

T.C.
AYDIN ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
2018-YL-052

VAKUMDA İSİSAL BUHARLAŞTIRMA
YÖNTEMİYLE BÜYÜTÜLEN Cu_2Se İNCE
FİLMLEİN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN
ELİPSOMETRİK İNCELENMESİ

Sedat KORKMAZ

Tez Danışmanı:
Doç. Dr. Hüseyin DERİN

AYDIN

T.C.
AYDIN ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜNE
AYDIN

Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Programı öğrencisi Sedat KORKMAZ tarafından hazırlanan “**Vakumda Isısal Buharlaştırma Yöntemiyle Büyütülen Cu₂Se İnce Filmlerin Optik Özelliklerinin Elipsometrik İncelenmesi**” başlıklı tez, 02.10.2018 tarihinde yapılan savunma sonucunda aşağıda isimleri bulunan jüri üyelerince kabul edilmiştir.

Ünvanı, Adı Soyadı	Kurumu	İmzası
Başkan: Prof. Dr. Ethem AKTÜRK	ADÜ	
Üye : Doç. Dr. Hüseyin DERİN	ADÜ	
Üye : Dr. Öğretim Üyesi Gökhan UTLU	EÜ	

Jüri üyeleri tarafından kabul edilen bu Yüksek Lisans tezi, Enstitü Yönetim KurulununSayılı kararıyla tarihinde onaylanmıştır.

Prof. Dr. Aydın ÜNAY
Enstitü Müdürü

T.C.
AYDIN ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜNE
AYDIN

Bu tezde sunulan tüm bilgi ve sonuçların, bilimsel yöntemlerle yürütülen gerçek deney ve gözlemler çerçevesinde tarafımdan elde edildiğini, çalışmada bana ait olmayan tüm veri, düşünce, sonuç ve bilgilere bilimsel etik kuralların gereği olarak eksiksiz şekilde uygun atıf yaptığımı ve kaynak göstererek belirttiğimi beyan ederim.

26/10/2018

Sedat KORKMAZ

ÖZET

VAKUMDA ISISAL BUHARLAŞTIRMA YÖNTEMİYLE BÜYÜTÜLEN Cu_2Se İNCE FİLMLEİN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN ELİPSOMETRİK İNCELENMESİ

Sedat KORKMAZ

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı
Tez Danışmanı: Doç. Dr. Hüseyin DERİN
2018, 57 Sayfa

Yarıiletken bir malzeme olan bakır-selenyum iyi bir kimyasal ve ısısal kararlılığının yanı sıra sahip olduğu uygun optik ve elektrik özelliklerinden dolayı foto-detektör ya da güneş enerjisi dönüşümü gibi optoelektronik uygulamaları için ince film formunda detaylı olarak incelenmiştir. Opto-elektronik alanındaki bu kullanım olasılığı göz önüne alındığında bu malzemenin yapısal, morfolojik ve optik özelliklerinin detaylı olarak incelenmesi önemli bir adımdır. Bu çalışmada vakumda buharlaştırma tekniği yardımıyla büyütülen Cu_2Se ince filmlerinin yapısal, morfolojik ve optik özellikleri incelendi. İnce filmlerin kristal yapısı X-ışını kırınım ölçeri kullanılarak analiz edildi. Analizin sonuçları büyütülen filmlerin kübik yapıda stokiyometrik Cu_2Se olduğunu doğruladı. Farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerin yüzey morfolojisi atomik kuvvet mikroskobu (AFM) yardımıyla incelendi. Tüm filmlerin taşıyıcıya çok iyi tutunmuş, granül yapıları nano-boyuttaki taneciklerden oluştuğu görüldü. Cam taşıyıcı üzerindeki Cu_2Se ince filmlerin transmittans ve reflaktans spektrumları UV-VISIBLE spektrometresiyle kaydedildi. Spektrofotometrik ölçümler ısısal olarak buharlaştırılan Cu_2Se ince filmlerinin opto-elektronik uygulamaları için uygun olan karakteristik transmittansa ve reflektansa sahip olduğunu gösterdi. Büyütülen Cu_2Se ince filminin stokiyometrisi ve yüzey morfolojisi sırasıyla enerji dağılımı X-ışını spektrometresi (EDAX) ve taramalı elektron mikroskobu (SEM) resimleri yardımıyla tayin edildi. Elipsometri tekniği kullanılarak opak altın taşıyıcı ve Cu_2Se yüzey film için n kırılma indisinin ve k sönüm katsayısının foton enerjisine bağlılığı belirlendi. Absorpsiyon katsayısının spektral davranışından Cu_2Se ince filmin optik absorpsiyonu tanımlandı. Cu_2Se 'un doğrudan yasak enerji band aralığının 2,33 eV civarında olduğu bulundu.

Anahtar Sözcükler: Cu_2Se , optik özellikler, elipsometri, yasak enerji aralığı, XRD, yüzey morfolojisi

ABSTRACT

ELLIPSOMETRIC STUDY OF OPTICAL PROPERTIES OF Cu₂Se THIN FILMS DEPOSITED BY VACUUM EVAPORATION TECHNIQUE

Sedat KORKMAZ

M. Sc. Thesis, Physics

Supervisor: Associate Prof. Dr. Hüseyin DERİN

2018, 57 pages

Thin films of copper selenide as a semiconductor are well studies for optoelectronic applications such as photo detection or solar energy conversion, due to its suitable optical and electrical properties, as well as good chemical and thermal stability. In order to explore the possibility of using this in optoelectronics, a preliminary and thorough study of structural, morphological and optical properties of this material is an important step. Based on the above view, we report the structural, morphological and optical properties of Cu₂Se thin films deposited by vacuum evaporation technique in the present work. The crystalline structure of the thin films was analyzed using X-ray diffractometer. The analysis confirmed that a stoichiometric copper selenide with a cubic structure was formed. The surface morphology of the Cu₂Se thin films at different thicknesses is investigated by AFM. It is seen that all the films compose of the nano-sized particles with granular structure which are well adhered to the substrate. The transmittance and reflectance spectra of Cu₂Se thin films on glass substrate were recorded by UV-VISIBLE spectrophotometer. The results show that the thermally evaporated Cu₂Se thin films have the characteristic transmittance and reflectance being suitable for the optoelectronic applications. The stoichiometry and surface morphology of a grown Cu₂Se thin film were confirmed by energy dispersive X-ray spectroscopy (EDAX) and scanning electron microscope (SEM) micrographs, respectively. The dependence of the refractive index, n , and extinction coefficient, k , on the photon energy for both the surface film and the opaque gold layer have been determined by ellipsometry. From the spectral behaviour of absorption coefficient, optical absorption for Cu₂Se thin film was described. The direct energy band gap of Cu₂Se is found to be about at 2.33 eV.

Key Words: Cu₂Se, Optical properties, Ellipsometry, Band gap energy, XRD, Surface morphology

ÖNSÖZ

Adnan Menderes Üniversitesi Fizik Bölümünde Yüksek Lisans Tezi olarak hazırlanan bu çalışmada vakumda ısısal buharlaştırma yöntemiyle büyütülen Cu_2Se ince filmlerin geniş bir spektral aralıkta (0,59-6,20 eV) optik özelliklerinin incelenmesi amaçlanmıştır. Örnekler Atatürk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Yoğun Madde Fiziği Araştırma laboratuvarında hazırlanmış olup, optik özelliklerinin incelenmesinde elipsometrik ve spektrofotometrik ölçümlerden yararlanılmıştır.

Bu Yüksek Lisans Tez çalışmasının konusunu belirleyip, yöneten, çalışmanın her aşamasında bilimsel katkı ve yardımlarını esirgemeyen sayın hocam Doç. Dr. Hüseyin DERİN'e, örneklerin hazırlanmasında laboratuvar imkânı sağlayan Atatürk Üniversitesi, Fen Fakültesi öğretim üyesi Prof. Dr. Mustafa SAĞLAM'a ve araştırma grubu üyelerine, yıllardır maddi-manevi destekte bulunan sevgili annem ile babama, bana her zaman moral veren ve güvenen eşime içten teşekkürlerimi sunar, şükranlarımı arz ederim.

Sedat KORKMAZ

İÇİNDEKİLER

KABUL VE ONAY SAYFASI.....	iii
BİLİMSEL ETİK BİLDİRİM SAYFASI.....	v
ÖZET	vii
ABSTRACT.....	ix
ÖNSÖZ	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xv
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	xix
1. GİRİŞ.....	1
2. KAYNAK ÖZETLERİ	4
2.1. Maxwell Denklemleri ve Düzlem Elektromanyetik Dalga	4
2.2. Düzlem Ara Yüzeyde Polarize Işığın Yansımaları ve Kırılması	8
2.3. Fresnel Katsayıları.....	12
2.3.1. s – Polarizasyon Hali	12
2.3.2. p – Polarizasyon Hali	13
2.3.3. Gelme Açısının Özel Değerleri	15
2.3.3.1. Dik geliş hali	15
2.3.3.2. Brewster açısı	15
2.3.3.3. Asal gelme açısı	16
2.4. Genlik Yansıtma Katsayılarının Oranı (Elipsometrinin Temel Bağlantısı)	16
2.5. Opak Taşıyıcı Üzerindeki İnce Filmden Işığın Yansımaları ve Geçişleri.....	21
2.6. Metallerin Dielektrik Sabiti	24
2.7. Yarı İletkenlerin Optik Özellikleri.....	27
2.8. Kristal Yapı Tarafından X-Işınlının Kırınımı	29
3. MATERYAL VE YÖNTEM	31

3.1. Örneklerin Hazırlanması	31
3.2. Taşıyıcıların Temizlenmesi	31
3.3. Deneysel Ölçümler	32
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	35
4.1. Cam Taşıyıcı Üzerinde Büyütülen Cu_2Se İnce Filmlerin Yapısal ve Yüzey Özellikleri	35
4.1.1. Kristal Yapısı	35
4.1.2. Yüzey Analizi.....	36
4.1.3. Kimyasal Analizi	38
4.2. Cam Taşıyıcı Üzerindeki Cu_2Se İnce Filmlerin Transmittansı ve Reflektansı	39
4.3. Au Taşıyıcının Optik Karakterizasyonu	40
4.3.1. Asal Gelme Açısının Belirlenmesi	40
4.3.2. Altının Optik Sabitleri ve Elektronik Özellikleri	42
4.4. Au Taşıyıcı Üzerinde Büyütülen Cu_2Se İnce Filmin Optik Karakterizasyonu	44
5. SONUÇ	47
KAYNAKLAR	49
ÖZGEÇMİŞ	57

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

- \vec{B} : Manyetik Akı Yoğunluğu
 \vec{E}^{gelen} : Gelen Işık Demeti
 \vec{E}_n^r : Yansıyan Işık Demeti
 \vec{E}_n^t : Geçen Işık Demeti
 $\overline{\phi_B}$: pseudo-Brewster Açısı
 $\overline{\phi}$: Asal Gelme Açısı
 ϕ_B : Brewster Açısı
 \vec{D} : Yerdeğiştirme vektörü
 \vec{E} : Elektrik Alan
 E_L : Elektronu Etki Eden Yerel Elektrik Alan
 E_g : Yarıiletkenin Yasak Band Aralığı
 \vec{H} : Manyetik Alan
 I_0 : $z = 0$ Noktasındaki Şiddet
 \tilde{N} : Kompleks Dielektrik Sabiti
 d' : Paralel Örgü Düzlemleri Arasındaki Mesafe
 m' : Kırınım mertebesi
 n' : Birim Hacimdeki Elektron Sayısı
 n_0 : Dış Ortamın Kırılma İndisi
 n_1 : Filmin Kırılma İndisi
 \vec{q} : Dalga Vektörü
 \tilde{q} : Kompleks Dalga Vektörü
 r_p, r_s : Genlik Yansıtma Katsayıları
 t_p, t_s : Genlik Geçirgenlik Katsayıları
 β' : En Yüksek Pikin Tam Yarı Genişliği

- $\tilde{\epsilon}$: Kompleks Dielektrik Fonksiyonu
- ϵ_0 : Boşluğun dielektrik geçirgenliği
- ϵ_1 : Dielektrik Fonksiyonun Gerçel Kısmı
- ϵ_2 : Dielektrik Fonksiyonun Sanal Kısmı
- ϵ_r : Ortamın Gerçel Dielektrik Sabiti
- ρ' : Serbest Yük Yoğunluğu
- σ_r : Gerçel Optik İletkenlik
- φ_1 : Gelme Açısı
- φ_2 : Kırılma Açısı
- φ_c : Kritik Açısı
- Δ : Yansıyan Dalganın Paralel ve Dik Bileşenleri Arasındaki Faz Farkı
- AFM : Atomik Kuvvet Mikroskobu
- EDAX : Enerji Dağınımı X- Işını Analizi
- J : Akım Yoğunluğu
- K : Sabit Bir Sayı
- N : Kırılma İndisi
- SEM : Taramalı Elektron Mikroskobu
- XRD : X-ışını Difraktometresi
- A : Absorpsiyon
- I : Şiddet
- R : Reflektans (Enerji Yansıtma Katsayısı)
- c : Işığın Boşluktaki Hızı
- d : Film Kalınlığı
- e : Elektronun Yüğü
- k : Sönüm Katsayısı
- m : Kütle

n	: Gerçel Kırılma İndisi
t	: Zaman
v	: Dielektrik Bir Ortamda Dalganın Yayılma Hızı
α	: Absorpsiyon Katsayısı
β	: Filmin Faz Kalınlığı (Optik yol)
γ	: Birim Zamandaki Çarpışma Sayısı
ϵ	: Ortamın Dielektrik Sabiti
η	: Geçişlerin Cinsini İfade Eden Bir Parametre
θ	: Kırınım açısı (Bragg Açısı)
λ	: Dalgaboyu
μ	: Ortamın Manyetik Geçirgenliği (Permeabilitesi)
σ	: Elektriksel İletkenlik
τ	: Ardışık İki Çarpışma Arasında Geçen Süre
ψ	: Yansıyan Dalganın Paralel ve Dik Bileşenlerinin Genliklerinin Oranı
ω	: Frekans

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Bir düzlem ara-yüzeyden düzlem dalganın yansımaları ve geçişi	9
Şekil 2.2. n_1 kırılma indisli absorplayıcı olmayan ortam ile $n_2 = 3$ ve farklı k_2 değerlerine sahip absorplayıcı örnek arasındaki arayüzey için gelme açısının fonksiyonu olarak Fresnel yansıma genliklerinin oranı	19
Şekil 2.3. Absorplayıcı olmayan iki ortam ($n_1 > n_2$) arasındaki arayüzey için gelme açısının fonksiyonu olarak p-polarize (kesikli çizgiler) ve s-polarize (noktalı çizgiler) dalgalar için Fresnel yansıma genliklerinin oranı (sürekli çizgiler).	20
Şekil 2.4. Kırılma indisleri oranı ($n_1 > n_2$) büyük olduğu zaman absorplayıcı olmayan iki ortam ($n_1 > n_2$) arasındaki arayüzey için gelme açısının fonksiyonu olarak p –polarize (kesikli çizgiler) ve s –polarize (noktalı çizgiler) dalgalar için Fresnel yansıma genliklerinin oranı (sürekli çizgiler)	20
Şekil 2.5. İnce bir filmde ışığın yansımaları ve geçişi.....	21
Şekil 2.6. Optik geçişler; (a) ve (b) doğrudan geçişler, (c) kristal örgü titreşimlerini içeren dolaylı geçişler.....	28
Şekil 2.7. Kristal örgü düzlemlerinden X-ışınlarının yansımaları	29
Şekil 3.1. Spekülar reflektans takımı: optik diyagramı.....	33
Şekil 3.2. Spektrofotometrenin elektronik sisteminin optik diyagramı.....	34
Şekil 4.1. Farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin X-ışını kırınım desenleri	35
Şekil 4.2. Farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin atomik kuvvet mikroskobu resimleri: (a) 325 Å, (b) 450 Å ve (c) 550 Å.....	37
Şekil 4.3. 325 Å kalınlığındaki Cu_2Se ince filmin EDAX spektrumu	38
Şekil 4.4. Farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin SEM resimleri: (a) 325 Å, (b) 450 Å ve (c) 550 Å.	38
Şekil 4.5. Farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin transmitans ve reflektans spektrumları.....	39

- Şekil 4.6. 5400 Å dalgaboylu ışık için ψ ve Δ elipsometrik parametrelerinin gelme açısıyla değişimi. (Au taşıyıcının optik sabitleri: $n_2=1,49$ ve $k_2 = 1,88$.)..... 41
- Şekil 4.7. 5400 Å dalgaboylu ışık için R_p ve R_s reflektanslarının gelme açısıyla değişimi. (Au taşıyıcının optik sabitleri: $n_2=1,49$ ve $k_2 = 1,88$.)..... 41
- Şekil 4.8. Opak Au filmin optik sabitlerinin foton enerjisi ile değişimi 43
- Şekil 4.9. Opak Au filmin kompleks dielektrik sabitinin gerçel (ϵ_1) ve sanal (ϵ_2) kısımlarının foton enerjisiyle değişimi. 43
- Şekil 4.10. 325 Å kalınlığındaki Cu_2Se ince filminin kırılma indisinin ve sönüm katsayısının foton enerjisiyle değişimi..... 44
- Şekil 4.11. 325 Å kalınlığındaki Cu_2Se ince filminin α absorpsiyon katsayısının foton enerjisiyle değişimi 45
- Şekil 4.12. 325 Å kalınlığındaki Cu_2Se ince filmi için $(h\nu\alpha)^2$ 'nin foton enerjisiyle değişimi..... 46

1. GİRİŞ

Çok katmanlı elektronik cihazların fabrikasyonunda *n*-tipi ve *p*-tipi saydam yarıiletkenlere gereksinim duyulur. Sn katkılı In_2O_3 , Al katkılı ZnO ve Sb katkılı SnO_2 ... gibi malzemeler güneş pili, ince film gaz sensörü, ışık detektörü ve ışık yayan diyot yapımındaki potansiyel uygulamalarından dolayı umut veren *n*-tipi saydam yarıiletkenlerdir (Hosono, 2004; Söderström, Haug, Niquille, Terrazzoni, Ballif, 2009; Fay, Kroll, Bucher, Vallat-Sauvin, Shah, 2005; Ju, Feng, Zhang, Kittichunggchit, Hori, Moritou, Fujii, Ozaki, 2009). Bundan başka, bu malzemelerin ideal bir kimyasal kararlılığa ve yasak enerji band aralığının geniş olması nedeniyle uygun optik özelliklere sahiptir. Bu malzemelerin doğada bolca bulunması, ucuz maliyeti ve iyi bir termal kararlılığa sahip olmaları bakımından da birçok avantajı vardır. Buna rağmen, yarıiletken uygulamalarında aktif fonksiyonların bir çeşitliliği *p-n* kavşağını oluşturduğundan *n*-tipi saydam yarıiletken uygulamalarını *p*-tipi saydam yarıiletkenlere de genişletmek gerekir. Fotovoltaik performansı iyi olan *p*-tipi saydam yarıiletken malzemelerin eksikliği sebebiyle *p*-tipi saydam yarıiletken tabanlı elektronik cihazların fabrikasyonuna ait önceki girişimler başarısızlıkla sonuçlanmıştır. Bu eksikliği gidermek için Cu_2S , Cu_2Se ve Cu_2Te gibi *p*-tipi saydam yarıiletken ince filmleri *n*-tipi yarıiletkenle kavşak oluşturulmasında yaygın olarak kullanılır. Bu malzemelerden Cu_2Se , saydam ve iyi iletkenliğe sahip bir ince filminin hazırlanmasındaki kolaylığı nedeniyle en kullanışlı olanıdır. (Okimura, Matsumae, Makabe, 1980; Hermann, Fabick, 1983) Bunun sonucu olarak, Cu_2Se ideal fotovoltaik performansa sahip çok katmanlı elektronik cihazların temelini oluşturmaktadır.

İnce film büyütme koşullarına bağlı olarak, bakır selenyumun farklı stokiyostride ve stokiyostrük olmayan çeşitli kompozisyonlara sahip olduğu bilinmektedir. Oda sıcaklığında beş kararlı faza sahiptir: CuSe (klockmannite), CuSe_2 (marcasite), $\alpha\text{-Cu}_2\text{Se}$ (bellidoite), Cu_2Se_3 (umagnite) ve Cu_5Se_3 (athabaskite). (Petrović, Gilić, Ćirković, Romčević, Trajić, Yahia, 2017) Stokiyostrük kompozisyonuna bağlı olarak bu alaşımlar monoklinik, kübik, tetragonal ve hekzagonal, gibi farklı kristal yapıda olmalarından başka elektrik ve optik özellikleri de önemli derecede değişmektedir. (Zhang, Qiao, Chen, 2002; Klockmannite, 2002; Madelung, Shulz, Weiss, 2008)

Bu özelliğiyle CuSe alaşımları doğrudan bir enerji dönüşüm cihazı olup, birçok uygulamaya sahip olan güneş pillerinin yapımında, absorplayıcı tabaka olarak güneş kollektörlerinde, ışık detektörlerinde ve fotovoltaik uygulamalarında yaygın olarak kullanılmaktadır. (Lakshmikumar, Rastogi, 1994; Fadel, Fayek, Abou-Helal, Ibrahim, Shakra, 2009; Gurin, Alexeenko, Zolotovskaya, Yumashev, 2006; Heske, Winkler, Neureiter, Sokolowski, Fink, Umbach E, 1997) Bu bakımdan Cu₂Se filmlerin optik özelliklerinin yapım koşullarına ve film kalınlığına bağlılığının incelenmesi önemli ve ilginç olacaktır. Bu çalışmada, filmlerin yapımındaki koşullar uygun seçilerek, özellikle fotovoltaik uygulamalar için bir potansiyele sahip olan Cu₂Se kompozisyonu elde edildi ve optik karakterizasyonu yapıldı.

Uygulamalar için yeterli performansa sahip Cu₂Se ince filmleri sol-jel yöntemi (Gurin, Prokopenko, Alexeenko, Wang, Prokoshin,2001), vakumda buharlaştırma (Hermann, Fabick, 1983; Muthukannan, Henry, Sivkumar, 2016), Cu ve Se'un eritilmesi (Tonejc, Ogorelec, Mestnik, 1975), elektroliz yöntemi (Lippkow, Strehblow,1998; Ramesh, Thaikaikarasan, Bharathi, 2014), kimyasal banyo tekniği (Pathan, Lokhande, Amalnerkar, Seth, 2003; Gosavi, Deshpande, Gudage, Sharma, 2008), magnetron püskürtme (Li, Gao, Yang, Huang,2010; Kashida, Shimosaka, Mori, Yoshimura, 2003) gibi birkaç yöntemle büyütülmüştür. Bu işlemler arasında vakumda buharlaştırma yöntemi, optik incelemeler için gereksinim duyulan aynı kalınlıktaki pürüzsüz ve homojen filmlerin elde edilmesinin yanı sıra vakumun derecesi, taşıyıcı sıcaklığı ve buharlaştırma hızı gibi büyütme koşullarının kontrol edilmesinde daha kullanışlıdır.

Bir malzemenin güneş pili uygulamaları için gereksinim duyulan optik özellikleri transmittans, reflektans, absorpsiyon, yayma gücü ve kırılma indisidir. Özel olarak bir yarı iletken malzemenin optik sabitlerinin doğru bilinmesi CuInSe₂, Cu_{2-x}Se – Cds çok katmanlı güneş pilleri gibi çeşitli optoelektronik cihazların dizaynı ve analizi için kaçınılmazdır. Cu₂Se ince filmlerinin literatürde yayınlanmış optik özelliklerinin çoğu reflektans ve transmittans ölçümleri kullanılarak belirlenmiştir. Şu ana dek küçük ara yüzey etkilerinin dikkate değer duyarlılığına sahip yansıma elipsometrisi kullanılarak Cu₂Se ince filmlerin optik özelliklerinin incelendiği hiçbir eski çalışmanın olmadığına farkına vardık. Bundan başka Cu₂Se'un yasak enerji band aralığının literatür verileri son derece tartışmalıdır:

Doğrudan izinli geçişlerin 2'den 3 eV' a kadar deęişen aralıkta, hatta nanotancıklar için 4 eV'a karşılık gelen yasak enerji band deęerleri kaydedilmiştir. Buradan hareketle bu çalışmada ısısal buharlaşma yöntemiyle büyütülen Cu₂Se ince filmlerinin optik özellikleri ilk kez elipsometri teknięi kullanılarak belirlendi. Ayrıca, filmlerin kristal yapısı, yüzey morfolojisi ve kimyasal kompozisyonu sırasıyla XRD, AFM, SEM ve elektron dağınımı X-ışını analizi (EDAX) ölçümleri yardımıyla tayin edildi.



2. KAYNAK ÖZETLERİ

2.1. Maxwell Denklemleri ve Düzlem Elektromanyetik Dalga

Katı ortamlarda ışığın yayılmasının tanımlanmasında Maxwell denklemlerinin makroskopik versiyonuyla işe başlamak uygun olacaktır. Bu denklemler

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \epsilon \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho' \quad (1)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = \mu \vec{\nabla} \cdot \vec{H} = 0 \quad (2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\frac{\mu}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{4\pi\sigma \vec{E}}{c} + \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (4)$$

bağıntılarıyla belirlidir. Burada, homojen ve izotropik ortam için $\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}$ olup, \vec{E} elektrik alanından kaynaklanan elektriksel akı ya da yerdeğiştirme vektörü, $B = \mu_0 \mu_r \vec{H}$ olup, \vec{H} manyetik alanın ortaya çıkardığı manyetik akı yoğunluğu, $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$ ortamın dielektrik sabiti (elektriksel permitivite), $\mu = \mu_0 \mu_r$ ortamın manyetik permeabilitesi, ρ' serbest yük yoğunluğu, σ elektriksel iletkenlik ve t zamandır. Ayrıca, ϵ_0 ve μ_0 , sırasıyla $8,8542 \times 10^{-12} C^2/Nm^2$ ve $(4\pi) \times 10^{-7} Ns^2/C^2$ gerçel sabit değerlere sahip olup, sırasıyla boşluğun elektriksel geçirgenliği (permitivite) ve manyetik geçirgenliği (permeabilitesi)'dir. Bu bağıntılarda elektriksel nicelikler elektrostatik birimler, manyetik nicelikler ise elektromanyetik birimler cinsinden ölçülür.

Serbest yükün bulunmadığı ortam ($\rho' = 0$ için) (3) bağıntısında \vec{B}' 'yi ortadan kaldırmak için bağıntının her iki tarafının rotasyoneli alınır ve (4) bağıntısı kullanılırsa ortamda \vec{E} alanının yayılmasını tanımlayan

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \frac{4\pi\mu\sigma}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (5)$$

dalga denklemi elde edilir. Benzer şekilde (4) bağıntısında \vec{E}' 'yi ortadan kaldırmak için bağıntının her iki tarafının rotasyoneli alınır ve (3) bağıntısı kullanılırsa ortamda \vec{H} alanının yayılmasını tanımlayan

$$\nabla^2 \vec{H} = \frac{\epsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} + \frac{4\pi\mu\sigma}{c^2} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad (6)$$

dalga denklemi elde edilir. (1) ve (5) denklemleri elektrik alan için çözülürse katı içerisinde ışığın yayılmasını ε ve μ gerçel optik parametreleri cinsinden tanımlayan enine düzlem dalga ifadesi elde edilir. Bu çözümler

$$\vec{E}(r, t) = \vec{E}_0 \exp[i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)] \quad (7)$$

şeklinde kompleks harmonik ifadeye sahiptir. Burada, ortamdaki ışık dalgasının tek renk olduğu kabul edildiğinden tek bir frekans bileşeni gözükmemektedir. Ayrıca, dalganın ilerleme yönünü gösteren \vec{q} kompleks dalga vektörü alan genlik vektörüne dik olup, büyüklüğü

$$\vec{q} = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \left[\varepsilon_r + i\left(\frac{4\pi\sigma_r}{\omega}\right)\right]} = \left(\frac{\omega}{c}\right) \tilde{N} \quad (8)$$

bağıntısıyla belirlidir. Kompleks dalga vektörüne (5) ve (6) denklemlerinin en sağdaki optik iletkenlik terimi nedeniyle enerjideki kaybın hesaba katılması için gereksinim duyulur. Kompleks dalga vektörü ifadesinde ω frekanslı ışık dalgası için ε_r ortamın gerçel dielektrik sabiti, σ_r ise gerçel optik iletkenliğini gösterir. \tilde{N} ise ω frekansındaki kompleks kırılma indisi olup,

$$\tilde{N} = n + ik = \sqrt{\varepsilon_r + i\left(\frac{4\pi\sigma_r}{\omega}\right)} \quad (9)$$

bağıntısıyla belirlidir. İlk eşitlikteki n gerçel kırılma indisi, k ise sönüm katsayısıdır.

Katının optik özelliklerinin bu yeni tanımlanmasıyla, (5) bağıntısıyla verilen dalga denkleminin çözümü olan \vec{E} elektrik alanı için

$$\vec{E}(r, t) = \vec{E}_0 \exp\left(-\frac{\omega k z}{c}\right) \exp\left\{i\left(\frac{\omega n z}{c} - \omega t\right)\right\} \quad (10)$$

bağıntısını verir. Burada, yayılma doğrultusunu tanımlayan \vec{q} dalga vektörünün z -eksenine paralel olduğu kabul edilir. Buna göre, ortam içerisinde xy -düzlemiyle sınırlandırılan \vec{E} elektrik alan vektörünün yayılmasının $v_p = c/n$ faz hızına,

$\lambda_m = 2\pi c/\omega n$ dalgaboyuna ve $\omega k/c$ sönüm uzunluğuyla ($1/e$ 'de) üstel olarak sönümlenen genliğe sahip bir dalga olduğu söylenebilir. Dalganın I şiddeti ya da

izotropik bir katı için birim zamanda \vec{q} dalga vektörüne dik birim yüzeyden geçirdiği enerjinin zaman üzerinden ortalaması

$$I(z) = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r v_p}{2} E_0^2 \exp\left(-\frac{2\omega kz}{c}\right) \quad (11)$$

bağıntısıyla verilir. Lambert-Beer absorpsiyon yasasına göre, α absorpsiyon katsayısı enerji kaybindan dolayı şiddet kaybını tanımlar. Böylece,

$$I(z) = I_0 \exp(-\alpha z) \quad (12)$$

$$\alpha = \frac{2\omega k}{c} = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (13)$$

$$I_0 = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r v_p}{2} E_0^2 \quad (14)$$

bağıntıları yazılabilir. Burada I_0 , $z = 0$ noktasındaki şiddettir. Ayrıca, $\lambda_0 = 2\pi c/\omega = n\lambda_m$ olup, vakumda ilerleyen aynı frekanslı ışık dalgasının dalgaboyudur. Bu bağıntılar ortamın ideal bir metal yani, $n = 0$ ve $k \neq 0$ olması durumunda geçerli değildir. Bu özel durumda $I(z) = 0$ olup, boşluk ortamından metal içerisine net bir enerji iletilmediğinden hiç enerji kaybı olmaz.

Kompleks kırılma indisinin yanı sıra, kompleks dielektrik sabiti katıların makroskopic özelliklerinin incelenmesinde yaygın olarak kullanılır. Kompleks dielektrik sabiti

$$\tilde{\varepsilon} = N^2 = \varepsilon_r + i\left(\frac{4\pi\sigma_r}{\omega}\right) \quad (15)$$

bağıntısıyla kompleks kırılma indisine bağlıdır. $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ şeklinde yazılırsa, kompleks kırılma indisinin gerçel ve sanal kısımları için

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_r = n^2 - k^2 \quad (16)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{4\pi\sigma_r}{\omega} = 2nk \quad (17)$$

bağıntıları elde edilir.

İletken olmayan ortam ($\sigma_r = 0$) için (5) ve (6) yayılma denklemleri

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{\varepsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (18)$$

$$\nabla^2 \vec{H} = \frac{\varepsilon\mu}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}}{\partial t^2} \quad (19)$$

bağıntılarına indirgenir. (18) ve (19) denklemleri standart dalga denklemiyle karşılaştırılırsa, absorplayıcı olmayan ortamda dalganın yayılma hızı için

$$v = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon\mu}} \quad (20)$$

bağıntısı elde edilir. Optik frekanslarda, ferromanyetik malzemeler hariç diğer tüm maddeler için $\mu \cong 1$ olduğundan dielektrik bir ortamda dalganın yayılma hızı

$$v = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon}} \quad (21)$$

bağıntısı ile tanımlanır. Dalganın boşlukta ve ortam içindeki yayılma hızlarının oranına ortamın n mutlak kırılma indisi adı verilir. Bu tanıma göre, absorplayıcı olmayan bir ortam için mutlak kırılma indisi

$$n = \frac{c}{v} = \sqrt{\varepsilon} \quad (22)$$

bağıntısı ile belirlidir. (Vasicek,1960; Ward,1988)

Teoride, hacimli katıların kırılma indisini ölçmek için deneyler tasarlanabilir. Örnek olarak, optik bakımdan parlatılmış düzlem paralel iki yüzeye sahip bir malzeme diliminin bilinen ω frekansında ve $\lambda = 2\pi c/\omega$ dalgaboyunda tek renk ışıkla aydınlatıldığını düşünelim. Işık dalgası ortamı geçtiği zaman ortaya çıkan faz kayması (referans dalgaya göre; n için) ve şiddetteki değişim (k için) ölçülmek suretiyle malzemenin n ve k optik özellikleri belirlenebilir. Ancak, ölçümler katının dışında yapılmak zorunda olduğundan, uygulamada katı ve kuşatan ortam ara-yüzeylerinin etkisinin hesaba katılması gerekir. Bu yöntemle, $d \sim 0,1 \text{ cm}$ kalınlığında parlatılmış hacimli malzeme için α absorpsiyon katsayısının maksimum ölçülebilir değeri 10^2 cm^{-1} 'dir. Çünkü daha büyük α değerleri için malzeme hemen hemen opaktır. Bunun sonucu olarak, geçirgenlik ölçümüne göre, elipsometri gibi bir yansıma ölçümü band içi ve bandlar arası doğrudan geçişlerle ilişkili olan çok daha büyük α değerlerinin ($< 10^3 \text{ cm}^{-1}$) belirlenmesinde kullanılabilir. Bundan başka, böyle bir geometride ortaya çıkan vakuma göre daha büyük faz kayması ölçümleri $n = 1,4 - 4$ tipik değerlerine sahip katılar için kullanışlı değildir. Bu durumda, n kırılma indisini belirlemek için malzemenin

geçirgen ya da opak olmasına bağlı olarak, sırasıyla transmitans ya da reflektans ölçümleri tercih edilebilir.

2.2. Düzlem Ara Yüzeyde Polarize Işığın Yansıması ve Kırılması

Yarı sonsuz iki ortam arasındaki düzlem ara yüzey üzerine tek renk düzlem ışık dalgasının eğik olarak geldiği temsili olarak Şekil 2.1’de gösterilmiştir. Burada $z=0$ ara yüzeyi dikkate alınırsa kompleks kırılma indisi $z < 0$ bölgesindeki \tilde{N}_1 değerinden, $z > 0$ bölgesindeki \tilde{N}_2 değerine keskin biçimde değişir. $z < 0$ ve $z > 0$ ortamlarında ışığın elektrik alan bileşenlerinin

$$\tilde{E}(\vec{r}, t) = \tilde{E}_\omega \exp[i(q_x x + q_z z - \omega t)] \quad (23)$$

şeklinde düzlem dalgalardan oluştuğu kabul edilir. Görüldüğü gibi ışığın elektrik alan vektörleri xz - düzleminde bulunur. Burada xz - düzlemi gelme düzlemi olarak adlandırılır. Bu seçim y doğrultusunda öteleme simetrisi ile desteklenir. Buna bağlı olarak $q_y = 0$ bulunur. (23) bağıntısıyla tanımlanan düzlem dalga ifadeleri dalga denkleminde yerine yazılırsa,

$$q_x^2 + q_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{N}^2(\omega) \quad (24)$$

bağıntısı elde edilir. Bu bağıntının ortamın kompleks kırılma indisini veya kompleks elektriksel geçirgenliğini (kompleks permitivite) içerdiği açıkça görülmektedir.

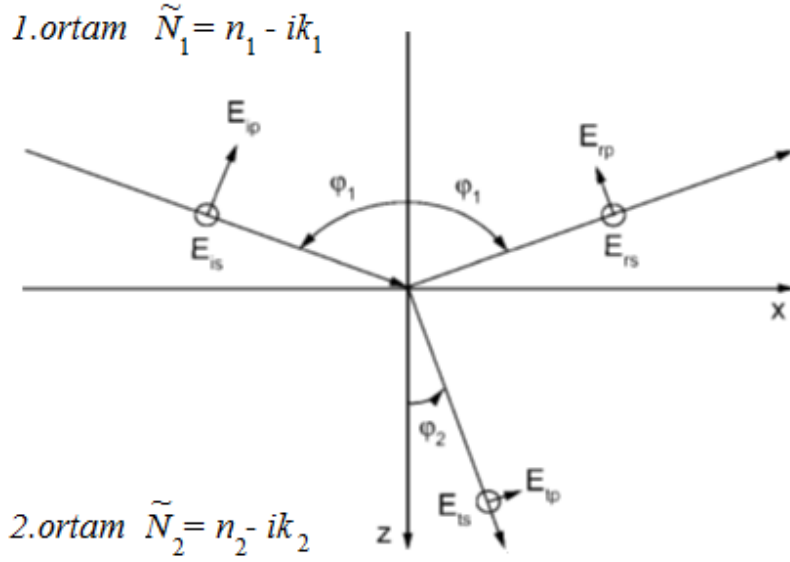
1 ortamındaki elektrik alan vektörleri

$$\begin{aligned} \tilde{E}_i(\vec{r}, t) &= \tilde{E}_{\omega i} \exp[i(q_{xi} x + q_{zi} z - \omega t)] \\ \tilde{E}_r(\vec{r}, t) &= \tilde{E}_{\omega r} \exp[i(q_{xr} x + q_{zr} z - \omega t)] \quad z < 0. \end{aligned} \quad (25)$$

şeklinde gelen ve yansıyan düzlem dalga ifadeleriyle, ikinci ortama geçen dalga ise

$$\tilde{E}_t(\vec{r}, t) = \tilde{E}_{\omega t} \exp[i(q_{xt} x + q_{zt} z - \omega t)] \quad z > 0. \quad (26)$$

ifadesiyle tanımlanabilir.



Şekil 2.1. Bir düzlem ara-yüzeyden düzlem dalganın yansımaları ve geçişi

Dalga vektörünün x ve z bileşenlerini

$$\tilde{q}_{xi} = \frac{\omega}{c} \tilde{N}_1 \sin \varphi_1, \quad \tilde{q}_{zi} = \frac{\omega}{c} \tilde{N}_1 \cos \varphi_1 \quad (27)$$

şeklinde ifade ederek, φ_1 gelme açısını tanımlayabiliriz. Burada $\sin \varphi_1$ ve $\cos \varphi_1$ trigonometrik fonksiyonları (24) bağıntısının gereksinim duyduğu $\sin^2 \varphi_1 + \cos^2 \varphi_1 = 1$ koşulunu sağlamalarına rağmen kompleks olabilir. Yine benzer şekilde $\varphi_1 = \arctan(\tilde{q}_{xi}/\tilde{q}_{zi})$ olduğunu söyleyebiliriz. Bu durumda kompleks argümana sahip kompleks trigonometrik fonksiyonlara başvurabiliriz. Ayrıca, ξ_1 ve ξ_2 gerçel olmak üzere, $\tilde{\xi} = \xi_1 + i\xi_2$ kompleks argümanı için

$$\sin \xi = [\exp(i\xi) - \exp(-i\xi)]/2i \quad \text{ve}$$

$$\cos \xi = [\exp(i\xi) + \exp(-i\xi)]/2 \quad (28)$$

trigonometrik fonksiyonlarını tanımlayabiliriz. (25) ve (26) bağıntıları ile verilen düzlem dalgaları tekrar ele alalım. $z = 0$ ara yüzeyinde yüzeye teğet bileşenler herhangi bir x noktasında karşılaşacağından üç dalga vektörünün x bileşenleri

$$\tilde{q}_{xi} = \tilde{q}_{xr} = \tilde{q}_{xt} \quad (29)$$

eşitliğini sağlamak zorundadır. (24) bağıntısıyla birlikte bu bağıntıların soldaki parçası $q_{zr}^2 = q_{zi}^2$ olduğunu ifade eder. Bunun sonucu olarak, yansıyan dalganın ara yüzeyden uzaklaştığını gösteren $q_{zr} = -q_{zi}$ kök değeri seçilebilir. Bu durumda

$$\tilde{q}_{xr} = \frac{\omega}{c} \tilde{N}_1 \sin \varphi_1 \quad \text{ve} \quad \tilde{q}_{zr} = -\frac{\omega}{c} \tilde{N}_1 \cos \varphi_1 \quad (30)$$

ifadeleri yazılabilir. Bu bağıntılardan açıkça görüldüğü gibi, yansıyan dalga vektörünün bileşenleri kırılma indisine ve gelme açısına bağlıdır. Başka bir deyişle, yansıma açısı gelme açısına eşittir.

(24) bağıntısıyla birlikte (29) bağıntısının sağdaki eşitliği geçen dalga vektörlerinin z- bileşeni için

$$q_{zt}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{N}_2^2 \left(1 - \frac{\tilde{N}_1^2}{\tilde{N}_2^2} \sin^2 \varphi_1\right) \quad (31)$$

bağıntısını verir. Gelen dalga vektörü bileşenlerinin (27) bağıntısı biçiminde yazılmasına benzer olarak geçen dalga vektörünün bileşenleri de

$$\tilde{q}_{xt} = \frac{\omega}{c} \tilde{N}_2 \sin \varphi_2, \quad \tilde{q}_{zt} = \frac{\omega}{c} \tilde{N}_2 \cos \varphi_2 \quad (32)$$

şeklinde yazılması uygun olacaktır. Burada, $\varphi_2 = \arctan(k_{xt}/k_{zt})$ bağıntısıyla belirli olan kırılma açısıdır. (27), (29) ve (32) bağıntılarından

$$\tilde{N}_1 \sin \varphi_1 = \tilde{N}_2 \sin \varphi_2 \quad (33)$$

kırılma yasası (Snell yasası) elde edilebilir.

Her iki ortam saydam olursa, kırılma indisleri gerçel olup, n_1 ve n_2 olarak gösterilebilir. Ayrıca, φ_1 ve $\sin \varphi_1$ de gerçel olur. Ayrıca, φ_1 ve $\sin \varphi_1$ de gerçel olur fakat φ_2 kırılma açısı $n_1 \sin \varphi_1 \geq n_2$ ise gerçeldir. Ancak, bu koşul

$$n_1 > n_2, \quad \varphi_1 \geq \varphi_c \equiv \sin^{-1} \frac{n_2}{n_1} \quad (34)$$

durumunda sağlanmaz. Ancak $n_2 < n_1$ ise gelme açısı sıfır derece değerinden (34) bağıntısı ile belirlenen kritik açı değerine artarken, kırılma açısı sıfır değerinden $\pi/2$ değerine artar. Gelme açısı artmaya devam ederse φ_2 'nin gerçel

parçası $\pi/2$ değerinde sabit kalırken, sıfıra eşit olmamakla birlikte sanal değeri ortaya çıkar.

(28) ifadeleri $\xi = \pi/2$ değeri için ele alır, (33) bağıntısıyla verilen Snell yasasını kullanırsak, kırılma açısı için,

$$\varphi_2 = \frac{\pi}{2} + i\ln \frac{n_1 \sin \varphi_1 - \sqrt{(n_1 \sin \varphi_1)^2 - n_2^2}}{n_2}, \quad \varphi_1 \geq \varphi_c, \quad (35)$$

bağıntısı elde edilir. (31) bağıntısından geçen dalganın z-bileşeni için

$$\tilde{q}_{zt} = i \frac{\omega}{c} \sqrt{(n_1 \sin \varphi_1)^2 - n_2^2}, \quad \varphi_1 \geq \varphi_c \quad (36)$$

kompleks ifadesi bulunur.

Ortaya çıkan alan deseni z eksenine doğrultusunda homojen olmayan titreşimsiz bir düzlem dalgadır. Bu dalga sonsuzluk dalgası (evanescent dalga) olarak adlandırılır. İkinci ortamdaki sabit faz düzlemleri x eksenine dik olup, $c/(n_1 \sin \varphi_1)$ hızıyla sağa doğru hareket eder. Alan şiddetinin büyüklüğü, (26) ve (36) bağıntılarından elde edileceği gibi, z koordinatıyla üstel olarak azalır.

$$|\vec{E}_t(\vec{r}, t)| = |\vec{E}_{\omega t}| \exp\left(-z \frac{\omega}{c} \sqrt{(n_1 \sin \varphi_1)^2 - n_2^2}\right), \quad \varphi_1 \geq \varphi_c, \quad (37)$$

Elektromanyetik dalgaların bir ortamdan diğerine geçişinin ve arayüzeyden yansımalarının daha detaylı incelemesi arayüzeyde \vec{E} ve \vec{H} 'nin teğetsel (yani, $xy -$) bileşenleri için süreklilik koşullarının uygulanması gerekir. \vec{q} dalga vektörüne sahip düzlem dalgalar için, alan şiddetleri $\vec{H} = -(\vec{q} \times \vec{E})/(\omega\mu_0)$ ve $\vec{E} = (\vec{q} \times \vec{H})/(\omega\varepsilon\varepsilon_0)$ ifadelerine uygun olacak şekilde birbirleri ile ilişki içindedir. Düzlem dalga için $q_y = 0$ olduğunda bu alanların kartezyen bileşenleri

$$H_x = \frac{q_z E_y}{\omega\mu_0}, \quad H_y = \frac{q_x E_z - q_z E_x}{\omega\mu_0}, \quad H_z = \frac{-q_x E_y}{\omega\mu_0} \quad (39)$$

$$E_x = \frac{-q_z H_y}{\omega\varepsilon\varepsilon_0}, \quad E_y = \frac{q_z H_x - q_x H_z}{\omega\varepsilon\varepsilon_0}, \quad E_z = \frac{q_x H_y}{\omega\varepsilon\varepsilon_0} \quad (40)$$

bağıntılarıyla ifade edilebilir.

Ayrıca, iki ortamdaki dalgaların ara-yüzeyde karşılaşmasını sağlamak için sınır koşullarının bir takımına ihtiyaç duyulur. Bu koşullar:

1. \vec{E} ve \vec{H} 'nin yüzeye paralel bileşenleri sınırın her iki tarafında aynı değere sahip olmalıdır.

2. \vec{D} ve \vec{B} 'nin yüzeye dik bileşenleri sınırın iki tarafında aynı değere sahip olmalıdır şeklinde ifade edilebilir.

$E_x = E_z = 0$ olan, yani gelme düzlemine dik lineer polarize olmuş dalgalar için, sıfırdan farklı sadece üç alan bileşeni (E_y , H_x ve H_z) vardır. Bu polarizasyon s –polarizasyon olarak adlandırılır. Bu polarizasyonunun aksi olarak düzlem dalgalar gelme düzlemine paralel polarize olduğu zaman, sıfırdan farklı alan bileşenleri sadece E_x, E_z ve H_y 'dir. Böyle gerçekleşen polarizasyon p –polarizasyon olarak adlandırılır. Genel bir polarizasyon hali (eliptik polarizasyon) s – ve p – polarizasyon hallerinin süperpozisyonu olarak göz önüne alınabilir.

2.3. Fresnel Katsayıları

2.3.1. s – Polarizasyon Hali

Gelen, yansıyan ve geçen dalgaların genlikleri sırasıyla E_{is} , E_{rs} ve E_{ts} olsun. Bu genlikler, (25) ve (26) bağıntılarıyla tanımlanan $\vec{E}_{\omega i}$, $\vec{E}_{\omega r}$ ve $\vec{E}_{\omega t}$ vektörlerinin y bileşenlerini temsil eder. (29) bağıntısını kullanırsak, $z = 0$ arayüzeyinde teğetsel (y) bileşenlerini karşılayan koşul

$$E_{is} + E_{rs} = E_{ts}, \quad (41)$$

şeklini alır. Gelen dalganın manyetik alan vektörünün teğetsel (x) bileşenini tayin etmek adına (39) bağıntısı dikkate alınır, genliğin $q_{zi}E_{is}/(\omega\mu_0)$ olduğu görülür. Benzer şekilde, yansıyan ve geçen dalgaların manyetik alan vektörlerinin teğetsel (x) bileşenleri sırasıyla $q_{zr}E_{rs}/(\omega\mu_0)$ ve $q_{zt}E_{ts}/(\omega\mu_0)$ olur. (30) ve (32) bağıntılarını kullanarak, $z = 0$ arayüzeyinde manyetik alan şiddetinin teğetsel (x) bileşenlerini karşılayan koşul elektrik alan cinsinden

$$\tilde{N}_1 \cos \varphi_1 (E_{is} - E_{rs}) = \tilde{N}_2 \cos \varphi_2 E_{ts} \quad (42)$$

şeklinde ifade edilebilir. (41) ve (42) bağıntılarının ortak çözümünden, alan genliklerinin oranını ifade eden Fresnel toplam yansıma ve geçirgenlik katsayıları

$$r_s \equiv \frac{E_{rs}}{E_{is}} = \frac{\bar{N}_1 \cos \varphi_1 - \bar{N}_2 \cos \varphi_2}{\bar{N}_1 \cos \varphi_1 + \bar{N}_2 \cos \varphi_2}, \quad (43)$$

$$t_s \equiv \frac{E_{ts}}{E_{is}} = \frac{2\bar{N}_1 \cos \varphi_1}{\bar{N}_1 \cos \varphi_1 + \bar{N}_2 \cos \varphi_2}, \quad (44)$$

bağıntıları ile ifade edilir. Bu katsayılar, (33) bağıntısıyla tanımlanan Snell bağıntısı kullanılarak

$$r_s = \frac{\sin(\varphi_2 - \varphi_1)}{\sin(\varphi_2 + \varphi_1)} = \frac{\bar{N}_1 \cos \varphi_1 - \sqrt{\bar{N}_2^2 - \bar{N}_1^2 \sin^2 \varphi_1}}{\bar{N}_1 \cos \varphi_1 + \sqrt{\bar{N}_2^2 - \bar{N}_1^2 \sin^2 \varphi_1}} = \tan \psi_s \exp(i\Delta_s) \quad (45)$$

$$t_s = \frac{2\sin \varphi_2 \cos \varphi_1}{\sin(\varphi_2 + \varphi_1)}, \quad (46)$$

şeklinde daha sade biçimde yazılabilir. (45) bağıntısıyla verilen r_s yansıma katsayısı ψ_s ve Δ_s gibi iki açı yardımıyla da ifade edilebilir. Bu yazım şekli yansıyan ve gelen dalgaların alan genliklerinin büyüklüklerinin oranını ($\tan \psi_s$) ve faz farkını (Δ_s) ayrı bir şekilde ele almanın uygun bir yoludur.

s – polarizasyon için, manyetik alan şiddeti hem teğetsel hem de dik bileşene sahiptir. (29) ve (39) bağıntılarından, manyetik alanın gelme düzlemine dik bileşenleri için süreklilik koşulunun

$$H_{zi} + H_{zr} = H_{zt}, \quad (47)$$

şeklinde olduğunu ispatlayabiliriz. Elbette ki, bu bağıntı $\vec{B}_\omega = \mu_o \vec{H}_\omega$ bağıntısıyla belirli manyetik alan etkisindeki ortam için manyetik indüksiyonun dik bileşenlerine ait genel sınır koşuludur.

2.3.2. p – Polarizasyon Hali

p – polarizasyon hali için Fresnel katsayıları s – polarizasyon halindeki benzer şekilde türetilir. Gelen, yansıyan ve geçen dalgaların manyetik alan şiddetlerinin genliklerini sırasıyla H_{ip} , H_{rp} ve H_{tp} ile gösterelim. $z = 0$ arayüzeyinde \vec{H} 'nin teğetsel (y) bileşenlerine karşılık gelen (29) bağıntısının kullanımı

$$H_{ip} + H_{rp} = H_{tp}, \quad (48)$$

eşitliği elde edilir. (40) bağıntısı gözönüne alınır, gelen dalganın elektrik alan şiddeti vektörünün teğetsel (x) bileşeninin genliğinin $E_{xi} = -q_{zi}H_{ip}/(\omega\epsilon\epsilon_0)$ değerine sahip olduğu görülür. Benzer şekilde, yansıyan ve geçen dalgaların x bileşenlerinin genlikleri sırasıyla $E_{xr} = -q_{zr}H_{rp}/(\omega\epsilon\epsilon_0)$ ve $E_{xt} = -q_{zt}H_{tp}/(\omega\epsilon\epsilon_0)$ bağıntıları ile ifade edilir. (30) ve (32) bağıntılarını kullanarak, $z = 0$ arayüzeyinde elektrik alanın teğetsel bileşenlerini manyetik alan şiddetleri cinsinden

$$\tilde{N}_2 \cos \varphi_1 (H_{ip} - H_{rp}) = \tilde{N}_1 \cos \varphi_2 H_{tp}, \quad (49)$$

şeklinde yazabiliriz.

Fresnel yansıma ve geçirgenlik katsayıları sırasıyla E_{rp} yansıyan ve E_{tp} geçen dalgaların elektrik alan şiddetlerinin genliklerinin E_{ip} gelen dalganın elektrik alan şiddetinin genliğine oranı olarak tanımlanır. Bu katsayılar

$$r_p \equiv \frac{E_{rp}}{E_{ip}} = \frac{E_{xr}}{E_{xi}} = -\frac{E_{zr}}{E_{zi}} = -\frac{H_{rp}}{H_{ip}},$$

$$t_p \equiv \frac{E_{tp}}{E_{ip}} = \frac{\tilde{N}_1 H_{rp}}{\tilde{N}_2 H_{ip}}, \quad (50)$$

bağıntılarıyla manyetik alan vektörünün genliğine bağlıdır. Buna göre (48) ve (49) bağıntılarının ortak çözümünden manyetik alan vektörünün izafi genlikleri

$$r_p = \frac{\tilde{N}_1 \cos \varphi_2 - \tilde{N}_2 \cos \varphi_1}{\tilde{N}_1 \cos \varphi_2 + \tilde{N}_2 \cos \varphi_1} = \frac{\tilde{N}_1/\cos \varphi_1 - \tilde{N}_2/\cos \varphi_2}{\tilde{N}_1/\cos \varphi_1 + \tilde{N}_2/\cos \varphi_2} \quad (51)$$

$$t_p = \frac{2\tilde{N}_1 \cos \varphi_2}{\tilde{N}_1 \cos \varphi_2 + \tilde{N}_2 \cos \varphi_1} = \frac{2\tilde{N}_1/\cos \varphi_1}{\tilde{N}_1/\cos \varphi_1 + \tilde{N}_2/\cos \varphi_2}, \quad (52)$$

şeklinde kolaylıkla belirlenebilir. Bu katsayılar için eşdeğer bağıntılar Snell bağıntısı kullanılarak

$$r_p = \frac{\tan(\varphi_2 - \varphi_1)}{\tan(\varphi_2 + \varphi_1)} = \frac{\tilde{N}_1/\cos \varphi_1 - \tilde{N}_2/\sqrt{1 - (\tilde{N}_1/\tilde{N}_2)^2 \sin^2 \varphi_1}}{\tilde{N}_1/\cos \varphi_1 + \tilde{N}_2/\sqrt{1 - (\tilde{N}_1/\tilde{N}_2)^2 \sin^2 \varphi_1}}$$

$$\equiv \tan \psi_p \exp(i\Delta_p), \quad (53)$$

$$t_p = \frac{2 \sin \varphi_2 \cos \varphi_1}{\sin(\varphi_2 + \varphi_1) \cos(\varphi_2 - \varphi_1)}, \quad (54)$$

şeklinde de yazılabilir. Yansıma genliğinin büyüklüğünü ve izafi fazını ayrı ayrı belirlemek için (53) bağıntısıyla verilen yansıma katsayısı bir kez de ψ_p ve Δ_p açıları yardımıyla ifade edilmiştir.

p – polarizasyon için elektrik alan şiddeti hem teğetsel hem de dik bileşene sahiptir. (29) ve (39) bağıntılarından, $\vec{\varepsilon}E'$ 'nin dik bileşenlerinin sürekliliği

$$\tilde{\varepsilon}_1(E_{zi} + E_{zr}) = \tilde{\varepsilon}_2 E_{zt}, \quad (55)$$

şeklinde yazılır. Burada, $\tilde{\varepsilon}_1$ ve $\tilde{\varepsilon}_2$ sırasıyla 1 ve 2 ortamlarının kompleks dielektrik fonksiyonlarıdır. (55) bağıntısı $\vec{D}_\omega = \varepsilon \varepsilon_0 \vec{E}_\omega$ elektriksel indüktansın dik bileşenlerine ait genel sınır koşuludur.

2.3.3. Gelme Açısının Özel Değerleri

2.3.3.1. Dik geliş hali

(43), (44), (51) ve (52) bağıntılarını $\varphi_1 = 0$ için yani ışığın dik geliş hali için ele alalım. Bu durumda yansıtma ve geçirgenlik katsayıları için

$$r = r_s = r_p = \frac{\tilde{N}_1 - \tilde{N}_2}{\tilde{N}_1 + \tilde{N}_2}, \quad t = t_s = t_p = \frac{2\tilde{N}_1}{\tilde{N}_1 + \tilde{N}_2},$$

bağıntıları elde edilir. Bu durumda dik polarizasyon hallerine ait fark ortadan kalkar. $|\tilde{N}_1| \approx 1$ ve $|\tilde{N}_2| \gg 1$ arayüzeyinden geçen alan sıfır olur ($t \approx 0$). Dolayısı ile gelen dalganın genliği ile arayüzeyin hemen üzerinde yansıyan dalganın genliği aynı fakat işaretleri zıt olur.

Ara yüzeyin yansıtma gücüne reflektans adı verilir kısaca R ile gösterilir ve gelen ve yansıyan dalgaların şiddetlerinin oranı olarak tanımlanır. Yani,

$$R = |r|^2 = \frac{(n_2 - n_1)^2 + (k_2 - k_1)^2}{(n_2 + n_1)^2 + (k_2 + k_1)^2}, \quad (56)$$

2.3.3.2. Brewster açısı

$|\tilde{N}_1| = n_1$ ve $|\tilde{N}_2| = n_2$ olması başka bir deyişle her iki ortamın saydam olması halinde, gelme açısı $\tan^{-1}(n_2/n_1)$ olur. Gelme açısının bu değeri almasını sağlayan koşul Brewster açısı olarak bilinir ve

$$\varphi_B = \tan^{-1}(n_2/n_1) \quad (57)$$

şeklinde ifade edilir. Brewster açısına eşit olan gelme açısında p –polarizasyon için genlik yansıtma katsayısı sıfır olur. Bu gelme açısında, p –polarize olmuş gelen dalga ikinci ortam içerisinde tamamen kırılır. Bunun sonucunda, çizgisel p -polarize olmuş dalga hariç, keyfi olarak eliptik polarize olmuş bir dalga, çizgisel s –polarize olarak yansır. Aynı durum polarize olmamış ya da kısmen polarize olmuş ışık için de geçerlidir. Bu gelme açısı, polarizleme açısı olarak adlandırılır. (53) bağıntısıyla tanımlanan Δ_p faz kaymasının $\varphi_1 < \varphi_B$ için $-\pi$ değerinden Brewster açısından daha büyük gelme açısı değerlerinde sıfıra sıçradığına dikkat edilmelidir. Çünkü r_p negatif değerlerden pozitif değerlere işaret değiştirir. Şüphesiz, r_p genlik yansıtma katsayısının sıfır olması ψ_p 'nin sıfır olmasına karşılık gelir.

İkinci ortam birinci ortamdaki optikçe daha yoğun olduğunda Brewster açılarından daha küçük gelme açılarında r_p pozitif olacağından yansıma sonucu fazda bir değişim olmazken, tersi durumda r_p negatif olacağından yansıma sonucunda π kadar bir faz değişimi olur.

2 ortamı ortam saydam olmadığı zaman (sıfırdan farklı bir k_2 sönüm katsayısına sahip bir ortam) ψ_p açısı Brewster açısında sıfıra ulaşmaz. Buna rağmen gelme açısında bir minimum değere sahip olur. Bu değer pseudo-Brewster açısı olarak adlandırılır.

2.3.3.3. Asal gelme açısı

Yansıyan ışığın p - ve s - polarize bileşenleri göz önüne alındığında aralarındaki faz farkının $\pi/2$ değerini aldığı gelme açısı değerine φ_p asal gelme açısı olarak adlandırılır. Gelme açısı φ_p değerine ulaştığı zaman s – ya da p – dalgasından farklı bir çizgisel polarize dalga büyük ve küçük eksenleri gelme düzlemine paralel ya da dik olan bir eliptik polarize dalga olarak yansır. Asal gelme açısı ve pseudo-Brewster açısı arasındaki fark k_2 'nin düşük değerleri için küçük olup, 2 ortamındaki absorpsiyon sıfıra giderken ortadan kalkmaya eğilimlidir.

2.4. Genlik Yansıtma Katsayılarının Oranı (Elipsometrinin Temel Bağıntısı)

Gelen dalganın polarizasyon hali uygun bir şekilde ayarlanır ise yansıma elipsometrisi, yansıyan dalganın polarizasyon halini belirler. Gelen ve yansıyan dalgaların genel polarizasyon hali gelme düzlemine paralel ve dik olmak üzere iki

temel lineer polarizasyona ayrılabilir. Genlikleri eşit aynı fazdaki $s -$ ve $p -$ titreşimlerinden oluşan gelen lineer polarize bir dalgadır. Bu polarizasyon halinin uygun bir gösterimi dalga vektörüne dik düzlemde koordinat sisteminin uygun bir seçimini gerektirir. Şekil 2.1 göz önüne alınır, x_i gelme düzleminde yer alıp, \vec{E}_{ip} vektörü boyunca yönelmiş olacaktır; y_i ise gelme düzlemine dik olup, okuyucuyu işaret eder. Buna göre, gelen dalganın elipsometrik açıları $\psi_{x_i y_i} = \pi/4$ ve $\Delta_{x_i y_i} = 0$ olur. Polarizasyon düzlemi gelen demet içinden bakıldığında pozitif yönde (saatin tersi yönünde) gelme düzlemiyle 45° 'lik açı yapar. Yansıyan dalganın izafi genlikleri (43) ve (51) bağıntılarıyla verilen $p -$ ve $s -$ polarize bileşenleri çeşitli değişimlere uğrar. Burada dalga vektörüne dik düzlemde uygun şekilde seçilen koordinat sisteminde yansıyan dalganın polarizasyon hali tanımlanmalıdır.

Gelme düzleminde bulunan x_r eksenine Şekil 2.1'deki \vec{E}_{rp} vektörü boyunca yönelmiştir. y_r eksenine ise gelme düzlemine dik olup, okuyucuya doğrudur; y_i ve y_r eksenleri birbirine paraleldir.

$s -$ polarize bileşeni dikkate alınır, elektrik alan vektörünün hem y_i hem de y_r eksenine paralel olduğu söylenebilir. Bu durumda $x_r - y_r$ koordinat sisteminde yansıyan dalganın genliği gelen dalganın genliğinin r_s katıdır. Bununla birlikte, x ve y koordinatlarında $p -$ polarize genliklerin oranı ise $-r_p$ 'dir. Bu sonuç (51) bağıntılarının ilk parçasından görülebilir ve Şekil 2.1'deki $x -$ eksenindeki x_i ve x_r izdüşümlerinin dönüşmüş anlamıdır. Sonuç olarak, $x_r - y_r$ koordinat sisteminde elipsometrik açıları yardımıyla temsil edilen yansıyan dalganın polarizasyon hali

$$\tan \psi_{x_r y_r} \exp i \Delta_{x_r y_r} = -\frac{r_p}{r_s} = -\frac{\tan \psi_p}{\tan \psi_s} \exp i (\Delta_p - \Delta_s) \quad (58)$$

şeklinde olur. Bu bağıntıda r_p 'nin işaretinin negatif olması koordinat sistemlerinin özel seçiminin bir sonucudur. Eğer $x_r - y_r$ eksenleri buldukları düzlemde 180° döndürülürse, (58) bağıntısındaki elipsometrik açıları aynı kalır; fakat y_i ve y_r eksenleri zıt yönlü paralel olacaklarından eksi işareti $s -$ polarize genliklerinin oranında ortaya çıkar. Genlik oranındaki eksi işaretinin kaynağı ayna yansımasındaki sağ el-sol el terslemesidir. Buradaki seçimimizi polarize genlik yansıma gücüne ait Fresnel kabulüne uygun olarak tanımlayabiliriz. Bu işaret kabulü Verdet kabulünden farklıdır (R. T. Holm, Convention conclusions, in

Handbook of Optical Constants of Solids II, editör: E. D. Palik (Academic Press., New York 1991, p.21.)

Yansıma elipsometrisi ölçümlerinin yorumlanmasında genlik yansıtma oranı temel kabul edilir. (58) bağıntısı elipsometrinin temel denklemi olarak kabul edilir. Bu denklem elipsometrik açıların tanımlanması için özel bir koordinat sistemine gereksinim duymayarak atıfta bulunulan bir referansla $\tilde{r}_s = r_s$ olarak kalırken, r_p Fresnel katsayısının $\tilde{r}_p = -r_p$ olarak değiştirilir. Bu sebeplerden ötürü yaygın olarak

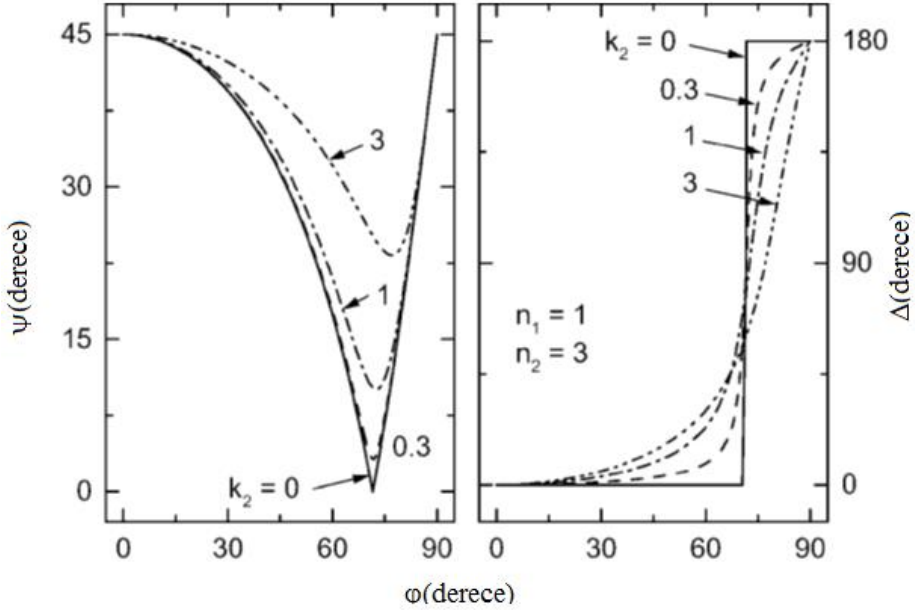
$$\tan \psi \exp i\Delta = \frac{\tilde{r}_p}{\tilde{r}_s}, \quad (59)$$

şeklinde yazılır. Bu ifade $\varphi_1 = 0$ halinde yani ışığın dik gelişi halinde p – ve s – polarize dalganın genlik yansımalarının zıt işareti için bir eksikliğe sahiptir ve burada her iki dalga fiziksel olarak eşdeğerdir. Biri diğerinden ayırt edilemez. Diğer taraftan, tek fark yansıtma oranının zıt işareti ya da eşdeğer olarak 180° 'lik izafi faz kayması olduğundan iki şema çok kolay bir şekilde ifade edilir.

(43) ve (51) bağıntılarıyla verilen Fresnel genliklerini birbirine oranlarsak

$$\rho = \frac{r_p}{r_s} = \frac{\tan \psi_p}{\tan \psi_s} \exp i(\Delta_p - \Delta_s) = \tan \psi \exp i\Delta, \quad (60)$$

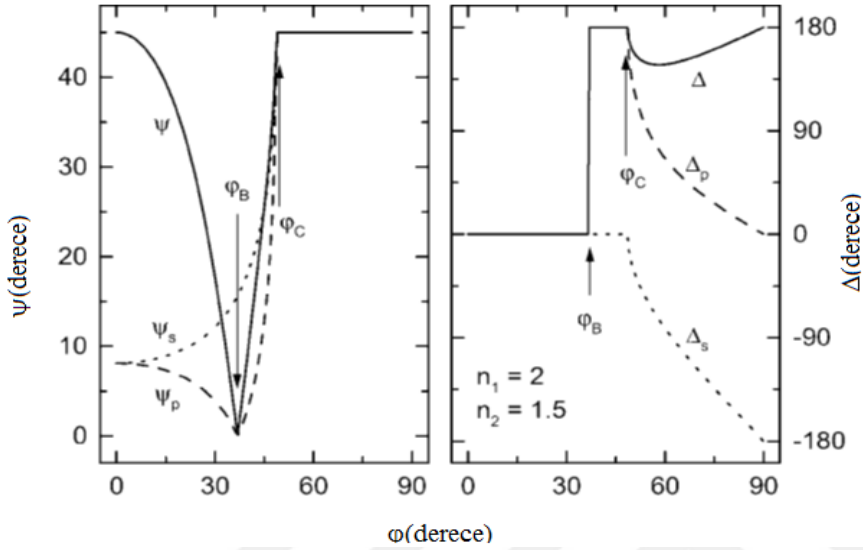
bağıntısını elde ederiz. Şekil 2.2'de absorplayıcı olmayan iki ortam arasındaki bir arayüzey için bu kompleks niceliğin tipik bir bağlılığı gösterilmiştir. Görüldüğü gibi (57) bağıntısıyla tanımlanan Brewster açısında ψ_p sifira gitmektedir. Gelen ve yansıyan s –dalgalarının elektrik alanı daima zıt yönlüdür (yani, 180° 'lik faz kayması vardır). Aynı durum Brewster açısından daha küçük gelme açılarında p –dalgaları için de doğrudur. Gelme açısı φ_B ile çakıştığı zaman, faz 180° 'ye sıçrar.



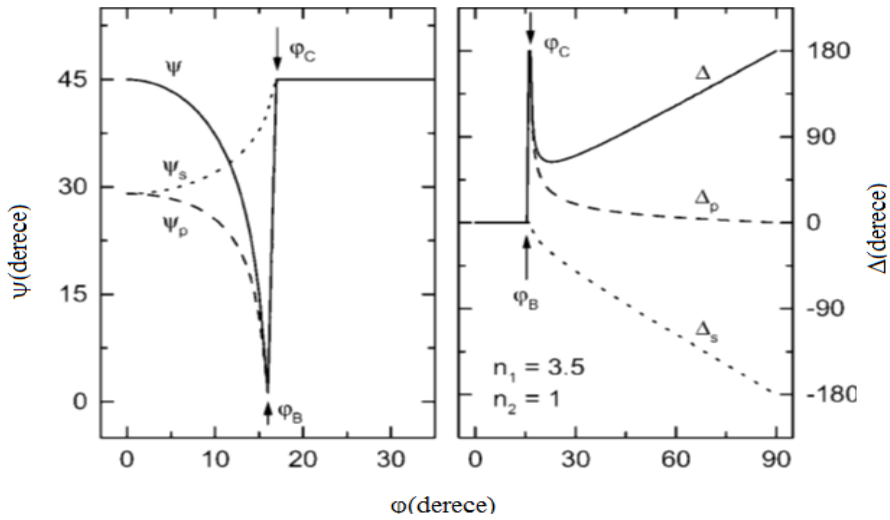
Şekil 2.2. n_1 kırılma indisli absorplayıcı olmayan ortam ile $n_2 = 3$ ve farklı k_2 değerlerine sahip absorplayıcı örnek arasındaki arayüzey için gelme açısının fonksiyonu olarak Fresnel yansıma genliklerinin oranı

Örnek üzerine gelen ışığın optikçe daha yoğun ortamdan gelmesi durumunda elipsometrik parametrelerin gelme açısıyla değişimi Şekil 2.3’de gösterilmiştir. Her iki ortam absorplayıcı olmadığından Brewster açısında elipsometrik oran sıfır olur. Kritik açıdan daha büyük gelme açılarında hem p – ve hem de s – polarize bileşenler arayüzeyde tam olarak yansır. Bunun sonucu olarak, $\phi > \phi_c$ için ψ elipsometrik parametresi 45° derece değerinde sabit kalır. s –polarize bileşenin fazı kritik açı değerine kadar sıfır değerinde sabit kalırken, p –polarize bileşenin fazı Brewster açısında 180° ’lik bir sıçramaya maruz kalır. ϕ_c kritik açısının üstündeki gelme açılarında, her iki polarize bileşenin fazı daha hızlı bir şekilde değişir. n_1/n_2 kırılma indislerinin oranı büyük olduğu zaman, sırasıyla (34) ve (57) bağıntılarıyla tanımlı olan kritik açı ve Brewster açısı her ikisi de küçük ve birbirlerine yakın değerler alır.

Şekil 2.4’te kızıl ötesi bölgede silisyum/hava arayüzeyindeki iç yansımayı temsil eden kırılma indisleri için elipsometrik oran gösterilmiştir. Toplam 90° ’lik faz kaymasının (yani, çeyrek dalga) 45° ’lik gelme açısı için elde edilir. Kızılötesi bölgede saf silisyum çok yüksek saydamlığa sahip olması nedeniyle, bu olay geciktirici prizmaların temeli olarak kullanılır.



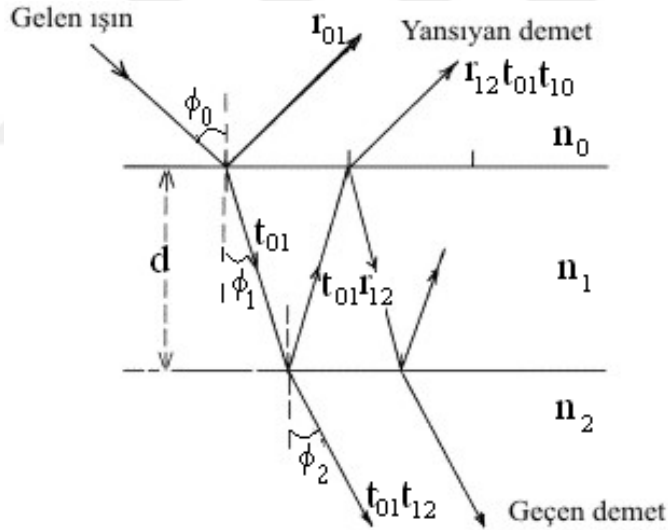
Şekil 2.3. Absorplayıcı olmayan iki ortam ($n_1 > n_2$) arasındaki arayüzey için gelme açısının fonksiyonu olarak p-polarize (kesikli çizgiler) ve s-polarize (noktalı çizgiler) dalgalar için Fresnel yansıma genliklerinin oranı (sürekli çizgiler).



Şekil 2.4. Kırılma indisleri oranı (n_1/n_2) büyük olduğu zaman absorplayıcı olmayan iki ortam ($n_1 > n_2$) arasındaki arayüzey için gelme açısının fonksiyonu olarak p-polarize (kesikli çizgiler) ve s-polarize (noktalı çizgiler) dalgalar için Fresnel yansıma genliklerinin oranı (sürekli çizgiler)

2.5. Opak Taşıyıcı Üzerindeki İnce Filmden Işığın Yansıması ve Geçışı

Optikçe kalın bir taşıyıcı üzerindeki bir ince filmde polarize ışığın yansıması birçok yöntemle ele alınabilir. En kullanışlı olanı yansıyan demetin tüm bileşenlerinin toplanması esasına dayanan bir analitik çözümdür. Şekil 2.5'te optikçe kalın bir taşıyıcı üzerindeki bir ince filmde ortaya çıkan gelen ışık demetinin çoklu yansımaları gösterilmiştir. Esas olarak, yansıyan ve geçen demetlerin sonsuz bir sayısı olmasına rağmen, her bir yansımada demet yansıyan ve geçen bileşenlere ayrılır. Yansıyan ve geçen demetlerin genliği gitgide sönümlenir ve son yansımaların genliğini hızlı şekilde azaltır. Bundan başka, filmdeki herhangi bir absorpsiyon da demetleri film içerisinde ilerlerken sönümleyecektir.



Şekil 2.5. İnce bir filmde ışığın yansıması ve geçişi

Burada, hacımlı bir sistemin Fresnel yansımaları ve geçirgenlik katsayıları için daha önceki türetme işleminin herhangi bir ara yüzeyden bir demetin yansıması ve geçişi için de yerel olarak geçerli olması gerçeğinin avantajını göz önüne almak gerekir. Böylece, hava/film ara-yüzeyi üzerine gelen herhangi bir demet için geçerli olan, kuşatan ortamın ve filmin kırılma indislerinin ve gelme açısının fonksiyonu olan Fresnel yansımaları katsayıları hesaplanabilir. Bu hesaplama sistemdeki her iki ara-yüzey üzerine her iki yönden gelen demetler için benzer şekilde yapılır.

Bu hesaplama için gösterimler şu şekilde verilir: İlk olarak, gelen demet \tilde{E}^{gelen} sembolü ile gösterilecek olup, birim genlikli ya p –polarize ya da s –polarize dalgayı temsil eder. Yansıyan demetler \tilde{E}_n^r olarak etiketlendirilecek. Burada, ‘n’ alt indisi n’inci yansımayı ve ‘r’ üst indisi yansıyan demeti göstermektedir. Geçen demetler ise \tilde{E}_n^t olarak etiketlendirilecek. Burada, ‘n’ alt indisi n’inci geçen demeti ve ‘t’ üst indisi geçen demetleri gösterir.

Kuşatan ortam, film ve taşıyıcı ile ilgili nicelikler sırasıyla ‘0’, ‘1’ ve ‘2’ alt-indislerine sahip olacaktır. Her iki ara-yüzey için Fresnel yansıma ve geçirgenlik katsayıları bir alt-indisde iki sayıya sahip olacaktır: Burada ilk sayı demetin ara-yüzey üzerine geldiği bölgeyi, ikinci sayı ise ara yüzeyin diğer tarafındaki bölgeyi gösterir.

Keyfi polarizasyona sahip gelen herhangi bir demet p –ve s –polarizasyon hallerinin lineer bir kombinasyonu olarak tanımlanabileceğinden hesaplamalarımızı p –ve s –polarize gelen demetler için ayrı ayrı yapacağız. Fresnel katsayılarının p –ve s – olarak etiketlendirilmesine ihtiyaç duyulmaz. Örneğin, ‘ \tilde{r}_{01} ’ kuşatan ortamdan (‘0’ bölgesi) film (‘1’ bölgesi) üzerine gelen Fresnel yansıma katsayısını gösterirken, ‘ \tilde{t}_{12} ’ film tarafından film/taşıyıcı ara-yüzeyine gelen demet için Fresnel geçirgenlik katsayısını gösterir.

Modeli tamamlamak için, filmin üst ve alt ara-yüzeyleri arasında ilerleyen dalgaları da birbirine bağlamamız gerekir. İlerleyen bir dalga $\tilde{E}(\vec{r}, t) = \tilde{E}_\omega \exp[i(k_x x + k_z z - \omega t)]$ denkleminde verilen biçime sahip olup, film içerisinde ilerleyen (her iki yönde) bir dalganın

$$\tilde{E}_{sonra} = \tilde{E}_{sönce} \cdot \exp(-2i\beta) \quad (61)$$

biçiminde ortaya çıkan bir dalga olduğunu göstermek basit bir durumdur. Burada, β verilen bir dalgaboyu ve gelme açısı için filmin faz kalınlığı (ya da optik kalınlığı) olup,

$$\beta = 2\pi\tilde{n}_1 \frac{d}{\lambda} \cos\tilde{\varphi}_1 = 2\pi \frac{d}{\lambda} \sqrt{\tilde{n}_1^2 - n_0^2 \sin^2\varphi_0} \quad (62)$$

bağıntısıyla verilir. Burada d film kalınlığı ve λ ise film kalınlığı ile aynı birimlerde olmak üzere dalgaboyudur. Şimdi ardışık yansıyan demetler için bağıntıları yazmak basit bir konudur:

$$\tilde{E}_1^r = \tilde{r}_{01} \tilde{E}_{gelen} \quad (63)$$

$$\tilde{E}_2^r = \tilde{t}_{10} \tilde{t}_{01} \tilde{r}_{10} e^{-i2\beta} \tilde{E}_{gelen} \quad (64)$$

$$\tilde{E}_3^r = \tilde{t}_{10} \tilde{t}_{01} \tilde{r}_{10} (\tilde{r}_{12})^2 e^{-i4\beta} \tilde{E}_{gelen} \quad (65)$$

$$\tilde{E}_4^r = \tilde{t}_{10} \tilde{t}_{01} (\tilde{r}_{10})^2 (\tilde{r}_{12})^3 e^{-i6\beta} \tilde{E}_{gelen} \quad (66)$$

Yansıyan dalganın genliğinin gelen dalga cinsinden ifadeleri bu şekilde devam eder. Şimdi, bu sonuçları n . yansıyan demet için genelleştirirsek

$$\tilde{E}_n^r = \tilde{t}_{10} \tilde{t}_{01} (\tilde{r}_{10})^{n-2} (\tilde{r}_{12})^{n-1} e^{-i(2n-2)\beta} \tilde{E}_{gelen} \quad (67)$$

bağıntısını elde ederiz. Bu fonksiyonel biçimi kullanarak yansıyan demetleri

$$\tilde{E}_{toplama}^r = [\tilde{r}_{01} + \tilde{t}_{10} \tilde{t}_{01} e^{i2\beta} \sum_{n=2}^{\infty} (\tilde{r}_{10})^{n-2} (\tilde{r}_{12})^{n-1} e^{-i2n\beta}] \cdot \tilde{E}_{gelen} \quad (68)$$

şeklinde toplayabiliriz. (01) ve (10) ara-yüzeylerine ait genlik yansıma ve geçirgenlik katsayılarından

$$\begin{aligned} \tilde{r}_{01} &= -\tilde{r}_{10} \\ \tilde{t}_{10} \tilde{t}_{01} &= 1 - (\tilde{r}_{01})^2 \end{aligned} \quad (69)$$

olduğu kolaylıkla gösterilebilir. Bu bağıntılar toplam yansıma genliği ifadesinde yerine yazılır ve ortaya çıkan yakınsak seri değerlendirilirse, toplam yansıyan demet ifadesi

$$\tilde{E}_{toplama}^r = \left(\frac{\tilde{r}_{01} + \tilde{r}_{12} e^{-i2\beta}}{1 + \tilde{r}_{01} \tilde{r}_{12} e^{-i2\beta}} \right) \cdot \tilde{E}_{gelen} \quad (70)$$

şeklinde yazılabilir. Bu bağıntı p – ve s – polarize giriş demetleri için geçerli olup, ara yüzeyler için karşılık gelen p – ve s – polarize bileşenlere ait Fresnel katsayılarına uygulanmasını sağlar. Şimdi, gelen, yansıyan ve geçen demetler cinsinden herhangi bir keyfi örnek için pseudo-Fresnel yansıma katsayılarını tanımlayalım. (70) bağıntısından p – polarize Fresnel yansıma katsayısını türetirsek, \tilde{R}_p , p – polarize pseudo-Fresnel yansıma katsayısını

$$\tilde{R}_p = \frac{\tilde{E}_{toplama}^r}{\tilde{E}_{gelen}} = \frac{\tilde{r}_{01} + \tilde{r}_{12} e^{-i2\beta}}{1 + \tilde{r}_{01} \tilde{r}_{12} e^{-i2\beta}} \quad (71)$$

şeklinde yazabiliriz. s – polarizasyon hali için de benzer bir bağıntı elde edilir. Bu katsayılar (70) bağıntısından kolaylıkla belirlenir. Şimdi, \tilde{R}_p ve \tilde{R}_s sırasıyla pseudo-Fresnel p – ve s – polarize yansıma katsayılarına sahip herhangi bir örnek için geçerli olan elipsometrik parametrelerin daha detaylı bir tanımını kullanarak Δ ve ψ ’ yi hesaplayabiliriz:

$$\tilde{\rho} = \tan\psi e^{i\Delta} = \frac{\tilde{R}_p}{\tilde{R}_s} \quad (72)$$

Özet olarak, verilen bir dalgaboyu ve gelme açısında tek bir film örneği için beklenen Δ ve ψ aşağıdaki yöntemle belirlenir.

1. (62) bağıntısından filmin faz kalınlığı belirlenir.
2. Kuşatan ortamdan (‘0’ indisiyle gösterilir) film (‘1’ indisiyle gösterilir) üzerine gelen bir demet için Fresnel bağıntılarından p –düzlem polarize yansıma katsayısı hesaplanır.
3. Filmden (‘1’ indisiyle gösterilir) taşıyıcı üzerine (‘2’ indisiyle gösterilir) üzerine gelen bir demet için Fresnel bağıntılarından p –düzlem polarize yansıma katsayısı hesaplanır.
4. İkinci ve üçüncü adımlarda hesaplanan ara-yüzeyin yansıma katsayıları kullanılarak (71) bağıntısından örnek için p –polarize pseudo yansıma katsayısı hesaplanır.
5. İkinci ve üçüncü adımlarda s –polarizasyon haline ait Fresnel bağıntıları kullanılarak, iki ila dört adımları arasındaki işlemler s –polarizasyon hali için tekrarlanır.
6. (72) bağıntısı yardımıyla p – ve s – polarize pseudo-yansıma katsayılarını veren Δ ve ψ elipsometrik parametreleri belirlenir.

2.6. Metallerin Dielektrik Sabiti

Drude’nin serbest elektron modeli (Kittel, 1966; Marton, Jordan, 1978; Maxwell-Garnett, 1904; Mie, Ann, 1908; Mott, Jones, 1936) klasik bir model olmakla birlikte birçok metalin optik özelliklerini başarılı bir şekilde açıklayabilmektedir. Valans elektronlar, kristal yapıdaki örgü kusurları, safsızlık atomları ve fononlar ile yaptıkları çarpışmalar dışında tamamen serbest olarak hareket ederler. Meydana gelen bu çarpışmalar sonucu elektronlar enerjilerinin bir kısmını

kaybederler. Tüm bu çarpışmalar serbest elektronların ortalama özelliklerine sahip bir model elektronunun hızıyla orantılı fakat zıt yönde yavaşlatıcı kuvvet etkisine sahiptir. Serbest elektronlar elektrik alan etkisinde yer değiştirdiklerinde dielektriklerdeki bağlı elektronlardan farklı olarak geri çağırıcı bir kuvvete maruz kalmazlar. Buna göre elektrik alan etkisinde kalan serbest elektronların hareket denklemi

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + m\gamma \frac{dx}{dt} = -eE_L \quad (73)$$

şeklinde yazılabilir. Burada m elektronun kütlesi, e elektronun yükü, E_L elektrona etki eden yerel elektrik alan $m\gamma \frac{dx}{dt}$ ise elektron-elektron, elektron-fonon, elektron-örgü kusurları gibi çarpışmalardan doğan enerji kayıplarına karşı gelen sönüm viskozluğunu gösterir. γ , birim zamanında meydana gelen çarpışma sayısıdır. Ardışık iki çarpışma arası geçen süreye relaksasyon zamanı adı verilir ve τ ile gösterilir. $\gamma = 1/\tau$ olarak ifade edilir.

E elektrik alanın zamanla $\exp(-i\omega t)$ şeklinde değiştiği kabul edilir ve $v = \frac{dx}{dt}$ hızı için (61) bağıntısı çözümlenirse

$$v = i \frac{eE_L}{m(\omega + i\gamma)} \quad (74)$$

ifadesi elde edilir.

Birim hacimdeki iletkenlik elektronlarının sayısı n kabul edilirse makroskobik olarak akım yoğunluğu $J = n' e \langle v \rangle$ bağıntısı ile verilebilir. Burada $\langle v \rangle$ ortalama hızı temsil eder. Bu ortalama hız boyutları ışığın dalgaboyu yanında küçük fakat çok sayıda serbest elektron ve metal iyonu bulunan bir hacim üzerinden alınır. İletkenlik elektronları metale bağlı değildir. Bu yüzden bunlara etki eden ortalama alanın E makroskobik alanına eşit olduğu yaklaşımı yapılırsa $\langle E_L \rangle \geq E$ yazılabilir. Bu durumda akım yoğunluğu için

$$J = -i \frac{n' e^2}{m(\omega + i\gamma)} E \quad (75)$$

bağıntısı elde edilir. Burada akım yoğunluğu, elektrik alan ve iletkenlik arasında var olan $j = \sigma E$ bağıntısı kullanılırsa metalin $\sigma(\omega)$ iletkenliği için

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{-1 + i\omega\tau} \quad (76)$$

bağıntısı elde edilir. Burada

$$\sigma_0 = \frac{n' e^2}{m\gamma} = \frac{n' e^2 \tau}{m}$$

şeklinde olup doğru akım iletkenliği olarak adlandırılır. Maxwell denklemlerinden

$$\nabla \times E = -\frac{1}{c} \frac{\partial B}{\partial t} \quad \text{ve} \quad \nabla \times B = \frac{1}{c} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} J$$

olduğunu hatırlayarak bu bağıntılarda J akım yoğunluğu için (75) bağıntısındaki değer yerine yazılırsa elektromanyetik dalganın iletken ortam içindeki yayılma denklemi olarak

$$\nabla^2 E + \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 + i \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega}\right) E = 0 \quad (77)$$

bağıntısına ulaşılır. Bu denklem genel olarak

$$\nabla^2 E + \frac{\omega^2}{c^2} \tilde{\epsilon}(\omega) E = 0 \quad (78)$$

şeklinde standart dalga denklemi formuna uygun olarak yazılır. Burada $\tilde{\epsilon}(\omega)$ ortamın dielektrik sabitidir. (77) ve (78) bağıntıları karşılaştırılırsa metalin dielektrik sabitinin kompleks bir nicelik olduğu ve

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = 1 + i \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega} \quad (79)$$

şeklinde ifade edilebileceği anlaşılır. (76) bağıntısındaki ifade (79) ifadesinde yerine konulursa

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (80)$$

bağıntısı elde edilir. Burada, n birim hacimdeki elektron yoğunluğu, e ve m elektronun sırasıyla yükü ve kütlesi olmak üzere

$$\omega_p = \sqrt{\left(\frac{4\pi n e^2}{m}\right)}$$

olup, iletkenlik elektronlarının plazma rezonans frekansı olarak adlandırılır. Metalin kompleks dielektrik sabiti $\tilde{\epsilon} = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ şeklinde gerçel ve sanal iki terimin toplamı olarak yazılıp (80) bağıntısıyla karşılaştırılır ise

$$\epsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} \quad (81)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)} \quad (82)$$

bağıntıları elde edilir. Metallerin çoğu için görünür ve yakın morötesi bölgede $\omega^2 \gg \gamma^2$ olduğundan (81) ve (82) bağıntıları yaklaşık olarak

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (83)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\omega_p^2 \gamma}{\omega^3} \quad (84)$$

şeklinde yazılabilir. Bu bağıntılardan görüleceği üzere sönüm küçük olduğu zaman $\varepsilon_1(\omega_p)=0$ ve $\varepsilon_2(\omega_p)\ll 1$ olur. ε_1 ve ε_2 'nin ω_p frekansındaki bu değerleri, bir metalde hacim plazma titreşimlerinin uyarıldığını gösteren karakteristik değerlerdir.

2.7. Yarı İletkenlerin Optik Özellikleri

Yarıiletkenlerin çoğu yüksek reflektansları nedeniyle görünüm olarak metallere zor ayırt edilebilirler. Bunlar spektrumun görünür bölgesinde genel olarak metaller gibi şiddetli absorplayıcı olup, absorpsiyon katsayıları 10^5 cm^{-1} mertebesindedir. Bütün saf yarıiletkenlerin karakteristik özelliği, genellikle yakın ya da orta kızıl ötesi bölgedeki belirli bir dalgaboyunda absorpsiyon katsayısının aniden hızla azalması ve daha uzun dalgaboylarında ise geçirgen olmalarıdır. Absorpsiyondaki bu karakteristik düşme literatürde “**absorpsiyon kenarı**” olarak bilinir. Yarıiletkenlerin, absorpsiyon kenarı ötesindeki dalgaboylarında gösterdiği saydamlık, ancak yarıiletkenin serbest taşıyıcılardan ileri gelen absorpsiyonunun temel absorpsiyonu bastırmayacak kadar küçük olmasını sağlayacak derecede saflaştırılmış olması halinde kendini gösterir. Safsızlıkların bulunması halinde yarıiletken morötesi bölgeden radyo dalgalarına kadar genellikle opak olur (Derin, 1997).

Yarı iletkenlerin band yapılarının belirlenmesinde optik ölçümler önemli bir araçtır. Fotonla uyarılan elektronik geçişler, ya da serbest taşıyıcı absorpsiyonu gibi tek bir band içinde oluşan geçişler şeklinde olabilir. Optik ölçümler ayrıca örgü titreşimlerinin incelenmesinde de kullanılabilir. (Smith, 1987)

Absorpsiyon katsayısı, bir ortamda birim uzunluktaki yol boyunca absorplanan şiddet kesri olarak tanımlanır. α absorpsiyon katsayısı ile k sönüm katsayısı arasındaki ilişki

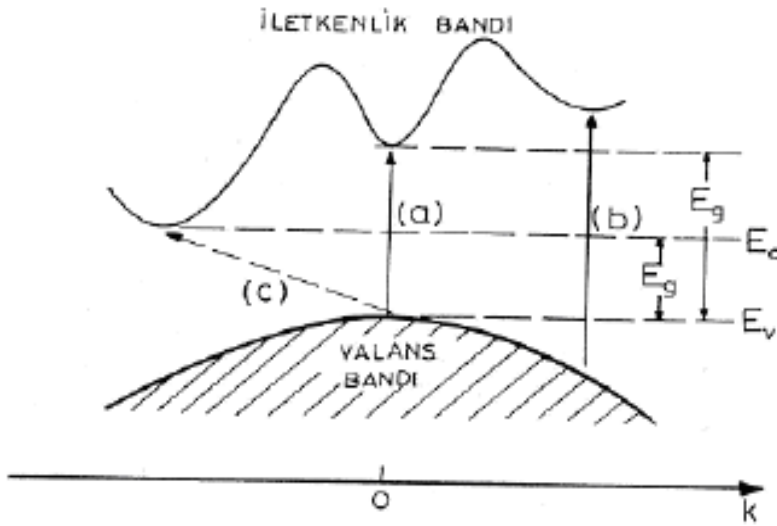
$$\alpha \equiv \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (85)$$

bağıntısıyla verilir. Farklı gelme açılarında elde edilen elipsometrik verileri değerlendirerek bir taşıyıcı üzerinde büyütülen yarı iletken ince filmlerin hem optik sabitleri ve kalınlığı (n , k ve d), hem de bandlar arası geçiş enerjisi belirlenebilir.

“Absorpsiyon kenarı” yakınındaki absorpsiyon katsayısı

$$(ahv) = K(hv - E_g)^\eta \quad (86)$$

bağıntısı ile verilir.



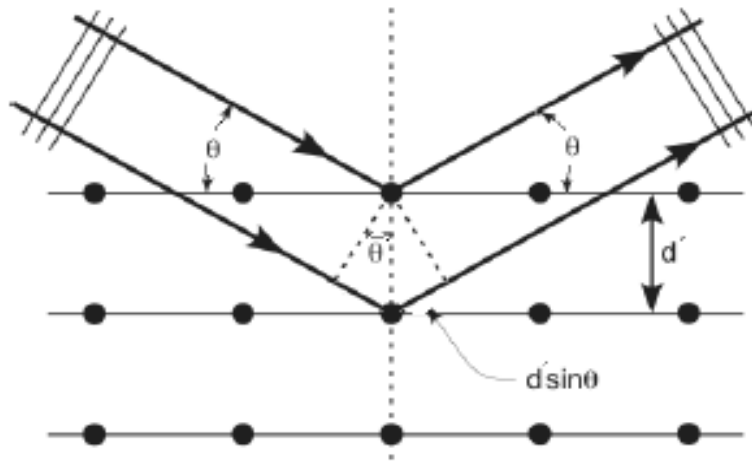
Şekil 2.6. Optik geçişler; (a) ve (b) doğrudan geçişler, (c) kristal örgü titreşimlerini içeren dolaylı geçişler

Burada $h\nu$ foton enerjisi, E_g yarı iletkenin yasak band aralığı, K bir sabit ve η geçişlerin cinsini ifade eden bir parametre olup izin verilen doğrudan geçişler için $1/2$ ye, yasaklanmış doğrudan geçişler için $3/2$ ye (Şekil 2.5’de gösterilen (a) ve (b) geçişler) ve fononların hesaba katılmasını gerektiren dolaylı geçişler (Şekil

2.5’de gösterilen (c) geçişi) için ise 2 ye eşittir. Eğer $\alpha hv^{1/\eta}$ nın hv ile değişimi çizilirse, hv eksenini $hv = E_g$ de kesen bir doğru elde edilmesi beklenir. Bu çizim η ’nın farklı değerleri için yapılır, en iyi doğruyu veren η değeri geçişlerin cinsini gösterir. (Rakhshani, 1986)

2.8. Kristal Yapı Tarafından X-Işınlarnın Kırınımı

Kristal yapısı X-ışınlarının kırınımı yardımıyla incelenebilir. Kırınım olayı kristalin yapısına ve kullanılan ışığın dalgaboyuna bağlıdır. Optik dalga boylarında (Örneğin 5000 Å) bireysel atomları tarafından esnek olarak saçılmaya uğratılan ışınların üst üste binmesi, optik kırılmayı meydana getirir. Gelen ışığın dalgaboyu örgü sabiti ile karşılaştırılabilecek büyüklükte ya da daha küçük olduğu zaman gelme doğrultusundan farklı doğrultularda kırınıma uğrayan demetler gözlenir. X-ışınlarının dalga boyları 0,1 – 100 Å mertebesinde olduğundan kristal yapı tarafından kırınıma uğrar.



Şekil 2.7. Kristal örgü düzlemlerinden X-ışınlarının yansıması

Bir kristal tarafından kırınıma uğrayan X-ışınlarının basit fakat deneysel sonuçlarla uyumlu olan tek açıklaması W. L. Bragg tarafından yapılmıştır. Şekil 2.7’de gösterildiği gibi, gelen dalgaların atomların bulunduğu düzlemlerden düzgün olarak yansıdığı kabul edelim. Böyle bir yansımada gelme açısı yansıma açısına eşittir. Atomların bulunduğu düzlemlerden olan yansımalar yapıcı girişim oluşturacağından kırınım deseni gözlenir. Bu kırınım olayında X-ışınları esnek olarak saçılır ve dolayısıyla enerjisi değişmez.

Şekil 2.7’de gösterildiği gibi, kristal örgü düzlemleri arasındaki mesafe d' olsun. Bu durumda ardışık düzlemlerden yansıyan ışınlar arasındaki optik yol farkı $2d' \sin\theta$ 'dır. Ardışık düzlemlerden olan yansımada yapıcı girişim koşulu optik yol farkının λ dalgaboyunun m' tam sayı katlarına olmasını gerektirir. Bu koşul matematiksel olarak

$$2d' \sin\theta = m'\lambda \quad (87)$$

olarak ifade edilebilir. Burada $m'=1,2,3,\dots$ gibi bir tamsayı olup, kırınım mertebesidir. Sadece $\lambda \leq d'$ dalga boyları için geçerli olan bu bağıntı Bragg yasası olarak isimlendirilir. Bragg yasası örgünün periyodikliğinin bir sonucu olup, her örgü noktasındaki baz atomunun cinsi hakkında bilgi vermemesine karşın, düzlem takımından olan çeşitli kırınım mertebelerinin bağıl şiddeti yardımıyla yapının içeriği belirlenebilir (Kittel, 2005).

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Örneklerin Hazırlanması

Bu çalışmada vakumda buharlaştırma yöntemiyle cam ve Au taşıyıcılar üzerinde farklı kalınlıkta Cu_2Se ince filmleri hazırlandı. Opak (yaklaşık 3000 Å kalınlığında) Au taşıyıcılar optikçe düz ve kimyasal olarak temizlenmiş cam yüzeyleri üzerinde oda sıcaklığında 10^{-6} torr mertebesindeki vakumda ısısal buharlaştırma yöntemi ile elde edildi. Altın filmlerin yapımında “Johson Matthey Chemicals Limited” tarafından üretilmiş olan %99,999 saflıkta Au parçacıkları, Cu_2Se filmlerin büyütülmesinde ise “Sigma-Aldrich” tarafından temin edilen 6,4 gr/ml yoğunluğa ve %99,99 saflığa sahip sentetik toz Cu_2Se kullanıldı. Buharlaştırma işlemi kristal kalınlık ölçüm cihazı ile donatılmış yüksek vakum kaplama ünitesinde sepet biçimindeki tungsten potalar kullanılarak yapıldı. Kaynak taşıyıcı uzaklığı 20 cm olarak alındı. Hazırlanan Au filmler temiz bir cam taşıyıcı ile birlikte Cu_2Se/Au ve Cu_2Se örneklerinin hazırlanmasında kullanıldı.

3.2. Taşıyıcıların Temizlenmesi

Taşıyıcı yüzeylerin temizliği yüksek kalitede filmler elde edebilmek açısından oldukça önem arz eder. Bernett ve Bernett tarafından önerilen temizleme işlemi bu çalışmada kullanılacak olan cam taşıyıcılarda aşağıdaki sıralama ile uygulandı. (Ward, 1988)

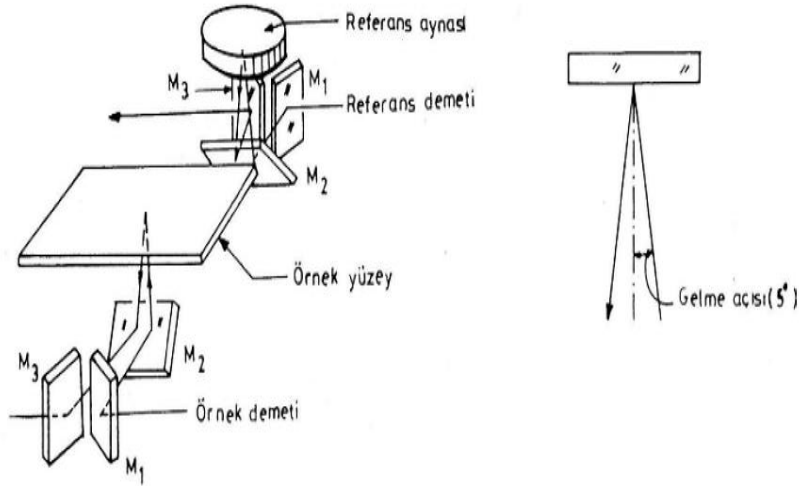
- Deterjanlı suda cam taşıyıcı yüzeyler çizilme vb. bir zarara uğramaması için pamukla ovularak yıkandı.
- Durulama işleminin dikkatle yapılmasının ardından saf suya daldırıldı.
- Ultrasonik temizleme banyosunda deterjanlı saf su ile 20 dakika süre ile yıkandı.
- Sonrasında yine ultrasonik temizleme banyosunda bu sefer sadece saf su ile 20 dakika süre ile durulandı.
- Saf aseton ile silinmesinin ardından vakumlu bir fırında kurutuldu.

3.3. Deneysel Ölçümler

İnce filmlerin kristal yapısı X-ışını kırınım ölçeri (XRD model Philips Xpert-PRO-MRD, $CuK_{\alpha}=1,5405 \text{ \AA}$, 40 kV, 30mA) kullanılarak analiz edildi. Farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerin yüzey morfolojisi Asylum Research MFD-3D atomik kuvvet mikroskobu kullanılarak tarama modunda incelendi. Atomik kuvvet mikroskobu resimleri 1024x1024 piksel çözünürlükte, yay sabiti 0,05 N/m olan yumuşak silikon nitrit uçlar kullanılarak alındı. Cu_2Se ince filmlerin kimyasal analizi enerji dağılımı X-ışını spektroskopisi (EDAX)'yle yapıldı. Bu analiz için EDAX detektörüyle donatılmış taramalı elektron mikroskobu cihazı (SEM, Quanta 200 FEG) kullanıldı. Cu_2Se ince filmlerin SEM resimleri de aynı cihazla kaydedildi.

Spektroskopi, elipsometri, foton enerjisi ya da dalga boyu için bir yüzeyden yansıma sonucu ortaya çıkan p- ve s- polarize olmuş ışık bileşenleri arasındaki ψ genlik oranı ve Δ faz farkı spektrumlarını ölçer. (Fujiwara, 2007) Genel olarak ölçüm sonuçlarının yorumlanması (Δ, ψ) elipsometrik parametrelerinin mutlak değerlerinde yapmak oldukça zordur. Bu nedenle verilerin analizi için optik sabitler yardımıyla tanımlanan bir optik modelin oluşturulmasına ve örneğin kalınlığına gereksinim duyulur. Bu modelde bilinmeyen fiziksel parametreler modelden hesaplanan elipsometrik verilere mümkün olduğu kadar yakın olacak şekilde karşılaştırılarak optik parametrelerin değiştirilmesi ile belirlenir. Taşıyıcı ve ince filmde oluşan bir sistem için ışığın dalga boyu, gelme açısı, film kalınlığı, tüm ortamların kompleks kırılma indisleri gibi birçok fiziksel parametre yansımayı etkiler. Işığın dalga boyu, gelme açısı ve kuşatan ortam ve taşıyıcının kırılma indisleri ile birlikte film kalınlığı biliniyorsa geriye kalan iki değişken ölçülen iki değerden doğrudan elde edilebilir. Dolayısıyla spektroskopik elipsometrede geniş bir aralığında ölçülen (Δ, ψ) spektrumlarında inceleme altındaki filmin optik karakterizasyonu mümkün olur.

Filmlerin optik geçirgenliği ve normale yakın yansıtıcı reaktansı, yansıma açısı 5° olan reaktans eklentisi ile donatılmış UV-VIS Shimadzu UV-160A spektrofotometre kullanılarak, 300-1100 nm dalga boyu aralığında kaydedildi. Spektrofotometrenin ölçüm adımı ve dalga boyu çözünürlüğü sırasıyla 0,1 nm ve 0,5 nm olarak alındı ve bu şekilde alınan ölçümlerde yaklaşık %0,1 sapma değeri olan yüksek doğrulukta ölçümler elde edildi. Çalışmada kullanılan Shimadzu UV-160A spektrofotometre düzeneğine ait optik diyagram Şekil 3.1' de verilmiştir.

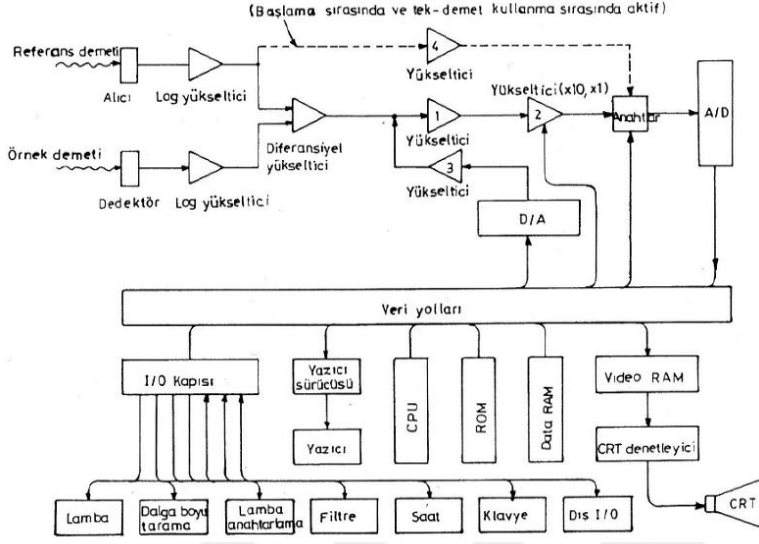


Şekil 3.1. Spekülar reflektans takımı: optik diyagramı

Spektrofotometrenin elektronik sisteminin blok diyagramı Şekil 3.2' de gösterilmiştir. Esas kontrol elemanı CPU mikro-bilgisayarı olup, ışık kaynaklarının çalışmasını, lamba değişimini, dalgaboyu taramayı, görüntülemeyi, klavyeyi ve yazıcıyı kontrol eder.

Örnek ve referans demetleri birer fotodiyot dedektörle algılanır, logaritmik olarak dönüştürülür ve diferansiyel yükseltici ile farkları elde edilir. Bundan sonra bir miktar sinyal eklenerek, sinyalin sıfır seviyesi absorbans sıfırına ayarlanır. Daha sonra bu sinyal 1 ve 2 yükselticilerinden geçer. 1 yükselticisi sinyal seviyesini duyarlı bir şekilde ayarlamaya yarar. 2 yükselticisi ise sinyali 10 katına kadar yükseltir. Son olarak, A / D dönüşümü yapılarak sinyal CPU bilgisayar tarafından okunur (Derin, 1997).

Absorplayıcı bir ortam yüzeyine, lineer olarak polarize olmuş ışık demeti eğik olarak gelir ve bu ortam yüzeyinden yansıtılırsa eliptik polarize olarak yansır. Ψ ve Δ elipsometrik parametreleri yansıyan ışığın polarizasyon halinde meydana gelen değişimini karakterize eder. Örnekten önce bir polarizör ve kompanatör, örnekten sonra ise analizör kullanılarak ölçülebilir. Elipsometri, örnekten yansıyan ya da geçen ışığın polarizasyon halindeki değişiminin ölçülmesine dayanan bir optik ölçme tekniğidir. Ψ ve Δ 'nın ölçülmesini sağlayan deneysel düzeneğe elipsometre adı verilir.



Şekil 3.2. Spektrofotometrenin elektronik sisteminin optik diyagramı

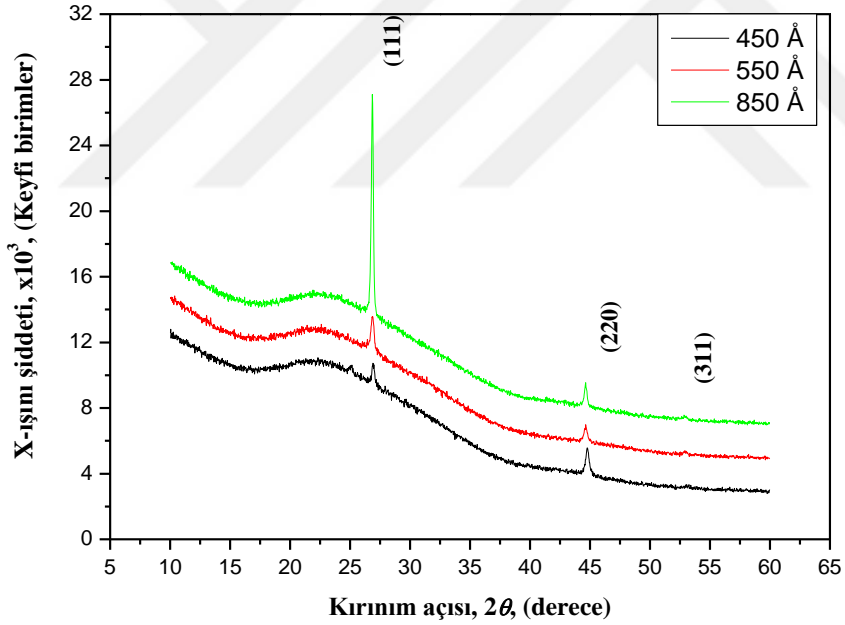
Bu çalışmada Cu_2Se filmlerin optik özelliklerini incelemek için 0,59-6,20 eV foton enerji aralığında 0,05 eV tarama adımıyla değişken açılı spektroskopik elipsometre kullanılarak toplandı (Woollam, 2007). Bu deneysel düzenekte optik sistemin modellemesi ve optik verilerin lineer regresyon analizi Levenberg-Marquardt Algoritmasını çalıştıran WASE32 paket programı kullanılarak yapıldı. (Woollam, 2007) Ψ ve Δ temel elipsometrik açılar, 55° , 65° ve 75° 'lik yansıma modunda üç gelme açısında ölçüldü. Birden fazla gelme açısında elde edilen bu veriler izotropik ortam için elde edilen en iyi fit parametre değerlerinin belirlemek için göz önüne alındı. Opak altın taşıyıcının ve bilinen kalınlıktaki Cu_2Se yüzey filminin optik sabitleri fit hatalarının minimize edilmesiyle (hataların karelerinin ortalamasının en küçük değeri alınarak) belirlendi.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1. Cam Taşıyıcı Üzerinde Büyütülen Cu_2Se İnce Filmlerin Yapısal ve Yüzey Özellikleri

4.1.1. Kristal Yapısı

Şekil 4.1’de oda sıcaklığındaki cam taşıyıcılar üzerinde vakumda buharlaştırma yöntemiyle büyütülen farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin X-ışını kırınım desenleri gösterilmiştir. X-ışını kırınım deseninde şiddetli bir yansıma pikinin gözlenebilmesi amacıyla 850 Å değerindeki kalın film özel olarak seçilmiştir.



Şekil 4.1. Farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin X-ışını kırınım desenleri

Şekil 4.1’deki kırınım desenleri Standart JCPDS kart verileriyle karşılaştırıldığında tüm piklerin 5,74 Å’luk örgü sabitine sahip kübik yapıda stokiometrik Cu_2Se fazına karşılık geldiği anlaşılır. Bu sonuçlar stokiometrik Cu_2Se ’un literatür verileriyle oldukça uyumludur (Yan, Qiand, Yin, Zhun, 2003; Bari Ganesan, Potadar, Patil, 2009; Ahn, Um, 2014; Zhang, Zhao, Li, Lan, Han, Dai, Bao 2015). Cu_2Se ’un X-ışını kırınım analizinde Cu ve Se’un ya da

stokiyometrik olmayan fazlar gibi diğer safsızlıkların gözlenmemiş olması dikkate değerdir.

Filmlerin içerdiği kristallerin grain boyutu

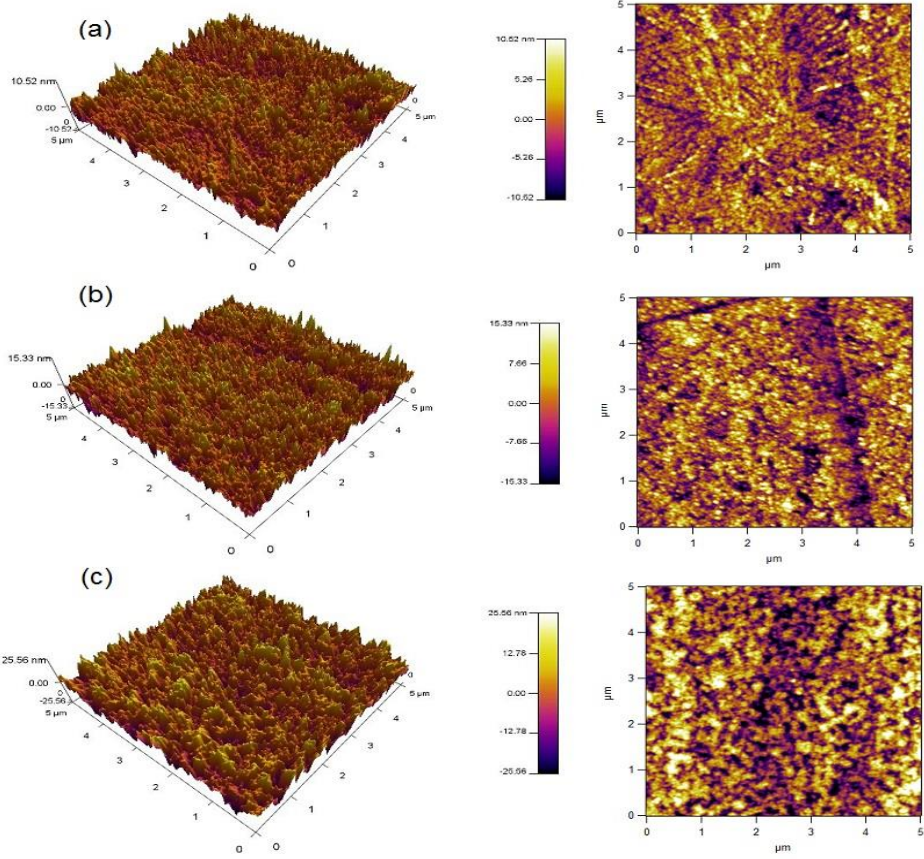
$$D = \frac{0,9\lambda}{\beta' \cos\theta} \quad (88)$$

Scherer formülü kullanılarak hesaplandı (Barret, Massalski 1966). Burada grain yarıçapı, λ kullanılan X-ışınının dalgaboyu ($CuK_{\alpha}=1,5406 \text{ \AA}$), β' en yüksek pikin tam yarı genişliği ve θ analiz edilen pike karşılık gelen Bragg açısıdır. Şekil 4.1'de Cu_2Se ince filmlerinin tercihli büyümesine karşılık gelen yaklaşık $26,90^{\circ}$ 'deki (111) piki kullanılarak yapılan hesaplama film kalınlığının artmasıyla ortalama grain yarıçapının $267,3-516,7 \text{ \AA}$ aralığında değiştiğini ortaya çıkarır. Bu sonuç filmin kristal yapısının kalınlık kontrol edilmek suretiyle geliştirilebileceğini gösterir.

4.1.2. Yüzey Analizi

Atomik kuvvet mikroskobu (AFM)'unun taneciğın boyutu ve yapısı ve yüzey pürüzlülüğü cinsinden bir filmin yüzey morfolojisini tanımlamakta kullanılan tek metot olduğu bilinmektedir. Şekil 4.2'de farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin iki ve üç boyutlu atomik kuvvet mikroskobu resimleri gösterilmiştir. Bu resimler büyütülen filmlerin taşıyıcıya iyi tutunmuş granül yapıda nano-boyutlu taneciklerden oluştuğunu ortaya çıkarır. Film kalınlığının daha fazla artmasıyla, Cu_2Se ince filmlerin ortalama yüzey pürüzlülüğü ve maksimum pik yüksekliği kademeli bir şekilde artmaktadır. Resimlerden açıkça görüldüğü gibi, film kalınlığının artmasıyla pürüzlülüğün karesinin ortalamasının karekökü (rms) $17,7 \text{ \AA}$ değerinden $59,8 \text{ \AA}$ değerine, maksimum pik yüksekliği de $105,2 \text{ \AA}$ değerinden $255,6 \text{ \AA}$ değerine değişmektedir.

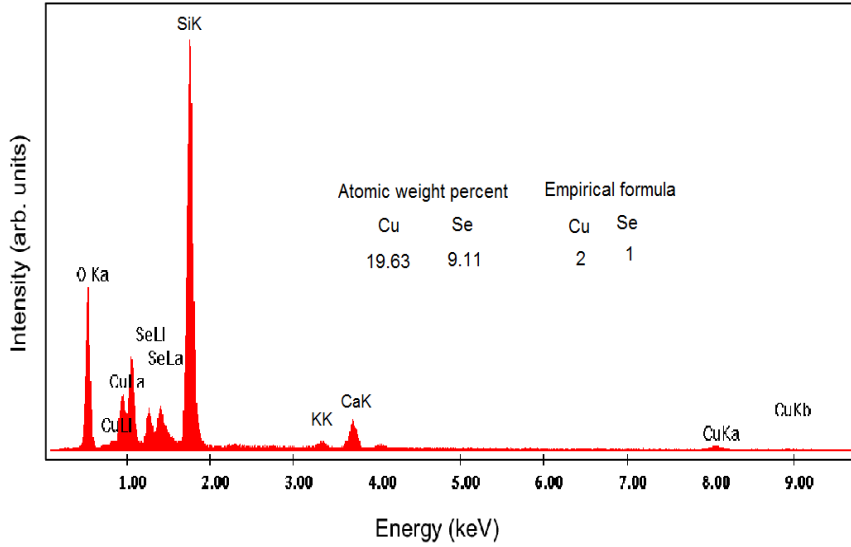
Atomik kuvvet mikroskobu (AFM)'unun taneciğın boyutu ve yapısı ve yüzey pürüzlülüğü cinsinden bir filmin yüzey morfolojisini tanımlamakta kullanılan tek metot olduğu bilinmektedir. Atomik kuvvet mikroskobu (AFM)'unun taneciğın boyutu ve yapısı ve yüzey pürüzlülüğü cinsinden bir filmin yüzey morfolojisini tanımlamakta kullanılan tek metot olduğu bilinmektedir. Şekil 4.2'de farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin iki ve üç boyutlu atomik kuvvet mikroskobu resimleri gösterilmiştir.



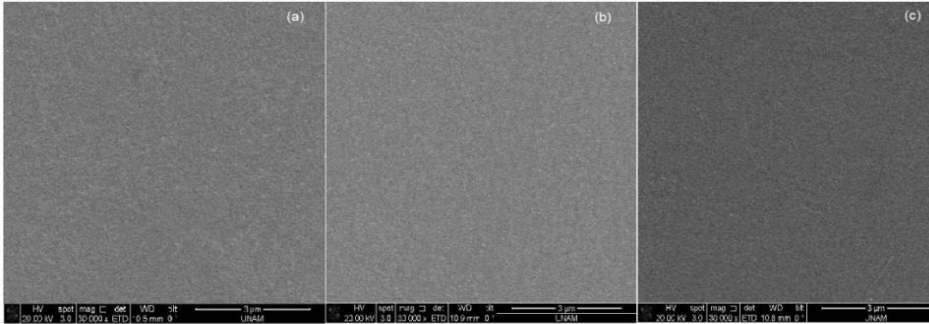
Şekil 4.2. Farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin atomik kuvvet mikroskobu resimleri: (a) 325 Å, (b) 450 Å ve (c) 550 Å.

Bu resimler büyütülen filmlerin taşıyıcıya iyi tutunmuş granül yapıda nano-boyutlu taneciklerden oluştuğunu ortaya çıkarır. Film kalınlığının daha fazla artmasıyla, Cu_2Se ince filmlerin ortalama yüzey pürüzlülüğü ve maksimum pik yüksekliği kademeli bir şekilde artmaktadır. Resimlerden açıkça görüldüğü gibi, film kalınlığının artmasıyla pürüzlülüğün karesinin ortalamasının karekökü (rms) 17,7 Å değerinden 59,8 Å değerine, maksimum pik yüksekliği de 105,2 Å değerinden 255,6 Å değerine değişmektedir.

4.1.3. Kimyasal Analizi



Şekil 4.3. 325 Å kalınlığındaki Cu₂Se ince filmin EDAX spektrumu



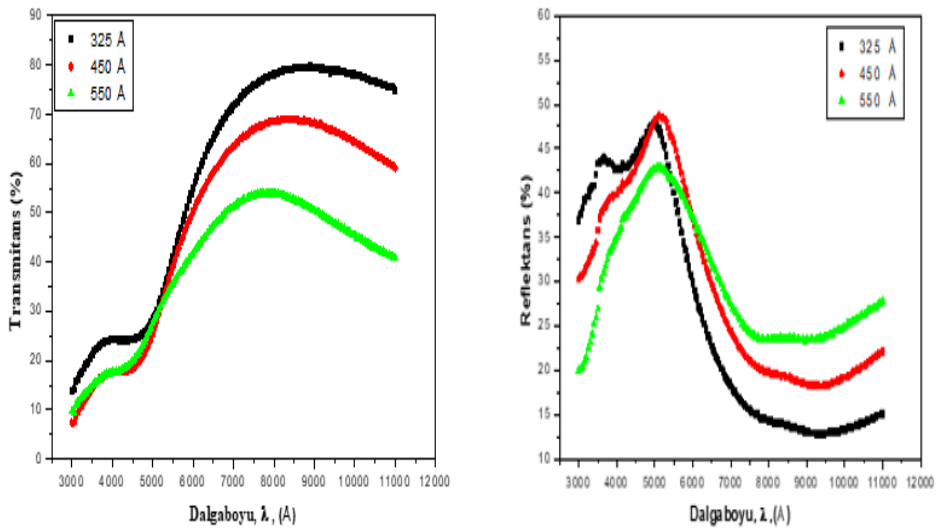
Şekil 4.4. Farklı kalınlıktaki Cu₂Se ince filmlerinin SEM resimleri: (a) 325 Å, (b) 450 Å ve (c) 550 Å.

Işık absorpsiyonu ve fotovoltaik uygulamalar için en uygun bakır selenyum fazının stokiometrik Cu₂Se olduğu iyi bilinmektedir. Bu çalışmada kullanılan toz Cu₂Se kaynağının bileşen elementleri olan Cu ve Se'un farklı buhar basınçlarından dolayı büyütülen filmlerin kimyasal içeriği buharlaştırma işlemi esnasında (Se) ya da (Cu)'ca zengin olabilir. Bu durum buharlaştırma hızı ve taşıyıcı sıcaklığı gibi buharlaştırma koşulları kontrol edilmek suretiyle ayarlanabilir (Llabres, Arjona 1980; Aparthitis, Scott 1989). Filmlerin kimyasal içeriği taramalı elektron mikroskobuna monte edilen enerji dağıtım X-ışını dedektörü (EDAX) yardımıyla

nicel olarak ölçülebilir. Şekil 4.3'de 325 Å kalınlığındaki Cu_2Se ince filminin EDAX spektrumu gösterilmiştir. Bu analiz cam taşıyıcıya ve kuşatan ortamdan yapıya giren katkılara atfedilebilecek silisyum, oksijen ve diğer elementlerden başka filmin içeriğindeki Cu ve Se'un varlığını açığa çıkarmaktadır.

Bu analizden filmdeki Cu ve Se'un atomik oranının 2,15 olduğu bulundu. Bu sonuç X-ışını kırınım verileriyle uyumlu olarak büyütülen filmin stokiometrik Cu_2Se olduğunu doğrular. Şekil 4.4'de Farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin taramalı elektron mikroskobu resimleri gösterilmiştir. Bu resimlerden filmlerin küçük grain yapısına ve homojen dağılıma sahip olmasından başka taşıyıcıların biriktirilen malzemeyle iyi bir şekilde kaplandığı gözükmektedir.

4.2. Cam Taşıyıcı Üzerindeki Cu_2Se İnce Filmlerin Transmittansı ve Reflektansı



Şekil 4.5. Farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin transmittans ve reflektans spektrumları.

Şekil 4.5'de farklı kalınlıktaki Cu_2Se ince filmlerinin optik transmittans ve dik geliş haline yakın reflektans spektrumları gösterilmiştir. Elektromanyetik spektrumun yakın kızılötesi bölgesinde artan film kalınlığıyla ortalama transmittans azalırken, reflektans artmaktadır.

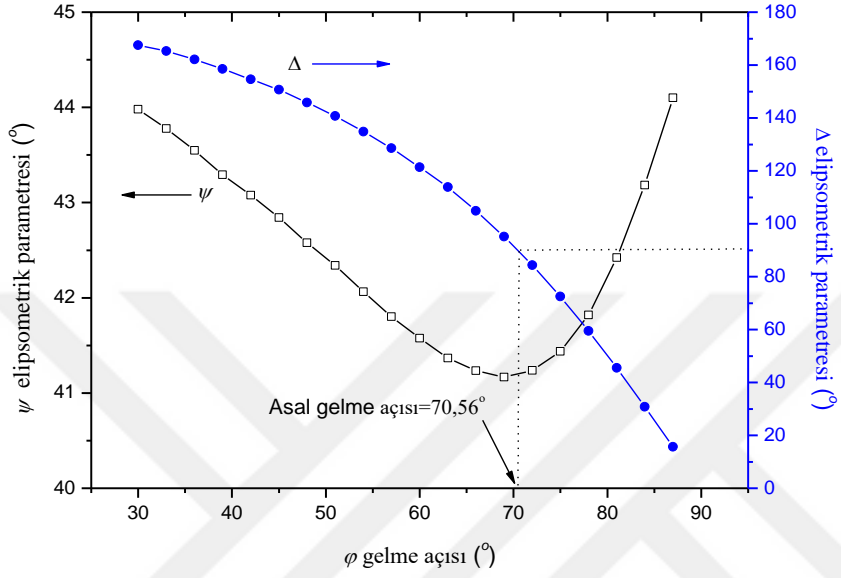
Görünür bölgede, büyütülen bakır selenyum ince filmlerinin çok saydam olduğuna dikkat etmek önemlidir. 5000-11000 Å dalgaboyu aralığında transmitans %30-80 civarında iken, reflektans %5-25 aralığındadır. Bu çalışmada büyütülen Cu_2Se ince filmlerin için belirlenen morötesi bölgede yüksek absorpsiyon ve görünür bölgede yüksek transmitans ve alçak reflektans davranışı bu malzemenin çok katmanlı güneş pillerinde bir iletken pencere katmanı ya da absoplayıcı olarak kullanılabileceğini gösterir. Uygulamada, iletken pencere malzemesine ya da bir absoplayıcı yüzeye gereksinim duyan çok katmanlı güneş pilleri doğrudan bir enerji dönüşüm cihazı olarak büyük öneme sahiptir.

4.3. Au Tasıyıcının Optik Karakterizasyonu

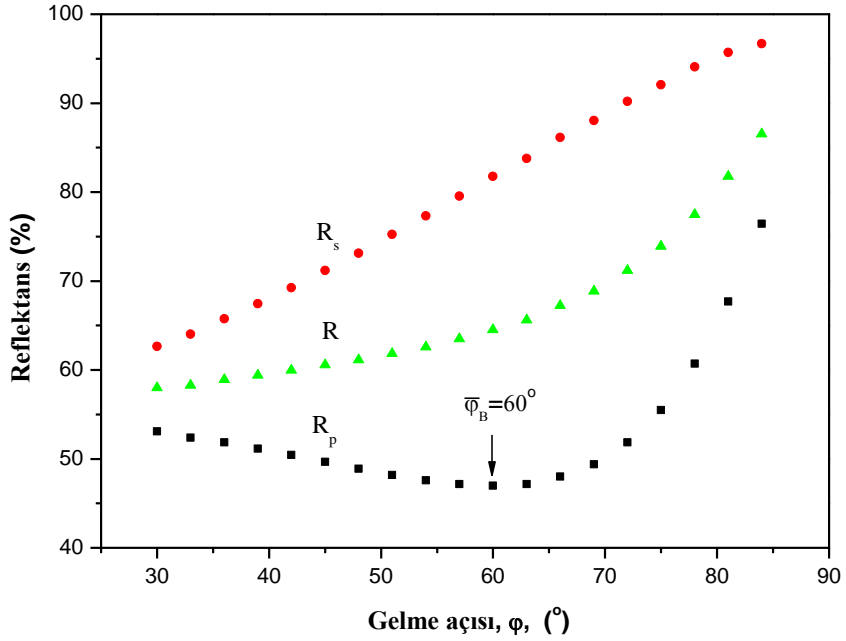
4.3.1. Asal Gelme Açısının Belirlenmesi

Şekil 4.6'da 5400 Å dalga boyuna sahip ışık kullanılarak, opak Au filmin (yaklaşık 3000 Å kalınlığında) ψ ve Δ elipsometrik parametrelerinin gelme açısıyla değişimi gösterilmiştir. İletken ortamlar için teorik davranışa uygun olarak (Hass, Thun, 1964; Azam, Bashara, 1986) Δ 'nın 90° değerini aldığı gelme açısında ψ 'nin sıfır olmayan bir minimumdan geçtiği görülmektedir. Au film için asal gelme açısı değeri $70,56^\circ$ olarak belirlendi. Şekil 4.7'de aynı filmin 5400 Å dalga boyundaki optik sabitleri kullanılarak, (45), (53) bağıntılarından hesaplanan R_p ve R_s reflektanslarının gelme açısıyla değişimi gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi Bölüm 2.2'de iletken ortamlar için tanımlanan davranışa uygun olarak, dik geliş ($\varphi_0 = 0^\circ$) halinde R_p ve R_s eşit olup, gelme açısı büyüdükçe R_s sürekli olarak artarken, R_p gelme açısının $\varphi' = 69^\circ$ değerinde bir minimumdan geçer.

R_p 'nin minimum olduğu bu gelme açısı değeri Bölüm 2.2'de tanımlanan pseudo-Brewster açısıdır. Bu değer Şekil 4.6 'da gösterilen deneysel ψ ve Δ değerlerinin gelme açısı ile değişimlerinden elde edilen asal gelme açısının $70,56^\circ$ 'lik değerine yakındır. Asal gelme açısının ve pseudo-Brewster açısının her ikisi için belirlenen değerler literatürde başka araştırmacılar tarafından bulunan değerlerle uyumludur (Kim, Vedam, 1986; Kolb, McIntyre, 1971).



Şekil 4.6. 5400 Å dalgaboylu ışık için ψ ve Δ elipsometrik parametrelerinin gelme açısıyla değişimi. (Au taşıyıcının optik sabitleri: $n_2=1,49$ ve $k_2 = 1,88$.)

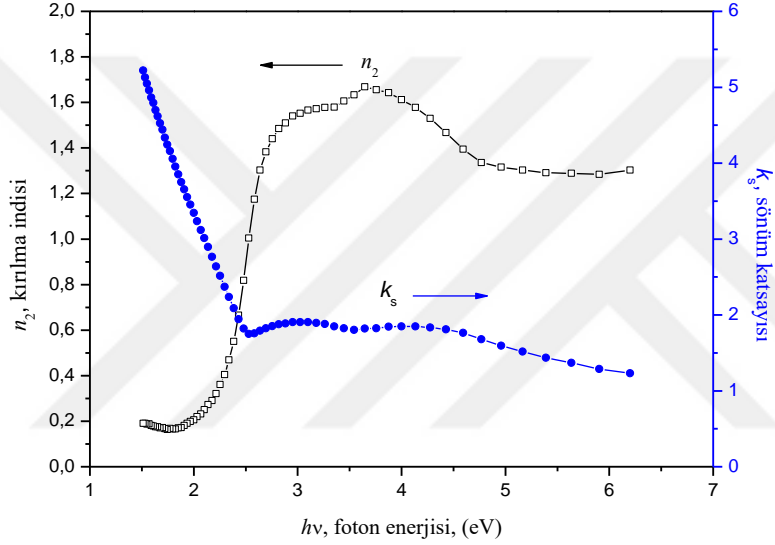


Şekil 4.7. 5400 Å dalgaboylu ışık için R_p ve R_s reflektanslarının gelme açısıyla değişimi. (Au taşıyıcının optik sabitleri: $n_2=1,49$ ve $k_2 = 1,88$.)

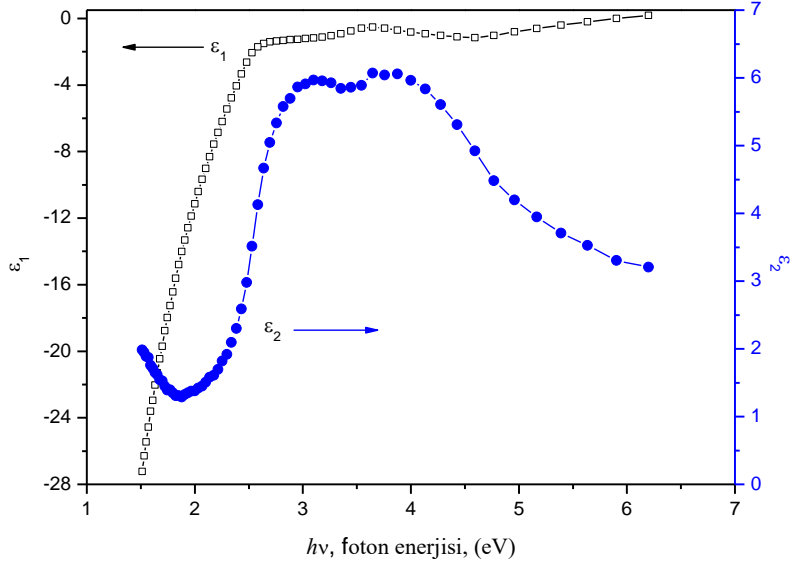
4.3.2. Altının Optik Sabitleri ve Elektronik Özellikleri

Herhangi bir optoelektronik cihazın fabrikasyonu ya da bir malzemenin optik karakterizasyonu ile ilgilenildiğinde, çok geniş bir spektral aralıkta ince filmlerin optik sabitlerinin bilinmesi oldukça önemlidir. Kuşatan ortam, Cu_2Se ince film ve opak Au taşıyıcıdan oluşan üç faz sisteminin tam optik karakterizasyonunu yapmak için, yüzey film büyütülmeden önce opak Au taşıyıcının geniş bir spektral aralıkta elipsometrik ölçümü yapıldı. Bu ölçümün sonuçları kullanılarak belirlenen n_2 ve k_2 optik sabitlerinin foton enerjisi ile değişimi Şekil 4.8’de gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi n_2 kırılma indisi alçak enerji bölgesinde küçük değerlere sahipken, 2,2 eV foton enerjisinden itibaren daha yüksek enerjilere doğru gidildikçe hızlı bir değişim gösterir. Sönüm katsayısı ise yüksek enerjilere doğru gidildikçe önce hızlı bir şekilde azalır ve yaklaşık 2,2 eV’den sonra daha küçük değerler alır. Optik sabitlerin bu davranışı Au’nun band yapısı ve elektronik özellikleri ile ilişkili olup, bu ilişki dielektrik sabitinin spektral davranışı ile birlikte göz önüne alınarak açıklanabilir. Bu değerler literatürde aynı enerji aralığında elde edilen sonuçlarla iyi bir uyum gösterir (Schulz,1954; Johnson, Christy,1975). Metallerin optik özellikleri ile elektronik özellikleri ve band yapısı arasında sıkı bir ilişki vardır. Bu ilişki $\tilde{\epsilon}_r$ kompleks dielektrik sabitinin ϵ_1 gerçel ve ϵ_2 sanal kısımlarının foton enerjisiyle değişimleri incelenerek kurulabilir. Dielektrik sabiti, metaldeki serbest ve bağlı elektronların metale uygulanan optik frekanslardaki dielektrik alanlara karşı gösterdiği davranışları karakterize eder. Bu davranışlar (1) alçak foton enerjilerinde serbest elektron davranışı, yani band içi geçişler, (2) daha yüksek enerjilerde band arası geçişler, (3) serbest elektronların plazma titreşimleri olmak üzere üç grupta toplanır. Serbest elektron davranışının etkin olduğu alçak enerji bölgesinde elektronlar aldıkları enerji ile buldukları bant içinde daha yüksek enerji seviyelerine çıkabilir. Bu bölgede ϵ_1 büyük negatif değerler alırken ϵ_2 hızlı bir şekilde sifıra doğru yaklaşır. Band arası geçişlerin etkin olduğu enerji bölgesinde ϵ_1 ve ϵ_2 hızlı bir değişim gösterir. Serbest elektronların plazma titreşimlerinin uyarıldığı enerji bölgesinde ise $\epsilon_1=0$ ve $\epsilon_2 \gg 1$ olur. Au’nun Şekil 4.8’de verilen optik sabitlerinin değerleri kompleks dielektrik sabitinin gerçel ve sanal kısımlarının (16) ve (17) bağıntılarıyla verilen ifadelerinde yerine yazılarak hesaplanan ϵ_1 ve ϵ_2 ’nin foton enerjisi ile değişimi Şekil 4.9 ‘da gösterilmiştir. Şekilden görüldüğü gibi ϵ_1 , 2.2 eV enerji değerinden itibaren daha küçük enerji değerlerine doğru gidildikçe büyük negatif değerlere hızlı bir şekilde artmaktadır. Au film için ϵ_1 ’in büyük

negatif değerler aldığı bu bölge serbest elektron davranışının, yani band içi geçişlerin etkin olduğu bölgedir. Bu bölgede ε_2 ise sıfıra yakın değerlere sahiptir. Au'nun band yapısı hesaplamalarına göre band arası geçişler yaklaşık 2,2 eV 'dan itibaren başlamaktadır (Schulz, 1954; Johnson, 1975). Band arası geçişlerin başlaması ile ε_1 ve ε_2 değerleri hızlı bir artış gösterir.



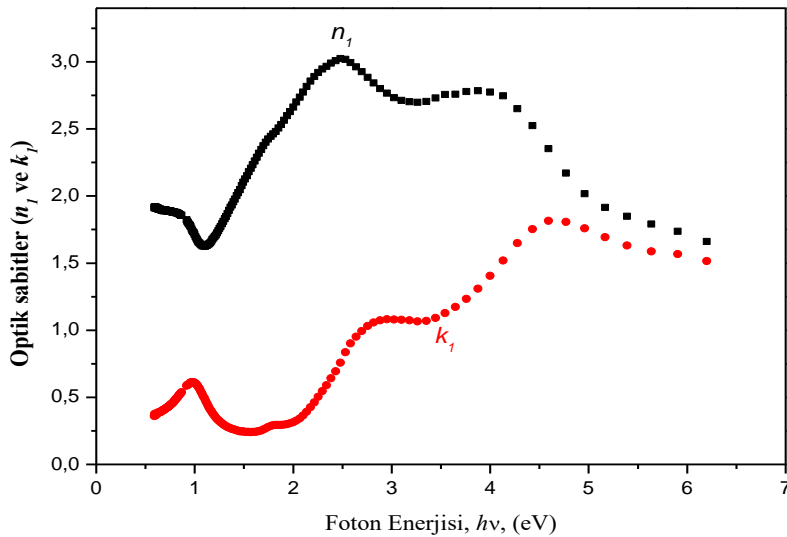
Şekil 4.8. Opak Au filmin optik sabitlerinin foton enerjisi ile değişimi



Şekil 4.9. Opak Au filmin kompleks dielektrik sabitinin gerçel (ε_1) ve sanal (ε_2) kısımlarının foton enerjisiyle değişimi.

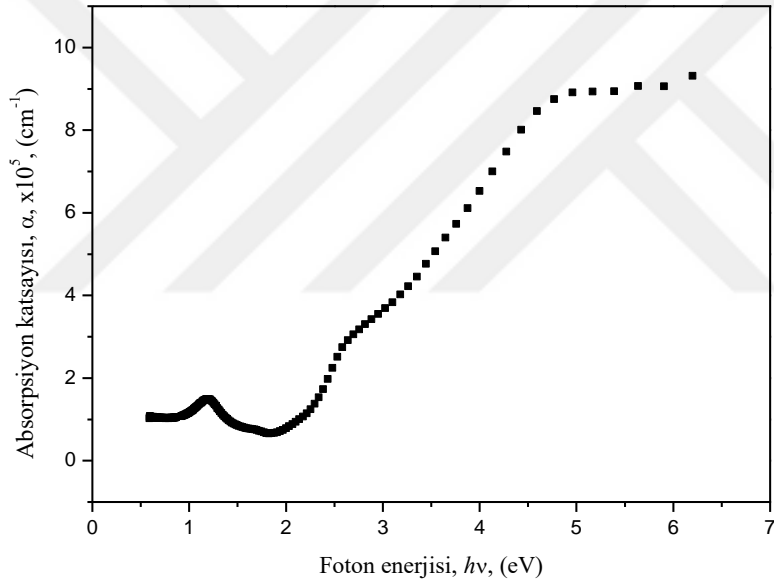
4.4. Au Taşıyıcı Üzerinde Büyütülen Cu_2Se İnce Filmin Optik Karakterizasyonu

Optik sabitleri bilinen opak Au taşıyıcı yaklaşık 325 Å kalınlığında Cu_2Se ince filmiyle kaplandı. Büyütülen optik sistem (kuşatan ortam-film-taşıyıcı, üç faz sistemi) üzerinde tanımlanan spektral aralıkta elipsometrik ölçümler tekrarlandı. Bu ölçümlerin sonuçları kullanılarak, Cu_2Se yüzey filmin optik sabitleri belirlendi. Şekil 4.10'da 0,59-6,20 eV enerji aralığında Cu_2Se yüzey filminin n_1 ve k_1 optik sabitlerinin foton enerjisiyle değişimi gösterilmiştir. n_1 kırılma indisi spektrumu Cu_2Se 'un temel optik geçişine karşılık gelen yaklaşık 2,33 eV enerji değerinde en yüksek bir pik değerine sahiptir. Yarıiletken bir malzeme için kırılma indisin temel optik geçişin meydana geldiği enerji yakınında bir maksimuma sahip olduğu bilinmektedir. Bu sonuç Cu_2Se ince filminin yasak enerji band aralığının 2,33 eV civarında olduğunu gösterir. k_1 sönüm katsayısı ise foton enerjisinin artmasıyla kademeli bir şekilde arttığı görülmektedir. Cu_2Se ince filmin optik sabitlerinin bu spektral davranışı literatürde reflektans ve transmitans ölçümlerinden elde edilen davranışıyla iyi uyum gösterir (Offiah, Ugwoke, Ezema, Ekwealor, 2012; Thirumavalavan, Mani, Sagadevan, 2015).



Şekil 4.10. 325 Å kalınlığındaki Cu_2Se ince filminin kırılma indisinin ve sönüm katsayısının foton enerjisiyle değişimi.

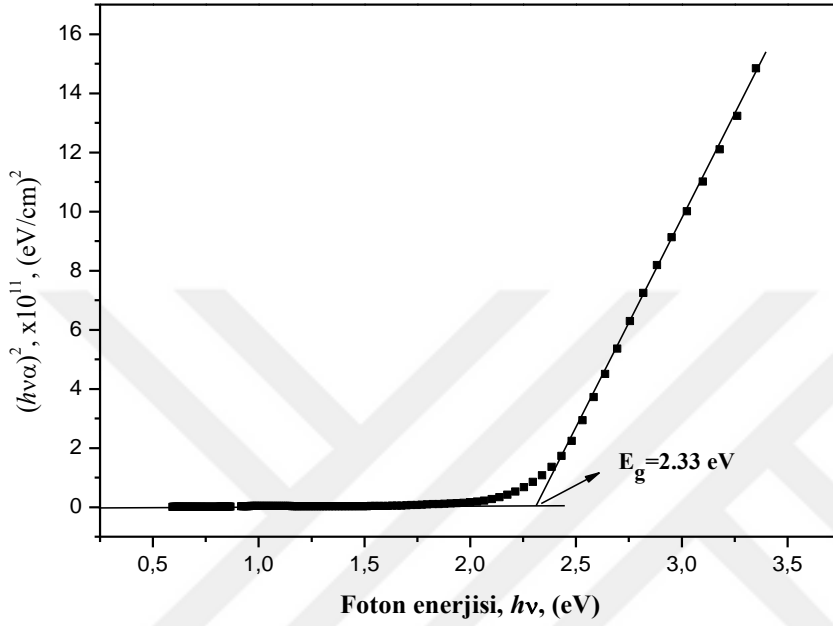
Şekil 4.11’de geniş spektral aralıkta optik sabitleri belirlenen Cu_2Se yüzey film için (13) bağıntısıyla tanımlı α absorpsiyon katsayısının foton enerjisiyle değişimi gösterilmiştir. Absorpsiyon katsayısı yaklaşık 1,5 eV’den daha büyük foton enerjilerinde keskin bir değişim sergiler. Ayrıca Cu_2Se ince filminin absorpsiyon katsayısının tüm foton enerjileri için 10^5 cm^{-1} mertebesinde olduğu görülmektedir. Böyle yüksek absorpsiyon katsayısı ince film formundaki Cu_2Se ’un güneş enerjisi uygulamaları için çok uygun bir malzeme olduğunu ifade eder (Pastrnyak 1959).



Şekil 4.11. 325 Å kalınlığındaki Cu_2Se ince filminin α absorpsiyon katsayısının foton enerjisiyle değişimi

Cu_2Se ’un yasak enerji band aralığını belirlemek için bölüm 2.8’de anlatılan yöntem kullanıldı.

Şekil 4.11’de spektral davranışı tanımlanan α absorpsiyon katsayısının sayısal değerleri (86) bağıntısında yerine yazılarak, γ ’nın 1/2, 3/2 ve 2 değerleri için $h\nu$ foton enerjisine karşı $(h\nu\alpha)^{1/\gamma}$ ’nın değerleri hesaplandı ve eğrisi çizildi.



Şekil 4.12. 325 Å kalınlığındaki Cu_2Se ince filmi için $(h\nu\alpha)^2$ 'nin foton enerjisiyle değişimi.

Şekil 4.12'de γ nın 2 değeri için çizilen en iyi lineerliğe sahip eğri gösterilmiştir. Bu eğrinin lineer kısmı Cu_2Se ince filmi için yaklaşık 2,33 eV değerinde bir yasak band aralığı verir. Bu değer literatürde Cu_2Se için 2-2,34 eV enerji aralığında belirlenen doğrudan yasak band aralığı değerleriyle uyumaktadır (Grozdanov 1994, Mamun, Islam, Bhuiyan, 2005; Bari Ganesan, Potadar, Patil, 2009; Monsalve 2014, Chavan, Yadav 2016; Sadekar 2018). Optik parametrelerinin büyütülen tabakaların kompozisyonuna duyarlı olmasından dolayı, buharlaştırılan Cu_2Se 'un yasak enerji band aralığına ait sonuçların geniş bir aralıkta değişiyor olması olağan karşılanmalıdır (Savelli, Bougnot, 1979).

5. SONUÇ

Cu₂Se ince filmleri çok katmanlı güneş pillerinin fabrikasyonunda iletken ya da absorplayıcı tabaka olarak kullanılmasına imkân sağlayan optik özelliklere sahiptir. Bu amaç için gereksinim duyulan filmler cam ve opak Au taşıyıcılar üzerinde vakumda buharlaştırma yöntemiyle başarılı bir şekilde büyütüldü. Filmlerin yapısal ve yüzey özellikleri X-ışını kırınım ölçeri (XRD), atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ve taramalı elektron mikroskobu (SEM) teknikleriyle incelendi. XRD desenlerinde ortaya çıkan tüm yansıma piklerinin kübik yapıya sahip stokiyometrik Cu₂Se fazına ait olduğu görüldü. AFM resimleri büyütülen filmlerin yüzey morfolojisinin taşıyıcıya iyi bir şekilde tutunmuş granüler yapıdaki nano-boyutlu taneciklerden oluştuğunu gösterdi. Artan kalınlıktaki üç yüzey filmin pürüzlülüklerinin sırasıyla 17,7 Å, 28,7 Å ve 59,8 Å mertebesinde olduğu belirlendi. Taramalı elektron mikroskobu resimleri filmlerin yapısının homojen ve taşıyıcıya iyi tutunduğunu doğrulamaktadır. Enerji dağılımı X-ışını analizi (EDAX) filmin Cu ve Se'un 2,15'lik atomik oranıyla stokiyometrik faza sahip olduğunu ortaya çıkardı. Elipsometrik yöntemle belirlenen optik sabitlerin spektral davranışı literatürde transmitans ve reflektans ölçümlerinden elde edilen davranışla iyi uyumaktadır. Cu₂Se'un absorpsiyon katsayısının ölçümün yapıldığı tüm spektral aralıkta 10^5 cm^{-1} mertebesinde olduğu bulundu. Optik incelemeler Cu₂Se'un optik absorpsiyonunu yeterli bir şekilde tanımlar. 325 Å kalınlığındaki stokiyometrik Cu₂Se ince filminin doğrudan geçişler için yasak enerji band aralığının 2,33 eV olduğu bulundu. Literatürde, Cu₂Se için 2 eV'dan 2,34 eV'a kadar değişen aralıkta doğrudan geçişlere karşılık gelen yasak enerji band aralığı değerleri belirlenmiştir. Böylece, vakumda buharlaştırma yöntemiyle büyütülen Cu₂Se ince filmi için elde edilen değer literatür değeriyle tam olarak uyumaktadır. Bu çalışmada elde edilen tüm optik özellikler inceleme altındaki malzemenin güneş enerjisini kontrol tabakası olarak ve fotovoltaik cihazlarda kullanılmasına imkân verir.

KAYNAKLAR

- Ahn, H., & Um, Y. (2014). Thickness dependences of the structural optical, and electrical properties of Cu₂Se thin films grown by using DC magnetron sputtering. **Journal of the Korean Physical Society**, 64(10): 1600-1604.
- Azam R. M. A. ve Bashara N. M. (1986), "Ellipsometry and Polarized Light", North-Holland Publ. Co., Amsterdam, 269-288
- Azam R. M. A. ve Bashara N. M. (1986), "Ellipsometry and Polarized Light", North-Holland Publ. Co., Amsterdam, 276
- Bari, R. H., Ganesan, V., Potadar, S., & Patil, L. A. (2009). Structural, optical and electrical properties of chemically deposited copper selenide films. **Bulletin of Materials Science**, 32(1): 37-42.
- Chavan, U. J., & Yadav, A. A. (2016). Optical And Photovoltaic Properties Of Cuse Thin Films. **International Education and Research Journal**, 2(10):59-61.
- Chu, T. L., Chu, S. S., Lin, S. C., & Yue, J. (1984). Large grain copper indium diselenide films. *Journal of the Electrochemical Society*, 131(9): 2182-2185.
- Derin H. (1997), "Vakumda Buharlaştırma Yöntemiyle Hazırlanan Alüminyum İnce Filmlerinin Optik Özellikleri" Ege Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü, Yüksek Lisans Tezi
- Derin H. (1997), "Vakumda Buharlaştırma Yöntemiyle Hazırlanan Cu ve Au Yüzeyleri Üzerindeki Isısal Cu₂O İnce Filmlerinin Optik Özellikleri" Ege Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü, Doktora tezi
- Derin H., Kantarlı K. (2009), "Structural and Optical Characterization of Thermally evaporated Cadmium Sulfide Thin Films" **Surf. Interface anal.** 41, 61-68
- Derin, H. (2014). Morphological and optical characterization of thermally evaporated copper sulphide thin films. **Applied Physics A**, 114(3): 839-845.

- Ersan F. (2009), "Vakumda Buharlaştırma Yöntemiyle Hazırlanan CuS İnce Filmlerinin Optik Özelliklerinin Elipsometrik İncelenmesi" Adnan Menderes Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü, Yüksek Lisans Tezi
- Fadel M., Fayek S.A., Abou-Helal M.O., Ibrahim M.M., Shakra A.M. (2009). Structural and optical properties of SeGe and SeGeX (X=In, Sb and Bi) amorphous films. **Journal of Alloys and Compounds**, 485(1-2): 604-609.
- Fay, S., Kroll, U., Bucher, C., Vallat-Sauvain, E., & Shah, A. (2005). Low pressure chemical vapour deposition of ZnO layers for thin-film solar cells: temperature induced morphological changes. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, 86(3), 385-397.
- Fons, P., Niki, S., Yamada, A., & Oyanagi, H. (1998). Direct observation of the Cu_{2-x}Se phase of Cu-rich epitaxial CuInSe₂ grown on GaAs (001). **Journal of applied physics**, 84(12): 6926-6928.
- Fujiwara H. (2007), "Spectroscopic Ellipsometry Principles and Applications" John Wiley & Sons, Ltd, England
- Garcia, V. M., Nair, P. K., & Nair, M. T. S. (1999). Copper selenide thin films by chemical bath deposition. **Journal of crystal growth**, 203(1-2): 113-124.
- Gosavi, S. R., Deshpande, N. G., Gudage, Y. G., & Sharma, R. (2008). Physical, optical and electrical properties of copper selenide (CuSe) thin films deposited by solution growth technique at room temperature. **Journal of Alloys and Compounds**, 448(1-2): 344-348.
- Grahn, H. T. (1999). Introduction to semiconductor physics. World Scientific Publishing Company, 123, Singapore.
- Grozdánov, I. (1994). Electroconductive copper selenide films on transparent polyester sheets. Synthetic Metals- Samuel I.D.W-Elsevier, 213-216, New York

- Gurin, V. S., Alexeenko, A. A., Zolotovskaya, S. A., & Yumashev, K. V. (2006). Copper and copper selenide nanoparticles in the sol-gel matrices: **Structural and optical. Materials Science and Engineering** 26(5-7): 952-955.
- Gurin, V. S., Prokopenko, V. B., Alexeenko, A. A., Wang, S., & Prokoshin, P. V. (2001). Cu₂Se nanoparticles in sol-gel silica glasses. **Mater. Sci. Eng. C**, 15: 93-95.
- Hankare, P. P., Khomane, A. S., Chate, P. A., Rathod, K. C., & Garadkar, K. M. (2009). Preparation of copper selenide thin films by simple chemical route at low temperature and their characterization. **Journal of Alloys and Compounds**, 469(1-2): 478-482.
- Hermann, A. M., & Fabick, L. (1983). Research on polycrystalline thin-film photovoltaic devices. **Journal of Crystal Growth**, 61(3): 658-664.
- Heske, C., Winkler, U., Neureiter, H., Sokolowski, M., Fink, R., Umbach, E., ... & Bressler, P. R. (1997). Preparation and termination of well-defined CdTe (100) and Cd (Zn) Te (100) surfaces. **Applied physics letters**, 70(8): 1022-1024.
- Hosono, H. (2004). Built-in Nanostructures in Transparent Oxides for Novel Photonic and Electronic Functions Materials. **International Journal of Applied Ceramic Technology**, 1(2): 106-118.
- Islam, A. B. M. O., & Bhuiyan, A. H. (2005). Structural, electrical and optical properties of copper selenide thin films deposited by chemical bath deposition technique. **Journal of Materials Science: Materials in Electronics**, 16(5): 263-268.
- J. A. Woollam. Co., Vertical VASE, USA (2007).
- Jagminas, A., Juškėnas, R., Gailiūtė, I., Statkutė, G., & Tomašiūnas, R. (2006). Electrochemical synthesis and optical characterization of copper selenide nanowire arrays within the alumina pores. **Journal of crystal growth**, 294(2): 343-348.

- Johnson, P. B., & Christy, R. W. (1975). Optical constants of copper and nickel as a function of temperature. **Physical Review B**, 11(4): 1315.
- Ju, X., Feng, W., Zhang, X., Kittichungchit, V., Hori, T., Moritou, H., ... & Ozaki, M. (2009). Fabrication of organic photovoltaic cells with double-layer ZnO structure. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, 93(9): 1562-1567.
- Kashida, S., Shimosaka, W., Mori, M., & Yoshimura, D. (2003). Valence band photoemission study of the copper chalcogenide compounds, Cu₂S, Cu₂Se and Cu₂Te. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, 64(12): 2357-2363.
- Kim, S. Y., & Vedam, K. (1986). Analytic solution of the pseudo-Brewster angle. **J. Opt. Soc. Am A**, 3(11):1772-1773.
- Kittel C. (2005), "Introduction to Solid State Physics" John Willey and Sons Inc., USA, Eighth Edition
- Kolb, D. M., & McIntyre, J. D. E. (1971). Spectrophotometric determination of the optical properties of an adsorbed oxygen layer on gold. **Surface Science**, 28(1):321-334.
- L.B. O. Madelung, M. Schulz, H. Weiss, Landolt-Börnstein 2008 Springer-Verlag, Berlin.
- Lakshmikumar, S. T., & Rastogi, A. C. (1994). Selenization of Cu and In thin films for the preparation of selenide photo-absorber layers in solar cells using Se vapour source. **Solar Energy Materials and Solar Cells** 32, 7-19.
- Li, Y. Z., Gao, X. D., Yang, C., & Huang, F. Q. (2010). The effects of sputtering power on optical and electrical properties of copper selenide thin films deposited by magnetron sputtering. **Journal of Alloys and compounds**, 505(2): 623-627.

- Lippkow, D., & Strehblow, H. H. (1998). Structural investigations of thin films of copper-selenide electrodeposited at elevated temperatures. **Electrochimica Acta**, 43(14-15): 2131-2140.
- Llabres, J., & Arjona, F. (1980). Methods for forming cuprous sulphide and an analysis of the films obtained for their application in Cu₂S/CdS solar cells. **physica status solidi (a)**, 58(2): K153-K156.
- Marton, J. P., & Jordan, B. D. (1978). Plasma and conduction resonance dispersion for bulk and aggregated metals. **Journal of Applied Physics**, 4225-4228.
- Milman, V. (2002). Klockmannite, CuSe: structure, properties and phase stability from ab initio modeling. **Acta Crystallographica Section B: Structural Science**, 58(3): 437-447.
- Montes-Monsalve, J. I., Correa, R. B., & Mora, A. P. (2014). Optical and structural study of CuSe and CuSe/in thin films. **In Journal of Physics: Conference Series**, (Vol. 480, No. 1, p. 012024). IOP Publishing.
- Muthukannan, A., Henry, J., Sivakumar, G., & Mohanraj, K. (2016). Fabrication and characterization of vacuum evaporated Al: CuSe₂ thin films. *Superlattices and Microstructures-Gil. B, Gogova D., Medjdoub F., Wang X.-Elsevier*, 83-88, New York
- O'Brien, R. N., & Santhanam, K. S. V. (1992). Incorporation of In into Copper Selenide Formation of Copper Indium Selenide Followed by Laser Interferometry. **Journal of The Electrochemical Society**, 139(2): 434-437.
- Offiah, S. U., Ugwoke, P. E., Ezema, F. I., Ekwealor, A. B. C., & Osuji, R. U. (2012). Comparative Study Of Cu_xS and Cu_ySe Thin Films Grown By Cbd. **Chalcogenide Letters**, 9(5): 257-264.
- Okimura, H., Matsumae, T., & Makabe, R. (1980). Electrical properties of Cu_{2-x}Se thin films and their application for solar cells **Thin Solid Films**, 71: 53-59,

- Pastrnyak, I. (1959). Temperature dependence of the light absorption coefficient in cuprous oxide crystals in the visible region of the spectrum. **Soviet Physics-Solid State**, 1(6):888-891.
- Pathan, H. M., Desai, J. D., & Lokhande, C. D. (2002). Modified chemical deposition and physico-chemical properties of copper sulphide (Cu₂S) thin films. **Applied Surface Science**, 202(1-2): 47-56.
- Patidar, D., & Saxena, N. S. (2012). Characterization of single phase copper selenide nanoparticles and their growth mechanism. **Journal of Crystal Growth**, 343(1): 68-72.
- Petrović, M., Gilić, M., Ćirković, J., Romčević, M., Romčević, N., Trajić, J., & Yahia, I. (2017). Optical Properties of CuSe Thin Films–Band Gap Determination. **Science of Sintering**, 49(2): 167-174.
- Ramesh, K., Thanikaikarasan, S., & Bharathi, B. (2014). Structural, morphological and optical properties of copper selenide thin films. **International Journal of ChemTech Research**, 6(13): 5408-5411.
- Sadekar H. K. (2018). Optical and Structural Properties of CuSe Thin Films Deposited by Chemical Bath Deposition (CBD) Technique. **Int. Res. J. of Science & Engineering, Special Issue**, A2: 20-22.
- Schulz, L. G. (1954). The optical constants of silver, gold, copper, and aluminum. *J. Opt. Soc. Am*, 44(5): 357-362.
- Smith T. (1977). Optical constants of copper and nickel. **J. Opt. Soc. Am**, 67(1):48-53.
- Söderström, T., Haug, F. J., Niquille, X., Terrazzoni, V., & Ballif, C. (2009). Asymmetric intermediate reflector for tandem micromorph thin film silicon solar cells. **Applied Physics Letters**, 94(6): 063501.
- Thirumavalavan, S., Mani, K., & Sagadevan, S. (2015). Investigation of the structural, optical and electrical properties of copper selenide thin films. **Materials Research**, 18: 000-1007.
- Tompkins, H., & Irene, E. A. (2005). *Handbook of ellipsometry*. William Andrew.

- Tonejc, A., Ogorelec, Z., & Mestnik, B. (1975). X-ray investigation of copper selenides Cu_{2-x}Se ($2.00 \geq 2-x \geq 1.72$). **Journal of Applied Crystallography**, 8(3): 375-379.
- Vasicek A. (1960), "Optics of Thin Films" North-Holland Publishing Company, Amsterdam.
- Ward L. (1988), "The Optical Constants of Bulk Materials and Films" Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia.
- Yan, Y. L., Qian, X. F., Yin, J., & Zhu, Z. K. (2003). Novel complex-assisted photochemical route to the phase control of nanocrystalline copper selenide. **Journal of materials science letters**, 22(24): 1801-1803.
- Zhang, L., Zhao, S., Li, Y., Lan, Y., Han, M., Dai, Z., & Bao, J. (2015). Monoclinic Copper (I) Selenide Nanocrystals and Copper (I) Selenide/Palladium Heterostructures: Synthesis, Characterization, and Surface-Enhanced Raman Scattering Performance. **European Journal of Inorganic Chemistry**, 2015(13): 2229-2236.
- Zhang, Y., Qiao, Z. P., & Chen, X. M. (2002). Microwave-assisted elemental direct reaction route to nanocrystalline copper chalcogenides CuSe and Cu_2Te . **Journal of Materials Chemistry**, 12(9): 2747-2748.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Sedat KORKMAZ

Doğum Yeri ve Tarihi : Bursa/28.10.1986

EĞİTİM DURUMU

Lisans Öğrenimi : Atatürk Üniversitesi

Yüksek Lisans Öğrenimi : Aydın Adnan Menderes Üniversitesi

Yabancı Diller : İngilizce

BİLİMSEL FAALİYETLERİ

a) Makaleler

-SCI

-Diğer

b) Bildiriler

-Uluslararası

-Ulusal

GEFİK 2012 Poster Bildiri Sunumu

ADIM 2012 Sözlü Sunum

c) Katıldığı Projeler

İŞ DENEYİMİ

Çalıştığı Kurumlar ve Yıl :

İLETİŞİM

E-Posta Adresi : sedat_korkmaz_1772@hotmail.com

Tarih : 26/10/2018