdiği kusur ise Frenkel kusuru olarak adlandırılır. Kristalde bir yerde oluşan bu kusurlar oluştukları yerin etrafında bir gerilme veya zor oluştursa da daha uzak bölgelerde kristal yapıyı etkilemedikleri için nokta kusur olarak adlandırılırlar.

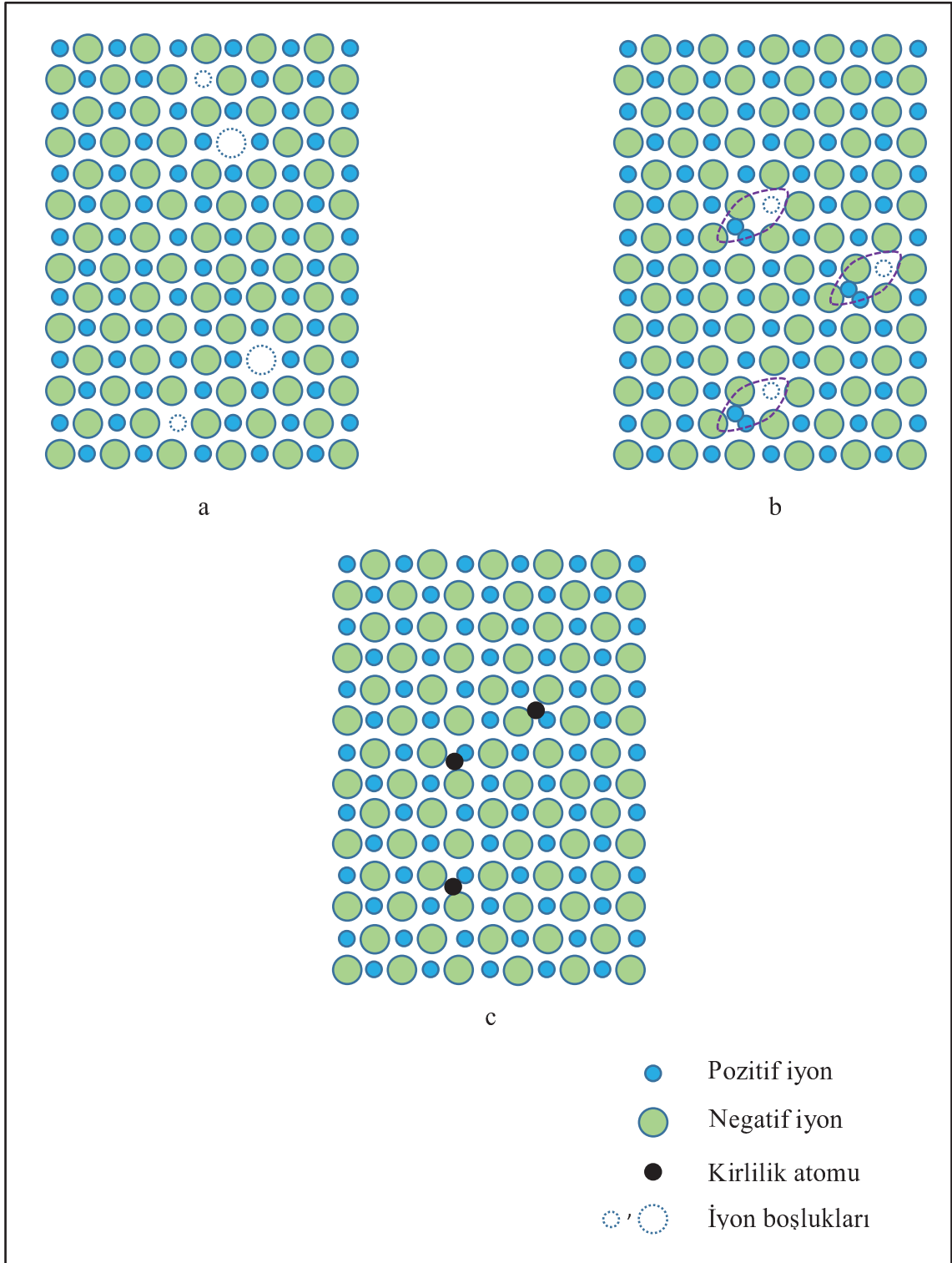
Kristalde bir çizgi boyunca atomik örgü dizilişinin bozulması sonucu ortaya çıkan bir diğer kusur tipide diskolasyon olarak adlandırılan çizgisel kusurlardır. Kristalde oluşan bir kusur tipi daha vardır ki o da sıkı paketlenmiş yapının farklı bir sitilini oluşturan düzlemsel kusurlardır ve iki tane yanlı düzlemi ayıran düzlem ise yığınsal kusur olarak adlandırılır. Kristal tarafından yayılan veya soğrulan enerji fonon olarak adlandırılır ve bir kristal tarafından fononların soğrulması kristalde atomik yerdeğıştirmelere neden olduğundan fononlarda kusur sınıfına ilave edilebilir. Çizgisel ve noktasal kusurlar atomlarda kalıcı yer değıştirme oluştururken, fononlar atomlarda geçici yerdeğıştirme oluştururlar. Ortam sıcaklığının artması kristalinde sıcaklığının artmasına neden olan atomik titreşimleri artırır ve denge yeniden oluşana kadar kristale fonon akışı olurken, kristalin ortam sıcaklığının artması ise onun fonon yaymasına neden olur. Fononlar kristale akarken atomlarla ve birbirleriyle momentum ve enerjiyi koruyarak çarpşırlar.

Fononlar birbirleriyle ve atomlarla etkileştikleri gibi kristaldeki elektronlarla da etkileşirler. Fononun enerjisi elektrondan küçük olduğu halde etkileşme sonucu elektron enerji kazanır ve kristalde boş enerji seviyesi oluşturarak bir üst seviyeye çıkabilir. Oluşan bu boş enerji seviyesi hol olarak adlandırılır ve uyarılan elektronla birlikte kusur olarak anılır.

2.4.2.1. Nokta Kusurlar

Uzayda herhangi bir boyutta uzanmayan, yalnızca bir kafeste ya da bir kafes çevresinde oluşan kusurlar olup dört farklı formu mevcuttur. Bir atom eksikliği sonucu oluşan kusur boşluk kusuru olarak adlandırılırken, bir atomun bulunmaması gereken yerde mevcut olması arayer kusuru olarak adlandırılır. Ayrıca iyon boşlukları Schottky kusuru olarak, iyon ve onun oluşturduğu boşluk çiftinin oluşturduğu kusur Frenkel

kususru olarak tanımlanır. Kristalin entropisini artıran noktasal kusurlar termodinamik açıdan kararlılık gösterir.



Şekil 2.9. Kristallerde meydana gelen noktasal kusurlar

Arayer Kusurları: Krsistalde örgü içerisinde arayer bölgesinde fazladan bir atomun bulunması sonucu oluşan kusur tipidir.

Schottky Kusurları: Bu kusur tipi atomun kristalde olması gereken yerde bulunmaması sonucu oluşur. Bu tür kusurlarda yüklü bir iyonun bulunması gereken yerde boşluk bulunması durumunda oluşan yük dengesizliğini gidermek adına diğer yüke sahip iyonun konumunda da boşluk oluşur. Kristalde katyon boşluğu bir pozitif iyonun yapıda kendi konumundan kristalin dışına doğru hareket etmesi sonucu oluşur. Sadece pozitif yükler kristalin dışına doğru hareket ederek zamanla yüzeyin pozitif yüklenmesine neden olur ve daha fazla pozitif yükün kristalin dışına hareket etmesine engel olacaktır. Bununla beraber kristalin iç kısmında oluşan fazla negatif yükler negatif boşlukların oluşmasını sağlayarak herhangi bir dış kuvvetin olmadığı durumda zıt yüklü boşlukların sayısı eşit olma eğiliminde olur (Aydoğan, 2011).

Frenkel Kusurları: Atomun kendi yerinde bir boşluk bırakarak arayer bölgesine geçmesi sonucu oluşan iyon-boşluk çiftinin oluşturduğu kusur Frenkel kusuru olarak adlandırılır. Yapılan çalışmalar alkali halojenürlerde schottky kusurlarının mevcut olduğunu, gümüş halejenürlerde 700 K sıcaklığın altında Frenkel kusurların baskın olduğunu göstermiştir. Tüm katılarda iki tip kusurda bulunmasına rağmen bu kusurların oluşma enerjileri eşit olmadığı için genellikle tek tip kusur oluşma meylindedir. Bu yüzden metallerde Frenkel kusurların oluşmasına rağmen boşlukların oluşma enerjileri tercih edildiği görülür. Boşluklar birleşerek birleşik boşluk oluşturduğu gibi arayer atomları da birleşerek atom kümeleri oluşturur (Aydoğan, 2011).

2.4.2.2. Çizgisel Kusurlar

Kusurların bir diğer türü de hem tek kristal hem de polikristaller de bulunabilen ve kristal yapıların atomsal dizilişinde bir çizgi boyunca meydana gelen çizgisel kusurlardır ve kristal bir katıda oluşan çizgisel kusurların en genel tipi dislokasyon olarak adlandırılan kusurlardır. Kristalin bir bölgesi, bu bölgeyi alt ve üst kısımlara bir düzlem üzerinde kaymaya uğramışsa bu bölgeleri ayıran çizgi dislokasyon olarak adlandırılan bir kusurdur ve bu kusur dislokasyon çizgisi ve burgers vektörü olmak üzere iki niceliğe sahiptir. Mükemmel bir kristalde paralel doğrultularda eşit adımlarla ilerlenirken bir çevirim sonunda başlangıç noktasına ulaşılırken dislokasyon içeren

bölgelerde bu işlem sonunda bu çevirim kapanmaz ve bir miktar açıklık kalır. Bu açıklık Burgers vektörü olarak adlandırılır. Kristalde bir miktar bağın kopması sonucu oluşan bir kayma varsa dislokasyonlar oluşabilir ve kayma sonucu kayan düzlemdeki atomlar yeni noktalarındaki atomlarla bağ kurarlar. Kristal içinde uzun atomik boyutlarda ortaya çıkan çizgisel kusurlar kristalin fiziksel özelliklerinde birçok önemli değişikliğe yol açarak kristalin zayıflık merkezi olarak bilinirler. Kristalin içinde konumlarını değiştirmiş atomların oluşturduğu bir çizgi olarak tanımlanabilen dislokasyonlar kenar ve vida olmak üzere iki türlü meydana gelmektedir.

Kenar Dislokasyonları: Kristalde fazladan yarım atomik düzlemin yer değiştirmesi sonucu oluşan dislokasyon kenar türü dislokasyonu olarak adlandırılır. Kenar türü dislokasyonda Burgers vektörü dislokasyon çizgisine diktir ve fazladan bir atomik düzlem yapıya yerleşmiştir. Kenar dislokasyonu ayrıca kristalin bir ya da birkaç tabakasının çıkarılmasıyla da oluşabilir.

Vida Türü Diskolasyon: Yukarıda da bahsettiğimiz gibi kristalde eşmerkezler arasındaki geçişler tamamlandığında kalan açıklık bir vida şeklini oluşturur. Bu tür dislokasyonda Burgers vektörü dislokasyon çizgisine paraleldir.

2.4.2.3. Düzlemsel Kusurlar

Kristaller küçük kristal taneciklerinin üst üste binmesi sonucu oluşur. Bu yığılmalar sırasında tanecikler üst üste binerken bir miktar kaymalar meydana gelebilir. Tane sınırları, taneleri birbirinden ayıran yüzeylerdir ve bu bölgedeki atom dizilişleri düzgün değildir, ayrıca kararlı bir yapıda göstermezler. İki tane sınırı arasındaki açı 10^0 'den küçük ise küçük açılı tane sınırı, 10^0 'den büyük ise büyük açılı tane sınırı adını alır. Küçük açılı sınırlarda, dislokasyonların küçük bir yönelme bozukluğu oluşturmaları sonucu oluşan dislokasyon sınırları iken; büyük açılı tane sınırlarında atomlar her iki kristalde uyum sağlayamayarak rasgele dizilim göstermektedirler.

Tanelerin şekillerinin kristal yapısı ile ilgisi olmadığı gibi katılma işlemi sırasında oluşan tanecik şekilleri tane sınırlarının özelliklerinden önemli derecede etkilenmezken katı ısıtıldığında tüm atomların mobilitesi artar. Tanecik sınırların özellikleri polikristalin mekanik, elektrik ve daha birçok özelliğini önemli derecede etkilemektedir. Bir polikristalin, çok sayıda kristalin rasgele yönelimler sonucu bir

araya gelerek oluşmasının önemli sonuçları vardır. Tanecikler boyuna büyüdüğü için tüm yabancı atomları iterek bunların sınırdaki birikmesine neden olurlar. Bu şekilde oluşan tane sınırlarının farklı kusurlar içerebileceğinden malzemenin mekanik ve fiziksel özellikleri üzerine bunların etkilerinin incelenmesi zorlaşır.

Komşu tanecikler arasındaki yanlış yönelim küçük açılarla oluşturulduğunda bir tane sınırı için model oluşturmak uygun olurken ilk taneciklerin rasgele yönelimi çoğu katıda büyük açılı sınır oluşması anlamına gelir. Birçok malzeme tek kristalden ziyade polikristal olarak oluşturulduğu için tanecik sınırlarının etkilerinin anlaşılabilmesi önemli bir problemdir. Çünkü analiz edilen polikristal malzeme tek kristal çalışmalarından elde edilen sonuçlara göre çok sayıda farklı özelliğe sahip olduğu görülmektedir.

2.4.3. Maddenin Fiziksel Özellikleri Üzerine Kusurların Etkisi

- Boşluklar kristalin hacminin artmasına ve termal genişlemeye yol açar.
- Noktasal kusurlar tarafından iletkenlik elektronlarının saçılması elektriksel özdirence katkıda bulunur.
- Kristalin entalpi ve özısıısı artar
- Boşluklar pozitronlar için tuzak oluştururlar ve bu olay boşluk oluşturma çalışmalarında faydalı olur.
- Difüzyon olayında noktasal kusur mekanizması baskın olur.

Bir numunede nokta kusurların konsantrasyonu kuenç deformasyon veya ısınlama işlemleri sonucunda artar. Düşük sıcaklıklarda bu tür dengede olmayan kusurlar örgüde hareketsiz kalır. Kuenç edilmiş malzemeler fazladan entalpi, hacim ve elektriksel öz dirence sahiptir. Mekanik özellikler, termal güç ve pozitron yok olma parametreleri de değişir (Aydoğan, 2011).

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. SRIM Teorisi

3.1.1. TRIM Hesaplama Çeşitleri

3.1.1.1. İyon Dağılımı ve Hasarın Hızlı Hesabı

Bu seçenek hedef hasarı ve saçırmanın detayları yaptığımız iş için önemli değilse kullanılmalıdır. Bu seçenekle hesaplanan hasar Kinchin-Pease yaklaşımı temel alınarak istatistiksel olarak hızlı bir şekilde değerlendirilebilir. Aşağıdaki terimler doğru bir şekilde hesaplanacaktır: Hedefteki iyonların son dağılımı, hedefteki iyonlar tarafından iyonlaşma enerji kaybı, geri tepen atomlara, geri saçılan iyonlara ve iletilen iyonlara transfer edilen saçılmış enerji. “Tam Hasar Kaskat” seçeneği kullanıldığında özdeş iyon aralığı sonuçları elde edilecektir, çünkü iyonlar için rastgele sayı üretici geri tepmelerde kullanılanlardan farklıdır. Bu hesaplamaları karşılaştırmak için kullanışlıdır.

3.1.1.2. Tam Hasar Kaskatlarıyla ile Ayrıntılı Hesaplama

Bu seçenekte her bir hedef atomun enerjilerinin en düşük yer değiştirme enerjisinin altına düşene kadar bütün geri tepen atomlar izlenir. Bu yüzden hedefteki bütün çarpışmalarda hasar analiz edilir. Tek istisna 20.000 atomu geçen nadir büyük kaskatlar (yığılma) içindir. Bu aşamada TRIM’in hafızası yetersiz kaldığından tek bir kaskatta 20.000 tepen atom sınırının aşıldığını gösteren hata mesajı gösterilir. Hesaplama mesaj gösterildikten sonra devam eder. Bu hata şu veri dosyası kullanılarak: ..\DATA\TRIM.cfg kullanılarak kaldırılabilir.

3.1.1.3. Tekkatman Çarpışma Adımları

Bu hesaplama TRIM’in iyonun hedefin her bir tek katmanında çarpışma yaptırmasını gerektirir. Bu Free Flight Path (Serbest Uçuş Yolu)’nun kullanımını ihmal eder ve her çarpışma hiçbir yaklaşım olmadan hesaplanacaktır. Bu seçeneği kullanmanın sonuçları eninde sonunda ortalama açıklık, iyonizasyon, hasar gibi aynı ortalama miktarları verecektir, ama hesaplamanın yapılması daha uzun sürecektir. Bu

tür hesaplama COLLISON.txt dosyasındaki her bir olası çarpışmadan veri üretmek ve saçtırma gibi özel uygulamalar için kullanışlıdır.

3.1.1.4. Yüzey Bombardımanı Hesaplaması

Bu hesaplama TRIM'ın iyon hedefin her bir tek katmanında çarpışma yaptırmasını gerektirir, bu iyon saçtırmasının hassas hesaplanması için önemlidir. Özel taslaklar saçtırmanın özel fiziğini anlamaya yardım etmek için kullanılabilir. Saçtırma ürününde yüzey bağlanım enerjisinin küçük farklılık etkilerini analiz edilmesine olanak sağlar. Bu parametre saçtırmanın kalbindedir ve bazen değerinin tahmin edilmesi zordur. TRIM Buharlaştırma Isı değerleri tablosu sağlar ki bu değerler hedefin yüzey bağlanım enerjisi tahmininde normal başlama değerleridir.

3.1.1.5. Nötron / Elektron / Foton Kaskatları

Bu seçenek sadece hedefteki hasar kaskatlarını hesaplamak için kullanılır. Giriş dosyası TRIM.DAT kullanır. Bu dosya tepme kaskatlarına başlayan atomlar hakkında kinetik bilgi içerir. Dosya TRIM.DAT hedef atomlara elektron, nötron ya da fotonlardan birisiyle gönderilmiş enerjiyi hesaplayan bazı başka programlar tarafından türetilmiştir. Bu, özel TRIM uygulama kısmı ‘Nötronlar/Elektronlar/Fotonlar tarafından Işınım Hasarı’nda açıklanmıştır. Bunu seçtiğimizde çıkan menü, bizden nasıl bir hasar hesaplaması yapmak istediğimiz konusunda bizi yönlendirecektir.

3.1.1.6. Farklı İyon Enerji / Açı / Pozisyonları

İyon ismini girin, örneğin oksijen için O ; helyum için He (TRIM büyük küçük harfe duyarlı değildir). PT ye basmak, periyodik tabloyu elde etmek için genellikle kullanışlıdır ve sadece elementin üzerine tıklamak yeterlidir. İyon kütlesi için, TRIM en verimli izotopun kütlesini önerir (doğal ağırlık değildir). Bu değerler periyodik tabloda MAI (En verimli izotop) olarak gösterilir. Fakat herhangi bir kütle girilebilir (birim=amu). İyon enerjisi için, herhangi bir değer girilmelidir (birim=keV). TRIM 10eV dan 10GeV/amu' ya kadar her değeri kabul eder. Bir şeye dikkat edilmelidir ki TRIM herhangi bir nükleer reaksiyon analizini içermez, bu yüzden yaklaşık

5MeV/amu' nun üzerinde enerjiye sahip iyonlar hesaplamalara katılmayan inelastik enerji kayıplarına sahip olabilir.

3.1.1.7. Elementlerin Periyodik Tablosu

TRIM kurulum penceresi kullanıcılara iyon ve hedef atomların periyodik tablosunu sağlar. PT butonuyla element seçilir ve elementin üzerine tıklanır. Ayrıca bu element için varsayılan parametreler sağlanır. MAI en verimli ve iyonlar için tipik olarak kullanılan izotoptur. Süblimleşme Isısı (Heat of Sublimation) katı cismin yüzey bağlanma enerjisi için varsayılan değerdir (saçtırma için kullanılır) ve Fermi Hızı (Fermi Velocity), V_o , bu elementin durdurma gücünü hesaplamak için kullanılır ve $V_o \sim 1.3 \cdot 10^6$ m/s birimiyle verilir.

14 Si		Nat. Wgt. = 28.086	Density = 2.3212 g/cm ³														
		MAI Mass=28	Atom Dens. = 4.977E+22 at/cm ³														
		MAI Wgt.= 27.977	Heat Subl. = 4.7 eV														
			Fermi Vel. = 0.974 Vo														
		Silicon															
IA		IIIB IVB VB VIB VIIB VIII															
H IIA		He															
Li Be		Ne															
Na Mg IIIA IVA VA VIA VIIA		VIII A		IB IIB		B C N O F Ar											
K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr																	
Ru Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe																	
Cs Ba La Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po At Rn																	
Fr Ra Ac																	
Close		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
		Th	Pa	U													
		Wgt./Mass = amu															
		Densities = Solid Phase															

Şekil 3.1. Elementlerin periyodik tablosu (www.SRIM.org)

3.1.1.8. İyonun Geliş Açısı

Bu, hedef yüzeye göre iyonun geliş açısını değiştirir. Normalde iyon hedef yüzeyine diktir, X eksenı boyunca açı 0^0 olarak tanımlıdır. Bu açı 0^0 ile 89.9^0 arasında herhangi bir açı olarak değiştirilebilir. İyon yönündeki değişim XY düzleminde olduğu farzedilir.

3.1.1.9.Hedef Tanıtma

- **Katı Cisim veya Gaz Hedefi**

TRIM gaz hedeflerini katı cisim hedeflerinden farklı olarak ele alır. Hedef fazı burada belirtilmelidir. Eğer hedef gaz ve katı cisim katmanlarının karışımı ise, sonraki bölüm olan "Using TRIM with Mixed Gas / Solid Targets" i okunmalıdır. Oksijen gibi normal gazları, kuartz hedef gibi katı cisimleri kapsayan hedefler, katı cisim olarak belirlenmelidir. Katı cisim fazındaki atomlar ile iyonların etkileşimi, gaz içindeki bu atomlara iyonların etkileşiminden farklı ele alınır.

- **Hedef Elementler**

Kendi hedefinizi yapacağınız çeşitli elementler girdi olarak belirlenebilir, aynı yolla iyonunuzda belirleyebilirsiniz, örneğin: Si=Silicon. PT tuşunu kullanarak aynı elementlerin periyodik tablosuna ulaşmak mümkündür. Bu tabloyu kullanarak, her bir hedef atomu için kullanılan varsayılan değerler görülebilir. Katman başına 12 hedef elementi girilebilir. TRIM' in özel uygulamalarından biri kaskatları oluşturan iyon demetleri ile katmanların karışımını takip etmektir. Eğer, örneğin, silikon altlık içindeki SiO₂ karışımının yüzey katmanından silikon atomlarını takip edilmek isteniyorsa, silisyum hedef atomu iki kere belirlenebilir, biri altlık biri yüzey katmanı için. TRIM iki silisyum atomunu ayrı tutar ve çeşitli analitik çizimler içerisinde biri diğerinden ayırt edilebilir.

- **Bileşiklerin Tablosu**

TRIM basit tek tabakalı hedefler için mevcut yaygın bileşiklerin ansiklopedisine sahiptir. TRIM yükleme penceresinde, Compound Dictionary tuşuna basarak bu tablolara erişilir. Bileşik stokiyometrilere ek olarak bu tablo tipik yoğunlukları ve bağlantı bilgilerini sağlar. Birçok hafif bileşikler için, özellikle hidrokarbonlar, bu bağlantı bilgileri daha sonra durdurma gücüne önemli düzeltmeler yapmak için kullanılır. Bu tablo kullanıldığı zaman hedef giriş adımlarının çoğu atlanabilecektir.

- **Katman derinikleri ve stokiyometri**

Hedef elementlerin listesini girer girmez hedef katmanları oluşturulmalıdır (8 katmana kadar). İlk katmanın kalınlığı girilmelidir. Varsayılan birim Angstroms'dur

fakat ayrıca birimlerin aşığı açılan menüsünü kullanarak mikron, milimetre, metre veya kilometre birimlerini de kullanılabilir. Her bir katman için bu katmandaki her bir elementin miktarı girilmelidir. TRIM bu girişı normalize eder bu yüzden herhangi bir birim kullanılabilir. Örneğın, SiO₂ hedefi için şunların herhangi birini kullanılabilir: Si(1) O(2); Si(100) O(200); Si(33) O(67); vs.

- **Katman yoğunluğu**

Her bir katman bir yoğunluğa sahip olmalıdır (birim:g/cm³). TRIM, ağırlıklı göreceli stokiyometrileryle saf hedef yoğunluklarının karışımını kullanarak yoğunluklarda tahmin edebilir. Fakat yoğunlukların makul olmasını kontrol etmede dikkatli olunmalıdır. Son TRIM dağılımları hedef yoğunluğuyla ölçeklendirilir, bu yüzden yoğunluktaki her hata sınırlar içerisindeki hatalara direk olarak kopyalar.

- **Katman ismi**

Her katman çizimleri, üzerine ve tüm veri dosyalarına girilen isimleri kullanarak tanımlanır. Silikon veya SiO₂ gibi çok basit isimleri veya Si(33)-Ge(67) gibi daha detaylı tanımlı isimleri kullanılabilir. “Özel komutlar olan \$ (üstsimge) ve @ (altsimge) i kullanarak çizimlerin üzerindeki katman isimleri için alt ve üst simge TRIM baskısına sahip olunabilir. SiO@₂ ekrana SiO₂ olarak basılacaktır. Eğer bunlardan biri ismin ortasında kullanılırsa alt çizgi(_) karakterini kullanarak normal boyut yazımına dönülebilir. Örneğın; “Fe@2_O@3” katman ismi “Fe₂O₃” olarak oluşturulacaktır.

3.1.1.10. Hedef Atomların Hasar Enerjileri

Hedef verilerinin sağında üç giriş vardır ve bunlar: hasar(eV)/yerdeğıştirme, kafes, yüzeydir. Bunlar hedef atomları için yerdeğıştirme enerjisi, örgü bağlanma enerjisi ve yüzey bağlanma enerjisi değlerleridir.

Yerdeğıştirme Enerjisi: Hedefin örgü kuvvetlerini aşmaya ve asıl konumundan bir atomik boşluktan daha fazla uzağa hareket etmeye ihtiyaç duyan bir geri tepme enerjidir. Eğer geri tepen atom bir örgü boşluğundan daha fazla hareket edemezse, varsayılır ki asıl konumuna geri sıçrayacak ve fononlar içindeki geri tepme enerjisini bırakacak. Tipik değlerler yarı iletkenler için 15eV ve metaller için 25eV civarındadır. Polimer gibi kırılğan maddeler için 2-5 eV kadar düşük bir değer daha kesin olabilir.

Yerdeğiřtirmelerin fiziđini anlayan kullanıcılar için, özel enerjiler farklı hedef atomlarının her biri için giriř olabilir. Aynı elementleri içeren çok katmanlı hedefler için, Örneđin Si üzerindeki SiO₂, iki katman içindeki silisyum atomları için farklı yerdeđiřtirme enerjileri kullanılabilir.

3.1.1.11.Yüzey Bađlanma Enerjisi

Eđer püskürtmeyle ilgiliyseniz bu parametre püskürtme verimi (hedef yüzeyi terk eden hedef atomlarının sayısı) için anahtardır. Bu, hedef atomların hedef yüzeyini aşması için gereken enerjidir (birim=eV). Bu, yüzey atomları için geleneksel kimyasal bađlayıcı enerji deđildir, çünkü bu, radyasyon zararı tarafından üretilmiř, yüzey gevşemesi, yüzey pürüzlülüđu vs gibi tüm yüzey dođrusalsızlıklarını içerir. Tipik olarak süblimleşme ısısı bu enerjinin iyi tahminidir. Tekil element hedefleri için TRIM, her element için enerjilerinin tablosu yükümlülüđünü yerine getirmeyecektir. II tuřunu kullanarak elementlerin periyodik tablosu kullanarak bu deđer görüntülenebilir, ayrıca yakınındaki elementler için de deđerleri gösterecektir. Özelleřmiř saçırma hesaplamaları esnasında, Plots (çizimler) menüsündeki özel çizimler, püskürtme verimi üzerinde sahip olunacak yüzey bađlayıcı enerjinin küçük deđişimlerle etkisini göstermek için uygundur.

3.1.1.12.Örgü Bađlanma Enerjisi

Bu hedefteki geri tepmeler ve örgü atomlarının konumlarından ayrıldıklarında bütün geri tepme hedef atomlarının yok olduđu enerjidir. Tipik olarak 1-3 eV civarındadır, fakat çođu bileşik için deđerler bilinmez. Bu enerjinin fononlara gittiđi farzedilir. Örgü bađlanma enerjisi maalesef saçırma verimi hesaplarında oldukça önemlidir. Bađlayıcı enerjideki 1eV'dan 3eV'a olan deđişim püskürtme verimini 2 katına kadar düşürebilir.

3.1.2. Hesaplama Parametreleri

Veri ve çizim için “görüntüleme penceresi”: TRIM bütün hedef derinliđini öngörülen mesafe, iyon başına düşen boşluk vb. gibi ortalamalar üretmek için kullansa da, detaylı analiz için hedefin bir kısmını genişletmek mümkündür, bu TRIM'in

Görüntüleme Penceresi'dir. Kalın hedefler için, bu önemli bir etmendir. Derinlik penceresi TRIM'a ince ayrıntı için hedefteki bir küçük derinlik bölgesini genişletme izni verir. Örnek olarak, "Gaz İyonlaşma Dedektöründeki Helyum (5 MeV)" adındaki TRIM Demosunda hedef 50mm derinliğindedir. Ancak, Görüntüleme Penceresi 40mm - 50mm'de ayarlanmıştır, böylece hem grafikler hem de veri-dosyaları için helyum iyonlarının menzil sonunun daha detaylı analizine izin verir. TRIM bu pencereyi 100-eşit derinlikteki pencereye böler ve ortalaması alınmış veriyi hesaplama -örneğin iyonlaşma için enerji kaybı ve son iyon menzili hesaplamaları- için bu pencerelerde saklar, diğer bir örnek olarak, TRIM Yükleme Penceresi'nin DEMO bölümünde, bir seçenek neredeyse 8mm menzili olan Be içine 10MeV H içindir. Bu DEMO için, derinlik penceresi 7.99-8mm'ye ayarlanmıştır. Bu sizin grafikte her iyonun yolunun tam son ucundaki detaylı çarpışmaları görmenizi ve ayrıca 0.1 mikronluk derinlik dilimlerinde son çarpışma detaylarına sahip olmanızı sağlar. Görüntüleme Penceresi TRIM Yükleme Penceresi'nde, "Pencere Derinliklerini Çizme"nin altına yerleştirilmiştir. Varsayılan değer sıfırdır, bu TRIM'in toplam hedef derinliğini kendi kaydedilmiş verisi için kullanacağı anlamına gelir. Eğer siz tek bir atomik tek-katmandan daha küçük kutulara yol açan bir Derinlik Penceresi girerseniz, bunun istendiğine dair bir uyarı alırsınız (yani 100 Angström'lük bir derinlik penceresi 1 Angström'lük -herhangi bir hedef tek-katmandan daha küçük- veri kutuları yapacaktır). 100 tek-katman'dan daha küçük bir pencere genişliği talep etmek katman uçlarında bozukluklara sebep olabilir. TRIM katmanın atomik yoğunluğunun ters küp kökü olarak 1 tek-katman tanımlar, $N^{-1/3}$. (N =yoğunluk – birimi atomlar/cm³). Bu yüzden 5×10^{22} atomlar/cm³ yoğunluğa sahip silikon $(5 \times 10^{22})^{-1/3} = 2.7$ Åms katman kalınlığına sahiptir.

İyonların Sayıları: Bu hesaplaması yapılacak iyonların sayısını sizin belirlemenize olanak tanır. Bu sayı 9999999 'a kadar çıkabilir. Normalde, varsayılanı seçersiniz (99999) ve yeterli sayıda istatistiğe sahip olunca TRIM'i kesersiniz. Bazı kullanıcılar seçilmiş bir iyon sayısının ardından durmayı tercih ederler. Bu sayede farklı TRIM hesaplamaları direkt olarak karşılaştırılabilir. Eğer bir TRIM hesaplamasını tekrar ederseniz, rastgele sayı çekirdeğini değiştirmedığınız takdirde her iyon önceki hesaplamayla birebir aynı olacaktır. Bir hesaplamayı tamamladıysanız (istenen tüm iyonlar bittiyse) bu hesaplama işlemine "Kayıtlı TRIM Hesaplamasına Devam Et" düğmesiyle devam edebilirsiniz. Ardından hesaplanacak toplam iyon sayısını arttırınız. Hesaplamaların Otomatik Kaydedilmesi: Bazı TRIM hesaplamaları günler aldığından,

bu TRIM'nin aralıklarla kendini otomatik olarak kaydetmesini sağlar. Kayıt sayısını hesaplama sırasında değiştirebilirsiniz. 1 'den 32000 'e kadar bir sayı saçılabılır.

Rastgele Sayı Çekirdeği (Random Number Seed): TRIM bu sayı değişmediği sürece hep birebir aynı hesaplamalar üretecektir (Girdi ayarları aynı kaldığı sürece). Buraya 0'dan 999999999 a kadar herhangi bir tam sayı girebilirsiniz. Varsayılan rastgele sayılar teorisine göre neredeyse mistik bir sayı olan 716381'dir ve aklınıza gelebilecek tüm diğer sayılardan daha iyidir. (Fishman ve ark., 1986). Fakat eğer farklı ancak benzer üç hesaplama istiyorsanız sayıyı 1, 2 ve 3 yapmanız yeterli olacaktır. TRIM, P. L'Ecuyer, C.A.C.M., vol. 31, 742-749, 774-776 (1988) 'a ait rastgele sayı üreticisini kullanmaktadır. TRIM hesaplama ekranının sağ altında kullanılan rastgele sayılar için bir sayaç bulunmaktadır. Büyük ölçekli hesaplamalarda bu sayı çok hızlı artabilir ve 1000 'den daha az iyon için kısa zamanda 231'i geçebilir.

3.1.2.1. Çıktı Disk Dosyaları

Bütün TRIM çıktı dosyaları, TRIM yükleme penceresinden veya hesaplama sırasında talep edildiğinde beyan edilebilir. Dosyaları yükleme penceresinde beyan etmenin avantajı, bunun birinci iyondan itibaren kayıt yapabilmelerine imkân sağlamasıdır. Geri yansıma / İletilmiş / Saçılmış Atomlar: Bu her bir iyon istatistiği için bilgi dosyalarını aktive ederek, iletilen ya da geri yansıyan her iyonun veya iletilen ya da saçılan her hedef atomun kinetiği hakkındaki bilgilerin kaydedilmesini sağlar. Ayrıca bu dosyaları, hesaplama sırasında, TRIM hesaplama penceresinde bulunan onay işaretleri aracılığıyla isteğe bağlı olarak kapatmak ve açmak mümkündür.

Geri Tepme Çarpışma dosyası: Bu bir atomun yerini değiştirdiği her iyon / atom çarpışması için bir bilgi dosyasını aktive eder. Bu dosya çok hızlı bir şekilde büyüyebildiği için dikkatlice kullanılmalıdır. (Kaydedilen 1000 çarpışma Diskte yaklaşık 64 kB kadar yer tutacaktır. Bazı yoğun durumlarda bir tek iyon 1MB dan daha büyük yer tutabilmektedir).

3.1.2.2.TRIM de Kullanılan Bilimsel Terimler

3.1.2.2.1.Geri Tepme Sürecinin Fiziği

TRIM dizilemesini anlamanın en kolay yolu TRIM'i başlatmak ve çeşitli DEMO hesaplamalar seçmektir. Hesaplanma sırasında, yapılan işlemleri görmek için çeşitli komut ve dosyalarla işlem yapılır. Her komut ve dosya ayrıntılarını açıklamak için onunla ilişkili bir yardım dosyası vardır. Bunun ardından, DEMO hesaplamaların bir tanesi seçilerek dizilemeden daha ayrıntılı bir anlayış oluşturulabilir ve daha sonra SRIM Çıkışlar / COLLISION.txt " adlı bir dosyada iyon / atom çarpışma ayrıntıları " adlı kutusunu işaretleyerek tutulur (TRIM Çıkışlar Bölüme bakınız). Not: TRIM hesaplama sırasında TRIM penceresinde Çarpışma Detay kutusunu kontrol etmeden bu veri toplamı vermeyebilir. Bu dosya oldukça büyük olsun ki, ilk deney için hesaplama birkaç dakika için denenebilir. Ardından SRIM dizininde herhangi bir metin düzenleyicisi kullanarak TRIM durdurun ve COLLISION.txt dosyasını düzenleyin. Hedefin çeşitli atomları ile çarpışan her iyonun ve herhangi bir çarpışma dizilerinin ayrıntılı sonuçlarının tablolarını göreceksiniz. Bu çarpışmalar en azından bir yer değiştirme tablosu oluşturur ve bu yüzden her çarpışma kaydına sahip olmayabilirsiniz.

COLLISION.txt dosyasında ilk olarak anlık iyon enerjisi ve derinlik verilir ve sonra hedef elektronlar için iyonların anlık enerji kaybının anlık oranı, örneğin; , eV / Angstrom birimli elektronik durdurma gücü,verilir. Sonra hedef atom vurulması ve geri tepme dizilimi başlaması geri tepme enerjisi ile birlikte tanımlanır. Her dizilim, aşağıda açıklandığı gibi daha sonra yer değiştirme çarpışmalarına, boşluk üretimine, yedek çarpışmalara ve ara yer atomlara ayrılmıştır.

Dosyada, yer değiştirme çarpışmaları sayısı onların yer değiştirme enerjisi üzerindeki enerjilerinde ile harekete geçirilen kaç hedef atom olduğunu belirler (TRIM Kurulum penceresinde belirtilen). Tablodaki sonraki unsur hedef işlerdir. Orijinal bölgesinden geri tepme atomu hareket ettiği zaman bir boşluk geride delikli hal alır. Sıradaki kutu boşluk sayısını azaltan yer değiştirme çarpışmalarını gösterir. Hareketli bir atom sabit bir hedef atoma çarparsa ve sonra onun yer değiştirme enerjisinden daha fazlası transfer edilirse ve başlangıç atomu, çarpışmanın ardından hareket için yeterli enerjiye sahip değilse ve bu durum o atoma çarpan aynı elementin sadece boşluk

oluşturmadan hedefte yer değiştirmesidir. Bu durumun karmaşık gelmesine rağmen, mekanizma boşluğu 30% kadar kısaltabilir. Toplamda:

Yer değiştirmeler = boşluklar + yer değiştirme çarpışmaları

Son olarak, tablo ara atomları listeler. Bir geri tepme atomu durduğunda ve bir yer değiştiren atom olmadığı zaman ardından bir atom çatlağı oluşur. Bunlar özetlenebilir:

Boşluklar = atom çatlağı + (hedef hacimden farklı atomlar)

Bir kaskat atom hedef hacmi bırakırsa, artık takip edilmemektedir. Bu hedef eğer ön yüzeyi ya da arka yüzeyden terk edilirse; daha sonra atılacağı belirtilir. TRIM atomları yan gitmek gibi belirsiz bir şekilde takip edecek hatta onlar ekranı terk edebilirler. Ama onlar hedef yüzeyi geçerse onlar ya atılır ya da sayılmazlar. Yani hedefin iç boşluğunda meydana gelen ve hareketli bir geri tepme atomun son dinlenme yeri olan boşluk biraz uzak bir mesafede olabilir. Geri tepme hedeften ayrılırsa, açık bir şekilde geçiş elementleri toplamı, o atom kaybı ile boşaltılmışların sayısından daha az olacaktır.

Yer değiştirme çarpışmaları bu eşitliğin bir kısmını meydana getirmemektedir, çünkü her yedek çarpışma denge denkleminde ayrı olarak, boş sayısı ve biri tarafından geçiş elementlerinin sayısını azaltır. Sonuç olarak; bu tabaka kökenli bir atomun hedefin üst tek tabakasında hareketsiz hale gelmekte, her zaman ve bunun bir örgü atomu olduğu varsayılır. Kaskatların hesaplanması, , hedef değiştirmeler, yedek çarpışmalar, vs. açıkça aşağıda tanımlanan belirli varsayımlar yapar.

Bir olay atomu ele alalım, atom numarası Z_1 , enerjisi E olan bir atom varsayalım. Atom numarası Z_2 olan bir atom ile bu hedef içinde bir çarpışma vardır. E_1 enerjili bu iyon çarpışmadan sonra E_2 atom enerjisi sahip olur. Daha önce hedef için belirlenen E_d enerjisi, yer değiştirme enerjisi E_b , kendi konumuna atom bağlanma enerjisi, ve aşağıda durdurulabileceği kabul edilen hareketli atomun final enerjisi E_f .

Bir yer değiştirme olursa eğer $E_2 > E_d$ (hit atomun konumu terk etmesi için yeterli enerji verilir). Eğer $E_1 > E_d$ ve $E_2 > E_d$ bir boşluk oluşur (her iki atom konumunu terk etmek için yeterli enerjiye sahiptir). Her iki atom daha sonra kaskadın hareketli atomu

olur. Çarpışmadan önce Z_2 atomunun E_2 enerjisi E_b ile azaltılır. Eğer $E_2 < E_d$, sonra çarpan atom yeterli enerjiye sahip olmaz ve orijinal konuma ‘phonons’ olarak E_2 enerjisini salarak geri döner.

Eğer $E_1 < E_d$, $E_2 > E_d$ ve $Z_1 = Z_2$, ardından gelen atom konumda kalır ve ‘phonons’ olarak E_1 ‘in saliverilmesiyle çarpışma yer değiştirme çarpışması olarak adlandırılır. Atom değişimiyle asıl konumda kalan aynı atomdur. Çarpışmanın bu tipi büyük geri tepme kaskadları ile tek eleman hedefleridir. Eğer $E_1 < E_d$, $E_2 > E_d$ ve $Z_1 \neq Z_2$, sonra Z_1 durdurulan bir ara yer atomu olur.

Sonuç olarak: $E_1 < E_d$, $E_2 < E_d$, ardından Z_1 ara yer atom olur ve $E_1 + E_2$ ‘phonons’ olarak saçılır. Eğer bir hedef farklı bazı elementler içeriyorsa onda farklı yer değiştirme enerjileri vardır, sonra E_d farklı hedef atomlara çarparak kaskadın her bir atomunu değiştirir. Bu amaçla TRIM ‘hızlı’ hedef zararın hesaplanması, sonra iki yazarın modifiye etmesiyle TRIM hedef zarar için Kinchin-Pease analitik çözüm kullanır.

4. BULGULAR

4.1. Giriş

Grafen bal peteği yapısında dizilen karbon atomlarının tek tabakasından meydana gelir. Üstelik en ince ve en güçlü iki boyutlu materyal olarak bilinir. Elektriği bakır kadar etkili bir şekilde iletir ve ısıyı iletmede diğer materyallerden daha üstündür. Grafen neredeyse tamamen şeffaftır ve bu nedenle en küçük helyum atomları bile içinden yoğun olarak geçemez (Geim, 2012).

Grafen; karbondioksitin azaltma ve mekaniksel katman kalkması, epitaksi, silikon- karpit, metal altaş, grafit oksit eksiltme, metal karbon eritme, sodyum oksit ısıtılma, nano tüp doğrama, solvent katman kalkması, arayüz tuzak gibi farklı tekniklerle üretilir. Grafenin potansiyel uygulamaları; hafif, esnek, ince, daha dayanıklı elektrik devreler, ekranlar ve güneş pillerinin yanı sıra yeni grafen materyallerin kullanımıyla olanak sağlanan veya geliştirilen çeşitli, medikal, kimyasal ve endüstriyel işlemler içerir.

Son dönemlerde grafen üzerine çalışmalar literatürde geniş ölçüde yer alır. Bu çalışmalar grafenin kimyasal, fiziksel, optik, mekanik, elektrik özelliklerinin yanı sıra; grafen klistografisi ve spektroskopisi; biyoteknoloji, biyofizik, natürel nanoteknoloji üzerine odaklanmıştır. Son zamanlarda bu çok kullanışlı malzeme üzerine radyasyon etkileri çalışılmaktadır.

Literatürde grafen yapılarında radyasyonun etkisi hakkında çalışmalar vardır. Grafen üzerine yüksek frekanslı elektromanyetik radyasyon etkileri araştırıldı ve grafenin manyetik iletkenliği üzerine bant aralığındaki değişimin etkileri çalışılmıştır (Kryuchkov ve ark., 2014). Elektron ışınlama altında grafende boş oluşturmak için çalışılmıştır. Bu çalışmalarda sınır dışı eşik enerjisi altında elektron radyasyonu altında boş oluşturmak için bir katolik yolun olasılığını göstermiştir (Zubeltzu ve ark., 2013).

Grafen tabanlı THZ optoelektronik aygıtlar tanımlanmıştır ve temel olarak yeni siklotron benzeri radyasyon işlemi tabanlı THZ ışığın üretimi için sinüzoidal dalgalı grafen plaka kullanımı dikkate alınmıştır (Tantiwanichapan ve ark., 2013). Mikrodalga radyasyon altında tek katmanlı grafen düşük sıcaklık magnetotransport ölçümleri yapılmıştır ve etkili sıcaklıkta radyasyon indüklemeye, enerji gevşemesi, zaman faz farkı

rapor edilmiştir (Eless ve ark., 2013). Radyoaktif uygulamalarında grafen kullanılması amacıyla tek katmanlı grafen platformu, düşük enerjili elektron ışınlama ile DNA hasarı için çalışılmıştır (Sidorov ve ark., 2013). Ağır iyon ışınlarına karşı grafen FED cihazların radyasyon hasarı araştırılmıştır. Ağır iyon ışınlama sonrası grafen tabanlı cihaz alt performansı ile de olsa çalışır durumda kaldığı gözlemlenmiştir (Ochedowski ve ark., 2013). Dikey hizalanmış birkaç katman grafen yapısı ve alan elektron emisyon özelliklerine X-ışınlarının etkileri incelenmiştir. Düşük vakumda X-ışınlarından sonra dikey hizalanmış birkaç katman grafenin alan emisyon performansı ve iş fonksiyonundaki değişim mekanizması tartışılmıştır (Wu ve ark., 2013). Tek katmanlı grafen genellikle SiC altlığı tarafından desteklenmiştir. SiC tabakası üzerine büyüyen grafen kaliteli grafen örnekleri üretmek için yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir (Mattaushch ve ark., 2007). İnce yüzey tabaka materyallerin (50nm-1µm) fiziksel ve kimyasal özelliklerini değiştirmek ve geliştirmek için iyon aşılama işlemi uygulanmıştır. Biz bu çalışmada SRIM’da gerçekleştirilen grafen/SiC sistem üzerine proton ışınlama etkilerini hesaplayıp tahminde bulunduk. Protonun enerjisi 1,8 MeV olarak seçildi çünkü Van de Graaff hızlandırıcıları tarafından temel olarak bu enerji sağlandı (White ve ark., 2003). Üstelik yayınlanan birçok çalışmada da protonun enerjisi 1,8 MeV olarak seçilmiştir (Komarnitsky ve ark., 2008).

4.2. SRIM Hesaplamaları

SRIM; bir Monte Carlo tabanlı bilgisayar programıdır (Ziegler, 2004; Ziegler ve ark., 2010). SRIM iyonlar ve farklı malzemeler arasındaki etkileşimleri hesaplar ve bu hesaplamalar iyon atom çarpışmalarına kuantum mekaniksel bir yaklaşım kullanarak maddede ki 10eV’den 26eV/akb’ye kadar olan iyonların aralığını ve kesilmesini içerir. İyon ekme, saçırma ve iyon iletme, iyon ışın iyileştirme en önemli SRIM uygulamalarıdır.

Maddedeki iyon etkileşimleri Bethe-Bloch eşitliği veya eşitlik 4.2’de yazıldığı gibi tanımlanmıştır.

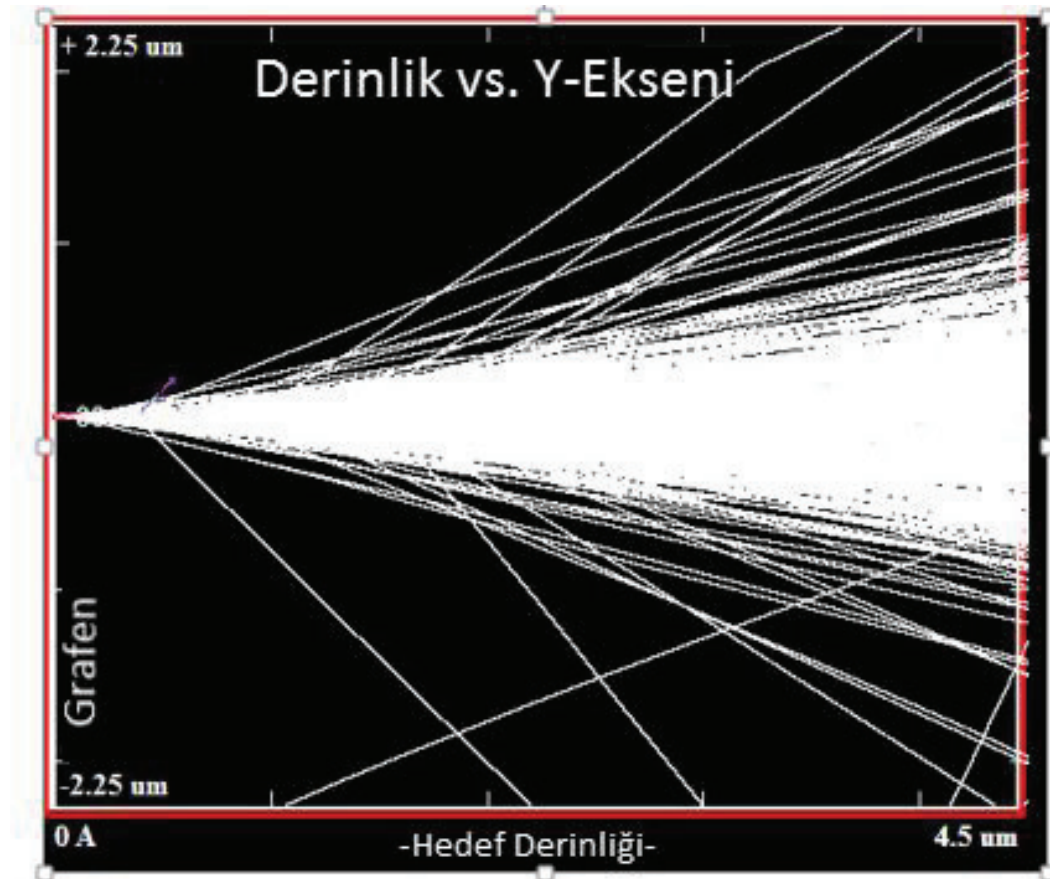
$$S = \frac{\kappa Z_2}{\beta^2} Z_1^2 [L_0(\beta) + Z_1 L_1(\beta) + Z_2^2 L_2(\beta) + \dots] \quad (4.1)$$

$$S = \frac{\kappa Z_2}{\beta^2} Z_1^2 L(\beta) \quad (4.2)$$

“S” durdurma gücüdür, $\kappa=4\pi r_0^2 m_e c^2$, Z_1 parçacık atom numarası, Z_2 hedef atom numarası $\beta=V/c$ bağıl parçacık hızı, L genellikle Barkas düzeltme faktörü olarak adlandırılır.

TRIM (Madde iyonlarının iletimi), amorf hedeflerle enerjik iyonların etkileşmelerini hesaplayan bir monte carlo bilgisayar programıdır. Yaptığımız SRIM hesaplamalarında, hedef zarar tahminleri için Kinchin-Peale çözümleri kullanıldı (Kinchin ve ark., 1955; Sigmund, 1969; Norgett ve ark., 1974). Bu konuda detaylı açıklamalar SRIM web sayfasında bulunabilir (<http://www.srim.org/>).

Biz bu tezde TRIM içeren SRIM-2013.00 simülasyon araçlarını kullandık. Biz SiC tabakası üzerine hesaplanmış grafen tek katman tabakasına 1,8 MeV proton ışınlanmasının simülasyonunu yaptık. TRIM simülasyon ekranının enine görüntüsü Şekil-4.1’de gösterilmiştir.

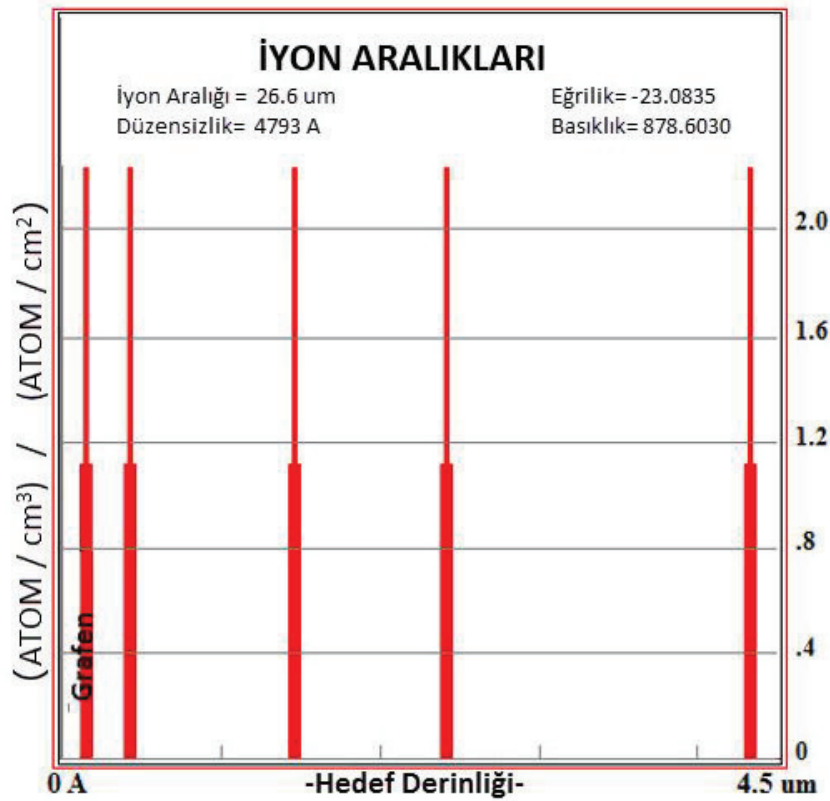


Şekil 4.1. Simülasyon ekranının enine görünümü

5. TARTIŞMA

Son yıllarda grafen malzemesi ve radyasyon arasındaki etkileşimleri hakkındaki uygulamalar çok popüler bir duruma geldi. Bununla birlikte, proton ekme gibi araştırılması gereken birçok radyasyon uygulaması da vardır. Proton ışınlama süreci boyunca, grafendeki karbon atomları hidrojen atomu yakalama eğilimindedir. Bu çalışmada 1,8 MeV proton ışınlarına maruz bırakılan tek grafen/SiC hedef malzemenin özellikleri, SRIM-TRIM Monte Carlo hesaplamaları kullanılarak incelendi.

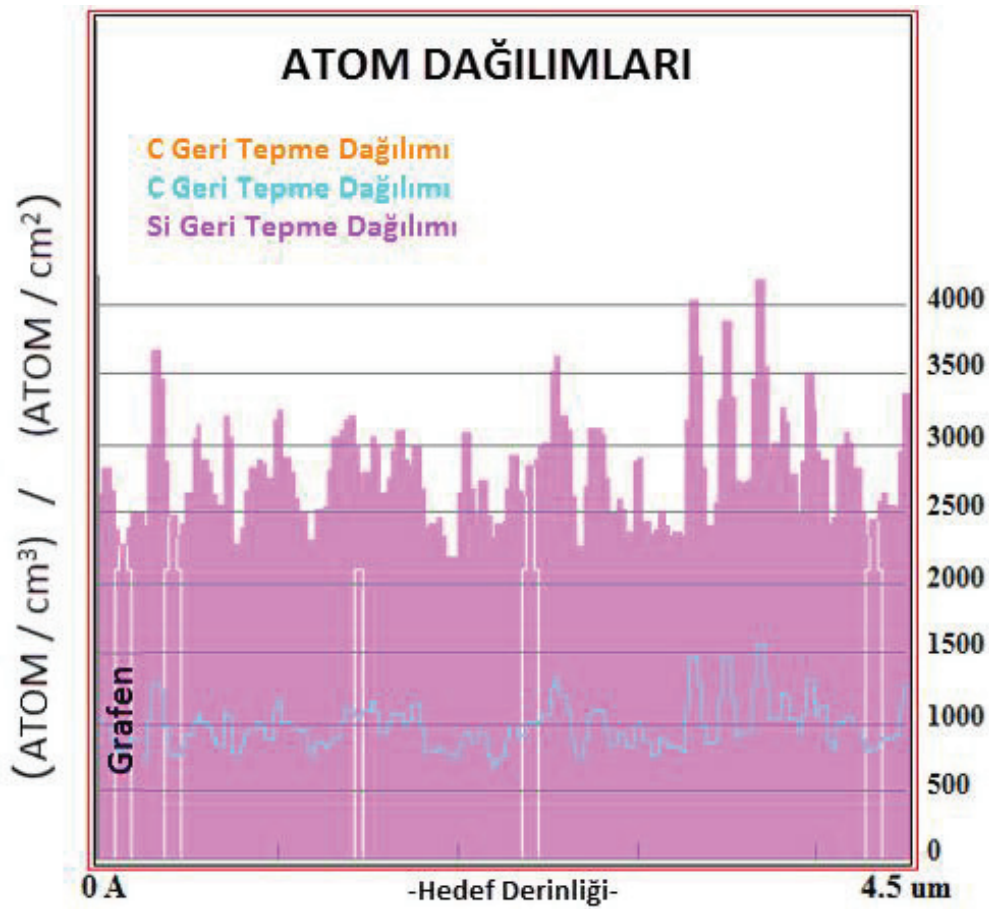
Şekil-5.1’de, 1,8 MeV’luk protonlar için iyon aralığına bağlı iyon dağılımları ve onun istatistiksel parametreleri (iyon dağılımlarının 2., 3. ve 4. anlarıyla ilişkili nicelikler olan düzensizlik, eğrilik ve basıklık) gösterilmiştir. Materyal içine giren radyasyon onun atomlarıyla ve atomdaki çekirdekleriyle çarpışmalar gerçekleştirerek enerji kaybeder. Fakat her çarpışmada kaybedilen enerji ve çarpışma sonrası katedilen mesafe aynı değildir. Bundan dolayı maddeyle etkileşen radyasyonların enerjileri aynı olsada durdurulma derinlikleri farklılık gösterir. 1,8 MeV’lik protonlar yaklaşık 26,6 μm aralığında durdurulmuştur.



Şekil 5.1. İyon Dağılımları

Şekil-5.2' den görülebileceği gibi iyon-geri tepme dağılımı hem iyon hem de bütün hedef atomlarının tekrar dağılımlarını verir. Üç atom tipinin (grafen karbonu, SiC'in Karbon ve silisyumu) geri tepme dağılımları gözlenir.

Işınlamadan sonra grafende karbon atomları güçlü kovalent bağlarla bağlı oldukları için geri tepmeye uğramamaktadır. SiC'teki Si ve karbon atomları geri tepmektedir. SRIM-TRIM Monte Carlo Kodunun iyonizasyon grafiklerinde hedef atomlar için enerji kaybı açıklandı. Hedef elektronlar; hızlı hareketli iyonlar ve geri tepen atomlardan enerjiyi soğurur; böylece elektronlar, hedef malzeme bir yalıtkan olarak seçildiğinde ve metal hedef veya fononların varlığında ısı enerjisini salarlar (Korkut ve ark., 2014).



Şekil 5.2. Atom dağılımları

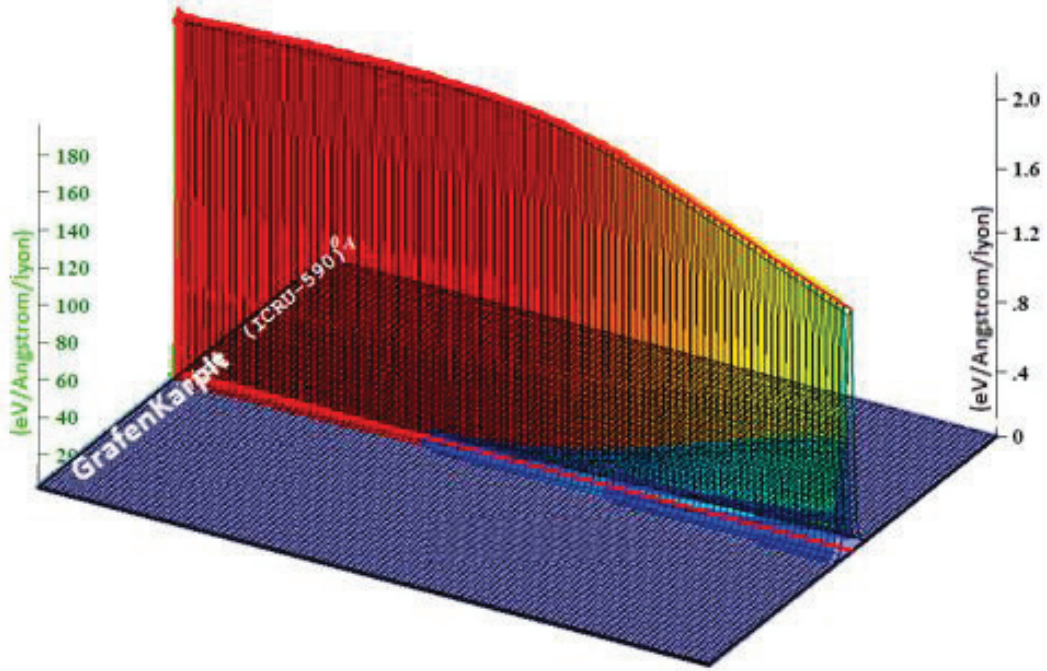
Şekil-5.3 toplam iyonizasyonun iyon başına 1798,8 KeV, toplam fononlar iyon başına 1,1 KeV ve toplam hedef hasar iyon başına 0,04 KeV olarak hedef materyalin durum iyonizasyonu hakkında bilgi verir. Grafikten de görülebileceği gibi iyonizasyon hedef bozulması ve fononlardan daha etkindir. Değerler yeni kimyasal bağların oluşumunu gösterir. Proton radyasyonu durmaya yakın nötr bir karbon atomundan bir elektron yakalar ve hidrojen atomuna dönüşür. Bu etki grafen tabakasında ve grafen-SiC tabakası yakınlarında çok daha baskındır. Sonuç C-H bağlarının oluşumu olarak yorumlanabilir.

Hedef İyonizasyonu

Toplam İyonizasyon = 1798.8 keV / İyon

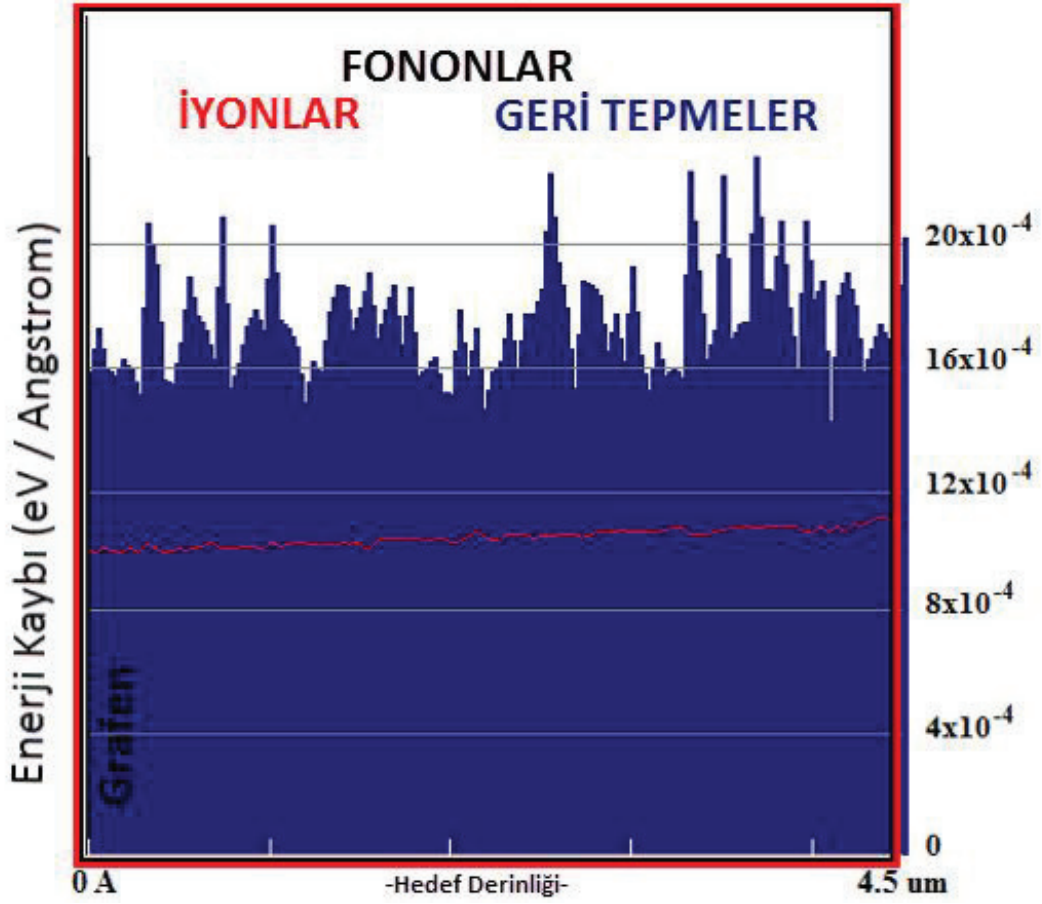
Toplam Fononlar = 1.1 keV / İyon

Toplam Hedef Hasarı = 0.04 keV / İyon



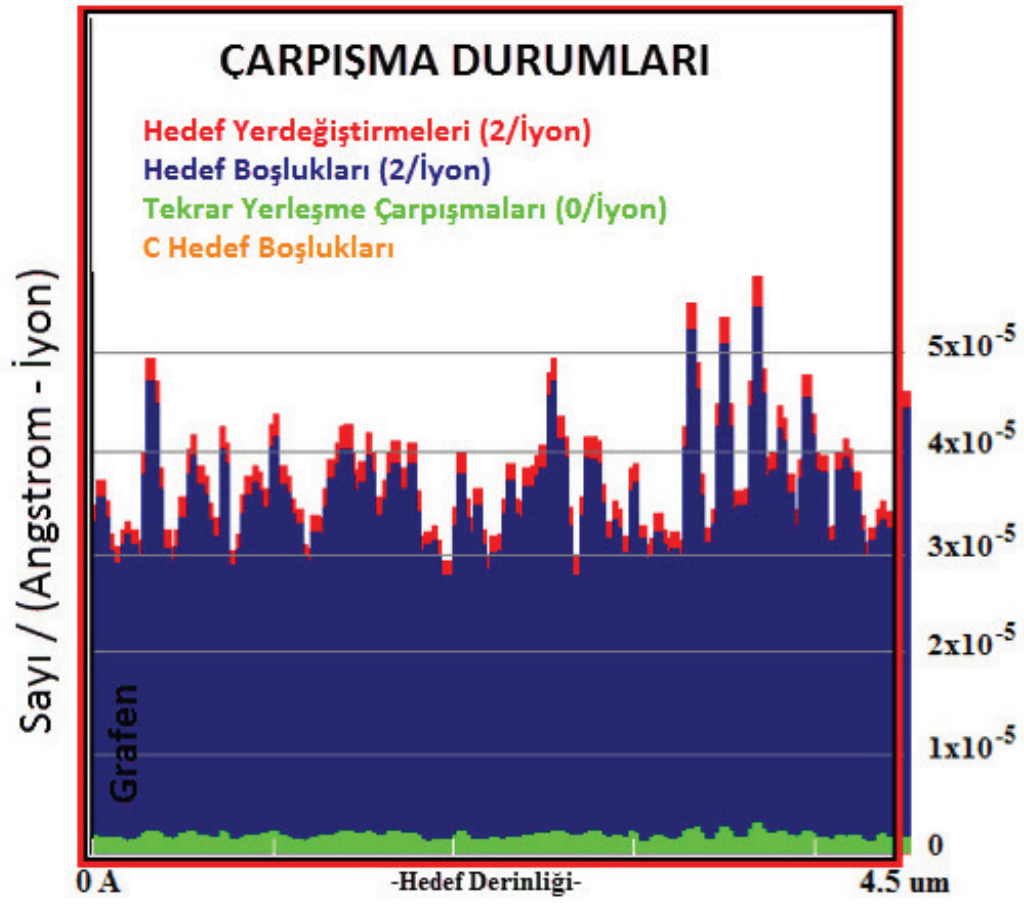
Şekil 5.3. Hedef iyonizasyonu

Şekil-5.4 proton ışınlamasıyla uyarılan fononları gösterir. Arta kalan fononlar hem iyon hem transfer edilen yer değiştirme enerjisi hem de bir örgü atomuna isabet eden geri tepen atom tarafından uyarılmışlardır. Eğer bu enerji kritik yer değiştirme enerjisinden daha az olursa hedef atom geri teper ve zamanla küçük bir periyotla titreşir ama kendi yerinden serbest kalabileceği yeterli enerjiye sahip olamaz ve sonuç olarak enerji yeni fonon üretim işlemi için verilir. Eğer bu enerji yeterliyse hedef yerinden uzaklaştırılır (Korkut ve ark., 2014).



Şekil 5.4. İyonlar ve geri tepmeler tarafından fononların oluşumu

Fononlarla uyarılmış iyonlardan ikinci kez geri tepme ile enerji kaybı oluştu. Işınlanmış aygıtların ve materyallerin elektronik kalitesi yer değiştirmelere, tekrar yerleşmelere ve boşluklara bağlıdır. Bu parametreler şekil-5.5'te hedef derinliğin fonksiyonu olarak grafiğe döküldü. En yüksek eğri toplam hedef yer değiştirmeleri gösterir. Bu terim kendi hedef örgü konumlarından kopan atomların sayısı anlamına gelir. Yer değiştirme, boşluklar ve yeniden yerleşmelerin toplamıdır. Sonraki daha düşük eğri grafen/SiC hedef boşluklarını tanımlar. Bu eğri yer değiştirmelerden daha az boşluk olduğunu gösteren hedef yer değiştirme eğrisinden daha düşüktür. En düşük eğri yeniden yerleşme çarpışmalarını gösterir. Bunlar kendi enerjilerinin hemen hemen tamamını veren bağlı atomlardaki yer değiştirmelerdir ve o daha ileri gitmek için yeterli değildir ve o geri tepen hedef atomları tarafından boşluklara düşer. Yani, o, hedef atomla çarpıştıktan sonra örgü içine yerleşir. Çünkü o aynı elementtir (karbon) ve hedefte bir değişiklik olmaz.



řekil 5.5. Hedefteki hasar durumları

6. SONUÇ

Karbonun çok özel formlarından biri olan grafen sahip olduğu optik, termal, mekanik ve elektrik özelliklerinden dolayı son zamanlarda üzerine en çok çalışılan yarı-iletken malzeme olmuştur. Grafenin yukarıda bahsedildiği benzersiz özellikleri onu geniş uygulama alanlarında birinci dereceden tercih edilen bir malzeme haline getirmektedir. Grafenin özelliklerini ve çeşitli dış etkenler karşısında göstereceği davranışları anlamaya yönelik birçok araştırma grubu oluşturulmuş ve ciddi çalışmalar yapılmıştır. Bahsi geçen dış etkenler arasında en büyük merak konularından biri de şüphesiz radyasyon karşısında göstereceği reflektir. Literatürde radyasyona maruz bırakılan grafen tabanlı malzemeler ile ilgili hatırı sayılır sayıda çalışma bulunmaktadır. Yapılan bu çalışmada SRIM-TRIM Monte Carlo programı kullanılarak grafen üzerine proton radyasyonunun etkileri araştırılmıştır. Güneş pili üretim teknolojisinin ve uzay keşfinin öneminden dolayı grafen üzerine proton ışınlama etkileri çok popüler hale gelmiştir. Uzay teknolojisinin günümüzde artık turistik faaliyetleri kaldırabilecek seviyelere gelmesi malzemelerin radyasyona karşı gösterdikleri davranışların bilinmesinin önemini daha da arttırmaktadır. Grafene uzay teknolojisinde kullanım alanı doğması ve uzayda proton radyasyonunun bol miktarda bulunması grafenin proton radyasyonuna gösterdiği tepkinin önemini oldukça artırmaktadır. SiC altlık malzeme üzerine büyütülen grafen 1.8 MeV' luk proton radyasyonu ile borbandıman edilerek elde edilen sonuçlar Bethe-Bloch eşitlikleri göz önüne alınarak analiz edildi ve yorumlandı. Proton ışınlama süreci boyunca grafendeki karbon atomlarının hidrojen yakalama eğiliminde olduğu tespit edilmiştir.

Bu çalışmada, temel olarak SiC üzerine yerleştirilmiş tek katman grafenin maruz bırakıldığı proton radyasyonunun; hidrojen ve silikon bağlar, yer değiştirmeler, kusur oluşumları ve fononlar üzerine etkileri temel olarak tartışıldı. Yarıiletken malzemeler üzerine yapılan radyasyon etkisi çalışmalarında, radyasyonun etkisiyle malzeme üzerinde çeşitli değişimlerin olduğu ve bu değişimlerin malzemenin elektrik ve optik özelliklerini ölçülebilir şekilde değiştirdiği bilinmektedir. Mevcut çalışmamızda tek katman grafenin maruz kaldığı 1.8 MeV enerjiye sahip proton radyasyonunun etkisiyle grafende hasar oluşumlarının meydana gelmesi, elektronik yapı ve fermi seviyelerinin modifikasyonu hakkında fikirler vermektedir. İyon aralığına bağlı iyon dağılımları ve düzensizlik, eğrilik ve basıklık gibi bazı istatistiksel parametreler belirlenerek

radasyunun malzeme ile etkileşimi analiz edildi. Grafenle etkileşen proton radyasyonunun malzeme içinde 26,6 μm derinliğinde durdurulduğu gözlenmiştir. Ayrıca grafenin SiC ile etkileşimi esnasında yeri değişen atomlar ve iyonizasyon belirlenerek oluşan değişiklikler belirlenmiştir.

Yapılan bu çalışmada atom dağılımları, çarpışmalar, fonon ve geri tepme dağılımları, tekrar yerleşme çarpışmaları, saçılma verimleri ve oluşan boşluklar anlatıldı. Bahsi geçen bu kavramlar radyasyon uygulamalarında malzemenin karakterini anlayabilmek ve malzemenin radyasyona gösterdiği refleksi tanımlayabilmek için önem arz eden kavramlardır. Hedef malzemenin radyasyona maruz bırakılması işlemi sonucunda SiC yarıiletkenindeki silisyum ve karbon atomları geri tepmeye uğrarken grafendeki karbon atomlarının geri tepmeye uğramaması dikkat çekici bir husustur. Malzemede cereyan eden bu olaylar anlaşıldığı takdirde malzemenin elektriksel karakteristiği daha iyi analiz edilebilir.

KAYNAKÇA

- Arinero, R., Zhang, E.X., Rezzak, N., Schrimpf, R.D., Fleetwood, D.M., Choi, B.K., Hmelo, A.B., Mekki, J., Touboul, A.D., Saigne, F. 2011. High fluence 1.8 MeV proton irradiation effects on n-type MOS capacitors. *Microelectron. Reliab.*, 51:2093.
- Anonim, 2016. www.SRIM.org (Erişim tarihi: 02.03.2016)
- Aydoğan, Ş. 2011. Katıhal Fiziği. Nobel Yağın Dağıtım, Ankara, 616.
- Balandin, A. A., Ghost, S., Bao, W., Calizo, I., Teweldebrhan, D., Miao, F. 2008. Superior thermal conductivity of single-layer graphene. *Nano Lett.*, 8: 902.
- Banhart, F., Kotakoski, J., Krasheninnikov, A.V. 2011. Structural Defects in Graphene. *American Chemical Society*, 5: 26-41.
- Bethe, H.A. 1930. Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie [Theory of the Passage of Fast Corpuscular Rays Through Matter]. *Ann. Physik*, 5: 325.
- Bethe, H.A. 1932. Bremsformel für elektronen relativistischer Geschwindigkeit. *Z. f. Physik*, 76: 293.
- Bohr, A. 1948. Penetration of atomic particles through matter. *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk*, 24:19.
- Bethe, H.A., Heitler, W. 1934. On the stopping of fast particles and on the creation of positive electrons. *Proc. Roy. Soc.*, A146: 83.
- Bloch, F. 1933. Zur Bremsing rasch bewegter Teilchen beim Durchgang durch Materie. *Ann. Physik*, 16: 287.
- Bohr, N. 1940. Scattering and stopping of fission fragments. *Phys. Rev.*, 58: 654.
- Bohr, N. 1948. The penetration of atomic particles through matter. *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, 18: 8.
- Bubin, S., Wang, B., Pantelides, S., Varga, K. 2012. Simulation of high-energy ion collisions with graphene fragments. *Physical Review B*, 85: 235435.
- Cançado LG, Takay K, Enoki T, Endo M, Kim YA, Mizusaki H. 2006. General equation for the determination of the crystallite size La of nanographite by Raman spectroscopy. *Appl Phys Lett.*, 88:163106.

- Chen JH, Jang C, Xiao S, Ishigami M, Fuhrer MS. 2008. Intrinsic and extrinsic performance limits of graphene devices on SiO₂. *Nat Nanotechnol.*, 3:206–9.
- Childres, I., Jauregui, L.A., Foxe, M., Tian, J., Jalilian, R., Jovanovic, I., Chen, Y.P. 2010. Effect of electron-beam irradiation on graphene field effect devices. *Applied Physics Letters*, 97: 173109.
- Compagnini, G., Forte, G., Giannazzo, F., Raineri, V., Magna, A. L., Deretzis, I. 2011. Ion beam induced defects in graphene: Raman spectroscopy and DFT calculation. *Journal of Molecular Structure*, 993: 506–509.
- Dillon, R.O., Woollam, J.A., Katkanant, V. 1984. Use of Raman scattering to investigate disorder and crystallite formation in asdeposited and annealed carbon films. *Phys. Rev. B*, 29:3482-9.
- Eless, V., Yager, T., Spasov, S., Lara-Avila, S., Yakimova, R., Kubatkin, S., Janssen, T.J.B.M., Tzalenchuk, A., Antonov, V. 2013. Phase coherence and energy relaxation in epitaxial graphene under microwave radiation. *Appl. Phys. Lett.*, 103: 093103.
- Fano, U. 1963. Penetration of protons, alpha particles, and mesons. *Annu. Rev. Nucl. Sci.*, 13:1–66.
- Fermi, E. 1940. The ionization loss of energy in gases and condensed materials. *Phys. Rev.*, 57: 485.
- Ferrari AC, Robertson J. 2000. Interpretation of Raman spectra of disordered and amorphous carbon. *Phys. Rev. B*, 61:14095–107.
- Geiger, H., Marsden, E. 1909. On a Diffuse Reflection of the α -Particles. *Proc. Roy. Soc.*, 82: 495.
- Geim, A. K., et. al. 2007. Making Graphene Visible, *Applied Physics Letters*, 91: 063124-063128.
- Geim, A. K., Novoselov, K. S. 2007. The rise of graphene. *Nature materials*, Vol: 6.
- Geim, A.K., 2012. Graphene prehistory. *Phys. Scr.* T146, 014003
- Compagnini, G., Giannazzo, F., Sonde, S., Raineri, V., Rimini, E. 2009. Ion irradiation and defect formation in single layer graphen. *Carbon*, 47: 3201–3207.
- Gomez-Guzman, J.M., Gomez-Morilla, I., Enamorado-Ba'ez, S.M., Moreno Sua'ez, A.I., Pinto-Go'mez, A.R. 2012. First-order ionoptics calculations for an Accelerator Mass Spectrometry system using SRIM and S3M. *Nucl Instrum Methods B*, 281: 30–36.

- Huang, H., Chen, W., Chen, S., Wee, A.T.S. 2009. Bottom-up Growth of Epitaxial Graphene on 6H-SiC (0001). *Acs Nano.*, 2: 2513-2518.
- Karabulut, N., Korkut, H., Korkut, T. xxxx. Simulations of 1.8 MeV proton irradiation effects on micrometer thickness monolayer graphene on SiC. *Xxxx*, x:xx.
- Kim, K., Park, H.J., Woo, B.C., Kim, K.J., Kim, G.T., Yun, W.S. 2008. Electric property evolution of structurally defected multilayer graphene. *Nano Lett.*, 8: 3092–6.
- Kinchin, G.H., Pease, R.S. 1955. The displacement of atoms in solids by radiation. *Rep. Prog. Phys.*, 18:1.
- Klemens, P.G. 2011. Theory of thermal conduction in thin ceramic films. *Int J Thermophys*, 22: 265.
- Knipp, J., Teller, E. 1941. Energy loss of heavy ions. *Phys. Rev.*, 59: 659.
- Kocabas, C., Dunham, S., Cao, Q., Cimino, K., Ho, X.N., Kim, H.S., Dawson, D., Payne, J., Stuenkel, M., Zhang, H., Banks, T., Feng, M., Rotkin, S.V., Rogers, J.A. 2009. High-Frequency Performance of Submicrometer Transistors That Use Aligned Arrays of Single-Walled Carbon Nanotubes. *Nano Letters.*, 9: 1937-1943.
- Komarnitsky, V., Hazdra, P. 2008. Proton implantation in silicon: evolution of deep and shallow defect states. *J. Optoelectron. Adv. M.*, 10:1374.
- Korkut, T. 2010. Deneysel ve Cern Fluka Monte Carlo Simülasyon Kodu Yöntemleri Kullanılarak 4,5 MeV Enerjili Nötronların Borlu Bileşik ve Cevherler Tarafından Yavaşlatılmasına İlişkin Parametrelerin Belirlenmesi. Doktora, Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Erzurum, 125.
- Korkut, H., Korkut, T. 2014. Evaluation of 500 keV proton irradiation of bilayer graphene on SiC by the use of SRIM code, a Monte Carlo simulation method for stopping and range of ions in matter. *J. Radioanal Nucl. Chem*, 299: 13–17.
- Krashennnikov, A.V., Banhart, F. 2007. Engineering of nanostructured carbon materials with electron or ion beams. *Nat Mater*, 6: 723–33.
- Krashennnikov, A.V., Miyamoto, Y., Tomanek, D. 2007. Role of electronic excitations in ion collisions with carbon nanostructures. *Phys Rev Lett*, 99: 16104–14.
- Kryuchkov, S.V., Kukhar, E.L., Nikitina, O.S. 2014. Graphene quasi-energy spectrum under high-frequency electromagnetic radiation. *Phys. Wave Phenom.*, 22:25.

- Lamb, W.E. 1940. Passage of uranium fission fragments through matter. *Phys. Rev.*, 58: 696.
- Landau, L.D., 1937. Zur Theorie der phasenumwandlungen II. *Phys. Z. Sowjetunion*, 11: 26-35.
- Lehtinen, A., Kotakoski, J., Krashennnikov, A.V., Tolvanen, A., Nordlund, K., Keinonen, J. 2010. Effects of ion bombardment on a two-dimensional target: Atomistic simulations of graphene irradiation. *Physical Review B*, 81: 153401.
- Lindhard, J. 1954. On the properties of a gas of charged particles. *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, 28: 8.
- Lindhard, J., Scharff, M., Schiott, H.E. 1963. Range concepts and heavy ion ranges. *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, 33:14.
- Lucchese, M.M., Stavale, F., Ferreira, E.H.M., Vilani, C., Moutinho, M.V.O., Capaz, R.B., Achete, C.A., Jorio, A. 2010. Quantifying ion-induced defects and Raman relaxation length in graphene. *Carbon*, 48: 1592–1597.
- Mathew S, Chan TK, Zhan D, Gopinadhan K, Barman A-R, Breese MBH, Dhar S, Shen ZX, Venkatesan T, Thong JTL. 2011. The effect of layer number and substrate on the stability of graphene under MeV proton beam irradiation. *Carbon*, 49: 1720–1726.
- Mattausch, A., Pankratov, O. 2007. Ab initio study of graphene on SiC. *Phys. Rev. Lett.*, 99:1.
- Neto, A.H.C., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S., Geim, A.K. 2009. The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics*, 81:109.
- Ni, Z.H., Wang, H.M. 2007. Graphene Thickness Determination Using Reflection and Contrast Spectroscopy. *Nano Lett.*, 07: 1254.
- Norgett, M.J., Robinson, M.T., Torrens, I.M. 1974. A proposed method of calculating displacement dose rates. *Nucl. Eng. Des.*, 33:50.
- Novikov, D.S., 2007. Elastic scattering theory and transport in graphene. *Phys. Rev B*, 76: 245435.
- Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V. 2004. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306: 666-669.
- Novoselov, K. S., Jiang, D. 2005. Two-dimensional atomic crystals. *PNAS.*, 102(30): 10451-10453.

- Ochedowski, O., Marinov, K., Wilbs, G., Keller, G., Scheuschner, N., Severin, D., Bender, M., Maultzsch, J., Tegude, F.J., Schleberger, M. 2013. Radiation hardness of graphene and MoS₂ field effect devices against swift heavy ion irradiation. *J. Appl. Phys.*, 113:214306.
- Park, J.S., Reina, A., Saito, R., Kong, J., Dresselhaus, G., Dresselhaus, M.S. 2009. G band Raman spectra of single, double and triple layer graphene. *Carbon*, 47, 1303, 2009.
- Peierls, R. E., 1935. Quelques proprietes typiques des corps solides. *Ann. I. H. Poincare* 5: 177-222.
- Prevel, B., Benoit, J.M., Bardotti, L., Melinon, P., Mayumi Sato, A., Ouerghi, A., Lucot, D., Bourhis, E., Gierak, J. 2012. Local ion irradiation of thin graphene films grown on SiC substrates. *Microelectron Eng.*, 98: 206–209.
- Sidorov, A.N., Orlando, T.M. 2013. Monolayer graphene platform for the study of DNA damage by low-energy electron irradiation. *J. Phys. Chem. Lett.*, 4:2328.
- Sigmund, P. 1969. A note on integral equations of the kinchin-pease type. *Rad. Eff.*, 1:15.
- Slonczewski, J.C., Weiss, P.R. 1958. Band structure of graphite. *Phys Rev.*, 109: 272.
- Smith, B.W., Luzzi, D.W. 2001. Electron Irradiation Effects in Single Wall Carbon Nanotubes. *J. Appl. Phys.*, 90: 3509–3515.
- Tantiwanichapan, K., Dimaria, J., Melo, S.N., Paiella, R. 2013. Graphene electronics for terahertz electron-beam radiation. *Nanotechnology*, 24:375205.
- Tapaszto, L., Dobrik, G., Nemes-Incze, P., Vertesy, G., Lambii, P., Biro, L.P. 2008. Tuning the electronic structure of graphene by ion irradiation. *Phys Rev B*, 8 (78): 233407-1–4.
- Teo, G., Wang, H. 2008. Visibility study of graphene multilayer structures. *Journal of Applied Physics*, 103:124302.
- Tuinstra, F., Koenig, J.L. 1970. Raman spectrum of graphite. *J. Chem. Phys.*, 53(3) 1126–1130.
- Teweldebrhan, D., Balandin, A.A. 2009. Modification of graphene properties due to electron-beam irradiation. *Appl. Phys. Lett.*, 94:013101-1–3.
- White, B.D., Bataiev, M., Goss, S.H., Hu, X., Karmarkar, A., Fleetwood, D.M., Schrimpf, R.D., Schaff, W.J., Brillson, L.J. 2003. Electrical, spectral and

- chemical properties of 1.8 MeV proton irradiated AlGa_N/Ga_N HEMT structures as a function of proton fluence. *IEEE T Nucl. Sci.*, 50:1934.
- Wu, J.Q., Zhang, Y., Wang, B., Yi, F.T., Deng, S.Z., Xu, N.S., Chen, J. 2013. Effects of X-ray irradiation on the structure and field electron emission properties of vertically aligned few-layer graphene. *Nucl. Instrum. Meth. B*, 304:49.
- Xia, F. 2009. Photocurrent imaging and efficient photon detection in graphene transistor. *Nano Lett.*, 9:1039.
- Zhang, Y. 2005. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature*, 438: 201-204.
- Ziegler, J.F. 2004. SRIM-2003. *Nucl. Instrum. Meth. B*, 219-220:1027.
- Ziegler, J.F., Ziegler, M.D., Biersack, J.P. 2010. SRIM-The stopping and range of ions in matter. *Nucl. Instrum. Meth. B*, 268:1818.
- Zubeltzu, J., Chuvilin, A., Corsetti, F., Zurutuza, A., Artacho, E. 2013. Knock-on damage in bilayer graphene: Indications for a catalytic pathway. *Phys. Rev. B*, 88:245407.

ÖZGEÇMİŞ

1988 yılında Sakarya’ da doğdu. İlk ve orta öğrenimini Pamukova’ da tamamladı. Lisans eğitimini 2005-2010 yıllarında Atatürk Üniversitesi Kazım Karabekir Eğitim Fakültesi Fizik Öğretmenliği Bölümünde tamamladı. 2015 yılında Sinop Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsünde yüksek lisans eğitimine başladı.