

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**A³B³C⁶₂ KALKOJEN YARIİLETKENLERİNDE ELEKTRİK ALANIN
OPTİK ÖZELLİKLERE ETKİSİ**

DİLARA UYSAL
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

GEBZE
2019

T.C.
GEBZE TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

A³B³C⁶₂ KALKOJEN
YARIİLETKENLERİNDE ELEKTRİK
ALANIN OPTİK ÖZELLİKLERE ETKİSİ

DİLARA UYSAL
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

DANIŞMANI
PROF. DR. MİRHASAN SEYİTSOY

GEBZE
2019

GTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 03/07/2019 tarih ve 2019/30 sayılı kararıyla oluşturulan jüri tarafından 19/07/2019 tarihinde tez savunma sınavı yapılan Dilara Uysal'ın tez çalışması Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

JÜRİ

ÜYE

(TEZ DANIŞMANI)

: PROF. DR. MİRHASAN SEYİTSOY

M. Seyitsoy

ÜYE

: PROF. DR. MEVLÜT KARABULUT

M. Karabulut

ÜYE

: PROF. DR. KEMAL ÖZDOĞAN (YTÜ)

K. Özdoğan

ONAY

Gebze Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun

...../...../..... tarih ve/..... sayılı kararı.

ÖZET

Bu tezin amacı TlGaSe₂ katmanlı yarıiletkeninde elektrik alan etkisiyle aktive olan kusurların oluşturduğu iç elektrik alanın varlığını incelemektir. Deneysel çalışmalar sonucunda TlGaSe₂ kristalinin elektrik alan, sıcaklık gibi dış etkilere karşı hassasiyet gösterdiği gözlenmiştir.

Çalışma içerisinde TlGaSe₂ kristalinin literatürdeki yeri, fiziksel, elektriksel ve optik özellikleri incelenmiştir. Ayrıca kristalin bant yapısından da bahsedilmektedir. Bunların yanı sıra yarıiletkenlerin optik soğurma özelliklerine de değinilmiştir. Bu incelemelerin hepsi Franz-Keldysh etkisi ve Urbach kuralına temel hazırlamak amacıyla yapılmıştır.

Franz-Keldysh etkisiyle ilgili detaylı bir literatür incelemesi yapılmış ve çalışmayla ilgili olan tüm bilgiler tez içerisinde detaylı bir şekilde anlatılmıştır. Aynı işlem Urbach kuralı içinde yapılmıştır.

Bu çalışmada kristalde gömülü elektrik alanın optik soğurmaya etkisi incelenmiştir. Ayrıca TlGaSe₂ kristalinin optik soğurma katsayısının yasak bant kenarındaki davranışı Urbach kuyruğu olarak tanımlanmıştır.

Literatürde TlGaSe₂ kristali için iç elektrik alanın optik soğurma kenarı üzerindeki etkisiyle ilgili bir çalışmaya rastlanmamıştır. Bu tez çalışması literatürdeki bu boşluğu doldurmayı amaçlamaktadır.

Anahtar Kelimeler: TlGaSe₂ katmanlı kristali, optik soğurma, Urbach kuralı, Franz-Keldysh etkisi.

SUMMARY

The aim of this thesis is to investigate the presence of an internal electric field in the TlGaSe₂ layered semiconductor caused by defects activated by the external electric field. As a result of experimental studies, it's shown that TlGaSe₂ crystal is sensitive to external effects such as electric field and temperature.

In this study, the place of TlGaSe₂ crystal in the literature, its physical, electrical and optical properties were examined. Crystalline band structure and in addition, optical absorption properties of semiconductors are mentioned. All of these investigations were conducted to prepare a basis for the Franz-Keldysh effect and the Urbach rule.

A detailed literal review of the Franz-Keldysh effect has been made and all the information that could contribute to the study was explained in detail in the thesis and the same path was followed for Urbach rule.

In this study, the effect of embedded electric field on optical absorption of the crystal was investigated. In addition, the behaviour of the optical absorption coefficient of the TlGaSe₂ crystal at the forbidden band edge is defined as the Urbach tail.

In the literature, a study related to the effect of internal electric field on the optical absorption edge of TlGaSe₂ crystal is missing. This thesis aims to fill this gap in the literature.

Key Words: TlGaSe₂ layered crystal, optical absorption, Urbach rule, Franz-Keldysh effect.

TEŐEKKÜR

Öncelikle danışmanım Prof. Dr. MirHasan Seyitsoy'a tez çalışmam boyunca bilimsel katkılarından ve yardımlarından dolayı sonsuz teşekkür ederim.

Değerli hocam Dr. Yasin Şale'ye tüm yardımları, katkıları ve sabrından ötürü teşekkür ederim.

Lisans ve lisansüstü öğrenim hayatım boyunca ders aldığım, çalışma şansı bulduğum tüm hocalarıma ve arkadaşlarıma da ayrıca teşekkür ederim.

Son olarak bugüne kadar desteğini benden esirgemeyen ve her zaman yanımda olan aileme sabır ve güvenlerinden ötürü sonsuz teşekkür ederim.



İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	v
SUMMARY	vi
TEŞEKKÜR	vii
İÇİNDEKİLER	viii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	x
ŞEKİLLER DİZİNİ	xiii
TABLolar DİZİNİ	xviii
1.GİRİŞ	1
2.TlGaSe ₂ KRİSTALİ HAKKINDA	3
2.1. TlGaSe ₂ Kristalinin Literatürdeki Yeri	3
2.1.1. TaGaSe ₂ Kristalinin Üretim Metodu	3
2.2. TlGaSe ₂ Kristalinin Fiziksel Yapısı	5
2.3. TlGaSe ₂ Kristalinin Elektriksel Özellikleri	8
2.4. TlGaSe ₂ Kristalinin Optik Özellikleri	9
2.4.1. TlGaSe ₂ Kristalinin Bant Yapısı	9
2.4.2. TlGaSe ₂ Kristalinin Optik Özelliklerinin İncelenmesi	12
2.5. TlGaSe ₂ Kristalinin Avantajları ve Dezavantajları	20
3.YARIİLETKENLERİN OPTİK ÖZELLİKLERİ	21
3.1. Soğurma	21
3.1.1. Doğrudan Geçiş	21
3.1.2. Dolaylı Geçiş	24
3.2. Franz-Keldysh Etkisi	29
3.2.1. Franz-Keldysh Etkisinin Matematiksel İncelenmesi	30
3.2.2. Kuvvetli Bir Elektrik Alan Varlığında Temel Soğurma	34
3.3. Urbach Kuralı	35
3.3.1. Kristal Katılarda Urbach Kuralı'nın Temel Özellikleri	35
3.3.2. Urbach Kuralı ve Kristal Örgü Bozulması	38
3.3.3. Amorf Malzemelerde Urbach Kuralı	41

4.DENEYSEL YÖNTEMLER	44
4.1. Cihazlar	44
4.1.1. Triax 550 UV-VIS-IR Spektrometre	44
4.1.2. Thermo Oriel Zenon Lamba	45
4.1.3. Optik Kreostat	46
4.1.4. Keithley 6517A Elektrometre	47
4.1.5. Hamamatsu R-1527 Fotoçoğaltıcı (PMT)	47
4.1.6. Lakeshore 340 Sıcaklık Kontrol Ünitesi	49
4.1.7. Numune Tutucular	50
4.2. Deneysel Yöntem	50
5.DENEYSEL VERİLER	52
5.1 Gömülü Alanlı (Polarize Olmuş) ve Alansız (Polarize Olmamış) Ölçümlerin Karşılaştırmalı Soğurma Spektrumları	52
5.1.1 Deneysel Sonuçlar	55
5.2 Tüm Gerilim Değerleri için Fit Edilmiş Soğurma Spektrumları	59
5.2.1 Deneysel Sonuçlar	65
5.3 Tüm Gerilim Değerleri için Sıcaklığa Bağlı Urbach Enerjisi Spektrumları	66
5.3.1 Deneysel Sonuçlar	69
6.SONUÇ VE YORUM	70
KAYNAKLAR	71
ÖZGEÇMİŞ	77

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

<u>Simgeler ve</u> <u>Kisaltmalar</u>	<u>Açıklamalar</u>
\AA	Angström
$C_{2/c}$	Merkezi simetrik uzay grubu
C_{2h}^6	Monoklinik simetri grubu
σ_{\perp}	İletkenlik tensörünün katmanlara dik bileşeni
σ_{\parallel}	İletkenlik tensörünün katmanlara paralel bileşeni
eV	Elektron volt
E_g^d	Doğrudan geçiş
E_g^i	Dolaylı geçiş
T	Geçirgenlik
R	Yansımaya
λ	Dalgaboyu
n	Kırınım indisi
k	Soğurma indisi
e	Elektron yükü
c	Işık hızı
ϵ_L	Örgü dielektrik sabiti
N	Taşıyıcı yoğunluğu
m^*	Etkin kütle
ω_p	Plazma frekansı
ϵ_0	Boşluğun dielektrik sabiti
E_0	Etkin dispersiyon osilatörünün enerjisi
E_d	Dispersiyon enerjisi
$h\nu$	Foton enerjisi
f	Osilatör kuvveti
ϵ_{∞}	Yüksek frekansta dielektrik sabiti
λ_p	Plazma dalgaboyu
ω	Gelen ışığın frekansı

n_0	Kırılma indisi (ing. refractive index)
α	Soğurma katsayısı
k_0	Sönüm katsayısı (ing. extinction coefficient)
E_e	Kuyruk genişliği
ϵ_1	Gerçek dielektrik sabiti
ϵ_2	İmajiner dielektrik sabiti
E_{phonon}	Fonon enerjisi
ϵ_G	Yasak bant enerjisi
\mathbf{A}	Elektromanyetik alanın vektör potansiyeli
H	Hamiltonyen
H_e	Elektronlar için Hamiltonyen
H_l	Örgü titreşimleri için Hamiltonyen
H_{el}	Elektron-fonon etkileşimi için Hamiltonyen
H_{er}	Elektron-foton etkileşimi için Hamiltonyen
w_{cv}	Değerlik bandından iletkenlik bandına birim zamandaki geçiş olasılığı
\mathbf{p}	Momentum operatörü
G_m	Ters örgü vektörü
R_l	Geçiş vektörü
k	Dalga vektörü
n_q^α	α değerindeki ve q dalga vektöründeki fonon kuantum sayısı
δ	Dirac fonksiyonu
K_2	Dielektrik fonksiyonunun imajiner kısmı
K	Dielektrik fonksiyonu
J_{cv}^{2D}	İki boyutlu bant için ortak durum yoğunluğu
E	Elektrik alan
E_U	Urbach enerjisi
E_g^*	Optik sözde-enerji (ing. pseudogap)
σ	Soğurma kenarının yükseklik parametresi
θ_E	Einstein sıcaklığı
W_T^2	Sıcaklık bozulmasından kaynaklanan ortalama kare sapma
W_X^2	Yapısal bozulmadan kaynaklanan ortalama kare sapma
W_C^2	Kompozisyon bozulmasından kaynaklanan ortalama kare sapma

$(E_U)_T$	Sıcaklık bozulmasının katkısı
$(E_U)_X$	Yapısal bozulmanın katkısı
$(E_U)_C$	Kompozisyon bozulmasının katkısı
$(E_U)_{X,dyn}$	Dinamik yapısal bozukluk
$(E_U)_{X,stat}$	Statik yapısal bozukluk
$(E_U)_{TR}$	Sıcaklıkla-İlgili bozukluk
$(E_U)_{TV}$	Örgü termal titreşimlerinin katkısı
$1/E_{nc}$	Soğurma katsayısı spektral bağıllığının sıcaklıktan bağımsız logaritmik eğimi.
LMTO	Doğrusal Muffin-Tin orbital metodu
VELF	Hacim enerji kayıp fonksiyonu
SELF	Yüzey enerji kayıp fonksiyonu
EPI	Elektron-fonon etkileşimi
UV	Morötesi bölge
VIS	Görünür bölge
IR	Kızılötesi bölge
PMT	Fotoçoğaltıcı

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil No</u>		<u>Sayfa</u>
2.1:	Sırasıyla Dikey Bridgman Tekniği ve Yatay Bridgman Tekniği.	5
2.2:	Atomlar etrafındaki koordinasyonun gösterildiği TlGaSe ₂ 'nin birim hücre diyagramı.	7
2.3:	[010] yönünün altından katmanların görünümü.	7
2.4:	TlGaSe ₂ kristalinin iletkenlik tensörlerinin (σ_{\perp} ve σ_{\parallel}) sıcaklıkla değişimi.	8
2.5:	TlGaSe ₂ ve TlGaS ₂ kristallerinin Brillouin bölgesi.	9
2.6:	TlGaSe ₂ kristalinin bölgesel durum yoğunluğu	10
2.7:	Monoklinik yapıdaki TlGaSe ₂ 'nin bant yapısı. Kesikli çizgiler birbirine bağlı olduğu düşünülen noktaları birleştirmekte, taralı kısımlar ise yasak bant bölgesini göstermektedir.	11
2.8:	TlGaSe ₂ katmanlı tek kristal için 200-2500 nm spektral aralıktaki geçirgenlik(T) ve yansım(R) spektral dağılımı.	12
2.9:	TlGaSe ₂ katmanlı tek kristal için kırınım indisinin(n) dalgaboyuna(λ) bağıllığı.	13
2.10:	TlGaSe ₂ katmanlı tek kristali için n^2 'nin λ^2 'ye bağıllığı.	14
2.11:	TlGaSe ₂ katmanlı tek kristali için $(n^2-1)^{-1}$ 'in foton enerjisinin karesine bağıllığı.	15
2.12:	TlGaSe ₂ katmanlı tek kristali için soğurma indisinin(k) dalgaboyuna(λ) bağıllığı.	16
2.13:	TlGaSe ₂ katmanlı tek kristali için (a) $(\alpha h\nu)^2$ ve $(\alpha h\nu)^{1/2}$ 'nin foton enerjisine bağıllığı.	17
2.14:	TlGaSe ₂ katmanlı tek kristali için foton enerjisinin (hv) bir fonksiyonu olarak $\ln\alpha$ 'nın gösterimi.	18
2.15:	TlGaSe ₂ katmanlı tek kristali için foton enerjisinin (hv) bir fonksiyonu olarak dielektrik sabitlerinin varyasyonu.	19

2.16:	TlGaSe ₂ katmanlı tek kristali için foton enerjisinin ($h\nu$) bir fonksiyonu olarak VELF ve SELF'in varyasyonu.	20
3.1:	Dolaylı geçiş süreçleri.	25
3.2:	Dolaylı geçiş için soğurma katsayısı. Burada $\sqrt{\alpha}$ ve $\sqrt{\kappa}$ ifadeleri $\hbar\omega - \mathcal{E}_G$ ifadesinin bir fonksiyonu olarak çizilmiştir.	27
3.3:	Si için $\hbar\omega$ foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak soğurma katsayısının karekökü $\sqrt{\alpha}$ çizilmiştir.	28
3.4:	Ge için $\hbar\omega$ foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak soğurma katsayısının karekökü $\sqrt{\alpha}$ çizilmiştir.	28
3.5:	Eğik bir potansiyel bariyer ile statik elektrik alandaki elektron-hol çiftinin dalga fonksiyonu.	30
3.6:	Bir yarıiletkendeki Franz-Keldysh etkisinin illüstrasyonu. Yüksek bir elektrik alan varlığında elektron ve holün dalga fonksiyonları yasaklanmış bant boşluğuna nüfuz eder ve yasak bant enerjisi altındaki foton enerjisine $\hbar\omega < \mathcal{E}_G$ optik geçişe izin verilir.	33
3.7:	$K_2(\omega,0)/A$ elektrik alansız ve $K_2(\omega,E)/A$ elektrik alanlı, M_0 kritik noktası ($\mu_x\mu_y\mu_z > 0$) yakınındaki foton enerjisinin bir fonksiyonu.	33
3.8:	Elektron tünelleme, (a) enerjide değişim yok, (b) foton soğurulması ile.	35
3.9:	80K (1), 100K (2), 150K (3), 200K (4), 250K (5), 273K (6), 300K (7) sıcaklıklarında Cu ₇ GeSe ₅ I kristali için Urbach soğurma kenarının spektral bağıllığı. İlâveten yükseklik parametresinin σ sıcaklık bağıllığı (a), optik sözde-enerji (ing. pseudogap) E_g^* (1b) ve Urbach enerjisi E_U (2b) gösterilmiştir.	37
3.10:	80K (1), 150K (2), 200K (3), 250K (4), 300K (5) sıcaklıklarında Cu ₇ Ge(S _{0,5} Se _{0,5}) ₅ I karışık kristali için Urbach soğurma kenarının spektral bağıllığı. İlâveten yükseklik parametresinin σ sıcaklık bağıllığı (a), optik sözde-enerji E_g^* (1b) ve Urbach enerjisi E_U (2b) gösterilmektedir.	40
3.11:	Cu ₇ Ge(S _{1-x} Se _x) ₅ I karışık kristali için Urbach enerjisinin E_U kompozisyon bağıllığı. İlâveten, statik yapısal bozukluğun	40

	(1), sıcaklıkla-İlgili bozukluğun (2) ve kompozisyon bozukluğunun (3) göreceli katkılarının Urbach enerjisine E_U kompozisyon bağılılıkları gösterilmiştir.	
3.12:	80K (1), 150K (2), 200K (3), 250K (4), 300K (5), 340K (6), 380K (7) sıcaklıklarındaki As_2S_3 camsı yarıiletken için logaritmik soğurma katsayısının spektral bağılılıkları. İlaveten optik sözde-enerjinin E_g^* (a1), Urbach enerjisinin E_U (a2) ve dinamik yapısal bozukluğun katkısının $(E_U)_{X,dyn}$ (b) sıcaklık bağılılıkları gösterilmektedir.	43
4.1:	Lambanın 1200 çizgi/mm (a), 1800 çizgi/mm (b) ve 2400 çizgi/mm (c) farklı kırınım ızgaraları için spektrumu. En çok ışımının 400-500 nm aralığında olduğu görülmektedir.	44
4.2:	Lambanın 1800 çizgi/mm kırınım ızgarası için spektrumu.	44
4.3:	Soldan sağa doğru kreostatın üst kısmı, monokromatöre bağlı fotoçoğaltıcı, monokromatör ve lamba.	45
4.4:	Beyaz LED, soğutuculu beyaz LED ve kırmızı yarıiletken lazer.	45
4.5:	Thermo Oriel Zenon Lamba.	46
4.6:	Kreostatın pencereİli üst kısmı.	47
4.7:	Keithley 6517A Elektrometre.	48
4.8:	Monokromatöre bağlı fotoçoğaltıcı.	48
4.9:	Numune tutucunun şekli, ölçüleri ve numunenin konumu.	49
4.10:	Somun-cıvata takımından yapılmış tutucular.	49
5.1:	80K sıcaklıkta, +5V, -5V ve 0V dış gerilimlerinde $TlGaSe_2$ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.	52
5.2:	80K sıcaklıkta, +10V, -10V ve 0V dış gerilimlerinde $TlGaSe_2$ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.	53
5.3:	80K sıcaklıkta, +15V, -15V ve 0V dış gerilimlerinde $TlGaSe_2$ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.	53
5.4:	80K sıcaklıkta, +20V, -20V ve 0V dış gerilimlerinde $TlGaSe_2$ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.	54

5.5:	80K sıcaklıkta, 0V, $\pm 5V$, $\pm 10V$, $\pm 15V$ ve $\pm 20V$ dış gerilim değerlerinde $TlGaSe_2$ kristalinin logaritmik soğurma spektrumu.	54
5.6:	300K sıcaklıkta, +5V, -5V ve 0V dış gerilimlerinde $TlGaSe_2$ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.	56
5.7:	300K sıcaklıkta, +10V, -10V ve 0V dış gerilimlerinde $TlGaSe_2$ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.	56
5.8:	300K sıcaklıkta, +15V, -15V ve 0V dış gerilimlerinde $TlGaSe_2$ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.	57
5.9:	300K sıcaklıkta, +20V, -20V ve 0V dış gerilimlerinde $TlGaSe_2$ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.	57
5.10:	300K sıcaklıkta, 0V, $\pm 5V$, $\pm 10V$, $\pm 15V$ ve $\pm 20V$ dış gerilim değerlerinde $TlGaSe_2$ kristalinin logaritmik soğurma spektrumu.	58
5.11:	80K sıcaklığında, $TlGaSe_2$ kristalinin logaritmik soğurma spektrumlarının bir arada gösterimi.	58
5.12:	300K sıcaklıkta, $TlGaSe_2$ kristalinin logaritmik soğurma spektrumlarının bir arada gösterimi.	59
5.13:	Alansız ölçüm için 80K ve 300K sıcaklıklardaki logaritmik soğurma spektrumu.	60
5.14:	+5V için 80K ve 300K sıcaklıklardaki logaritmik soğurma spektrumu.	60
5.15:	-5V için 80K ve 300K sıcaklıklardaki logaritmik soğurma spektrumu.	61
5.16:	+10V için 80K ve 300K sıcaklıklardaki logaritmik soğurma spektrumu.	61
5.17:	-10V için 80K ve 300K sıcaklıklardaki logaritmik soğurma spektrumu.	62
5.18:	+15V için 80K ve 300K sıcaklıklardaki logaritmik soğurma spektrumu.	62
5.19:	-15V için 80K ve 300K sıcaklıklardaki logaritmik soğurma spektrumu.	63

5.20:	+20V için 80K ve 300K sıcaklıklardaki logaritmik soğurma spektrumu.	63
5.21:	-20V için 80K ve 300K sıcaklıklardaki logaritmik soğurma spektrumu.	64
5.22:	80K için foton enerjilerinin alana bağılılığı.	64
5.23:	300K için foton enerjilerinin alana bağılılığı.	65
5.24:	0V, $\pm 5V$, $\pm 10V$, $\pm 15V$ ve $\pm 20V$ dış gerilim değerleri için Urbach Enerjisinin E_U sıcaklığa bağılılığı.	66
5.25:	Alansız ölçüm için Urbach Enerjisinin E_U sıcaklığa bağılılığı.	67
5.26:	+5V, 0V, -5V için Urbach Enerjisinin E_U sıcaklığa bağılılığı.	67
5.27:	+10V, 0V, -10V için Urbach Enerjisinin E_U sıcaklığa bağılılığı.	68
5.28:	+15V, 0V, -15V için Urbach Enerjisinin E_U sıcaklığa bağılılığı.	68
5.29:	+20V, 0V, -20V için Urbach Enerjisinin E_U sıcaklığa bağılılığı.	69

TABLÖLAR DİZİNİ

<u>Tablo No</u>		<u>Sayfa</u>
1.1:	Kashida ve arkadaşları tarafından yapılan TlGaSe ₂ ve TlGaS ₂ kristallerinin bant yapısı hesaplamalarının sonuçları.	11
1.2:	TlGaSe ₂ katmanlı kristalinin dispersiyon parametreleri.	15
1.3:	TlGaSe ₂ katmanlı tek kristalinin enerji aralığının değerleri.	19

1. GİRİŞ

TlGaSe₂ katmanlı kristali, açık adıyla Talyum Galyum Selenid, yarıiletken bir kristal olup 60'lı yılların başından günümüze literatürü incelediğimizde pek çok çeşitli deneysel gruba konu olmuştur.

Optik, elektriksel, yapısal, ısıl iletim vs. özelliklerini incelemek adına yapılan deneysel çalışmalar sonucunda TlGaSe₂ kristali için çeşitli model ve açıklamalarda bulunulmuştur. Ancak bu model ve açıklamalar birbirleriyle uyum içinde değildir.

Elinizdeki çalışma bu uyuşmazlığın sebebini açıklayabilmek adına birtakım girişimlerde bulunmaktadır. Literatürü incelediğimizde TlGaSe₂'nin kristal yapıda olduğu açıkça görülmesine rağmen bazı şartlar altında amorf yarıiletken davranışları sergilemektedir. Yapısal bozukluğa sahip yarıiletkenler amorf yarıiletkenler olarak adlandırılabilir.

TlGaSe₂ kristalinin amorf yapılaraya özgü davranışları optik geçirgenlik ölçümleri sonucunda elde edilen bulgular ile tespit edilmiştir. TlGaSe₂ kristalinin optik soğurma katsayısının yasak bant kenarındaki davranışı Urbach kuyruğu şeklindedir. Yapısal bozukluklar, örgü titreşimlerinden meydana gelen bozukluklar vs. değerlik ve iletkenlik bandında sapmalara neden olarak Urbach kuyruğunu oluşturmaktadır. TlGaSe₂ kristalinin Urbach kuyruğu ile ilgili çalışmalar literatürde mevcuttur [1].

Bu tez çalışmasında TlGaSe₂ kristalindeki gömülü elektrik alan incelenmektedir. Daha doğrusu kristale bir gerilim uygulanıp daha sonra bu gerilim kaldırılmış ve kristal içerisinde gömülü bir elektrik alan oluşması sağlanmıştır. Gömülü elektrik alanın TlGaSe₂ kristalinin optik soğurma kenarı üzerindeki etkisi incelenmektedir. Bunun için öncelikle optik soğurma katsayısının gerilime bağlı değişimi incelenmiştir.

Kristalin optik özelliklerini inceleyebilmek için bant yapısı hakkında bilgi sahibi olmamız gerekmektedir. Elinizdeki bu çalışmada TlGaSe₂ kristalinin fiziksel ve optik özellikleri de ele alınmıştır. Bilindiği üzere düzenli yapıya sahip yarıiletkenlerde yasak bant enerjisi altındaki enerjilerde optik geçişler söz konusu değildir. Ancak TlGaSe₂ kristali için yapılan deneyler sonucunda yasak bant enerjisi altındaki enerjilerde optik geçişler olduğu tespit edilmiştir. Bunun sebebi ise kristaldeki gömülü elektrik alanın soğurma kenarındaki etkisidir. Bir elektrik alan varlığında yarıiletkende optik soğurmadaki değişiklik Franz-Keldysh etkisi olarak bilinmektedir. Franz-

Keldysh etkisi hakkında detaylı inceleme tez içerisinde gelecek bölümlerde mevcuttur. Elektrik alan altında yarıiletkenin elektron ve hol dalga fonksiyonları Airy fonksiyonlarına dönüşür. Airy fonksiyonları kısaca yasak bant aralığına uzanan bir kuyruğu tanımlamaktadır. Böylece yasak bant enerjisi altındaki enerjilerde optik geçişler söz konusu olmaktadır.

Yapılan literatür incelemesinde TlGaSe₂ kristalindeki gömülü elektrik alanın optik soğurma kenarındaki etkisinin incelenmesine dair bir çalışmaya rastlanmamıştır. Bu yönüyle, sunulan tez çalışması literatürdeki büyük bir boşluğun doldurulmasına katkı sağlayacaktır.



2. TlGaSe₂ KRİSTALİ HAKKINDA

2.1 TlGaSe₂ Kristalinin Literatürdeki Yeri

TlMX₂ formülüyle tanımlanan kristaller 1963 yılında patenti alınarak bilim camiasına giriş yapmıştır [2]. Burada Tl “talyum”, M “indiyum, galyum” ve X “sülfür, selenyum ve tellür” elementlerini ifade etmektedir. TlMX₂ formülüyle verilen kristaller TlInS₂, TlInSe₂, TlInTe₂, TlGaS₂, TlGaSe₂, TlGaTe₂ kristalleridir. Görüldüğü gibi TlGaSe₂ kristali de bu patentte yer alan kristallerden biridir.

Yukarıda bahsi geçen kristallerin yarıiletken ve iyi birer fotoiletken oldukları bu patentte belirtilmiştir. Ayrıca TlMX₂ formülüyle verilen kristallerin üretim metodundan da bahsedilmiştir. Bu metot eriyikten katılaştırma olarak bilinen Bridgman Tekniğidir ve hâlâ kullanılmaktadır.

Patentte geçen her bir kristal için bugüne kadar pek çok çalışma yapılmıştır. Panish 2008 makalesine göre TlGaSe₂ kristali katmanlı bir yapıda ve monoklinik simetriye sahip bir kristaldir. Dahil olduğu uzay grubu C2/c’ dir. Örgü parametreleri a=10,772 Å; b=10,771 Å; c=15,636 Å; β=100,6° ve Z=16 şeklindedir [3]. Bu makaleye kıyasla çok daha eski bir çalışma olan Hahn 1967 makalesine göre ise TlGaSe₂ kristali tetragonal yapıdadır ve turuncu-kırmızı renktedir. Kristalin yoğunluğu 6,47 gr/cm³, örgü parametreleri a ve b 7,62 Å, c ise 30,5 Å olarak verilmiştir [4].

2.1.1. TlGaSe₂ Kristalinin Üretim Metodu

TlGaSe₂ kristalinin üretim metodu önceki bölümde kısaca bahsedildiği gibi Bridgman Metodu ya da Bridgman-Stockbarger Tekniği olarak bilinmektedir. Bu teknik adını Harvard Üniversitesinden Percy Williams Bridgman (1882-1961) ve MIT’den Donald C. Stockbarger (1895-1952) isimli fizikçilerden almıştır [6]. Bridgman tekniği kristal büyütme için kullanılan en eski tekniklerden biridir. Bridgman tekniğinde eriyikten kristal büyütme kullanılır. Bridgman tekniğinde, erimiş malzemeyi içeren bir tüp bir fırında sıcaklık gradyanı (derece) eksenini boyunca çevrilirken, Bridgman tekniği üzerinde sadece bir modifikasyon yapan Stockbarger

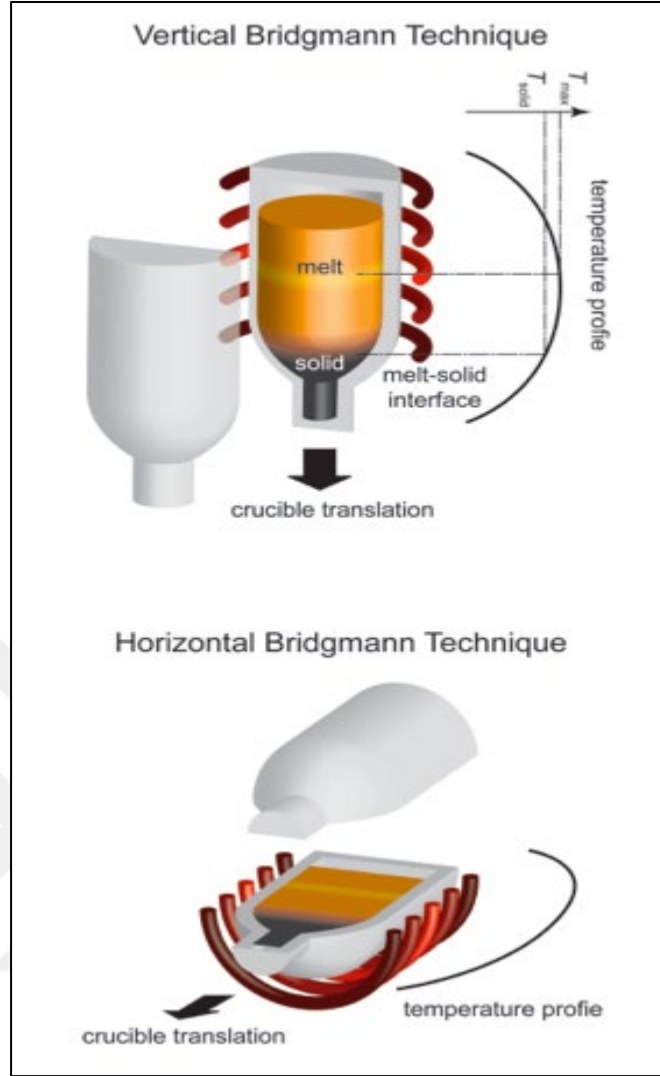
tekniginde yüksek sıcaklık bölgesi, adyabatik bir kayıp bölgesi ve düşük sıcaklıklı bir bölge vardır. Bu iki yöntem terminolojide özel olarak farklı değildir [6, 7].

Bridgman tekniğinin prensibi, bir eriyiği sıcak bölgeden fırının soğuk bölgesine çevirerek yönsel katılaştırma [6, 7]. İlk başta tüpteki polikristal malzemenin sıcak bölgede tamamen eritilmesi ve tüp altındaki bir çekirdek ile temas ettirilmesi gerekir. Bu çekirdek bir tek kristal parçasıdır ve belirli bir kristalografik oryantasyon boyunca bir tek kristal büyümesi sağlar. Eritmeyle temas ettikten sonra çekirdeğin bir kısmı tekrar eritilecektir. Bu, kristal büyümesi için taze bir arayüz sağlar.

Tüp daha sonra yavaşça fırının soğutucu bölümüne çevrilir. Tüpün dibindeki sıcaklık katılma sıcaklığının altına düşer ve kristal büyümesi, eriyik çekirdek arayüzündeki çekirdek tarafından başlatılır. Bütün tüp soğuk bölgeye çevrildikten sonra, bütün eriyik katı tek kristalli bir külçe haline dönüşür.

Bridgman tekniği dikey (dikey Bridgman tekniği) veya yatay (yatay Bridgman tekniği) sistem yapılandırmasında uygulanabilir. Şekil 2.1. de gösterilen bu iki konfigürasyon kavramı benzerdir [8]. Dikey (vertical) Bridgman tekniği, yatay (horizontal) Bridgman tekniğiyle yetiştirilen D şeklindeki külçelerin aksine, kristallerin dairesel biçimde büyümesini sağlar. Bununla birlikte, yatay olarak büyütülen kristaller yüksek kristal kalitesi (örneğin düşük yerdeğiştirme yoğunluğu) sergiler, çünkü eriyik üzerindeki serbest yüzey nedeniyle kristal daha az stres yaşar ve tüm büyüme işlemi boyunca genişlemek için serbesttir.

Tüpün hareket etmesi yerine, fırın sabit tutulurken, fırın çekirdek ucundan çevrilebilir. Bu şekilde de yönlü bir katılma sağlanabilir. Diğer bir değişiklikte ne tüp ne de fırının çevrilmesini gerektirmeyen gradyan dondurma tekniğidir. Bunun yerine her bir bölgenin gücünün kontrolörler tarafından programlandığı ve kontrol edildiği çok bölgeli bir fırın kullanılarak sıcaklık derecesinin bir çevirisi gerçekleştirilir. Bu sistem aynı sıcaklık derecesini sıvı-katı (eriyik-kristal) arayüzünde korur, bu da büyüme sırasında zamanla konumunu değiştirir. Bridgman tekniğine benzer şekilde, gradyan dondurma tekniği dikey ve yatay yapılandırmalarda da gerçekleştirilebilir [6, 7].



Şekil 2.1: Sırasıyla Dikey Bridgman Tekniği ve Yatay Bridgman Tekniği.

2.2. TlGaSe₂ Kristalinin Fiziksel Yapısı

TlGaSe₂ kristali katmanlı yapıya sahip bir yarıiletkenidir. Bu da görünür, kızılötesi ve x ışını bölgelerinde yüksek foto-duyarlılık, foto-ışıldama ve elektro-ışıldama (luminescence) gibi önemli fiziksel özelliklere yol açar. Bu özellikler onları ışığa duyarlı cihazlar olarak yararlı kılar [9]. Özellikle TlGaSe₂ Raman [10], elektriksel iletkenlik [11] ve Hall etkisi [12] gibi farklı fiziksel özellik çalışmalarının konusu olmuştur.

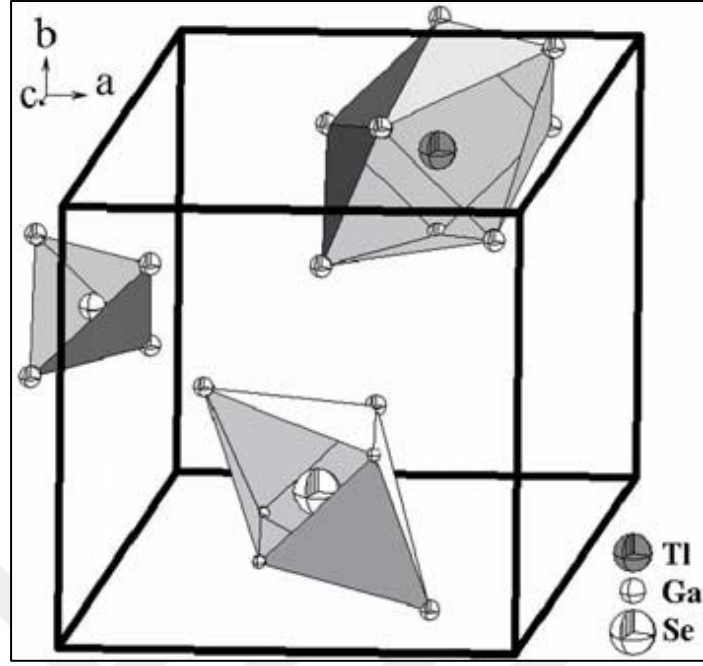
Raman spektroskopisi sonuçlarına dayanan teorik bir çalışmada Henkel ve arkadaşları TlGaSe₂ için monoklinik merkezi-simetrik uzay grubu C2/c' de, titreşim modlarını tatmin edici bir şekilde açıklayan yapısal bir model önermiştir [13]. Henkel

ve arkadaşlarının önerdiği teorik modeli deneysel olarak doğrulamak amacıyla, Delgado ve arkadaşları TlGaSe₂ için tek kristalli bir difraktometri çalışması sunmuştur [3]. Bu çalışmanın sonuçları, deneysel olarak, merkezi simetrik uzay grubu C2/c' de Henkel ve arkadaşlarının önerdiği yapıda TlGaSe₂' nin kristalize olduğunu doğrulamıştır [3].

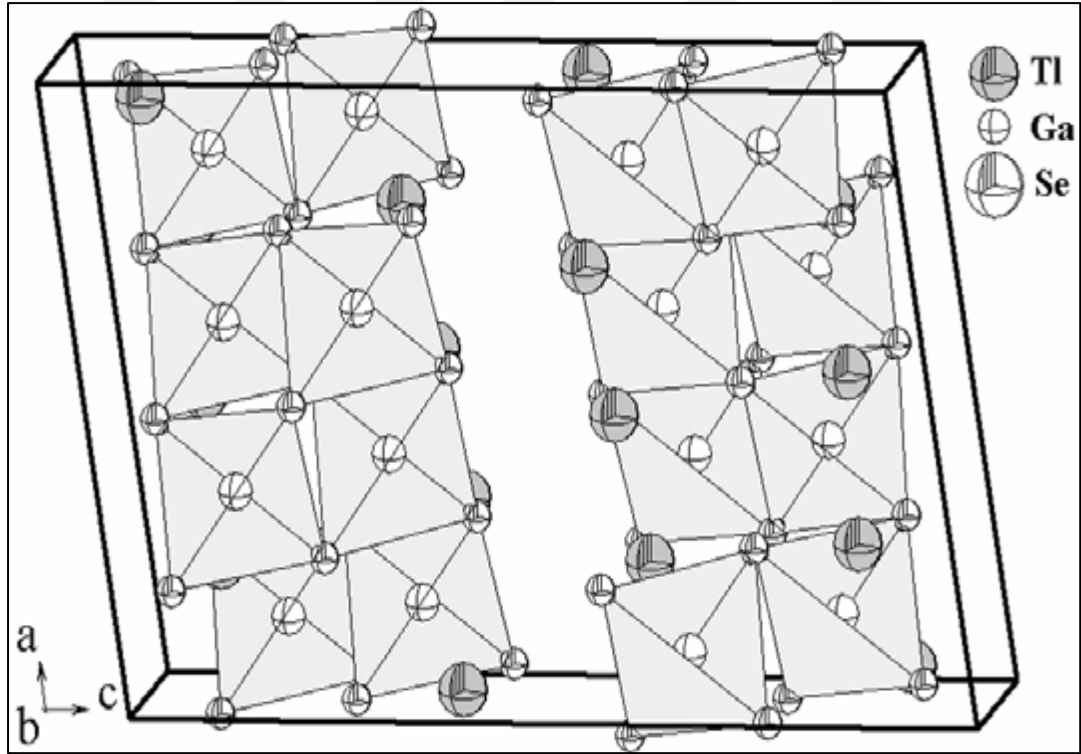
Yapıda her anyon (Se), dört talyum atomu ve bir oktahedron oluşturan iki galyum atomu tarafından koordine edilir [3]. Şekil 2.2 de gösterildiği gibi Tl⁺ çaprazlanmış bir trigonal prizmatik koordinasyon ile sonuçlanan 8 selenyum ile çevriliyken, Ga³⁺ katyonları düzenli bir tetrahedron oluşturan 4 selenyum ile çevrilidir [3].

Şekil 2.3 de katmanların yapısal motifi, dört tane düzgün tetrahedra GaSe₄'ün birleşmesiyle oluşan, köşelerden birbirine bağlı Ga₄Se₁₀ düzgün tetrahedronu içermektedir [3]. Ortalama Ga-Se mesafesi 2,39 Å' dur. Bu değer Ga(1,26 Å) ve Se(1,17 Å)' un kovalent yarıçaplarının toplamına yakın bir değerdir. Ortalama Se-Ga-Se açısı 109,5°' dir. Bu yapı kovalent sp³ Ga-Se bağlarının oluşumunu desteklemektedir. İki bitişik katman birbirine göre 90° döndürülür, katmanlar arasında trigonal prizmatik boşluklarda bulunan Tl⁺ iyonları ile birlikte ve Ga₄Se₁₀ gruplarının kenarlarına paralel olan [110] ve [1 $\bar{1}$ 0] doğrultularında düz çizgiler üzerinde tutulur. Her Tl atomu altı tane Se atomu ile çevrilidir, trigonal prizmatik TlSe₆ polyhedra'yı oluşturur. Ortalama Tl-Se bağ uzunluğu 3,45 Å'dur ve Tl⁺ (1,50 Å) ve Se²⁻ (1,98 Å) iyonlarının iyonik yarıçapları toplamından biraz küçüktür. Zincirdeki ortalama Tl-Tl aralığı 3,81 Å'dur [14].

Sonuç olarak TlGaSe₂ kristali katmanlı bir yapıda ve monoklinik simetriye sahip bir kristaldir [14]. Dahil olduğu uzay grubu C2/c' dir. Örgü parametreleri a=10,772 Å; b=10,771 Å; c=15,636 Å; β=100,6° ve Z=16 şeklindedir. Birim hücrede [001] doğrultusunda istiflenmiş iki anyon tabakası olarak kristalleşir. [001] doğrultusu kristalin *c doğrultusudur [14].



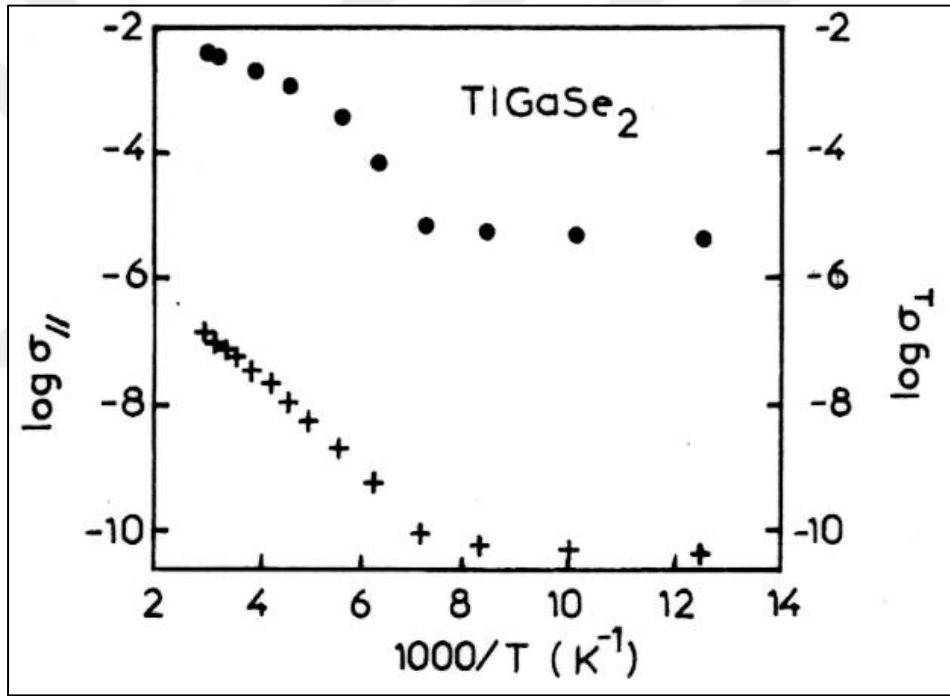
Şekil 2.2: Atomlar etrafındaki koordinasyonun gösterildiği TlGaSe₂' nin birim hücre diyagramı.



Şekil 2.3: [010] yönünün altından katmanların görünümü.

2.3. TlGaSe₂ Kristalinin Elektriksel Özellikleri

TlGaSe₂ kristali yarıiletken özelliğe sahip bir kristaldir. Yapısal özelliklerinden bahsederken katmanlı bir kristal olduğundan söz etmiştik. Katmanlı yapısından dolayı anizotropik bir davranış sergiler ve iletkenliği p-tipidir. TlGaSe₂ kristalinde iletkenlik tensörünün katmanlara dik bileşeninin katmanlara paralel bileşenine oranı yaklaşık 90-250 K sıcaklık aralığında, $\sigma_{\perp}/\sigma_{\parallel} \sim 10^6$ - 10^8 değerlerindedir [15]. Bu değer TlGaSe₂ kristalinin yüksek anizotropiye sahip olduğunu göstermektedir. Şekil 2.4 σ_{\perp} ve σ_{\parallel} değerlerinin sıcaklıkla değişimini göstermektedir [14]. Yüksek anizotropiye sahip malzemeler düşük boyutlu sistemler olarak bilinmektedir.



Şekil 2.4: TlGaSe₂ kristalinin iletkenlik tensörlerinin (σ_{\perp} ve σ_{\parallel}) sıcaklıkla değişimi.

Yukarıda bahsi geçen $\sigma_{\perp}/\sigma_{\parallel}$ oranı farklı yazarlar için farklı sonuçlar içermektedir [15-17]. Aynı bileşenlerin farklı yazarlar tarafından elde edilen sonuçlardaki bu uyumsuzluk muhtemelen kristal oluşumu esnasında kontrol edilemeyen farklı türdeki yapısal bozukluklar (hata, kusur vb.) ve safsızlıkların varlığı nedeniyle meydana gelmektedir. Ayrıca, kristalografik eksenler boyunca yapılan ölçümler için kristallerin uygun şekilde yönlendirilmesi ve gerçek kalkojen atomlarının miktarının bilinmesi, ölçüm sonuçlarını güçlü bir şekilde etkileyen diğer faktörler arasındadır.

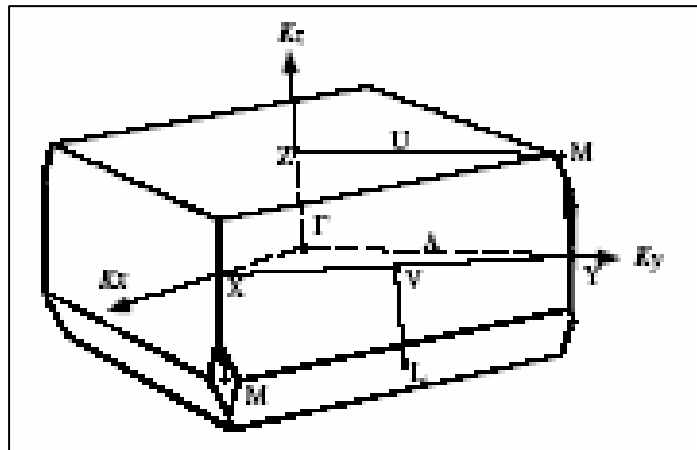
2.4. TlGaSe₂ Kristalinin Optik Özellikleri

TlGaSe₂ kristalinin optik özelliklerinden bahsedebilmemiz için öncelikle bant yapısını incelememiz lazım.

2.4.1. TlGaSe₂ Kristalinin Bant Yapısı

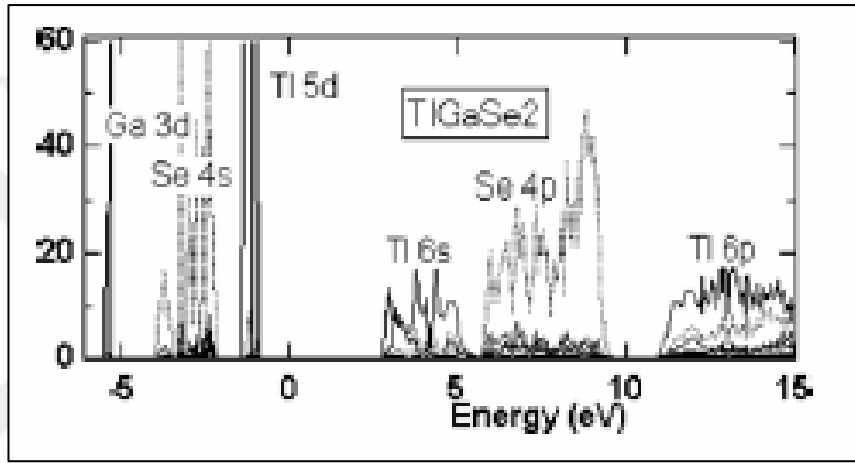
TlGaSe₂'nin bant yapısını hesaplamak için ilk girişim, ampirik psödopotansiyel metot kullanılarak, Abdullaeva ve arkadaşları tarafından gerçekleştirilmiştir [18]. Yazarlar, TlGaSe₂'nin monoklinik modifikasyonunu deforme olmuş bir tetragonal yapı olarak değerlendirmişlerdir. İletkenlik bandının minimum değerinin Brillouin bölgesinin $T(0, \pi/\alpha, 0)$ noktasına yerleştirildiği, değerlik bandının maksimum değerinin yaklaşık olarak eşit enerjilerdeki $N(\pi/2\alpha, \pi/2\alpha, 0)$, $T(0, \pi/\alpha, 0)$ ve $A(0, 0, \pi/2c)$ olmak üzere üç noktada bulunduğu tespit edilmiştir.

Abdullaeva ve arkadaşları tarafından yapılan bir sonraki psödopotansiyel hesaplama değerlik bandının tepesinin Γ noktasına yerleştirildiğini göstermektedir [19]. İletkenlik bandının minimum değeri ise Γ -Y hattına yerleştirilmiştir. 2006 yılında Kashida ve arkadaşları tarafından üçlü talyum kalkojenler TlGaSe₂ ve TlGaS₂'nin elektronik yapısı ile ilgili çalışmada spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan LMTO (Linear Muffin-Tin Orbital Method) metodu kullanılmıştır [20]. Bu bant yapısı hesaplarının sonuçları Şekil 2.5, Şekil 2.6 ve Tablo 1.1 de gösterilmiştir [14].



Şekil 2.5: TlGaSe₂ ve TlGaS₂ kristallerinin Brillouin bölgesi.

Hesaplanan bant dispersiyonu TlGaSe_2 ve TlGaS_2 kristallerinin dolaylı geiş enerjilerine sahip olduklarını göstermektedir. TlGaSe_2 kristali için deęerlik bandının tepesi, dalga fonksiyonu oęunlukla Tl 6s – Se 4p seviyelerinden oluřan Γ noktasında yer almaktadır. İletkenlik bandının minimum deęeri ise $Z(0, 0, -0.5) - L(0.5, 0.5, -0.5)$ hattı boyunca yer almaktadır. Fermi seviyesine yakın seviyelerin hesaplanan orbital ayrışımı, Γ noktasında bulunan iletkenlik bandının minimum deęerindeki dalga fonksiyonu Tl 6p, Ga 4s ve Se 4s seviyelerinden oluřur. İletkenlik bandının minimum deęeri Tl 6p – Se 4p baęlı olmayan seviyelere sahiptir. Bu seviyeler nispeten Γ noktasındaki seviyeye karřılık gelen Tl 6p seviyesinden daha gldr.



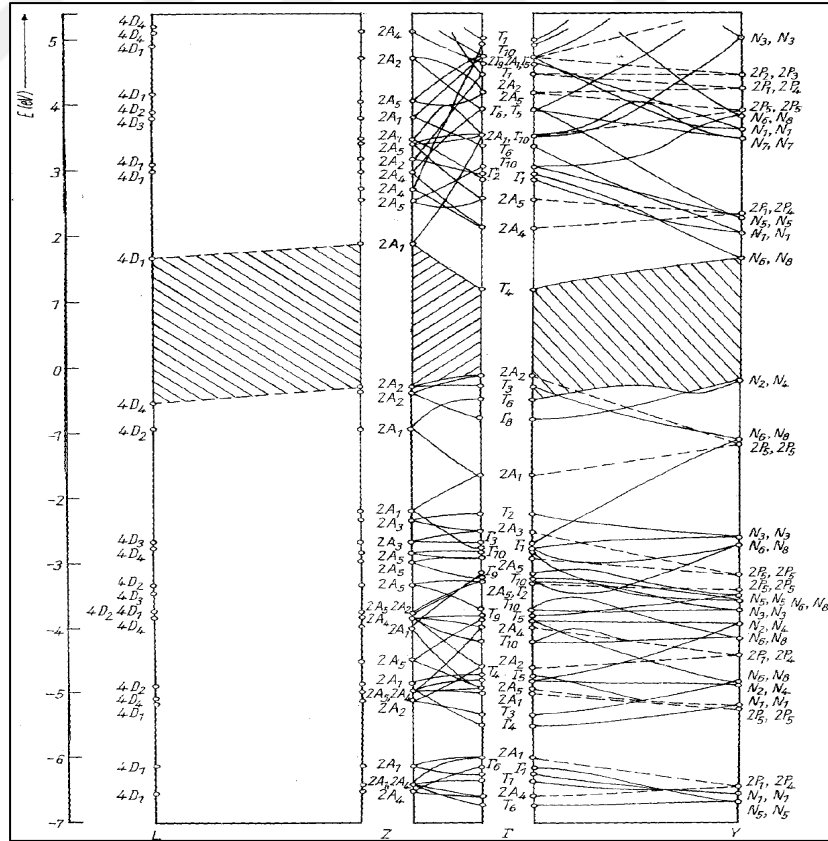
řekil 2.6: TlGaSe_2 kristalinin blgesel durum yoęunluęu.

Katman iindeki iletkenlięi katmana gre normalden birkaç kat daha byk olan TlGaSe_2 'nin olduka yksek anizotropik bir yarıiletken olduęunu belirtmiřtik. řekil 2.7, TlGaSe_2 'nin Γ noktasındaki doęrudan geiři 1.25 eV iken, Γ 'dan Z-L hattına dolaylı geiři 1.24 eV'luk enerjiyle gerekleřtięi iin dolaylı bir yarıiletken olduęunu gstermektedir [18]. Bu sonu daha nce bahsettięimiz ampirik psdopotansiyel bant hesabı [16],[18] ve [19]'te TlGaSe_2 'nin dolaylı bir yarıiletken olduęunu belirleyen optik soęurma alıřmaları ile niteliksel olarak uyumludur.

Hanias ve arkadařları tarafından yapılan deneysel lmler sonucu yasak bant enerjisi $E_g^d=2.11$ eV, $E_g^i=1.83$ eV olarak bulunmuřtur. Burada E_g^d doęrudan geiř, E_g^i dolaylı geiři ifade etmektedir.

Tablo 1.1: Kashida ve arkadaşları tarafından yapılan TlGaSe_2 ve TlGaS_2 kristallerinin bant yapısı hesaplamalarının sonuçları.

Enerji, eV.	Bantlar	Seviyeler
11 - 15	İletkenlik batları	Tl 6p seviyeleri, TlGaSe_2 için Se 4p Ga 4s seviyeleri, TlGaS_2 için S 3p Ga 4s seviyeleri.
	Γ noktasındaki iletkenlik bandının en alt noktası	TlGaSe_2 için Tl 6p, Ga 4s, Se 4s, TlGaS_2 için Tl 6p, Ga 4s, S 3s.
	Γ noktasındaki değerlik bandının en üst noktası	Tl 6s seviyeleri, TlGaSe_2 için Se 4p, TlGaS_2 için S 3p.
5 - 10	Değerlik bantları	Tl 6p ve Ga 4p seviyeleri ile bağlı olmayan seviyeler; TlGaSe_2 için Se 4p, TlGaS_2 için S 3p.
3 - 5	Değerlik bantları	Tl 6s ve Ga 4s seviyeleri ile bağlı olan; TlGaSe_2 için Se 4p, TlGaS_2 için 3s.
Around - 1.5	Değerlik bantları	Ga 3d ve Tl 5d seviyeleri.
-4 - 2.5	Değerlik bantları	Se 4s, S 3s.
Around - 5	Değerlik bantları	Ga 3d ve Tl 5d seviyeleri.

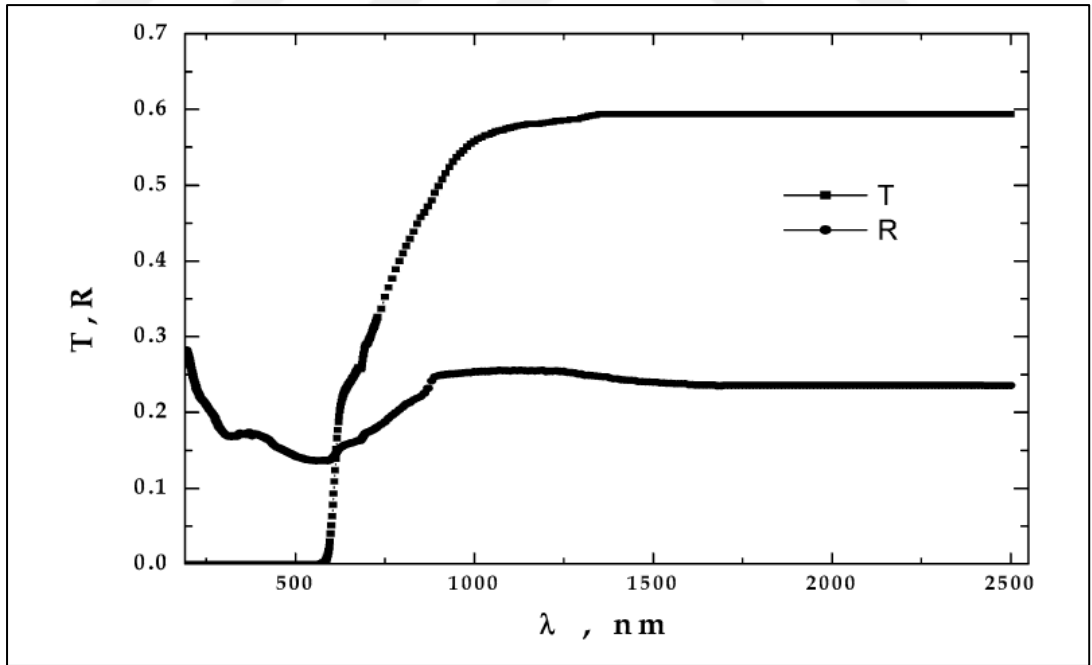


Şekil 2.7: Monoklinik yapıdaki TlGaSe_2 'nin bant yapısı. Kesikli çizgiler birbirine bağlı olduğu düşünülen noktaları birleştirmekte, taralı kısımlar ise yasak bant bölgesini göstermektedir.

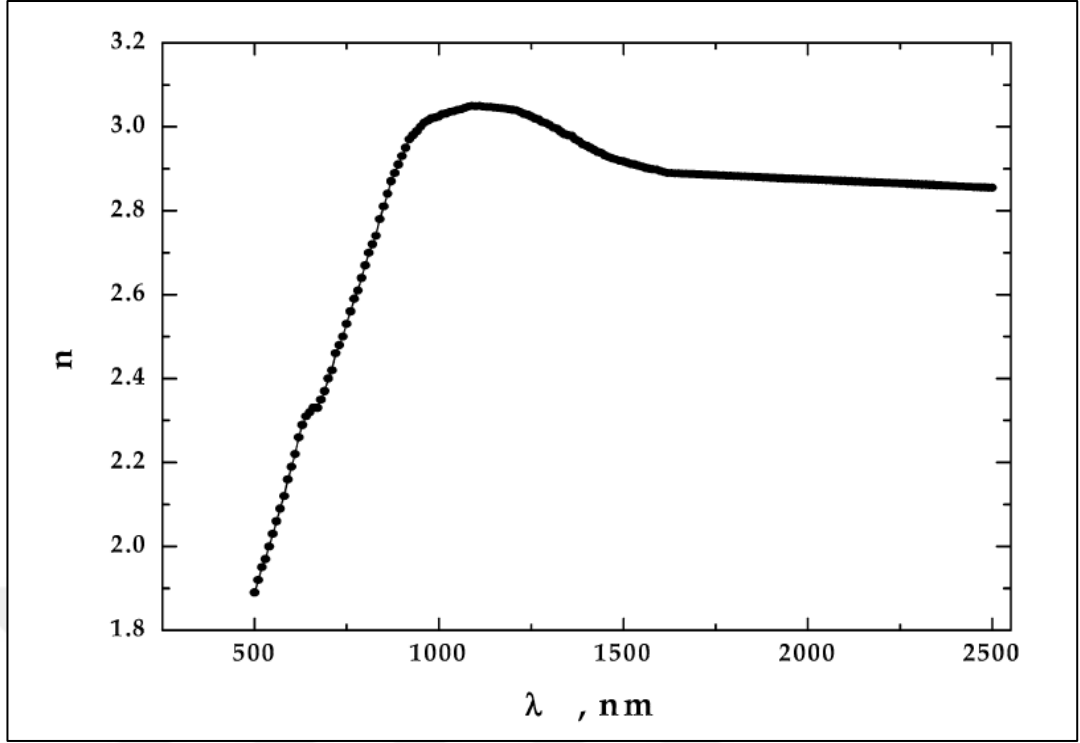
2.4.2. TlGaSe₂ Kristalinin Optik Özelliklerinin İncelemesi

TlGaSe₂ katmanlı tek kristali için geçirgenlik T(transmission) ve yansıma R(reflection) üzerindeki spektral bağıllık (200-2500 nm aralığındaki dalgaboyunda) şekil 2.8 de verilmiştir [21]. [21] makalesine göre TlGaSe₂ kristalinin homojen ve optik düz özelliğinden ötürü ışığın dağılmadığı sonucuna varılmıştır. Aynı makalede, daha büyük bir dalgaboyu ($\lambda > 800 \text{ nm}$) için TlGaSe₂ katmanlı tek kristalin şeffaf hale geldiği ve hiçbir ışığın saçılmadığı ya da soğurulmadığı yani soğurucu olmayan bir bölge olduğundan bahsedilmektedir ($T+R=1$). Kısa dalgaboyunda ise ($\lambda < 800 \text{ nm}$) $R+T < 1$ eşitsizliği soğurmanın varlığını yani soğurucu bir bölgeyi ifade eder. [21]' de kırınım indisinin (n) ve soğurma indisinin (k) hesaplanan değerlerinin doğruluğu ($n = \pm 0,3$ ve $k = \pm 0,2$) temel olarak dalgaboyunun ölçüm hatası tarafından sınırlandırılmıştır.

Tek osilatör modeli normal dağılım bölgesinde ($\lambda > 800 \text{ nm}$) uygulanır ve veriler osilatör parametrelerini elde etmek için kullanılır [21]. Şekil 2.9 kırınım indisinin (n) dalgaboyuna (λ) bağıllığını göstermektedir [21].



Şekil 2.8: TlGaSe₂ katmanlı tek kristal için 200-2500 nm spektral aralıktaki geçirgenlik (T) ve yansıma (R) spektral dağılımı.



Şekil 2.9: TlGaSe₂ katmanlı tek kristal için kırınım indisinin (n) dalgaboyuna (λ) bağılılığı.

Dielektrik sabiti kısmen, serbest elektronlardan ve aşağıdaki ilişkiyle temsil edildiği gibi bağlı elektronlardan kaynaklanmaktadır [22]:

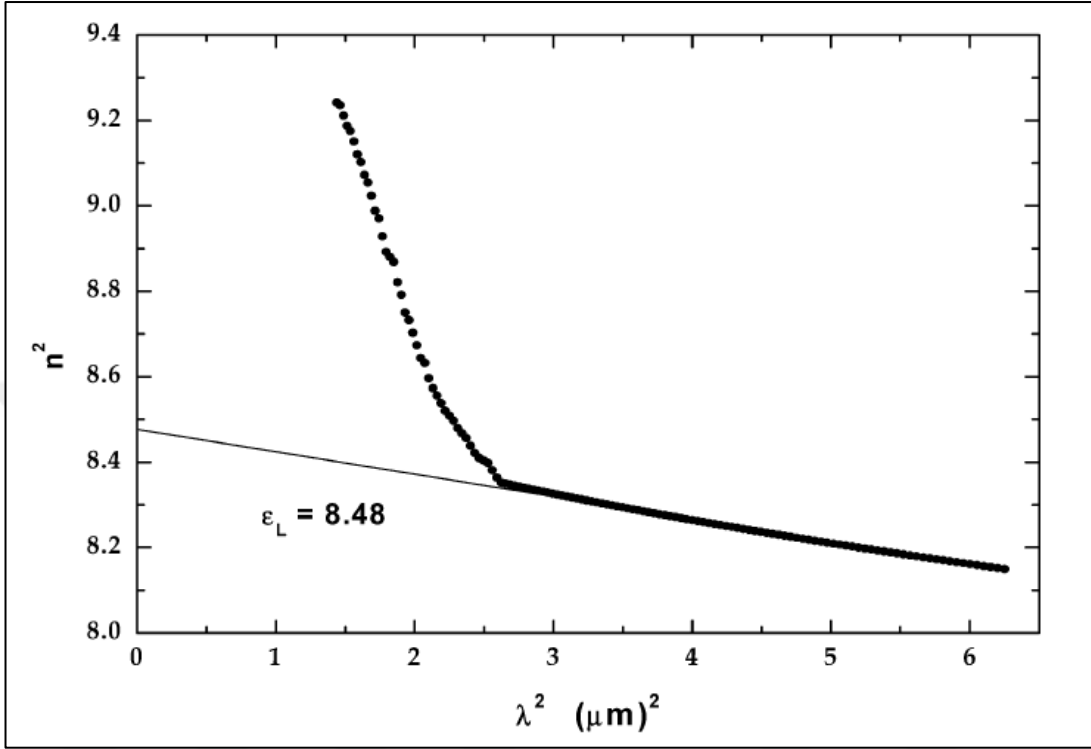
$$n^2 = \epsilon_L - [(e^2/\pi c^2)(N/m^*)]\lambda^2 \quad (2.1)$$

Burada e elektron yükü, c ışık hızı, λ ışık dalgaboyu, ϵ_L örgü dielektrik sabiti, N taşıyıcı yoğunluğu ve m^* etkin kütedir. Şekil 2.10 TlGaSe₂ katmanlı tek kristali için λ^2 'nin bir fonksiyonu olarak n^2 'nin bağılılığının daha uzun dalgaboylarında doğrusal olduğunu temsil eder [21]. Kısa dalgaboyları için doğrusal kısmın uzantısına baktığımızda, $\lambda^2=0$ ' da ordinatı kestiği nokta $\epsilon_L=8,48$ değerini verir. Grafiğin lineer kısmından $(N/m^*)=1,07 \times 10^{47} \text{ gm}^{-1}\text{cm}^{-3}$ değeri elde edilir.

Elektron sönüm parametresi $\gamma \ll \omega$ iken şeffaflık (saydamlık) aralığında olduğu bilinmektedir:

$$n^2 = \epsilon_\infty - \omega_p^2/\omega^2 \quad (2.2)$$

Burada ω_p plazma frekansdır ve $\omega_p^2 = e^2 N / \epsilon_0 m^*$, ϵ_0 boşluğun dielektrik sabiti ve ω gelen ışığın frekansdır [23, 24]. TlGaSe₂ katmanlı kristalinin $n^2(\lambda^2)$ ' ye bağlı lineer kısmının yaklaşımından $\lambda=0$ ve $n=0$ ' da ϵ_∞ ve ω_p değerleri bulunmuştur.



Şekil 2.10: TlGaSe₂ katmanlı tek kristali için n^2 'nin λ^2 'ye bağlılığı.

TlGaSe₂ katmanlı tek kristali için kırınım indisine bağlı enerji, Wemple ve DiDomenico [25] tarafından geliştirilen normal dağılım (dispersiyon) bölgesindeki tek osilatör modeli kullanılarak fit edilmiştir [21]:

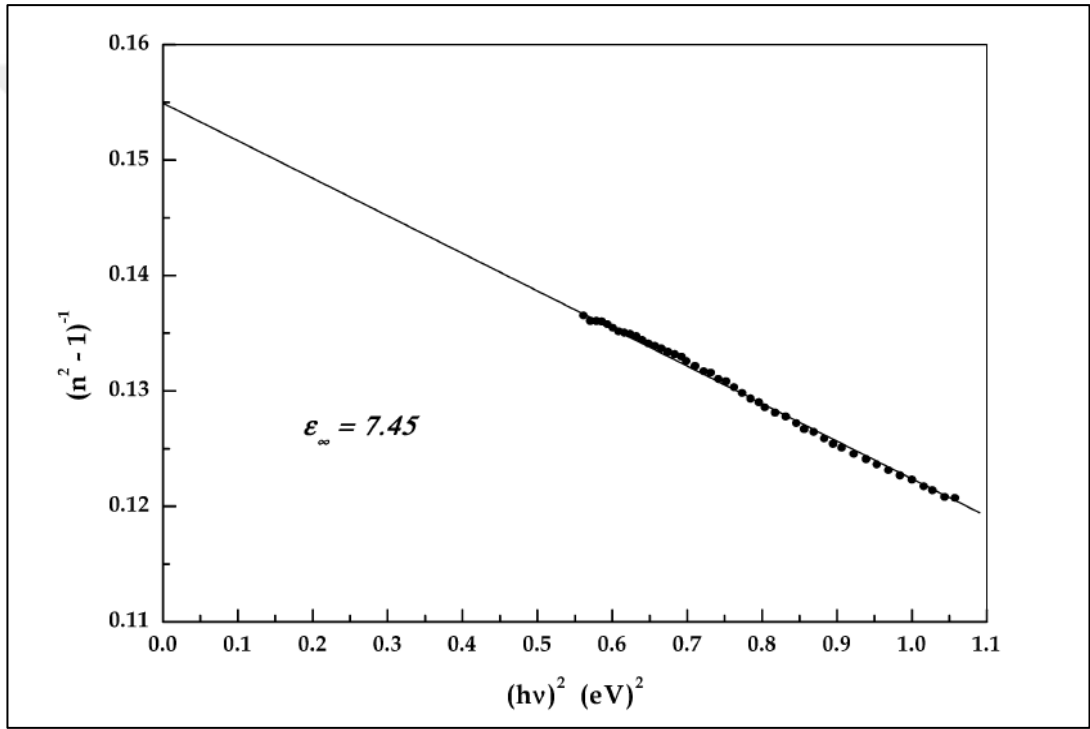
$$1/(n^2 - 1) = (E_0/E_d) - (1/E_0 E_d)(h\nu)^2 \quad (2.3)$$

E_0 etkin dispersiyon osilatörünün enerjisi ve E_d dispersiyon enerjisi ya da osilatör kuvvetidir. TlGaSe₂ katmanlı tek kristal için, şekil 2.11 de $(h\nu)^2$ 'nin bir fonksiyonu olarak $(n^2-1)^{-1}$ çizilmiştir [21]. Uzun dalgaboyları boyunca lineer kısma baktığımızda $(h\nu)^2=0$ ' da ordinatı kestiği nokta daha yüksek dalgaboylarında ϵ_∞ dielektrik sabitinin değerini verir, elde edilen değer 7,45' tir. Ordinatı kesen nokta ve eğrinin eğiminden elde edilen E_0 ve E_d değerleri sırasıyla 2,15 ve 13,82 eV' tur [21].

Aşağıda gösterilen, [26]'te tanımlanmış, osilatör kuvveti (f) olarak adlandırılan önemli bir parametre vardır:

$$f = E_0 E_d (eV)^2 \quad (2.4)$$

[21]'de incelenen örnekte osilatör kuvveti $29,71(eV)^2$ 'ye eşittir. Osilatör enerjisi E_0 ortalama bir enerji aralığıdır ve yaklaşık olarak, [27] Tanaka tarafından bulunan, $E_g^d: E_0 \approx 2E_g^d$ optik bant genişliği ile ölçeklendirilir. TlGaSe₂ katmanlı tek kristal için E_0/E_g^d oranı 1,11 olarak hesaplanmıştır [21].



Şekil 2.11: TlGaSe₂ katmanlı tek kristal için $(n^2 - 1)^{-1}$ 'in foton enerjisinin karesine bağlılığı.

Örgü dielektrik sabitinin değeri (ϵ_L), yüksek frekansta dielektrik sabiti (ϵ_∞), osilatör enerjisi (E_0), dispersiyon enerjisi (E_d), plazma dalgaboyu (λ_p) ve plazma frekansı tablo 1.2 de listelenmiştir [21].

Tablo 1.2: TlGaSe₂ katmanlı kristalinin dispersiyon parametreleri.

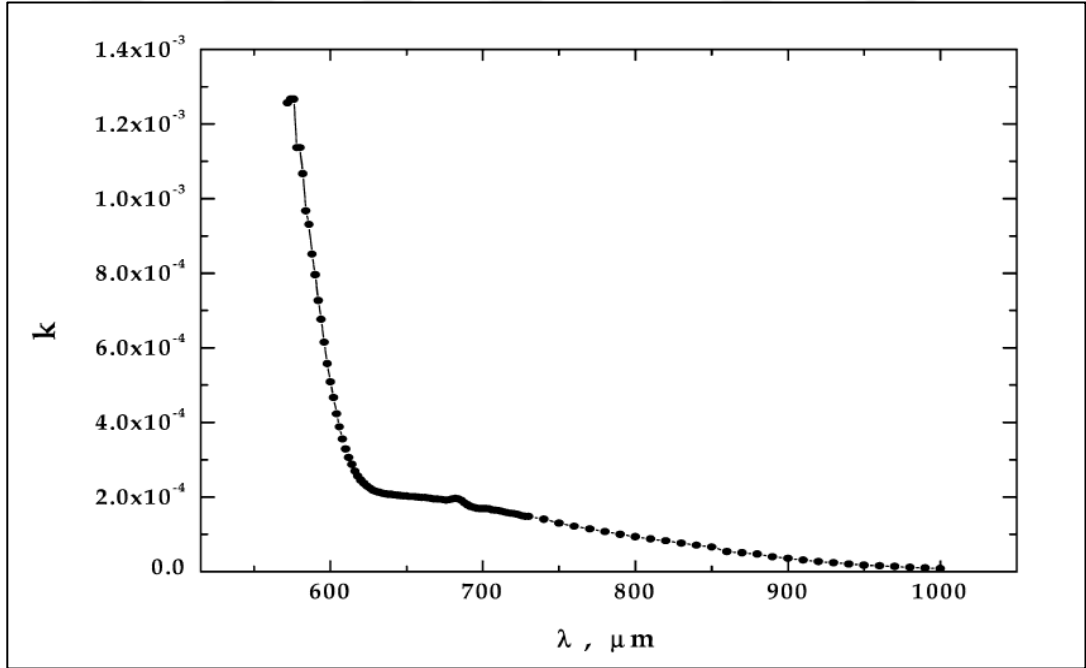
Parametre	ϵ_∞	ϵ_L	$E_0(eV)$	$E_d(eV)$	$\lambda_p (\mu m)$	$\omega_p (Hz)$	E_0/E_g^d
Değer	7,45	8,48	2,15	13,82	3,39	$5,6 \times 10^{14}$	1,11

TlGaSe₂ katmanlı tek kristal için soğurma indisi k, alt tabakanın (substrate) soğurması ve yansıtması için düzeltildikten sonra, normal ışık olayında ölçülen geçirgenlik ve yansımanın mutlak değerlerinden belirlenmiştir [28]. TlGaSe₂ katmanlı tek kristal için k' nın spektral bağıllığı şekil 2.12 de gösterilmiştir [21].

Soğurma katsayısındaki varyasyon (çeşitlilik), α , bantlar arası geçiş için foton enerjisi $h\nu$ ile ilgilidir. Aralarındaki ilişki [29, 30]:

$$(\alpha h\nu)^x = A(h\nu - \epsilon_G) \quad (2.5)$$

Burada $x=2$ ve $1/2$ sırasıyla doğrudan ve dolaylı izinli optik geçişler, $x=2/3$ ve $1/3$ sırasıyla doğrudan ve dolaylı yasaklı optik geçişler için olan değerlerdir. Şekil 2.13 (a)' da $x=2$ için doğrudan geçiş, (b)' de $x=1/2$ için dolaylı geçiş çizilmiştir [21]. Her bir şekil için daha düşük foton enerjileri boyunca lineer kısma bakılırsa, $(\alpha h\nu)^{1/2}=0$ ' da bulunan $h\nu$ eksenini kestiği nokta doğrudan ve dolaylı enerji bant aralığına karşılık gelir. Başlangıç sınırlarıyla ilişkili (birleşmiş) kuyruklar fonon destekli dolaylı elektronik geçişlere atfedilir.

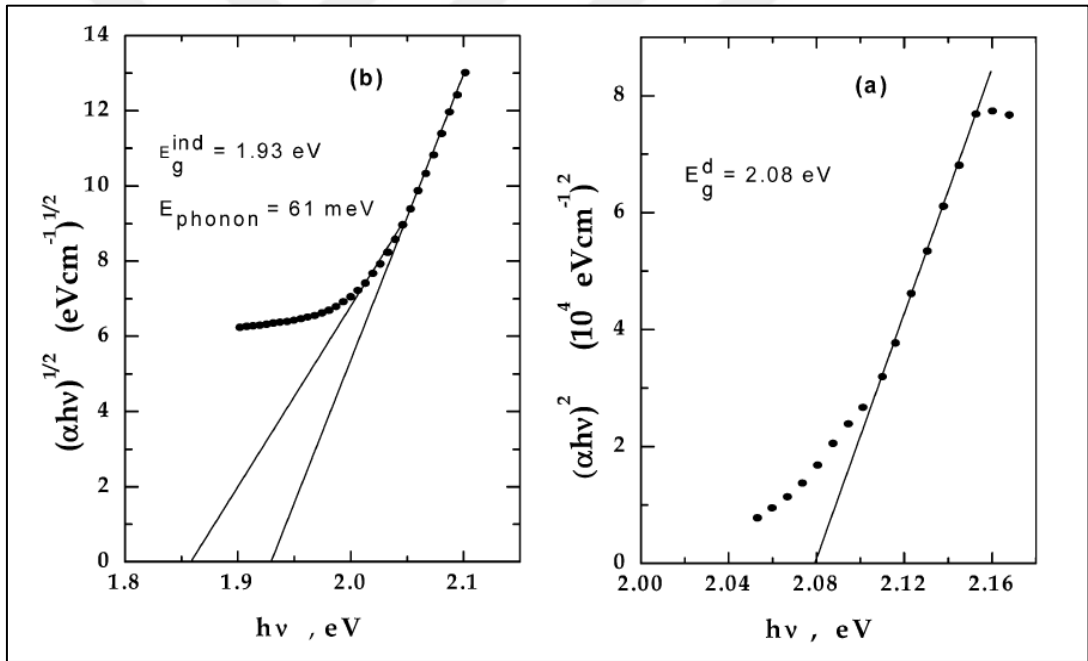


Şekil 2.12: TlGaSe₂ katmanlı tek kristal için soğurma indisinin (k) dalgaboyuna (λ) bağıllığı.

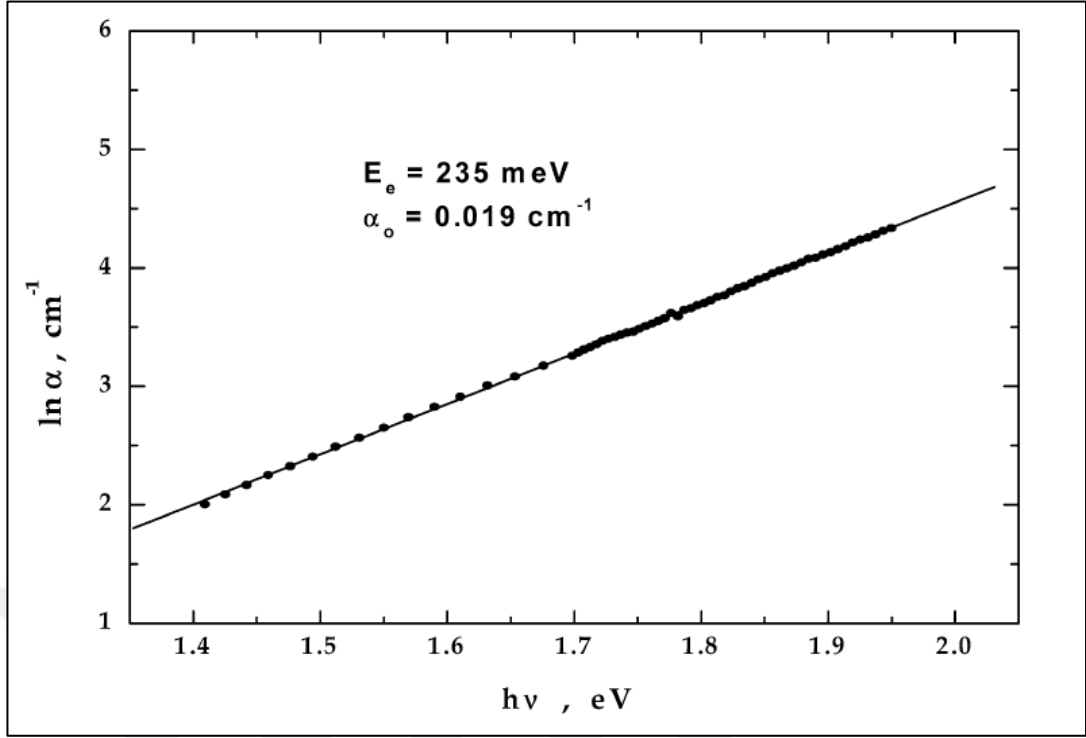
TlGaSe₂ katmanlı tek kristali için fonon enerjileri (E_{phonon}) ve dolaylı enerji aralığı (E_g^{ind}) için elde edilen veriler sırasıyla 61 meV ve 1,93 eV, doğrudan geçiş aralığı ise (E_g^{d}) 2,08 eV Şekil 2.13' te gösterilmiştir. Bu sonuçlar [21], [31] ile uyum içindedir. Urbach' ın deneysel ilişkisi [32] kullanılarak incelenmiştir:

$$\ln(\alpha) = \ln(\alpha_0) - [1/E_e]hv \quad (2.6)$$

Burada E_e kuyruğun genişliği ve α_0 bir sabittir. Şekil 2.14, foton enerjisi üzerinde soğurma katsayısının doğal logaritmasının lineer bağımlılığını gösterir [21]. Düşük enerjilerde kesişim α_0 'ı verirken, eğimin tersi kuyruğun genişliğinin büyüklüğünü (E_e) verir. [21]' de elde edilen değerler sırasıyla 0,019 cm⁻¹ ve 235 meV, [32]'deki verilerle uyumludur.



Şekil 2.13: TlGaSe₂ katmanlı tek kristali için (a) $(\alpha hv)^2$ ve (b) $(\alpha hv)^{1/2}$ 'nin foton enerjisine bağılılığı.



Şekil 2.14: TI GaSe₂ katmanlı tek kristal için foton enerjisinin (hv) bir fonksiyonu olarak ln α'nın gösterimi.

Doğrudan ve dolaylı bant aralıkları, fonon enerjisi, kuyruk genişliği ve α₀ sabiti TI GaSe₂ katmanlı tek kristal için tablo 1.3' te listelenmiştir [21]. Bu sonuçlar [21] ve [31], [34] sonuçları birbirleriyle uyumludur.

Kırınım indisi (n), aşağıdaki deneysel ilişki tarafından [35] doğrudan enerji aralığı (E_g^d) ile ilişkilidir:

$$n^4 E_g^d \approx 108 \quad (2.7)$$

ε₁ ve ε₂ dielektrik sabiti çeşitleri, sırasıyla gerçek ve imajiner dielektrik sabitleri, TI GaSe₂ katmanlı tek kristal için foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak şekil 2.15' te gösterilmiştir [21]. Şekilde elde edilen herhangi bir soğurma maksimumu gösterilmemektedir. Ayrıca ε₂' nin karşısındaki gelen foton enerjisinin artmasıyla dielektrik sabiti ε₁ azalmaktadır. Hacim (volume) ve yüzey (surface) enerji kayıplarının fonksiyonlarının hesaplanması aşağıdaki bağıntı ile mümkündür [36]:

$$VELF = \varepsilon_2^2 / (\varepsilon_1^2 - \varepsilon_2^2) \quad (2.8)$$

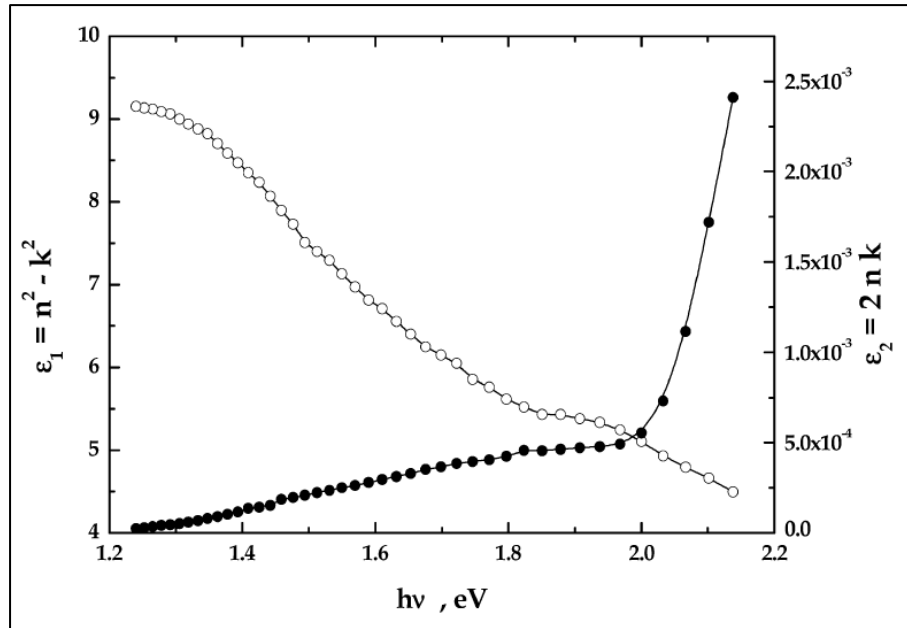
$$SELF = \varepsilon_2^2 / ((\varepsilon_1 + 1)^2 + \varepsilon_2^2) \quad (2.9)$$

VELF hacim enerji kayıp fonksiyonu, SELF yüzey enerji kayıp fonksiyonudur. TlGaSe₂ katmanlı tek kristalinin hacim ve yüzey enerji kayıp fonksiyonlarının varyasyonu foton enerjisinin ($h\nu$) fonksiyonları olarak şekil 2.16’da gösterilmiştir [21]. Şekilde gelen foton enerjisinin artmasıyla VELF ve SELF hızlı bir şekilde artmaktadır. Düşük foton enerjilerinden aralarında önemli bir fark yokken, gelen yüksek foton enerjilerinde VELF SELF’ten daha fazla artmaktadır [21].

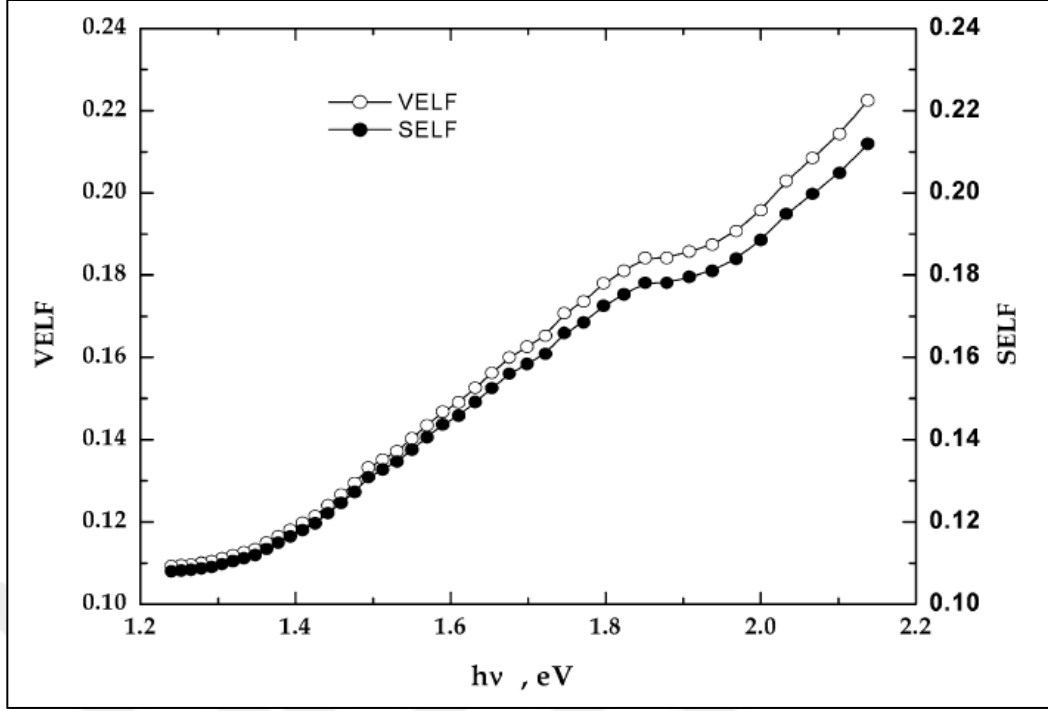
Tablo 1.3: TlGaSe₂ katmanlı tek kristalinin enerji aralığının değerleri.

Parametre	E_g^d (eV)	E_g^{ind} (eV)	E_{phonon} (meV)	E_c (meV)	α_0 (cm ⁻¹)
Değer	2,08	1,93	61	235	0,019

[21] makalesindeki optik çalışmalar sonucunda doğrudan (E_g^d) ve dolaylı (E_g^{ind}) enerji aralıkları sırasıyla 2,08 ve 1,93 eV olarak bulunmuştur. Ayrıca, fonon enerjisi (E_{phonon}) ve kuyruk genişliği (E_c) sırasıyla 61 ve 235 meV olarak hesaplanmıştır. Kırınım indisi saydam bölgedeki normal bir dağılım kadar soğurma bölgesinde de anormal bir dağılım göstermektedir. Dispersiyon eğrisinin analizinden tek osilatör enerjisi (E_0), dispersiyon enerjisi (E_d) ve plazma frekansı (ω_p) tanımlanmıştır.



Şekil 2.15: TlGaSe₂ katmanlı tek kristali için foton enerjisinin ($h\nu$) bir fonksiyonu olarak dielektrik sabitlerinin varyasyonu.



Şekil 2.16: TlGaSe₂ katmanlı tek kristali için foton enerjisinin ($h\nu$) bir fonksiyonu olarak VELF ve SELF'in varyasyonu.

2.5. TlGaSe₂ Kristalinin Avantajları ve Dezavantajları

Bu çalışmada TlGaSe₂ kristalini kullanılmasının sebebini anlayabilmek için kristalin avantajlarından ve dezavantajlarından bahsetmek gerekir.

Kristalin avantajı katmanlı yapıda olmasıdır. Bu durum katmanlararası zayıf Van der Waals bağlarından dolayı yüzeyde boş bağların olmadığı anlamına gelir. Yani kristal yüzeyi temizdir. Yüzey temizliği ise cihaz üretimini oldukça kolaylaştırır. Yüzeye yabancı atomlar bağlanamadığından, istenen metalle yapılan kaplama sonucunda Metal-Yarıiletken eklemleri yapılabilmektedir.

Kristalin dezavantajından bahsedecek olursak, yalnızca p-tipidirler. Bu da iletkenlik tipinin düzensizlikten kaynaklandığını göstermektedir. Ancak XRD incelemeleri bu düzensizlikleri yansıtmamakta, mükemmel bir kristal yapı olduğunu söylemektedir. Çünkü bahsedilen düzensizliklerin kaynağı kusurların civarının deforme olmasıdır. XRD yüzey üzerinden bir ortalamayı verdiği için bu durumun gözlemlenememesi normaldir.

3. YARIİLETKENLERİN OPTİK ÖZELLİKLERİ

3.1. Soğurma

Soğurma, bir elektronun değerlik (ing. Valence) banttan iletkenlik (ing. Conduction) bandına uyarılması şeklinde tanımlanabilir. Soğurma işlemi, yarıiletkenlerin enerji bantları arasındaki boşluğu (ing. Gap) belirlemek için kullanılabilir. Soğurmayı matematiksel olarak ifade etmek için soğurma katsayısını kullanırız. Soğurma katsayısı, yarıiletken bir malzemeye gelen elektromanyetik dalganın geliş gücünün birim yayılma uzunluğu başına $1/e \sim 0,37$ azalmasına neden olur. Soğurma katsayısı temelde şu şekilde ifade edilebilir:

$$\alpha = \frac{2\omega k_0}{c} = \frac{\omega K_2}{n_0 c} \quad (3.1)$$

Soğurma işlemi iki şekilde gerçekleşebilir. Bunlardan biri doğrudan geçiş diğeri ise dolaylı geçiş olarak adlandırılır.

3.1.1. Doğrudan Geçiş

Bu bölümde bir yarıiletken malzemeye gelen bir ışık tarafından uyarılmış bir elektronun değerlik bandından iletkenlik bandına doğrudan (direkt) geçişini inceleyeceğiz. Bunu yapmak içinde mükemmel (ing. Perfect) bir kristaldeki uyarılmış elektronun hareketini göz önünde bulunduracağız.

Elektronun Hamiltonian ifadesi şu şekilde verilir:

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + V(r) \quad (3.2)$$

Burada \mathbf{A} elektromanyetik alanın vektör potansiyelidir ve düzlem dalga tarafından ifade edilir:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}A_0\mathbf{e}[e^{i(k_p \cdot r - \omega t)} + e^{-i(k_p \cdot r - \omega t)}] \quad (3.3)$$

Hamiltonian ifadesini açacak olursak

$$H \simeq \frac{p^2}{2m} + V(r) + \frac{e}{m}\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = H_0 + H_1 \quad (3.4)$$

$H_1 = (e/m)\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ ifadesini pertürbasyon olarak varsayarsak, elektron için değerlik bandından ($|vk\rangle$) iletkenlik bandına ($|ck'\rangle$) birim zamandaki geçiş olasılığı

$$\omega_{cv} = \frac{\pi e^2}{2\hbar m^2} A_0^2 |\langle ck' | \exp(ik_p \cdot r) \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | vk \rangle|^2 \times \delta[\varepsilon_c(k') - \varepsilon_v(k) - \hbar\omega] \quad (3.5)$$

Şeklinde ifade edilir [37]. Yukarıdaki denklemde momentum operatörünü (\mathbf{p}) içeren matris elemanı geçiş matris elemanı olarak adlandırılır ve seçim kuralını ve geçiş gücünü verir.

Elektron seviyesini ifade eden Bloch fonksiyonunu inceleyelim:

$$|jk\rangle = e^{ik \cdot r} u_{jk}(r) \quad (3.6)$$

$j=v$ ve c sırasıyla değerlik ve iletkenlik bant seviyelerini temsil eder. Bu durumda geçiş matris elemanı

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv} = \frac{1}{V} \int_V e^{i(k_p + k - k') \cdot r} u_{ck'}^*(r) \mathbf{e} \cdot (\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) u_{vk}(r) d^3r \quad (3.7)$$

$u(r) = u(r + R_l)$ Bloch fonksiyonu özelliğinden R_l geçiş vektörüdür, bu durumda matris elemanı şu şekilde yazılabilir:

$$\begin{aligned} \mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv} &= \frac{1}{V} \sum_l \exp\{i(k_p + k - k') \cdot R_l\} \\ &\times \int_{\Omega} e^{i(k_p + k - k') \cdot r} u_{ck'}^*(r) \mathbf{e} \cdot (\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k}) u_{vk'}(r) d^3r \end{aligned} \quad (3.8)$$

Matris elemanındaki, $k_p + k - k' = G_m = mG$ ifadesi hariç, R_l geçiş vektörünü içeren toplam sıfır olur. Burada G_m ters örgü vektörüdür.

1 μm dalgaboylu ışığın dalga vektörü $|k_p| = 6,28 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ ve örgü sabiti 5Å olan bir kristal için ters örgü vektörünün büyüklüğü $|G| = 1,06 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ dir [37]. Böylece $k_p \ll G$ eşitsizliği genel olarak sağlanır. Dahası, matris elemanının integral kısmına en büyük katkı $G_m = 0$ ($m = 0$) teriminden gelir. Bu durumun momentumun korunumuna eşdeğer olduğu anlaşılabilir. Bu düşünceler optik geçiş için önemli olan $k' = k$ ilişkisine yol açar.

Yani k uzayında aynı k dalga vektörlü seviyeler arasında elektron geçişlerine izin verilir. Başka bir deyişle, yasak bant aralığından daha büyük enerjili bir foton bir yarıiletken geldiğinde, değerlik bandındaki k dalga vektörlü bir elektron iletkenlik bandındaki aynı dalga vektörlü bir seviyeye uyarılır. Bu durum “doğrudan(direkt) geçiş” olarak adlandırılır.

Matris elemanındaki integral terimi Bloch fonksiyonunun diklik özelliği nedeniyle yok olur, böylece matris elemanı son halini alır:

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{ck'}^*(r) \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} u_{vk}(r) d^3r \delta_{k,k'} \quad (3.9)$$

Yukarıdaki sonuçları kullanarak, birim hacim ve birim zamanda bir malzemedeki foton enerjisi soğurulması $\hbar \omega \omega_{cv}$ ifadesiyle verilir. Bu da birim hacim ve birim zamanda elektromanyetik dalgalardaki güç kaybına eşittir [37]:

$$\hbar \omega \omega_{cv} = \frac{1}{2} \omega K_2 \epsilon_0 E_0^2 \quad (3.10)$$

3.1.2. Dolaylı Geçiş

Deneyisel sonuçlar, $k \neq 0$ da iletkenlik bandının minimumu ve $k=0$ da değerlik bandının maksimumu arasında bant boşluğuna karşılık gelen foton enerjisi için zayıf bir geçiş olduğunu ortaya çıkarmıştır. Bu geçişe “dolaylı geçiş” denir. Değerlik bandındaki bir elektron bir foton soğurur sonra iletkenlik bandının minimumuna geçmek için bir fonon soğurur ya da yayınlar. Bu durum daha yüksek mertebeden etkileşim (ing. higher-order interaction) ya da kuantum mekanikteki ikinci derece pertürbasyon (ing. second-order perturbation) sebebiyle olur.

Yüksek mertebeden etkileşim, doğrudan geçişe kıyasla daha zayıf bir geçiş olasılığını meydana getirir ve böylece zayıf soğurma açıklanır. Ayrıca, değerlik bandının maksimumu ile iletkenlik bandının minimumu arasındaki geçiş sanal bir seviye sayesinde gerçekleşmektedir. Bu sebeple bu geçişe “dolaylı geçiş” (ing. indirect transition) denilmektedir.

Elektronlar (H_e), örgü titreşimleri (H_l), elektron fonon etkileşimi (H_{el}) ve elektron foton etkileşimi (H_{er}) için hamiltonyeni tanımlayacak olursak, toplam hamiltonyen şu şekilde yazılır:

$$H = H_e + H_l + H_{el} + H_{er} \quad (3.11)$$

Elektronlar ve fononların hamiltonyeni $H_0=H_e+H_l$ şeklinde yazılır ve öz durumlar şu şekilde yazılır:

$$|j \rangle = \begin{cases} |c\mathbf{k}, n_q^\alpha \rangle & (\text{iletkenlik bandındaki bir elektron için}) \\ |v\mathbf{k}, n_q^\alpha \rangle & (\text{değerlik bandındaki bir elektron için}) \end{cases} \quad (3.12)$$

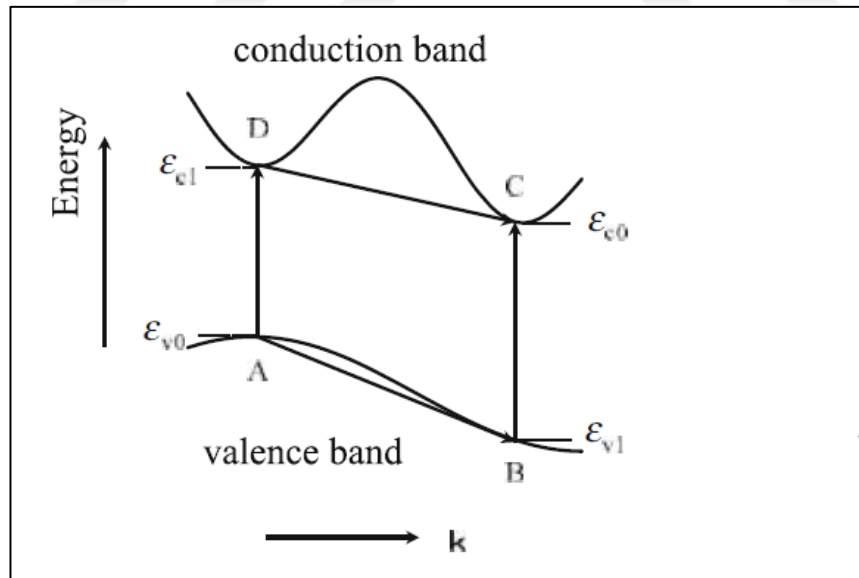
Burada \mathbf{k} elektronun dalga vektörü, n_q^α ise α değerindeki ve \mathbf{q} dalga vektöründeki fonon kuantum sayısıdır. $H'=H_{el}+H_{er}$ eşitliği pertürbasyon hamiltonyenini ifade eder ve pertürbasyonu ikinci dereceye kadar devam ettirir.

Sanal bir seviye $|m \rangle$ kullanılarak, değerlik bandının maksimumundan (başlangıç seviyesi) $|i \rangle$ iletkenlik bandının minimumuna (bitiş seviyesi) $|f \rangle$ geçiş olasılığı şu denklemlerle verilir:

$$w_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f|H'|i\rangle + \sum_m \frac{\langle f|H'|m\rangle\langle m|H'|i\rangle}{\epsilon_i - \epsilon_m} \right|^2 \delta(\epsilon_i - \epsilon_f) \quad (3.13)$$

Burada $\langle f|H'|i\rangle = \langle f|H_{er}|i\rangle + \langle f|H_{el}|i\rangle = 0$ ilişkisi bariz bir şekilde görülmektedir. $\langle f|H_{er}|i\rangle$ matris elemanı, bir önceki bölümde bahsettiğimiz doğrudan geçiş durumundaki matris elemanı ile aynıdır ve doğrudan geçiş k uzayındaki aynı k dalga vektörleri arasında izinlidir. Ancak, dolaylı geçiş durumunda k dalga vektörleri farklıdır ve bu yüzden $\langle f|H_{er}|i\rangle=0$ olur. Diğer taraftan $\langle f|H_{el}|i\rangle$ matris elemanı momentum korunumunu sağlar ama enerji korunmaz. Çünkü bant boşluğu ile karşılaştırıldığında fononun enerjisi küçüktür. Bu yüzden $\langle f|H_{el}|i\rangle=0$ olur. Tüm bunları göz önünde bulundurarak yukarıdaki geçiş olasılığı denklemini tekrar inceleyecek olursak, sadece denklemdaki ikinci ifadenin dolaylı geçişe katkıda bulunduğunu anlarız. Sonuçta geçiş olasılığı şu şekilde ifade edilir:

$$w_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_m \frac{\langle f|H'|m\rangle\langle m|H'|i\rangle}{\epsilon_i - \epsilon_m} \right|^2 \delta(\epsilon_i - \epsilon_f) \quad (3.14)$$



Şekil 3.1: Dolaylı geçiş süreçleri.

Şekil 3.1 de iki dolaylı geçiş süreci gösterilmektedir [38]. Bunlardan ilkinde; değerlik bandının maksimumu olan A noktasındaki bir elektron bir foton soğurarak iletkenlik bandındaki sanal bir seviye olan D noktasına geçiş yapar, hemen sonrasında

fonon soğurarak ya da yayınlayarak iletkenlik bandının minimumu olan C noktasına geçer. İkinci süreçte ise; değerlik bandının A noktasında bulunan bir elektron bir fonon soğurarak ya da yayınlayarak yine değerlik bandında bulunan B noktasına geçer ve hemen ardından bir foton soğurarak iletkenlik bandındaki C noktasına ulaşır. Bu ikinci süreç farklı bir yolla da ifade edilebilir: Sanal seviye olan B noktasındaki bir elektron bir foton soğurarak iletkenlik bandındaki C seviyesine geçiş yapar ve arkasında bir hol bırakır. Daha sonra değerlik bandının A seviyesindeki bir elektron bir fonon soğurarak ya da yayınlayarak bu sanal seviyeye geçiş yapar. Bu süreçler aşağıdaki denklemlerle ifade edilir:

$$\begin{aligned} \omega_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} & \left| \frac{\langle C\mathbf{k}_f, n_q^\alpha \pm 1 | H_{el} | D\mathbf{k}_i, n_q^\alpha \rangle \langle D\mathbf{k}_i, n_q^\alpha | H_{er} | A\mathbf{k}_i, n_q^\alpha \rangle}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_D} \right. & (3.15) \\ & + \frac{\langle C\mathbf{k}_f, n_q^\alpha \pm 1 | H_{er} | B\mathbf{k}_f, n_q^\alpha \pm 1 \rangle \langle B\mathbf{k}_f, n_q^\alpha \pm 1 | H_{el} | A\mathbf{k}_i, n_q^\alpha \rangle}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_B} \left. \right|^2 \\ & \times \delta(\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_f) \end{aligned}$$

Yukarıdaki denklemde \pm ile gösterilen kısımlarda (+) fonon yayınlanmasına, (-) ise fonon soğurulmasına karşılık gelir. Burada fonon enerjisini ifade eden $\hbar\omega_q$ terimini yok saydık. Çünkü bu terim foton enerjisi ile kıyaslandığında ya da bant boşluğunun enerjisi ile kıyaslandığında oldukça küçük bir değerdir.

Dolaylı geçiş için dielektrik fonksiyonunu inceleyelim:

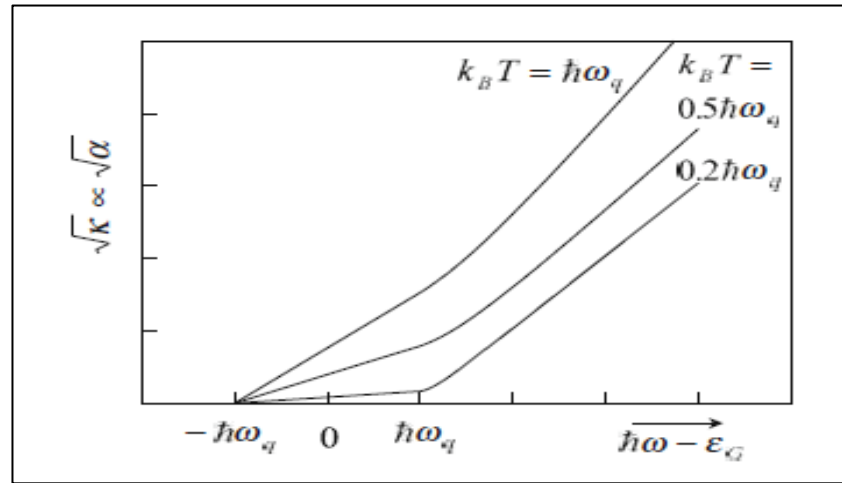
$$\begin{aligned} K_2(\omega) = \frac{\pi e^2}{\epsilon_0 m^2 \omega^2} \frac{K}{(4\pi)^3} \sum_{m,\alpha} & \left[|A_{CV}^{m,\alpha,+}|^2 \frac{(\hbar\omega - \hbar\omega_q^\alpha - \mathcal{E}_G)^2}{1 - \exp(-\hbar\omega_q^\alpha/k_B T)} \right. & (3.16) \\ & \left. + |A_{CV}^{m,\alpha,-}|^2 \frac{(\hbar\omega + \hbar\omega_q^\alpha - \mathcal{E}_G)^2}{\exp(\hbar\omega_q^\alpha/k_B T) - 1} \right] \end{aligned}$$

Burada köşeli parantezle belirtilen terimlerden birinci terim fonon yayınlanmasını, ikinci terim ise fonon soğurulmasını ifade etmektedir.

Dolaylı geçişteki sanal seviye fonon soğurulması ya da yayınlanmasıyla ifade ediliyor. Bunu göz önünde bulundurarak soğurma katsayısına bağlı sıcaklığı hesaplayabiliriz.

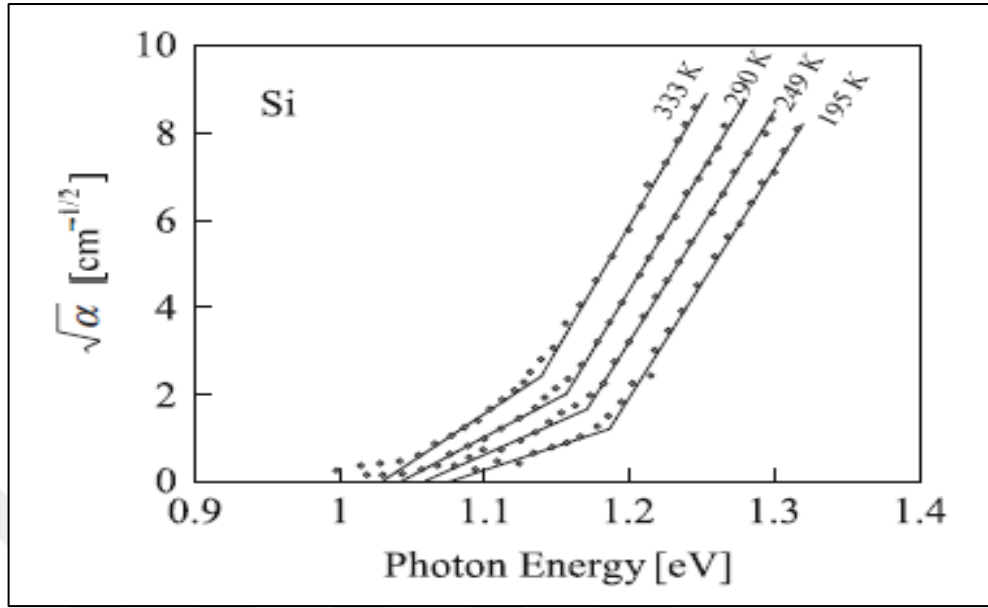
$k_B T \ll \hbar \omega_q^\alpha$ koşulunda ikinci terimin paydası büyük bir değer alır ve fonon soğurulmasını takiben gerçekleşmesini beklediğimiz geçiş düşük sıcaklıkta gözlenmez. Diğer bir taraftan birinci terimin paydası aynı koşul için 1 değerini alır. Dolayısıyla düşük sıcaklıklarda dolaylı geçiş fonon soğurulması tarafından yönetilecektir. Bu özellik, dielektrik fonksiyonunun imajiner kısmının karekökünün ($\sqrt{K_2}$) ve soğurma katsayısının karekökünün ($\sqrt{\alpha}$) $\hbar \omega \mp \hbar \omega_q - \epsilon_G$ ifadesi ile orantılı olduğu gerçeğini göz önüne alarak, şekil 3.2 de ($\sqrt{K_2}$) ifadesinin farklı sıcaklıklar için $\hbar \omega - \epsilon_G$ nin bir fonksiyonu olarak çizilmesiyle gösterilmiştir [38]. Daha düşük sıcaklıklarda fonon soğurulma süreci azalır ve soğurma katsayısı çok zayıf olur.

Literatürde Si ve Ge için deneysel sonuçlar elde edilmiştir. Bunlar sırasıyla şekil 3.3 ve şekil 3.4'te gösterilmektedir [38]. Si için, soğurma katsayısının karekökü ($\sqrt{\alpha}$) foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak çizilir ve şekil 3.2'deki dolaylı geçiş özelliğini bulur. Eğrinin dönüm noktası yüksek sıcaklıktaki düşük foton enerjisine kayar. Ge için dönüm noktaları 249 K sıcaklıkta 0,65 ve 0,71 eV spektrumunda gözlemlenir. Bu dönüm noktaları, bir boyuna optik (ing. Longitudinal Optical) fonon soğurması ve yayınlanması nedeniyle olan geçişe ve düşük sıcaklıklardaki fonon yayınlanmasının yok olması nedeniyle olan geçişe karşılık gelir. Zayıf bir soğurma, boyuna akustik (ing. Longitudinal Acoustic) fonon yayınlanması süreci nedeniyle yaklaşık 0,77 eV foton enerjisi altında 4,2 K sıcaklıkta gözlemlenir. Bunun, enine akustik (ing. Transverse Acoustic) bir fonon yayınlanmasını takiben yasaklı bir geçiş yüzünden olduğuna inanılır.

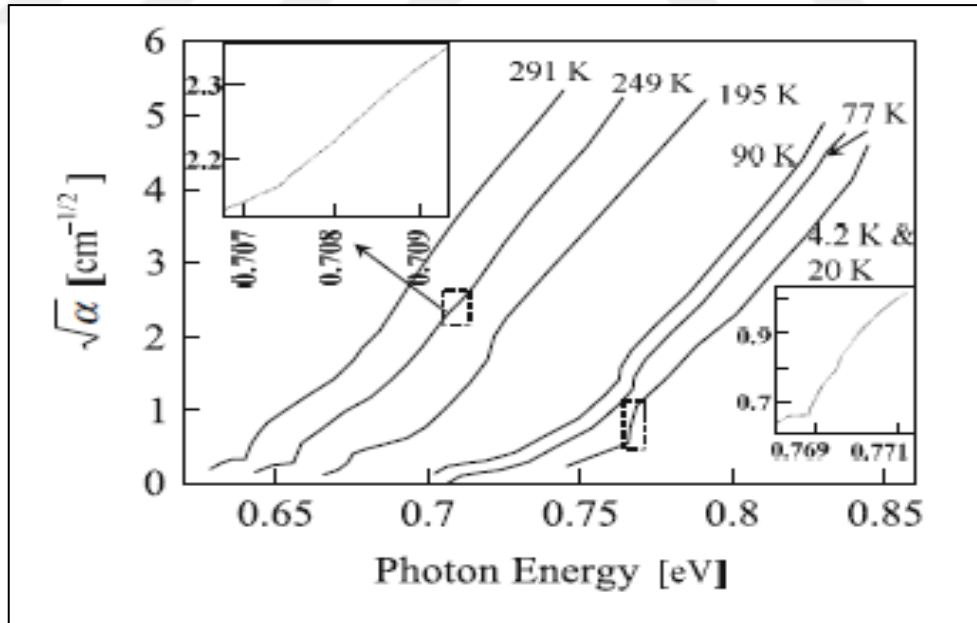


Şekil 3.2: Dolaylı geçiş için soğurma katsayısı. Burada $\sqrt{\alpha}$ ve \sqrt{K} ifadeleri $\hbar \omega - \epsilon_G$ ifadesinin bir fonksiyonu olarak çizilmiştir.

Buradaki önemli nokta soğurma katsayısının karekökü düz bir hat değil bir kambur şeklinde çizilmesidir. Bunun sebebi ise exciton etkisidir.



Şekil 3.3: Si için $\hbar\omega$ foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak soğurma katsayısının karekökü $\sqrt{\alpha}$ çizilmiştir.



Şekil 3.4: Ge için $\hbar\omega$ foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak soğurma katsayısının karekökü $\sqrt{\alpha}$ çizilmiştir.

3.2. Franz-Keldysh Etkisi

Franz-Keldysh etkisi, bir elektrik alan varlığında yarıiletkende optik soğurma kenarındaki bir kaymadır. Etki adını Alman fizikçi Walter Franz ve Rus fizikçi Leonid Keldysh'ten almıştır [39].

Bir yarıiletkene elektrik alan uygulandığında elektron ve hol dalga fonksiyonları düzlem dalgadan ziyade Airy fonksiyonlarına dönüşür. Airy fonksiyonu yasaklanmış bant boşluğuna uzanan bir kuyruk içerir. Elektron ve hol biraz farklı potansiyellerde olsa da Airy kuyukları hafifçe üst üste biner. Soğurma spektrumu artık yasaklanmış bant boşluğu enerjisi altındaki enerjilerde bir kuyruk ve yasaklanmış bant boşluğu enerjisi üzerindeki enerjilerde bazı salınımlar içerir.

Tüm bunları anlayabilmek adına Franz-Keldysh etkisini daha detaylı inceleyelim:

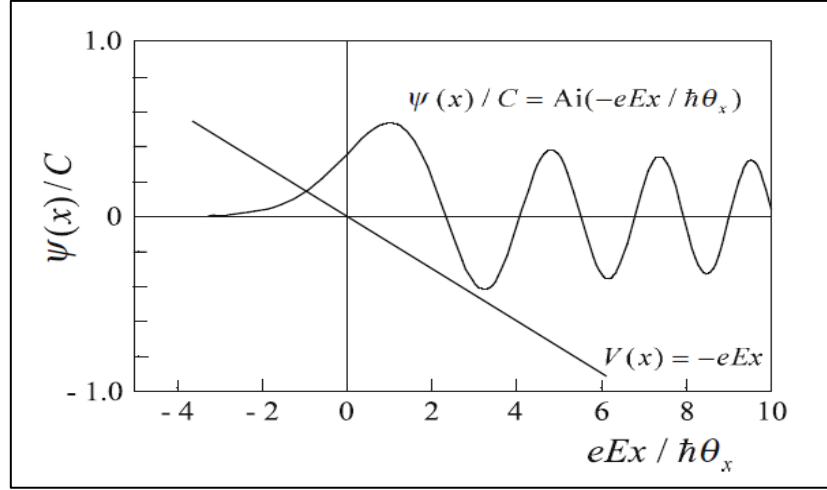
Bir x yönünde uygulanan elektrik alan altındaki durumu göz önünde bulunduracak olursak, y ve z yönündeki elektrik alanlar sıfırdır ve

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_x} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2\mu_y} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu_z} - eEx \right] \psi(x, y, z) = \varepsilon \psi(x, y, z) \quad (3.17)$$

denklemini elde ederiz. Bu denklemin çözümü aşağıdaki gibidir:

$$\psi(x, y, z) = C \cdot A_i \left(\frac{-eEx - \varepsilon + \hbar^2 k_y^2 / 2\mu_y + \hbar^2 k_z^2 / 2\mu_z}{\hbar \theta_x} \right) \times \exp\{i(k_y y + k_z z)\} \quad (3.18)$$

Bu sonuca göre y ve z yönündeki Bloch fonksiyonuyla verilen dalga fonksiyonu periyodiktir. Ancak uygulanan elektrik alandan dolayı elektron-hol çiftinin lokalizasyonu x yönünde gerçekleşir. Şekil 3.5 te x' in bir fonksiyonu olarak dalga fonksiyonunun çizimi gösterilmiştir [40].



Şekil 3.5: Eğik bir potansiyel bariyer ile statik elektrik alanındaki elektron-hol çiftinin dalga fonksiyonu.

μ_x etkin kütleli bir parçacığın tek boyutlu hareketini ele alacak olursak, klasik yaklaşımda parçacık pozitif potansiyel bölgesine ($-eEx > 0$; $x < 0$) nüfuz edemez ve bu yüzden $x=0$ noktası hareket için dönüm noktasıdır. Kuantum mekanişsel yaklaşımda ise parçacık pozitif potansiyel bölgesine nüfuz edebilir ve dalga fonksiyonu şekil 3.5 te görüldüğü gibi o bölgede eksponansiyel bir kuyruğa sahiptir [40].

Sonuç olarak; değerlik bandındaki bir elektronun, yasaklanmış bant enerjisinden daha düşük bir enerjiye sahip bir fotonu soğurarak iletkenlik bandına geçmesine izin verilir. Bu etki “Franz-Keldysh Etkisi” olarak bilinir [40].

3.2.1. Franz-Keldysh Etkisinin Matematiksel İncelemesi

Bantlar arası geçişte elektrik alanın etkisini matematiksel olarak inceleyelim [40]:

Dielektrik fonksiyonunun imajiner kısmı şu denklem ile verilmektedir:

$$K_2(\omega, \mathbf{E}) = \frac{\pi e^2 |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2}{\epsilon_0 m^2 \omega^2} \frac{e^3 |E_x E_y E_z|}{(\hbar \theta_x \hbar \theta_y \hbar \theta_z)^2} \int d\mathcal{E}_x d\mathcal{E}_y d\mathcal{E}_z \quad (3.19)$$

$$\times \left| A_i \left(-\frac{\mathcal{E}_x}{\hbar \theta_x} \right) \cdot A_i \left(-\frac{\mathcal{E}_y}{\hbar \theta_y} \right) \cdot A_i \left(-\frac{\mathcal{E}_z}{\hbar \theta_z} \right) \right|^2$$

$$\times \delta[\mathcal{E}_G + \mathcal{E}_x + \mathcal{E}_y + \mathcal{E}_z - \hbar \omega]$$

$d\mathcal{E}_y\mathcal{E}_z$ ifadesine göre integral, iki boyutlu bant için ortak durum yoğunluğu $\mathcal{J}_{cv}^{2D}(\hbar\omega - \mathcal{E}_G - \mathcal{E}_x)$ ile verilir. Böylece denklem aşağıdaki halini alır:

$$\begin{aligned} K_2(\omega, \mathbf{E}) &= \frac{\pi e^2 |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2}{\epsilon_0 m^2 \omega^2} \frac{e |\mathcal{E}_x|}{(\hbar \theta_x)^2} \\ &\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{J}_{cv}^{2D} [\hbar\omega - \mathcal{E}_G - \mathcal{E}_x] \left| A_i \left(-\frac{\mathcal{E}_x}{\hbar \theta_x} \right) \right|^2 d\mathcal{E}_x \end{aligned} \quad (3.20)$$

İki boyutlu ortak durum yoğunluğu şu şekilde ifade edilir:

$$\mathcal{J}_{cv}^{2D}(\hbar\omega) = \begin{cases} B_1 = \frac{(\mu_y \mu_z)^{1/2}}{\pi \hbar^2}, & \hbar\omega > \mathcal{E}_G \\ 0, & \hbar\omega < \mathcal{E}_G \end{cases} \quad (3.21)$$

Bu durumda dielektrik fonksiyonu

$$\begin{aligned} K_2(\omega, \mathbf{E}) &= \frac{\pi e^2 |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2}{\epsilon_0 m^2 \omega^2} \frac{e |\mathcal{E}_x|}{(\hbar \theta_x)^2} \frac{|\mu_y \mu_z|^{1/2}}{\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{\hbar\omega - \mathcal{E}_G} \left| A_i \left(-\frac{\mathcal{E}_x}{\hbar \theta_x} \right) \right|^2 d\mathcal{E}_x \quad (3.22) \\ &= \frac{e^2}{2\epsilon_0 m^2 \omega^2} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2 (\hbar \theta_x)^{1/2} \left(\frac{8 |\mu_x \mu_y \mu_z|}{\hbar^6} \right)^{1/2} \\ &\times [|A_i'(-\eta)|^2 + \eta |A_i(-\eta)|^2] \end{aligned}$$

halini alır. Bu denklemde η ile gösterilen ifade $(\hbar\omega - \mathcal{E}_G)/\hbar\theta_x$ şeklinde tanımlanır.

Foton enerjisinin, temel soğurma sınırının altında olduğu limit durumlarını inceleyecek olursak $\eta \ll 0$ ($\eta \rightarrow -\infty$) durumunda ($\hbar\omega \ll \mathcal{E}_G$), Airy fonksiyonlarının asimptotik çözümleri şu şekilde olur:

$$\lim_{z \rightarrow \infty} A_i(z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} z^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} z^{3/2}\right) \left[1 - \frac{3C_1}{2z^{3/2}} \right] \quad (3.23)$$

$$\lim_{z \rightarrow \infty} A'_i(z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} z^{1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} z^{3/2}\right) \left[1 + \frac{21C_1}{10z^{3/2}}\right] \quad (3.24)$$

Böylece yasaklanmış bant enerjisi altında bir enerjiye sahip foton için dielektrik fonksiyonu son halini almış olur.

$$\begin{aligned} K_2(\omega, \mathbf{E}_x) &= \frac{e^2 |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2}{2\epsilon_0 m^2 \omega^2} \frac{1}{2\pi} \left(\frac{8|\mu_x \mu_y \mu_z|}{\hbar^6} \right)^{1/2} (\mathcal{E}_G - \hbar\omega)^{1/2} \\ &\times \exp\left[-\frac{4}{3} \left(\frac{\mathcal{E}_G - \hbar\omega}{\hbar\theta_x} \right)^{3/2}\right] = \frac{1}{2} K_2(\omega) \exp\left[-\frac{4}{3} \left(\frac{\mathcal{E}_G - \hbar\omega}{\hbar\theta_x} \right)^{3/2}\right] \end{aligned} \quad (3.25)$$

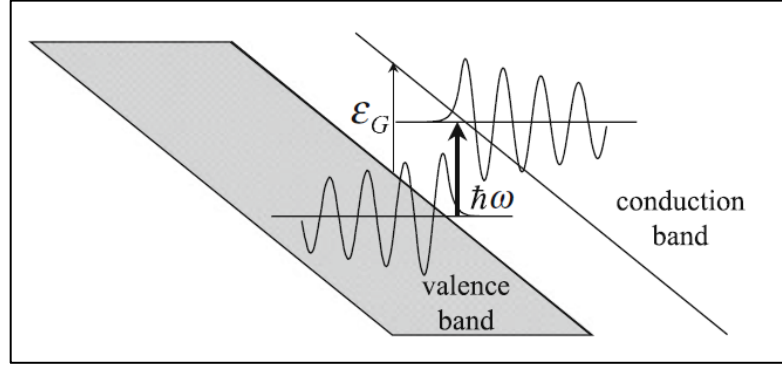
Bu denklemi $\alpha = \omega K_2 / \eta_0 c$ ifadesinde yerine yazarsak soğurma katsayısı α ile bir ilişki elde edebiliriz.

$$\begin{aligned} \alpha(\omega, \mathbf{E}_x) &= \frac{e^2 |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2}{2\epsilon_0 m^2 c \eta_0 \omega^2} \frac{1}{2\pi} \left(\frac{8|\mu_x \mu_y \mu_z|}{\hbar^6} \right)^{1/2} (\mathcal{E}_G - \hbar\omega)^{1/2} \\ &\times \exp\left[-\frac{4}{3} \left(\frac{\mathcal{E}_G - \hbar\omega}{\hbar\theta_x} \right)^{3/2}\right] \end{aligned} \quad (3.26)$$

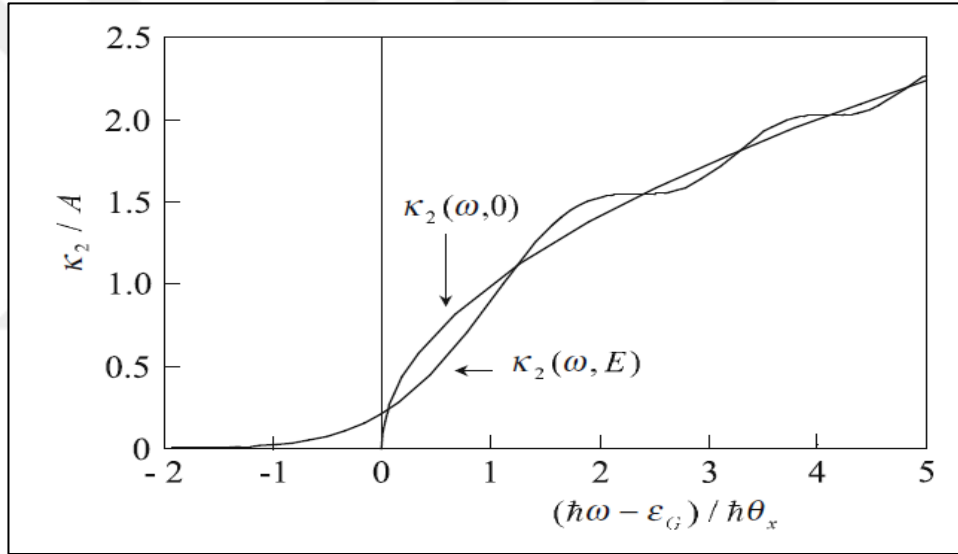
$$\alpha(\omega, \mathbf{E}_x) = \frac{1}{2} \alpha(\omega) \exp\left[-\frac{4}{3} \left(\frac{\mathcal{E}_G - \hbar\omega}{\hbar\theta_x} \right)^{3/2}\right] \quad (3.27)$$

Denklemlerdeki $K_2(\omega)$ ve $\alpha(\omega)$ değerleri, sıralı olarak elektrik alan yokluğunda dielektrik sabitinin imajiner kısmı ve elektrik alanlı soğurma katsayısıdır.

Bu sonuçlar bir elektrik alan varlığında, enerjisi yasaklanmış bant aralığının enerjisinden az olan bir foton için soğurma meydana geldiğini ve soğurma katsayısının eksponansiyel bir kuyruğu olduğunu göstermektedir. Franz ve Keldysh tarafından bağımsız olarak öngörülmüş bu etki “Franz-Keldysh Etkisi” olarak adlandırılır. Şekil 3.6 da Franz-Keldysh etkisinin illüstrasyonu gösterilmektedir [40].



Şekil 3.6: Bir yarıiletkendeki Franz-Keldysh etkisinin illüstrasyonu. Yüksek bir elektrik alan varlığında elektron ve holün dalga fonksiyonları yasaklanmış bant boşluğuna nüfuz eder ve yasak bant enerjisi altındaki foton enerjisinde $\hbar\omega < \epsilon_G$ optik geçişe izin verilir.



Şekil 3.7: $K_2(\omega, 0)/A$ elektrik alansız ve $K_2(\omega, E)/A$ elektrik alanlı, M_0 kritik noktası ($\mu_x\mu_y\mu_z > 0$) yakınındaki foton enerjisinin bir fonksiyonu.

Elektrik alan yokluğunda $E=0$, dielektrik sabit $K_2(\omega, 0)$ $\hbar\omega < \epsilon_G$ bölgesinde sıfırdır. Bir elektrik alan varlığında ise $E \neq 0$, dalga fonksiyonu yasaklanmış bant boşluğuna nüfuz eder ve dielektrik sabiti temel soğurma sınırı altındaki bölgede $\hbar\omega < \epsilon_G$ eksponansiyel bir kuyruğa yol açar. Şekil 3.7 de bu durum gösterilmektedir [40].

$K_2(\omega, 0)$ temel soğurma sınırı üzerindeki bölgede foton enerjisinde $\sqrt{\hbar\omega - \epsilon_G}$ gibi bir artış sergilerken, $K_2(\omega, E)$ bir salınım hareketi sergiler ve temel soğurma sınırının çok üstündeki bir bölgede $K_2(\omega, 0)$ ile birleşir.

3.2.2. Kuvvetli Bir Elektrik Alan Varlığında Temel Soğurma

Franz-Keldysh etkisini ifade etmenin bir diğer yolu da verilen bir enerjide yasaklanmış bant boşluğu içinde elektronun bulunma olasılığının daha yüksek olduğunu ya da bir elektrik alan varlığında tünelleme olasılığının arttığını söylemektir.

Bir elektrik alan varlığında bir elektronun yasaklanmış bant boşluğu içinde bulunma olasılığı eksponansiyel azalan bir fonksiyon ile tanımlanır. Değerlik elektronu iletkenlik bandına geçmek için üçgen bir bariyere bir tünel açmalıdır. Bu bariyer \mathcal{E}_G yüksekliğinde ve d kalınlığındadır:

$$d = \frac{\mathcal{E}_G}{qE} \quad (3.28)$$

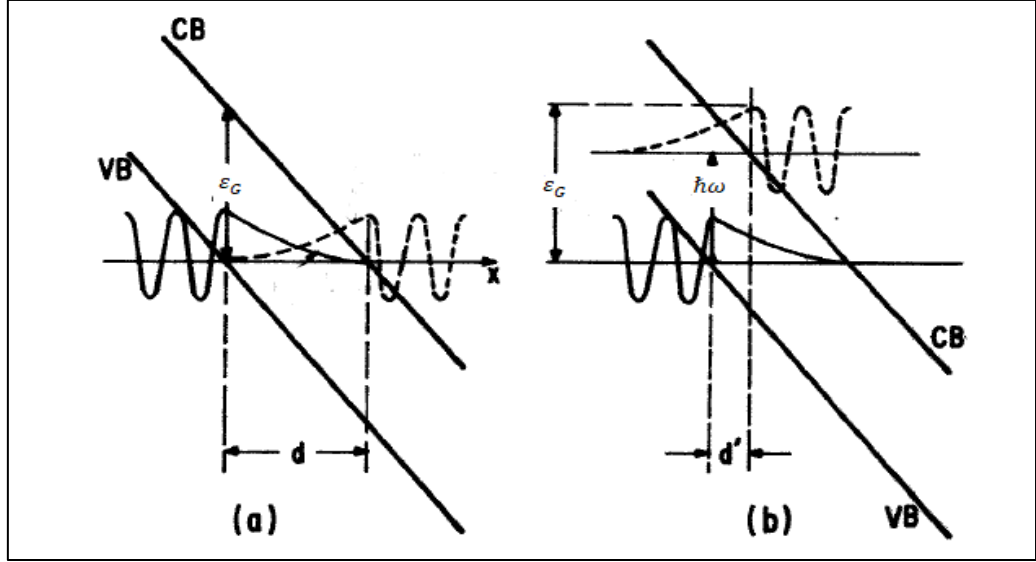
E elektrik alan artarsa tünel mesafesi azalır, yasaklanmış bant boşluğunda bir elektronun bulunma olasılığını tanımlayan dalga fonksiyonlarının üst üste gelmesi arttırılır. Şekil 3.8. (b) de $\hbar\omega$ enerjili bir foton yardımıyla bariyer kalınlığı şu değere azaltılır [41]:

$$d' = \frac{\mathcal{E}_G - \hbar\omega}{qE} \quad (3.29)$$

Dalga fonksiyonlarının üst üste gelmesi tünelleme transferinin gerçekleşme olasılığını arttırır.

Foton destekli tünellemeyle temel soğurmada Franz-Keldysh etkisi ilk silikonda gözlemlenmiştir. Soğurma sınırından daha düşük bir enerjiye düzgün bir kayma olarak ifade edilmiştir. Benzer gözlemler GaAs ve Ge içinde yapılmıştır [41].

Tünelleme destekli soğurmanın bir elektrik alan varlığında daha muhtemel olduğu görülmektedir [41]. Bu nedenle bir kirlilik ya da kesikli bir seviye için, gözlemlenmesi gereken bir kayma değil aslında bir genişleme etkisidir. Ancak mevcut durumdaki gibi sadece düşük enerji kenarı gözlemlendiğinde bu kenardaki Franz-Keldysh genişlemesi düşük enerjiye doğru bir kayma gibi görünür (Şekil 3.7).



Şekil 3.8. Elektron tünelleme, (a) enerjide değişim yok, (b) foton soğurulması ile.

3.3. Urbach Kuralı

Sıcaklık arttıkça soğurma kenarı spektrumunun eksponansiyel kısımları karakteristik bir “demet (ing. Bundle)” oluştururken, foton enerjisi ile soğurma katsayısında eksponansiyel bir artış gösterdiği deneysel olarak ilk kez 1953’te AgBr kristallerinde ışık soğurulmasını inceleyen Franz Urbach tarafından gözlemlenmiştir [32]. Diğer araştırmalar, dolaylı geçişli yarıiletkenler için Urbach tarafından geliştirilen [32] ampirik düzenliliğin, daha sonra doğrudan geçişli yarıiletkenler [43], çeşitli kristaller ve amorf malzemeler için gözlemlendiğini göstermiştir [44 – 47]. Urbach kuralı, katmanlı [48, 49], zincirlenmiş [50] ve nanoboyutlu yapılar [51 – 53], ferroikler [50, 54 – 56] ve süperiyonik iletkenlerde [57 – 59] ortaya çıkar. Urbach kuralı ve farklı malzemelerdeki tezahürünün temel özellikleri ile ilgili detaylı incelemeler [44, 47, 59 – 61] kaynaklarında yapılmıştır.

3.3.1. Kristal Katılarda Urbach Kuralının Temel Özellikleri

Soğurma kenarının Urbach davranışı durumunda, soğurma katsayısının sıcaklığı ve spektral bağımlılığı şu şekilde tanımlanmaktadır [32]:

$$\alpha(h\nu, T) = \alpha_0 \exp\left[\frac{\sigma(h\nu - E_0)}{kT}\right] = \alpha_0 \exp\left[\frac{h\nu - E_0}{E_U(T)}\right] \quad (3.30)$$

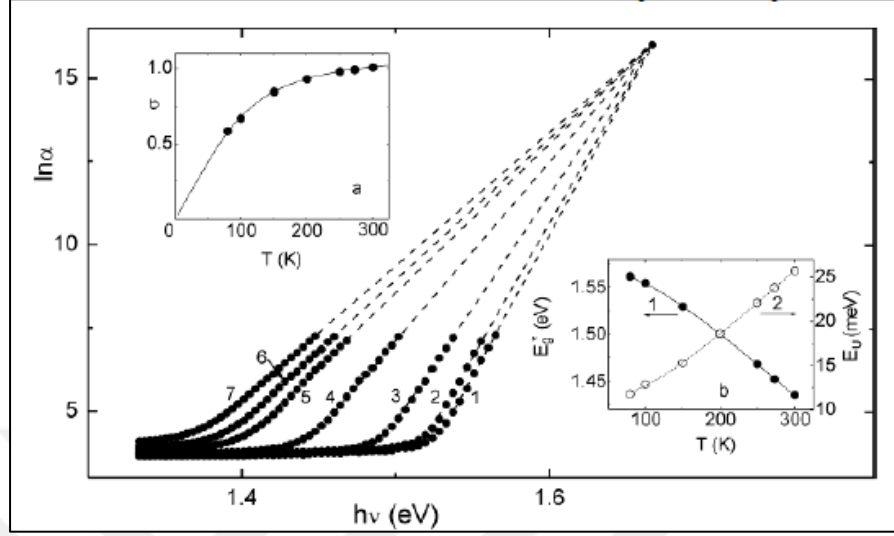
Burada E_U Urbach enerjisidir, soğurma kenarının enerji aralığına eşit ve eğimine terstir $E_U^{-1} = \Delta(\ln \alpha)/\Delta(h\nu)$. σ soğurma kenarının yükseklik (ing. steepness) parametresidir, α_0 ve E_0 Urbach demetinin birleşme noktasının koordinatlarıdır. Soğurma kenarı bölgesindeki soğurma katsayısının eksponansiyel artışı, değerlik ve iletkenlik bandındaki durum yoğunluklarının kuyrukları arasındaki geçişler tarafından açıklanır. Bu kuyrukların şekli ve boyutları farklı türdeki bozuklukların varlığına bağlıdır [45]. Şekil 3.9 farklı sıcaklıklar için soğurma katsayısının tipik spektral bağlılıklarını ve $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ [61] kristali için Urbach soğurma kenarını gösterir [42]. $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ kristalinin bakır içerikli katı elektrolitler arasında en verimli süperiyonik iletkenlerden biri olduğuna dikkat etmek gerekir [62]. α_0 ve E_0 koordinatları ile bir noktada karşılaşan düz hatlarda karakteristik bir “demet” ortaya çıkmıştır. Böyle bir demet, kural olarak, Debye sıcaklığının üzerinde geniş bir sıcaklık aralığında birkaç büyüklük sırasına göre soğurma katsayısı değişimi içinde gözlemlenmelidir. Şuna dikkat edilmelidir ki Urbach demeti, yarıiletken ve iyonik kristallerdeki Wannier-Mott eksiton bulaşmasının (ing. smearing), moleküler kristallerdeki Frenkel eksiton bulaşmasının ve aynı zamanda eksitonsuz katılardaki bantlararası optik geçişlerin bir sonucu olarak gözlemlenmiştir [44]. Bazı durumlarda Urbach davranışından sapmalar meydana gelir, yani optik soğurma kenarının şekli hâlâ eksponansiyeldir, ancak dışsallaştırılmış (ing. extrapolated) doğrusal parçalar α_0 ve E_0 koordinatlarıyla bir odakta birleşmez.

Urbach kuralının σ parametresine bağlı sıcaklık bir denklem ile tanımlanabilir:

$$\sigma(T) = \sigma_0 \left(\frac{2kT}{\hbar\omega_p} \right) \tanh \left(\frac{\hbar\omega_p}{2kT} \right) \quad (3.31)$$

Burada $\hbar\omega_p$, çoğu durumda temel soğurma kenarının uzun dalga tarafının oluşumuna katılan fononların enerjisiyle çakışan etkin fonon enerjisidir, σ_0 malzemedeki optik uyarmayı tanımlayan bir parametredir. Örneğin; $\hbar\omega_p$ kristal yarıiletkenlerde eksiton (elektron) – fonon etkileşimini (EPI) tanımlayan tek salınım modelindeki etkin fonon enerjisiyken, σ_0 , $\sigma_0 = (2/3)g^{-1}$ olarak ki burada g bir sabittir, EPI ile ilgili bir parametredir [44, 63]. σ' ya bağlı tipik bir sıcaklık şekil 3.9 da ek olarak gösterilmiştir. Urbach kuralının sadece kesin bir sıcaklıktaki foton enerjisinde soğurma katsayısına bağlı eksponansiyelde oluşmadığına, aynı zamanda

yukarıda gösterilen $\alpha(h\nu, T)$ ve $\sigma(T)$ denklemlerindeki parametreler arası sıkı ilişkide de oluştuğuna dikkat edilmelidir.



Şekil 3.9: 80K (1), 100K (2), 150K (3), 200K (4), 250K (5), 273K (6), 300K (7) sıcaklıklarında $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ kristali için Urbach soğurma kenarının spektral bağılılığı. İlaveeten yükseklik parametresinin σ sıcaklık bağılılığı (a), optik sözde-enerji (ing. pseudogap) E_g^* (1b) ve Urbach enerjisi E_U (2b) gösterilmiştir.

Urbach soğurma kenarının bazı parametrelerine bağlı sıcaklık, optik sözde-enerji ($E_g^* \alpha = 10^3 \text{ cm}^{-1}$ [57] soğurma katsayısının sabit bir değerinde eksponansiyel soğurma kenarının enerji pozisyonudur) ve Urbach enerjisi E_U Einstein modeli çerçevesinde iyi tanımlanmış olarak (şekil 3.9) gösterilmektedir [64, 65]:

$$E_g^*(T) = E_g^*(0) - S_g^* k \theta_E \left[\frac{1}{\exp(\theta_E/T) - 1} \right] \quad (3.32)$$

$$E_U = (E_U)_0 + (E_U)_1 \left[\frac{1}{\exp(\theta_E/T) - 1} \right] \quad (3.33)$$

Burada $E_g^*(0)$ 0 K' deki enerji, S_g^* , $(E_U)_0$ ve $(E_U)_1$ sabit değerler, θ_E etkileşimde olmayan salınımların fonon uyarımlarının ortalama frekansına karşılık gelen Einstein sıcaklığıdır.

Yarıiletkenlerde Urbach kuralının tezahürlerini açıklamak için yaygın olarak kullanılan en çok alıntı yapılan teorik modeller arasında Sumi-Toyozava [66] ve Dow-

Redfield [67, 68] modelleri bulunmaktadır. Ayrıca literatürde Urbach kuralı açıklaması için başka versiyonlarda mevcuttur [69 – 72].

3.3.2. Urbach Kuralı ve Kristal Örgü Bozulması

Urbach enerjisinin E_U , dış faktörler kadar yapısal faktörlerinde sebep olduğu kristal örgü düzensizliğinden dolayı oluşan soğurma kenarı kirliliğinin derecesini karakterize ettiği bilinmektedir. Farklı bozukluk tiplerinin Urbach enerjisi E_U üzerindeki etkisi genel olarak şu şekilde tanımlanabilir [73]:

$$E_U = k_0(W_T^2 + W_X^2 + W_C^2) = (E_U)_T + (E_U)_X + (E_U)_C \quad (3.34)$$

Burada k_0 bir sabit, W_T^2, W_X^2, W_C^2 sırasıyla sıcaklık bozulmasından, yapısal bozulmadan ve kompozisyon (bileşimsel) bozulmadan kaynaklanan, mükemmel bir şekilde sıralanmış bir yapının elektrik potansiyelinden ortalama kare sapmalarıdır. $(E_U)_T, (E_U)_X, (E_U)_C$ sırasıyla sıcaklık bozulmasının, yapısal bozulmanın ve kompozisyon bozulmasının katkılarıdır. Sıcaklık bozulması temel olarak örgü termal titreşimlerinden kaynaklanmaktadır, $(E_U)_T \equiv (E_U)_{TV}$. Yapısal bozulmanın doğası içsel olabilir, yani boşluklar ya da kaymalar gibi yapının içsel kusurları sebebiyle olabilir, ya da stokiometriden sapma, doplama, iyon implantasyonu, hidrojenasyon gibi dış faktörler tarafından da uyarılabilir. Kompozisyon bozukluğuna karışık kristallerdeki atomik yer değiştirme sebep olur.

Örnek olarak, süperiyonik $\text{Cu}_7\text{Ge}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_{51}$ karışık kristalinde Urbach soğurma kenarı parametreleri üzerinde farklı tip bozuklukların etkisini düşünebiliriz [74]. Örgü termal titreşimlerinden kaynaklanan sıcaklık bozulması dışında, süperiyonik iletkenler önemli yapısal bozukluklar tarafından karakterize edilirler. Bu durum hareketli iyonların sayısı ile işgal edebilecekleri konumlar arasındaki eşitsizlikten kaynaklanmaktadır ve sabit alt örgü düzenli yapısını korurken sadece hareketli iyonların alt örgüsüne uygulanmaktadır. Yapısal bozulma iyonik iletkenlik mekanizmasıyla doğrudan ilgilidir. Yapısal bozulmanın derecesi, yani hareketli iyonlar için boşlukların miktarı, hızlı iyon taşınımının mekanizmasını ve etkinliğini belirler. Süperiyonik fazda yapısal bozukluk iki kısımdan oluşur; dinamik yapısal bozukluk $(E_U)_{X,dyn}$ ve statik yapısal bozukluk $(E_U)_{X,stat}$ [57]:

$$(E_U)_X = (E_U)_{X,dyn} + (E_U)_{X,stat} \quad (3.35)$$

Bu denklem oldukça keyfidir, çünkü dinamik yapısal bozukluk $(E_U)_{X,dyn}$ bu denklemdeki gibi yapısal bozuklukla $(E_U)_X$ ya da aşağıdaki gibi sıcaklıkla-İlgili bozulmayla $(E_U)_{TR}$ ilişkilendirilebilir.

$$(E_U)_{TR} = (E_U)_{TV} + (E_U)_{X,dyn} \quad (3.36)$$

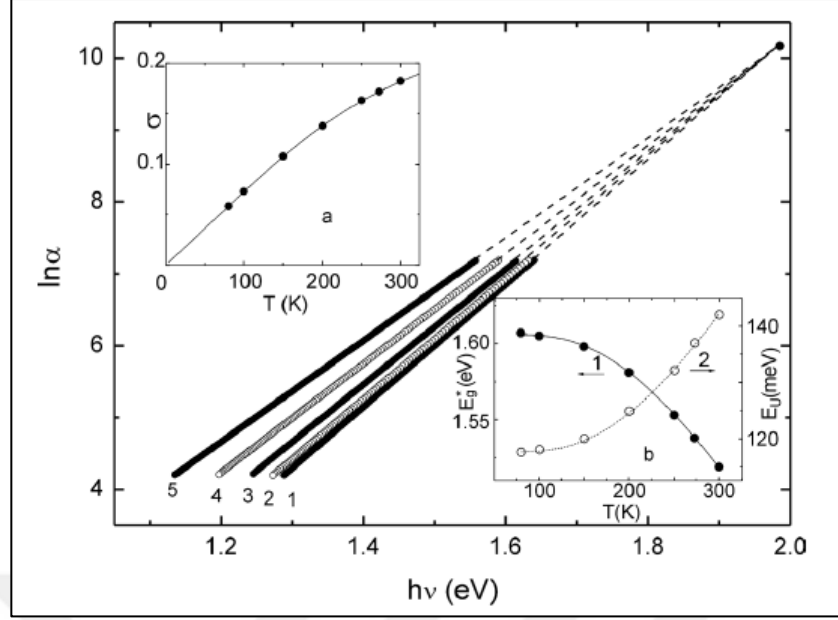
Burada $(E_U)_{TV}$ örgü termal titreşimlerinin katkısına karşılık gelir. En son belirtilen iki denklem kullanılarak Urbach enerjisi şu formda yazılabilir [42]:

$$E_U = (E_U)_{TR} + (E_U)_{X,stat} + (E_U)_C \quad (3.37)$$

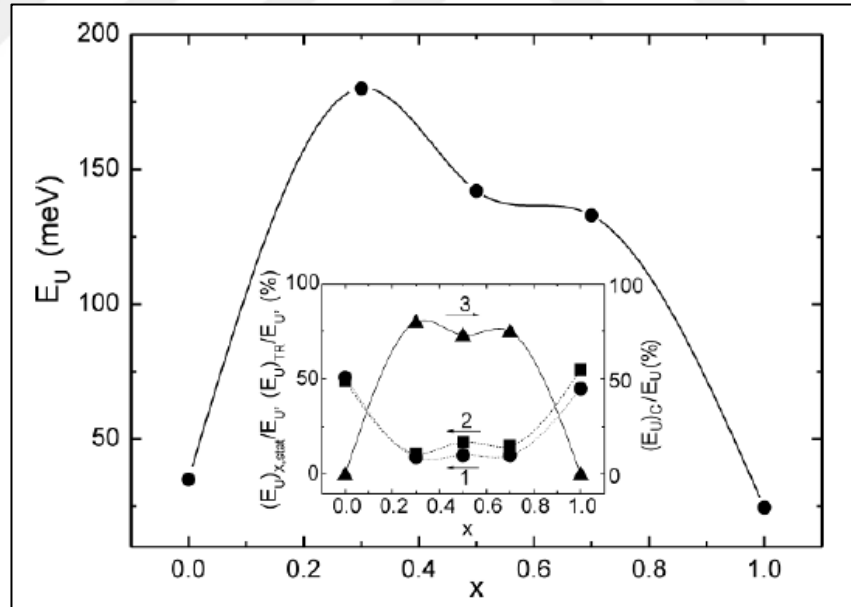
Yapısal kusurlardan kaynaklanan süperiyonik iletkenlerdeki statik yapısal bozulmanın bölgesel düzensiz elektrik alanların görünmesine yol açtığına ve bununda enerji bantlarının fazladan kirlenmesine sebep olduğuna dikkat edilmelidir. Süperiyonik fazda görünen dinamik yapısal bozukluk, iyonik taşınmaya katılan ve yüksek iyonik iletkenliği sağlayan hareketli bakır iyonlarının atlama (ing. hopping) hareketi ile ilgilidir.

Urbach soğurma kenarı, $Cu_7Ge(S_{1-x}Se_x)_5I$ karışık kristalleri için tipik, yükseklik parametresinin sıcaklık bağılıklarına karşılık şekil 3.10 da $Cu_7Ge(S_{0,5}Se_{0,5})_5I$ için sunulmuştur, optik sözde-enerji E_g^* ve Urbach enerjisi E_U şekil 3.10 da ek olarak gösterilmiştir [42].

Urbach enerjisinin kompozisyon bağılılığı Urbach soğurma kenarı parametrelerinde farklı tip bozuklukların etkisini incelemek için kullanılabilir. Urbach enerjisindeki farklı tip bozuklukların katkılarının eşitlik, bağımsızlık ve eklenebilirlik hesabı ile, [59]' de geliştirilen prosedüre göre kompozisyon bozukluğu, sıcaklıkla-İlgili bozukluk ve statik yapısal bozukluğun katkılarında biri ayrıştırılabilir. Saf kristallerde, sadece statik yapısal bozukluk $(E_U)_{X,stat}$ ile sıcaklıkla-İlgili bozukluk $(E_U)_{TR}$ Urbach enerjisine E_U katkıda bulunur. Bundan dolayı Cu_7GeS_5I kristalinde 300K'de E_U da yukarıda belirtilen türdeki bozuklukların göreceli katkısı neredeyse eşittir. Oysaki Cu_7GeSe_5I kristalindeki $(E_U)_{TR}$ ' nin katkısı $(E_U)_{X,stat}$ ' in katkısını aşıyor [42].



Şekil 3.10: 80K (1), 150K (2), 200K (3), 250K (4), 300K (5) sıcaklıklarında $\text{Cu}_7\text{Ge}(\text{S}_{0.5}\text{Se}_{0.5})_5\text{I}$ karışık kristali için Urbach soğurma kenarının spektral bağılılığı. İlaveten yükseklik parametresinin σ sıcaklık bağılılığı (a), optik sözde-enerji E_g^* (1b) ve Urbach enerjisi E_U (2b) gösterilmektedir.



Şekil 3.11: $\text{Cu}_7\text{Ge}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{I}$ karışık kristali için Urbach enerjisinin E_U kompozisyon bağılılığı. İlaveten; statik yapısal bozukluğun (1), sıcaklıkla-İlgili bozukluğun (2) ve kompozisyon bozukluğunun (3) göreceli katkılarının Urbach enerjisine E_U kompozisyon bağılılıkları gösterilmiştir.

Artan selenyum içeriğine sahip olan $\text{Cu}_7\text{Ge}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{I}$ karışık kristallerinde, Urbach enerjisinin kompozisyon bağıllığında, kompozisyon bozukluğunun etkisine işaret eden bir maksimumun ortaya çıktığı şekil 3.11 de gösterilmiştir [42]. $\text{Cu}_7\text{Ge}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{I}$ karışık kristalleri için E_U içindeki $(E_U)_{X,stat}$, $(E_U)_{TR}$ ve $(E_U)_C$ katkılarının elde edilen kompozisyon bağıllıkları şekil 3.11’ de ek olarak gösterilmiştir. Artan selenyum içeriği ile, $x>0,5$ ’ te azalan ve $x<0,5$ ’ te artan $(E_U)_C$ ’ nin katkısına karşılık, $(E_U)_{X,stat}$ ve $(E_U)_{TR}$ ’ nin katkıları doğrusal bir şekilde $x<0,5$ ’ te azalır ve $x>0,5$ ’ te artar [42].

3.3.3. Amorf Malzemelerde Urbach Kuralı

Amorf malzemelerdeki optik soğurma kenarı, sıcaklık ve spektral davranışı geniş bir sıcaklık aralığında Urbach kuralı ile belirtilen [75 - 77] veya sınırlı bir sıcaklık aralığında Urbach kuralı ile belirtilen [78] ya da Urbach’ a hiç uymayan kirli bir eksponansiyel kuyruğun varlığı ile karakterize edilir. İlk durumda kristallerin aksine amorf yarıiletkenler için soğurma kenarı daha fazla kirlenmiş ve soğurma kenarı eğrisinin sıcaklık bağıllığı daha az belirgindir [44 - 47]. Ayrıca, $\sigma_0 < 1$, bu durum yapısal bozukluk yüzünden elektron öz-yerelleştirmenin kanıtıdır. Sonraki iki durumda optik soğurma kenarı izlerinin spektral bağıllığının eğimi, sınırlı bir sıcaklık aralığında veya inceleme altındaki tüm sıcaklık aralığında sıcaklıkla değişmeden kalır ve sıcaklıkla paralel bir kırmızıya-kayma gözlenir. Yukarıda belirtilen spesifik davranışı, modifiye edilmiş bir Urbach kuralıyla açıklamak için aşağıdaki denklem dikkate alınabilir [76]:

$$\alpha(h\nu, T) = \alpha_{nc} \cdot \exp \left[\frac{h\nu}{E_{nc}} - \frac{T}{T_0} \right] \quad (3.38)$$

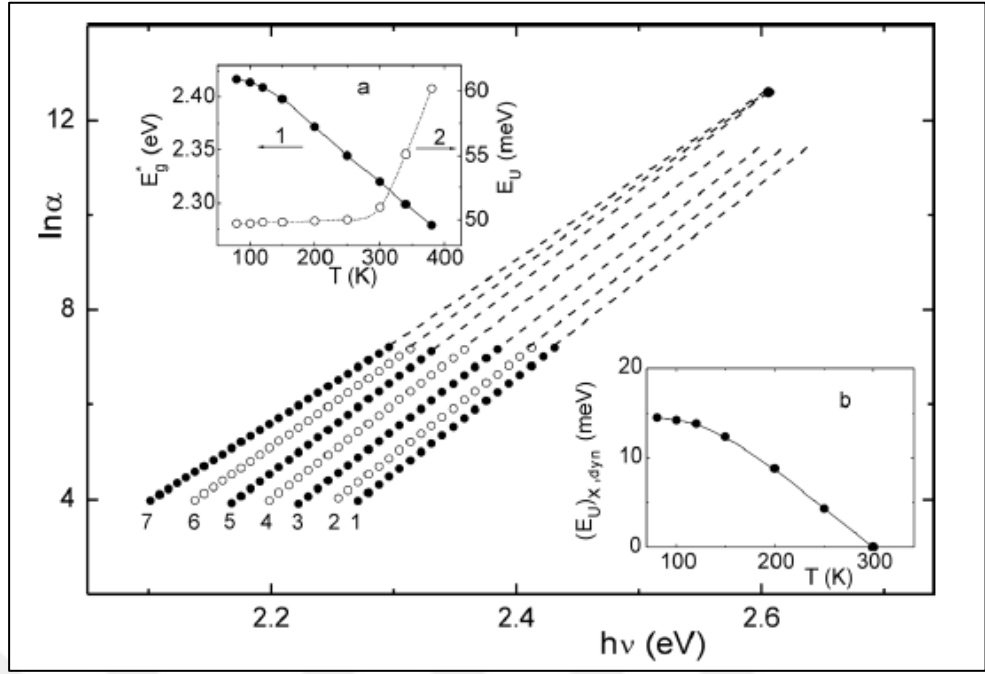
α_{nc} bir sabit, T_0 karakteristik bir sıcaklık, $1/E_{nc}$ soğurma katsayısı spektral bağıllığının sıcaklıktan bağımsız logaritmik eğimidir, $E_{nc} \equiv E_U$. Bu denklemin temel dezavantajı, düşük sıcaklıklarda eksponansiyel soğurma kenarının sıcaklık davranışı tanımlaması için uygulanamaz olmasıdır [76].

Amorf sistemlerde yapısal bozukluğun statik ve dinamik bileşenlerinin eşdeğerliğine göre optik soğurma kenarı bölgesindeki soğurma katsayısının genel eksponansiyel bağıllığının sınırlayıcı durumları olduğu gösterilmiştir [76]. Yapısal bozukluğun statik ve dinamik bileşenlerinin katkılarının ayrışma formalizmi

kullanılarak, kısa ve orta menzilli düzen varlığına göre, As_2S_3 camında soğurma kenarının Urbach davranışı [78]' de açıklanmıştır.

Camsı As_2S_3 için optik soğurma kenarı incelemeleri iki sıcaklık bölgesinin varlığını gösterir [78]; birincisi $80K \leq T < 300K$ sıcaklık aralığındaki kenarın paralel kırmızıya-kayma bölgesi, ikincisi $T \geq 300K$ (şekil 3.12) sıcaklıklarda soğurma kenarının Urbach davranışının bölgesi. As_2S_3 ' teki optik soğurma kenarının paralel kırmızı-kayması ve buna bağlı olarak Urbach enerjisinin sıcaklık değişmezliğinin atomik düzendeki orta menzil düzenin yokluğuyla ilgili olduğu şekil 3.12' de ek olarak gösterilmiştir [42]. Kısmen bozuk süperiyonik iletkenlerde olduğu gibi, tamamen bozuk camlardaki yapısal düzensizlik, dinamik yapısal bozukluk $(E_U)_{X,dyn}$ ve statik yapısal bozukluğun $(E_U)_{X,stat}$ bir toplamı olarak sunulabilir. Statik yapısal bozukluğun $(E_U)_{X,stat}$ sıcaklıktan bağımsız katkısının, atomik düzendeki sadece kısa-menzil düzenin varlığı ve uzun-menzil düzenin yokluğundan kaynaklandığına, dinamik yapısal bozukluğun sıcaklıktan bağımsız katkısının $(E_U)_{X,dyn}$ orta-menzil düzen yokluğuyla ilgili olduğuna dikkat edilmelidir. Düşük sıcaklıkta camsı As_2S_3 yarıiletkendeki atomik düzende sadece kısa-menzilli düzen mevcuttur, sıcaklık arttıkça $(E_U)_{X,dyn}$ katkısı azalır, orta-menzil düzenin kademeli oluşumuyla sonuçlanır. $(E_U)_{X,stat}$ ' in değişmez katkısında sıcaklık bozukluğunun $(E_U)_{TV}$ artan katkısıyla birlikte dinamik yapısal bozukluğun $(E_U)_{X,dyn}$ katkısındaki düşüş, soğurma kenarının paralel kırmızıya-kaymasının yanı sıra, sırasıyla $(E_U)_{TR}$ ' nin ve Urbach enerjisinin sıcaklık değişmezliğine yol açar. $T \geq 300K$ ' de $(E_U)_{X,dyn} = 0$ ve Urbach enerjisindeki artış sıcaklık bozukluğu katkısının artmasıyla tanımlanır [78].

Bu nedenle, optik soğurma kenarının Urbach davranışının inceleme altındaki bütün sıcaklık bölgesinde gözlemlendiği amorf malzemelerde, bu sıcaklık bölgesinde hem orta-menzil hem de kısa-menzil düzen mevcuttur. Aynı zamanda, bütün sıcaklık bölgesindeki Urbach olmayan davranış, orta-menzil düzen yokluğunda sadece kısa-menzil düzenin varlığını yansıtır.



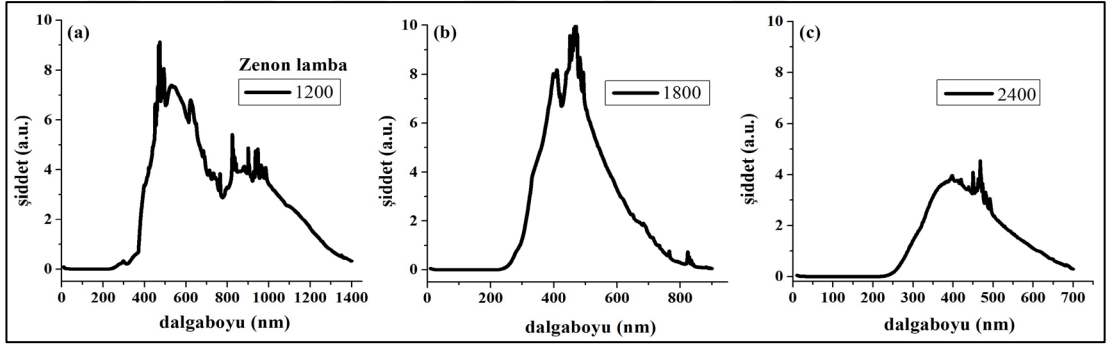
Şekil 3.12: 80K (1), 150K (2), 200K (3), 250K (4), 300K (5), 340K (6), 380K (7) sıcaklıklarındaki As_2S_3 camı yarıiletken için logaritmik soğurma katsayısının spektral bağılılıkları. İlaveten optik sözde-enerjinin E_g^* (a1), Urbach enerjisinin E_U (a2) ve dinamik yapısal bozukluğun katkısının $(E_U)_{X,dyn}$ (b) sıcaklık bağılılıkları gösterilmektedir.

4. DENEYSEL DÜZENEK VE YÖNTEM

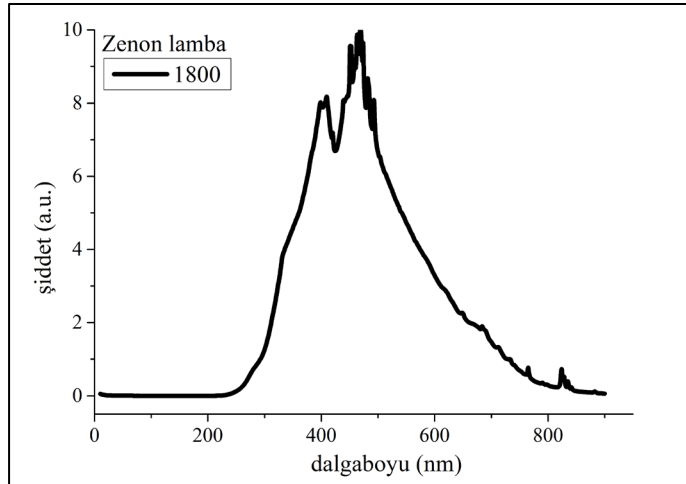
4.1. Cihazlar

4.1.1. Triax 550 UV-VIS-IR Spektrometre

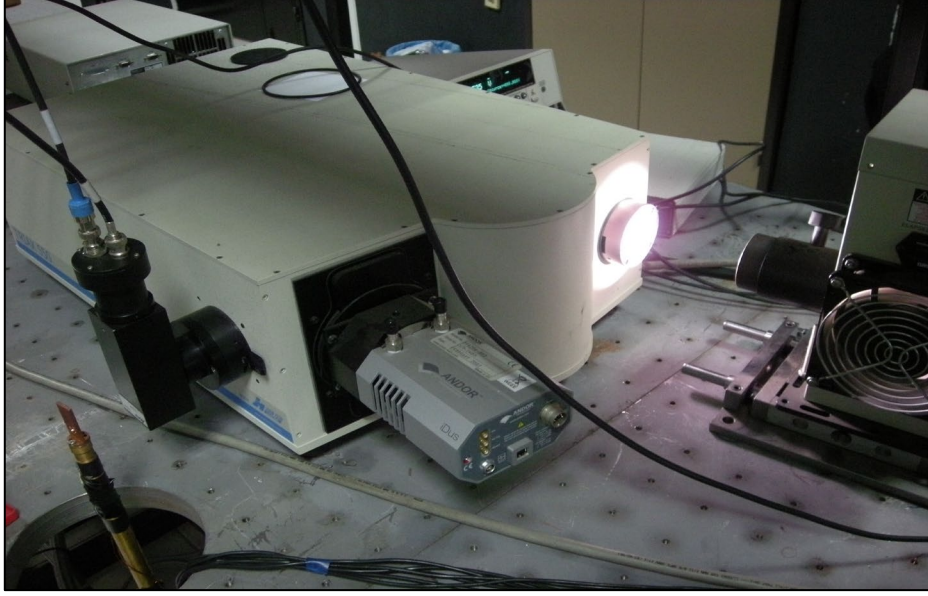
Bu cihaz şekil 4.1'te spektrumu gösterilen 1200 çizgi/mm, 1800 çizgi/mm ve 2400 çizgi/mm olmak üzere üç farklı kırınım ızgarasına sahip bir monokromatördür (şekil 4.3). Deneyde kullandığımız lambanın UV bölgedeki uzantısı diğerlerine kıyasla daha belirgin ve görünür bölgedeki şiddetinin yüksek olmasından dolayı deneysel çalışmalarımıza daha uygun olan 1800 çizgi/mm'lik ızgarayı kullandık (şekil 4.2).



Şekil 4.1: Lambanın 1200 çizgi/mm (a), 1800 çizgi/mm (b) ve 2400 çizgi/mm (c) farklı kırınım ızgaraları için spektrumu. En çok ışımaların 400-500 nm aralığında olduğu görülmektedir.



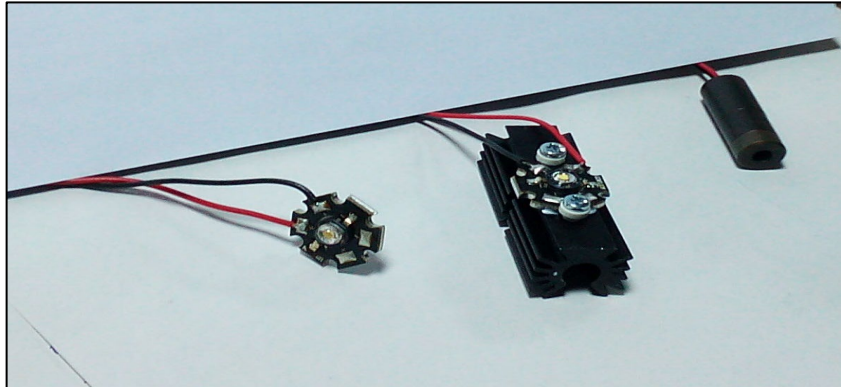
Şekil 4.2: Lambanın 1800 çizgi/mm kırınım ızgarası için spektrumu.



Şekil 4.3: Soldan sağa doğru kreostatın üst kısmı, monokromatöre bağlı fotoçoğaltıcı, monokromatör ve lamba.

4.1.2. Thermo Oriel Zenon Lamba ve Işık Kaynakları

Thermo Oriel Zenon lamba, 300 W gücüne kadar çıkabilen, beyaz renkte ışık üreten, şekil 4.5’de gösterilmekte olan ana ışık kaynağımızdır. Lambanın gövdesi en iyi performans için dahili bir ateşleyici kart ve arka reflektör içerir. Lamba için güvenli bir çalışma sıcaklığı sağlayan dahili bir soğutma fanı mevcuttur. Şekil 4.4’de gösterilen beyaz LED, soğutuculu beyaz LED ve kırmızı yarıiletken lazer, spektral ölçümler dışında, ışık altında soğutma vb. deneylerde kristali uyarmak adına kullandığımız ışık kaynaklarıdır.



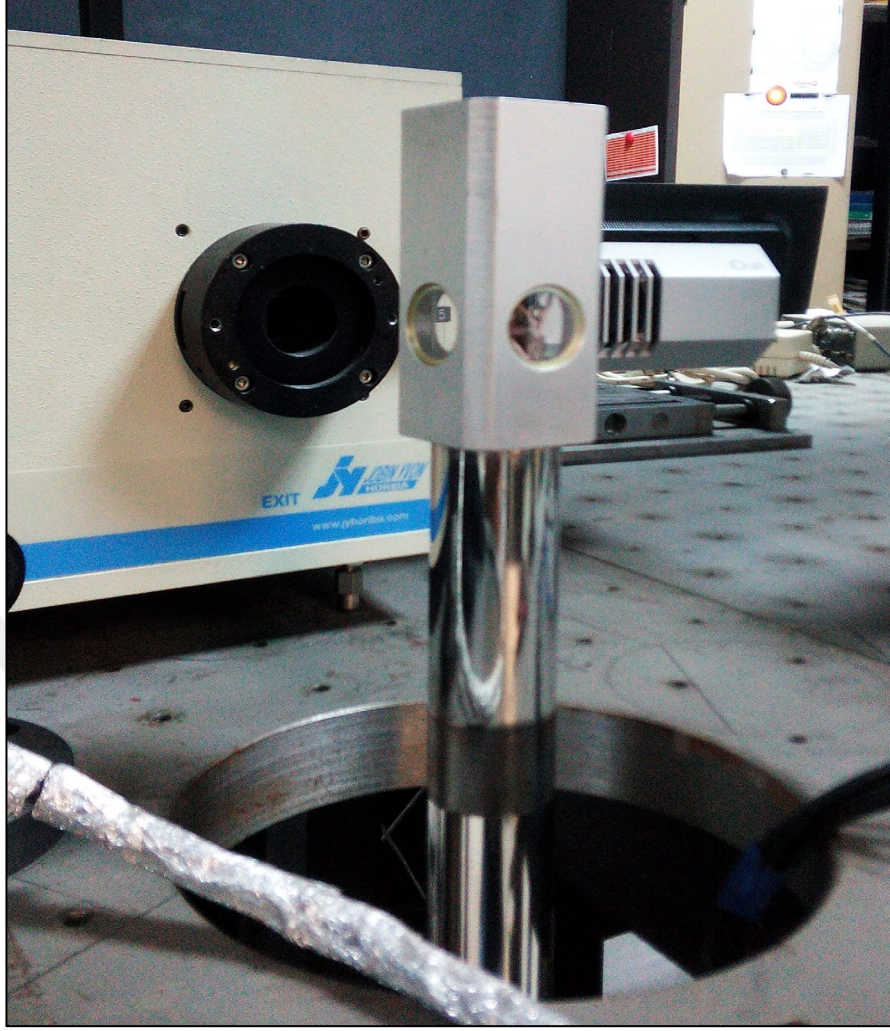
Şekil 4.4: Beyaz LED, soğutuculu beyaz LED ve kırmızı yarıiletken lazer.



Şekil 4.5: Thermo Oriel Zenon Lamba

4.1.3. Optik Kreostat

DeneYler sıcaklık kontrolü altında gerçekteşeeğinden sistemin dış etkilerden yalıtılması amacıyla kreostat kullanılmaktadır. Kreostatın içi yaklaşık 1 militorluk düşük basınçta tutulmaktadır. Kreostatın üst kısmı, dört bir tarafında 18 mm çapında birer pencere bulunan, numunenin konulduğu yerdir ve şekil 4.6'da gösterildiği gibi monokromatörün çıkış penceresi önünde bulunmaktadır. Kreostatın alt kısmında helyum pompası bulunmaktadır. Bir kapalı devre helyum pompasından kreostata gelen helyum kreostatın alt kısmındaki bu pompa sayesinde numuneye kadar taşınır.



Şekil 4.6: Kreostatın pencereci üst kısmı.

4.1.4. Keithley 6517 A Elektrometre

Şekil 4.7’da gösterilen elektrometre, elektriksel ölçümlerde aynı anda hem voltaj uygulayıp hem de akım ölçebilmektedir. Elektrometre 10^{-15} A seviyesindeki akımları dahi ölçebilmektedir. Çok küçük sapmalarla doğru akım gerilimi uygulayabilir.

4.1.5. Hamamatsu R-1527 Fotoçoğaltıcı (PMT)

Monokromatörden gelen ışığın sinyalini voltaja dönüştürmek amacıyla özellikle optik soğurma ölçümlerinde kullanılan fotoçoğaltıcı şekil 4.8’de gösterilmektedir.



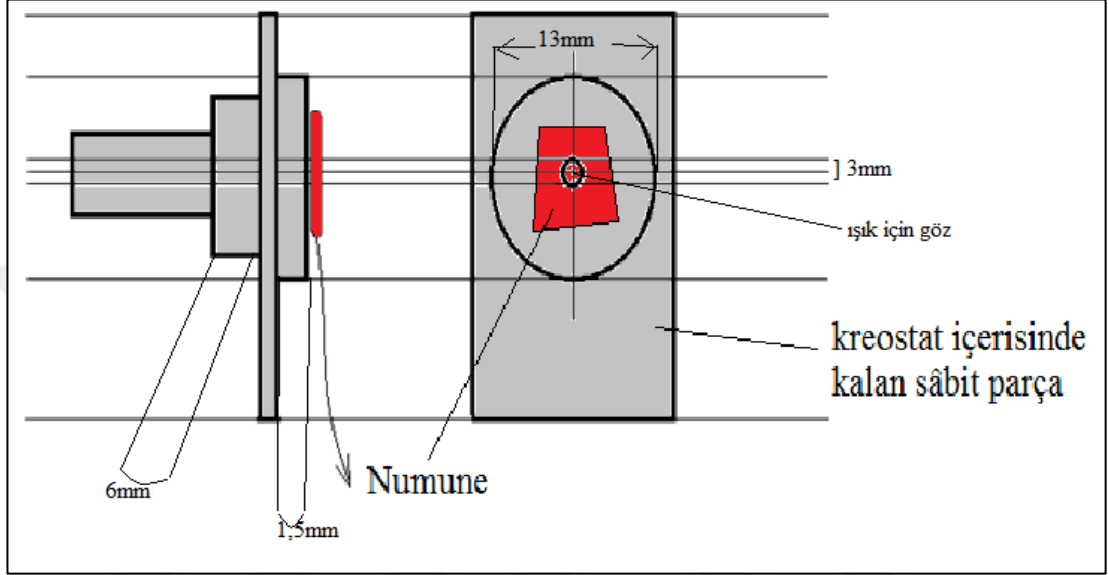
Şekil 4.7: Keithley 6517A Elektrometre



Şekil 4.8: Monokromatöre bağlı fotoçoğaltıcı.

4.1.6. Lakeshore 340 Sıcaklık Kontrol Ünitesi

Hassasiyeti 0,005K olan, sıcaklığın artış miktarı vb. sıcaklık parametrelerinin kontrolünü sağlamak amacıyla Lakeshore 340 sıcaklık kontrol ünitesi kullanılmaktadır.



Şekil 4.9: Numune tutucunun şekli, ölçüleri ve numunenin konumu.



Şekil 4.10: Somun-civata takımından yapılmış tutucular.

4.1.7. Numune Tutucular

Optik özellikleri tespit edebilmek için numunenin soğurma spektrumunu elde etmek gerekmektedir. Bunun için numuneyle ilgili önceki deneylerde optik ölçümlere has bir numune tutucu tasarlanmıştır. Şekil 4.9 ve 4.10'da gösterilen numune tutucu, ölçüm boyunca numunenin dış etkilere maruz kalmadan yerleştirildiği parçadır. Optik soğurma ölçümleri için kullandığımız tutucu, bakır bir somun-cıvata takımının simetri eksenine üzerine 3 mm'lik bir delik açarak elde edilmiş ve çok sayıda üretilmiştir. Bunun amacı numuneyi tutucudan sökmeye gerek kalmadan, çok sayıda numuneyle daha kolay soğurma ölçümleri yapabilmektir.

4.2. Deneysel Yöntem

Elektrik alan altında soğurma incelemelerinde aşağıdaki süreç takip edilmiştir.

Deneyler geniş sıcaklık aralığında yapıldığı için, (80K-300K), kreostat ortamının vakumlanması gerekmektedir. Bunun için Edwards RV8 model mekanik pompa kullanılmaktadır. Böylece 10^{-6} bar seviyesinde basınçlara erişilmektedir. Laboratuvarımızda Janis Research model kapalı devre He kreostatu kullanılmaktadır. Kreostatın uç kısmında, optik ölçümleri yapmak üzere dört tarafı camlı bir pencere bulunmaktadır.

Sıcaklık kontrolü, Lakeshore 340 model sıcaklık kontrol birimiyle sağlanmaktadır. Bunun için DT-470 tip sıcaklık sensörü kullanılmaktadır. Böylece ~ 1 mK hassasiyete ulaşılabilmektedir.

Optik ölçümlerinde ışık kaynağı olarak TermoOriol marka Zenon lamba kullanılmıştır. Lambanın gücü 300W civarındadır. Zenon lambanın spektrumu beyazımsıdır (Bkz Şekil 4.5). Biz çalışmamızda daha çok TlGaSe₂ kristalinin soğurma kenarı olan 600 nm civarında çalıştık. Beyaz ışık, Jobin Yvon Triax 550 model monokromatör yardımıyla renklerine ayrılmıştır. Burada spektral hassasiyet 0.5 Å'dır. Optik geçirgenlik sinyali, Hamamatsu R-1527 model PMT ile toplanmıştır. PMT ~ 1000 V ile beslenmiştir. PMT sinyali, Keithley 6517 A model elektrometre yardımıyla toplanmış ve bilgisayar kontrolünde derlenmiştir.

Alanlı soğurma ölçümleri yapılırken, oda sıcaklığındaki numune öncelikle vakumlanır. Vakum seviyesi ~ 10 mikron (1 mikron ~ 1 miliTorr) olunca, numuneye

gerilim uygulanır ve bu esnada numune soğutulur. Alan altında soğutma işlemi bitince numune üzerinden gerilim kaldırılır. Bir süre, yaklaşık 10 dakika, bu sıcaklıkta numunenin termodinamik dengeye ulaşması için beklenir. Daha sonra optik geçirgenlik deneyi önceden planlanan sıcaklıklarda tekrarlanır. Böylece geçirgenlik spektrumunun sıcaklık bağımlılığı elde edilmiş olur.

Geçirgenlik spektrumundan soğurma spektrumunu elde etmek için kristalin kalınlığı ölçülmelidir. Eğer geçirgenlik $T = \ln(I/I_0)$ ise, o zaman soğurma da

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{I}{I_0} \quad (4.1)$$

ile hesaplanır. Böylece $\alpha(T)$ eğrileri elde edilmiş olur.

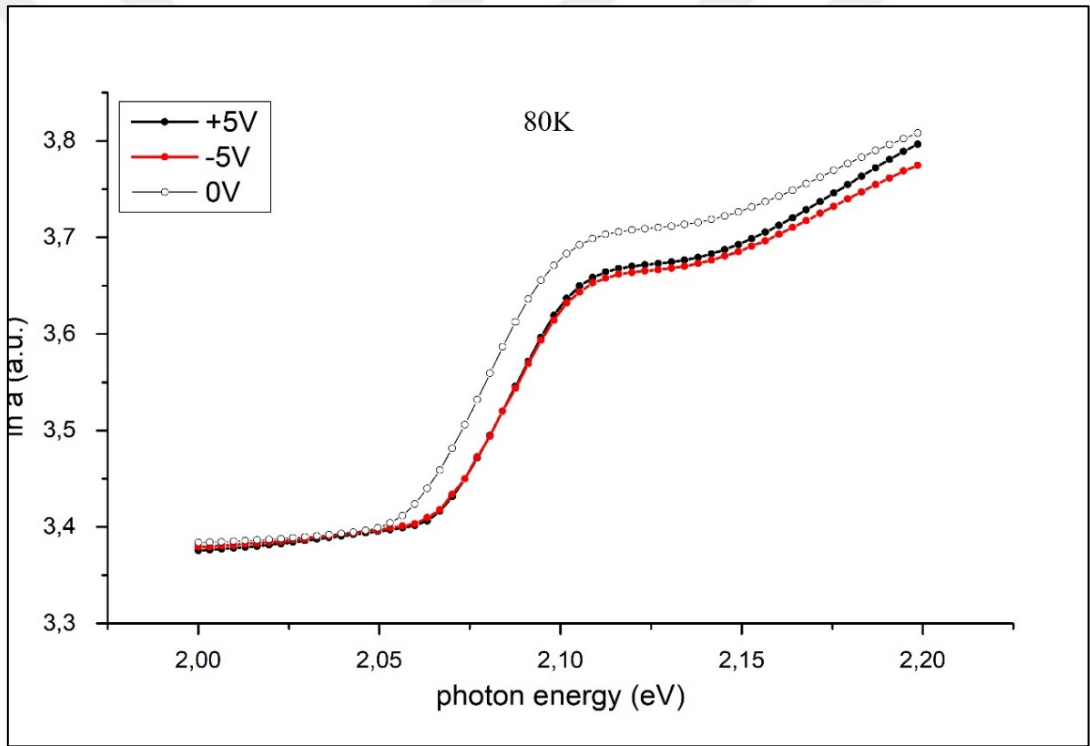
Bizim çalışmamızda ölçüm esnasında numune alana maruz bırakılmamıştır. Fakat incelenen kristallerin ferroelektriklik, faz geçişleri, hafıza etkisi gibi özelliklerinden, alan kaldırılrsa dahi üzerinde bir süre daha elektrik alanın etkisinin devam ettiği bilinmektedir [79]. Uygulanan elektriksel gerilim 0, ± 5 , ± 10 , ± 15 , $\pm 20V$ değerlerindedir. İncelenen numunede alan, katmanlara dik yönde uygulanmıştır. Bu yön, katmanlı TlGaSe₂ kristalinin c-eksenine paralel, dolayısıyla kristalografik katmanlarına dik yöndedir. Alan uygulanması için kristallere termal buharlaştırma yöntemiyle yaklaşık 2x2 mm²'lik altın kontaklar yapılmıştır. Teller, altın kontaklara gümüş pasta yardımıyla tutturulmuştur.

Elde edilen soğurma spektrumlarının anlamlandırılması için Urbach kuralı kullanılarak Urbach enerjisi E_U ve E_g parametreleri fit yoluyla hesaplanmıştır. Uygulanan elektrik alan sonucunda E_U , E_g 'de değişimler gözlemlenmiştir.

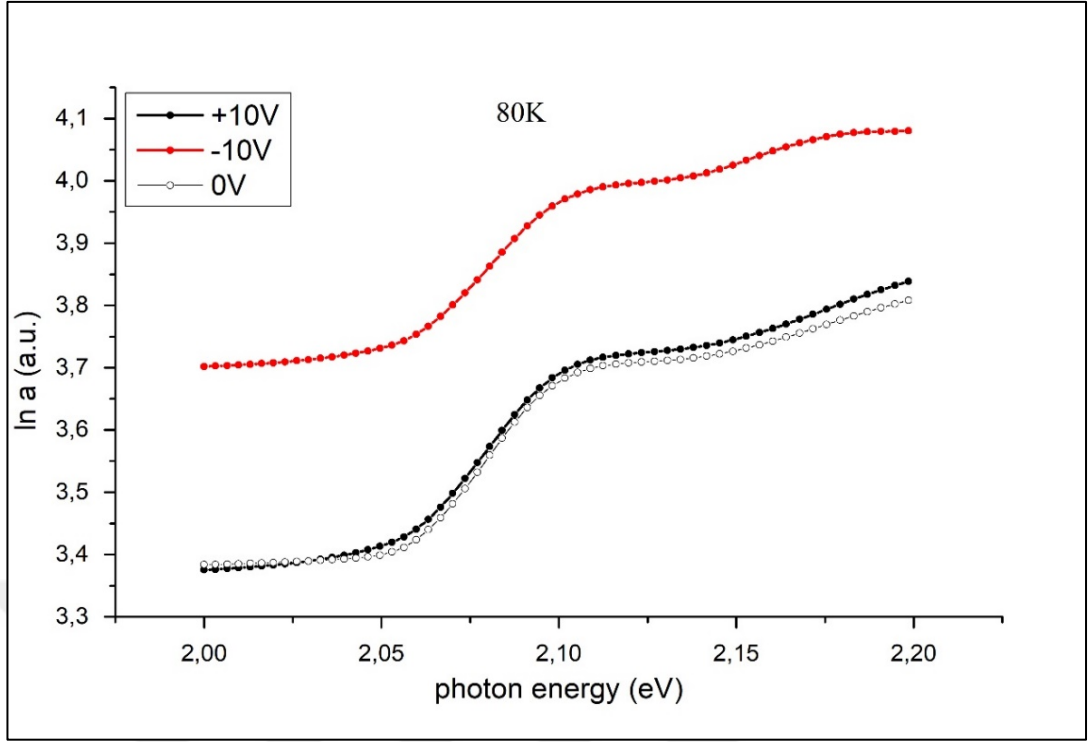
5. DENEYSEL VERİLER

5.1. Gömülü Alanlı (Polarize Olmuş) ve Alanlı (Polarize Olmamış) Ölçümlerin Karşılaştırmalı Soğurma Spektrumları

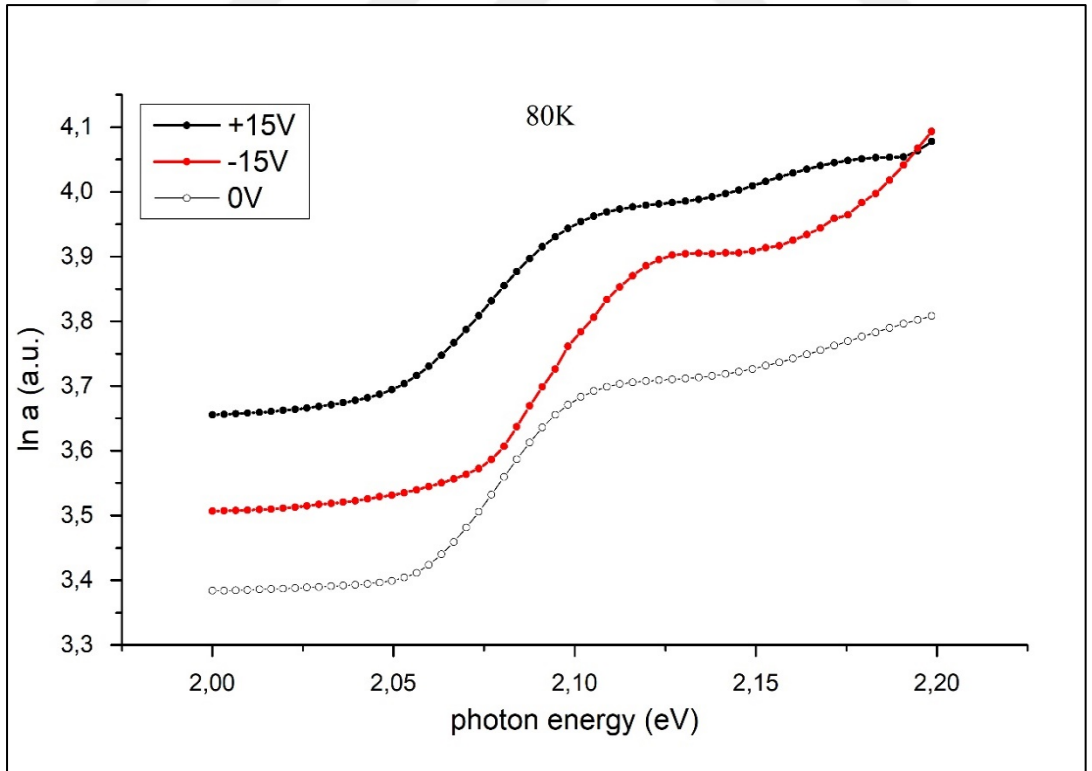
Bu kısımda numuneye önceden uygulanan gerilim değerlerinin logaritmik soğurma spektrumları alanlı ölçümlerden elde edilen spektrumla bir arada gösterilmiştir. Buradaki amaç alanlı ve alanlı ölçümlerin soğurma değerlerini karşılaştırmak ve yorumlayabilmektir.



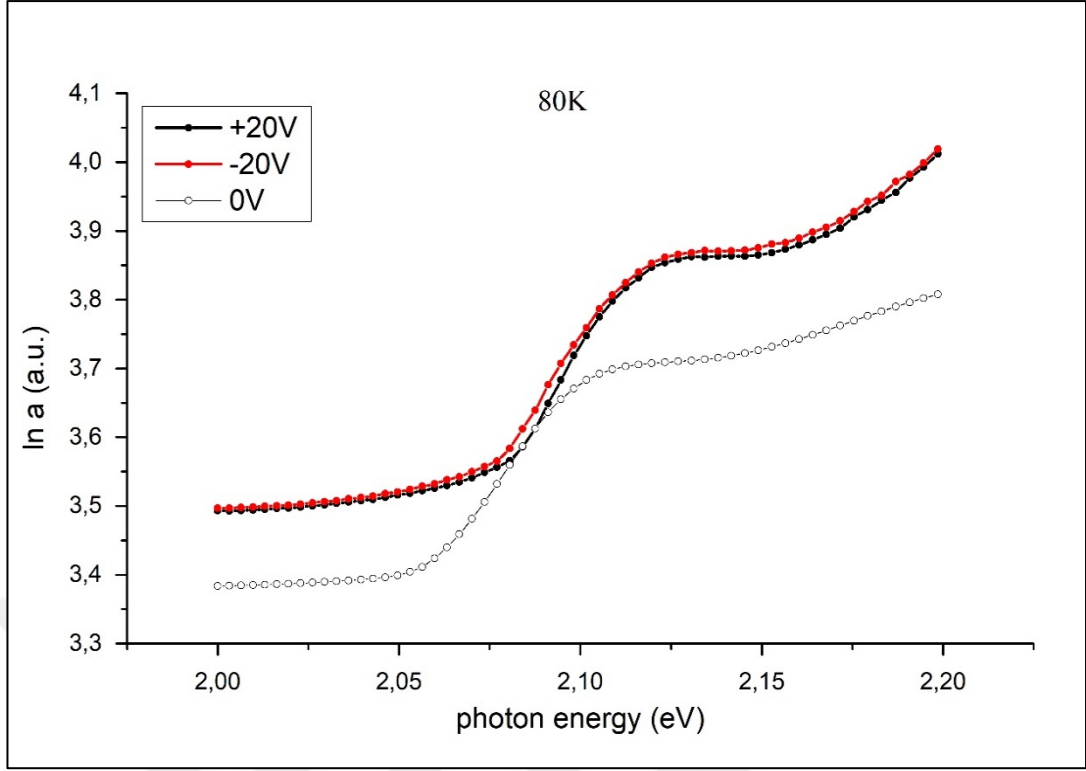
Şekil 5.1: 80K sıcaklıkta, +5V, -5V ve 0V dış gerilimlerinde TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.



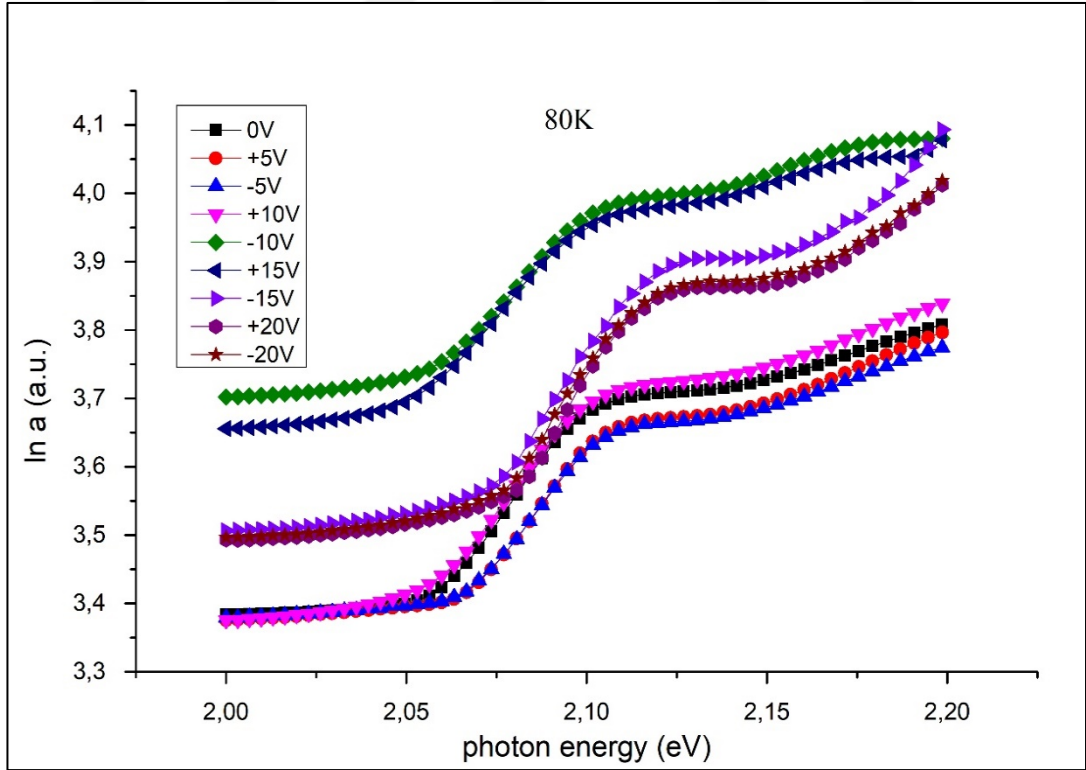
Şekil 5.2: 80K sıcaklıkta, +10V, -10V ve 0V dış gerilimlerinde TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.



Şekil 5.3: 80K sıcaklıkta, +15V, -15V ve 0V dış gerilimlerinde TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.



Şekil 5.4: 80K sıcaklıkta, +20V, -20V ve 0V dış gerilimlerinde TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.



Şekil 5.5: 80K sıcaklıkta, 0V, ±5V, ±10V, ±15V ve ±20V dış gerilim değerlerinde TlGaSe₂ kristalinin logaritmik soğurma spektrumu.

Şekil 5.1-5.4, 80K sıcaklığında TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumlarını göstermektedir. Kristalin logaritmik soğurma spektrumları hem elektrik alan yokluğunda 0V hem de numuneye gerilim uygulanıp daha sonra bu gerilim kaldırılarak hesaplanmıştır. Bu uygulanan dış gerilim değerleri $\pm 5V$, $\pm 10V$, $\pm 15V$ ve $\pm 20V$ olmak üzere sekiz farklı değerdir.

Şekil 5.6-5.9, 300K sıcaklığında TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumlarını göstermektedir. 80K sıcaklıkta uygulanan işlemler 300K sıcaklığı için tekrar edilmiştir

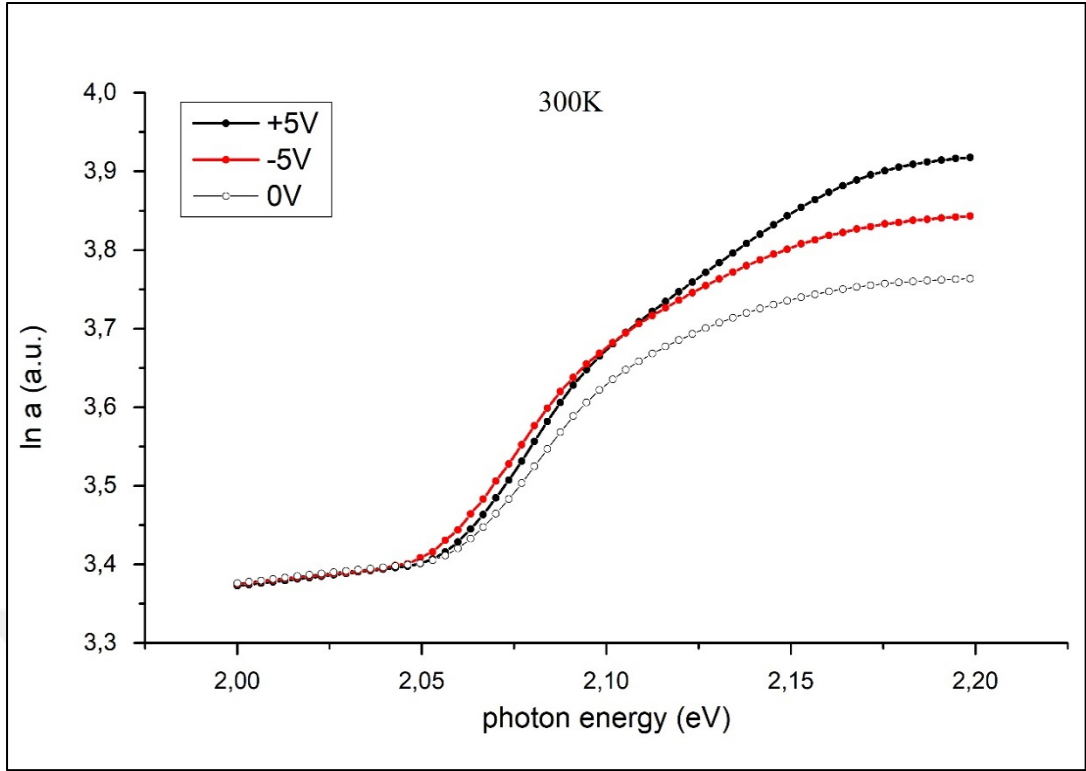
5.1.1.Deneysel Sonuçlar

Şekil 5.5'te 80K sıcaklıkta kristale önceden uygulanan tüm gerilim değerleri için hesaplanan logaritmik soğurma spektrumları bir arada gösterilmektedir. Uygulanan dış gerilimin amacı kristal içinde gömülü elektrik alanın oluşturulmasıdır. Gerilimin işareti numunenin ön yüzeyine yani ışık düşen yüzeyine göre belirlenmektedir. Örneğin +5V demek, kristalin ön yüzeyi (+) arka yüzeyi (-) anlamına gelmektedir ya da -10V demek kristalin ön yüzeyi (-) arka yüzeyi (+) demektir. Kısaca referans alınan yüzey kristalin ışık düşen yüzeyidir.

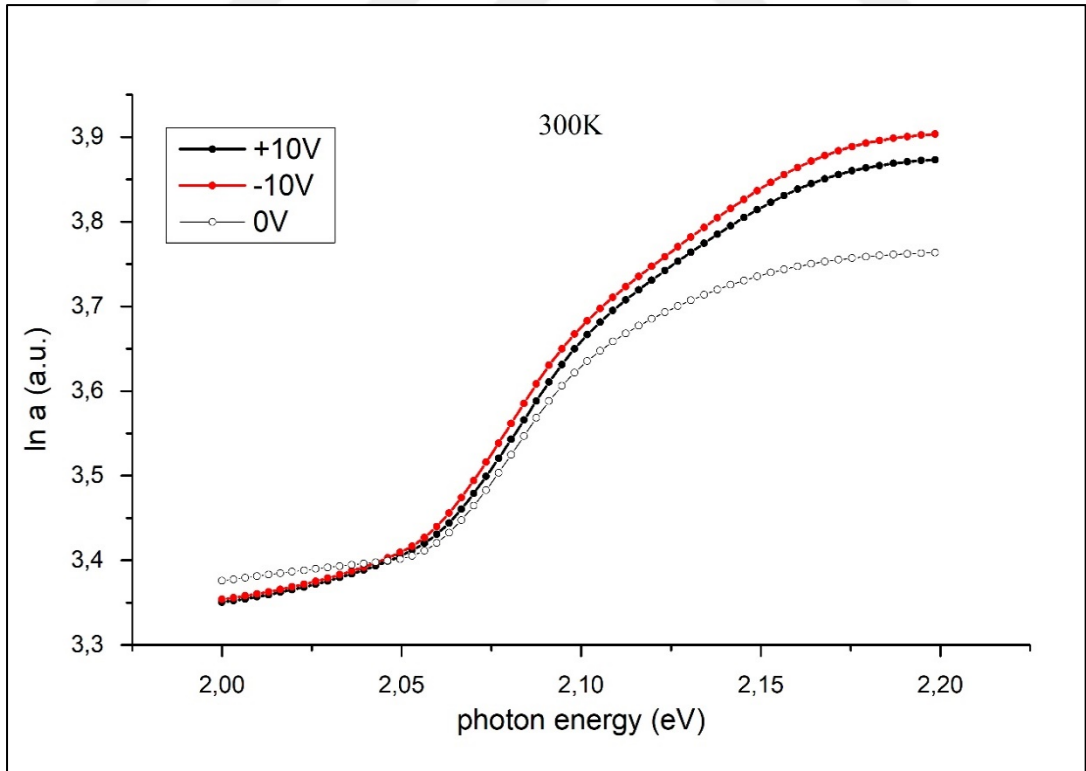
Burada -10V ve +15V dış gerilim değerlerinin, 80K sıcaklığında, yaklaşık 2,20 eV foton enerjisinin altındaki enerjiler için diğer dış gerilim değerlerine kıyasla daha yüksek logaritmik soğurma değerine sahip olduğu görülmektedir.

Şekil 5.10'da 300K sıcaklıkta, tüm dış gerilim değerleri için hesaplanan logaritmik soğurma spektrumları bir arada gösterilmektedir. Burada -15V ve -20V dış gerilim değerlerinin 300K sıcaklığında diğer dış gerilim değerlerine kıyasla daha yüksek logaritmik soğurma değerine sahip olduğu görülmektedir.

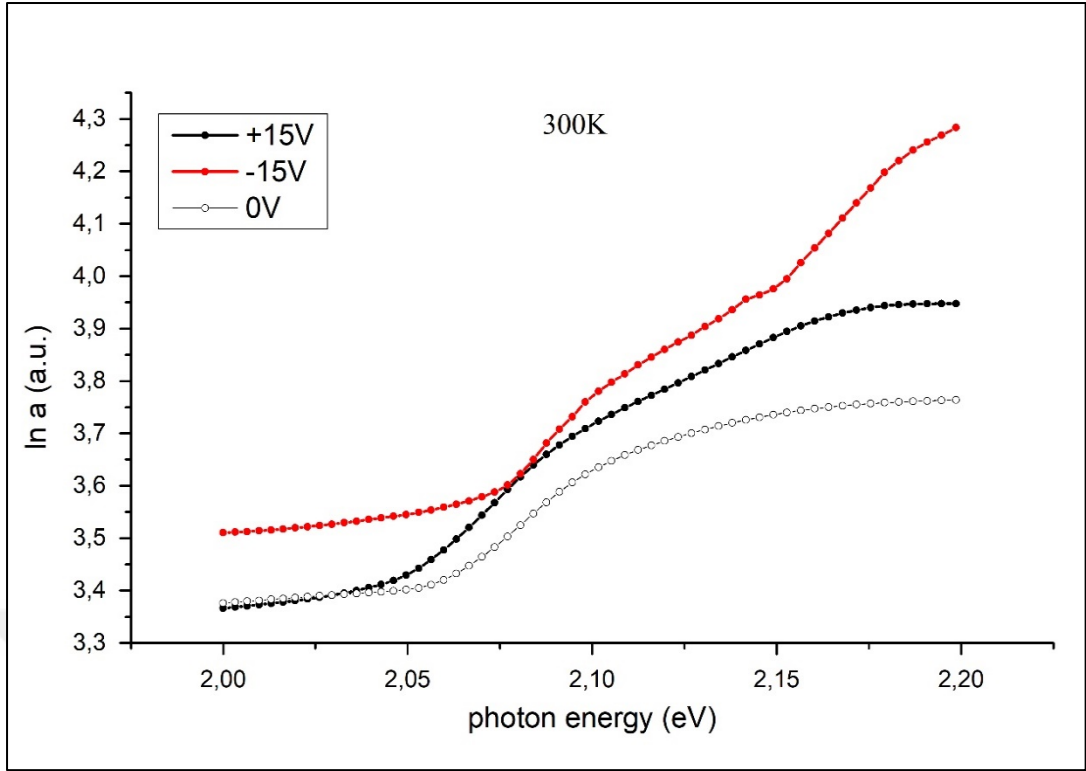
Şekil 5.5 ve şekil 5.10 kıyaslandığında -10V ve +15V dış gerilimleri dışındaki gerilimlerin logaritmik soğurma değerlerinin sıcaklık farkından yok denecek kadar az etkilendikleri görülmektedir. -10V ve +15V gerilim değerleri 300K sıcaklıkta 3,4 a.u logaritmik soğurma değerinin altındaki soğurma değerine sahipken 80K sıcaklıkta yaklaşık 3,65 – 3,7 a.u logaritmik soğurma değerlerine sahipler. Diğer dış gerilim değerleri ise her iki sıcaklık değerinde de yaklaşık 3,35 – 3,4 a.u logaritmik soğurma değerlerinin dışına çıkmamışlardır.



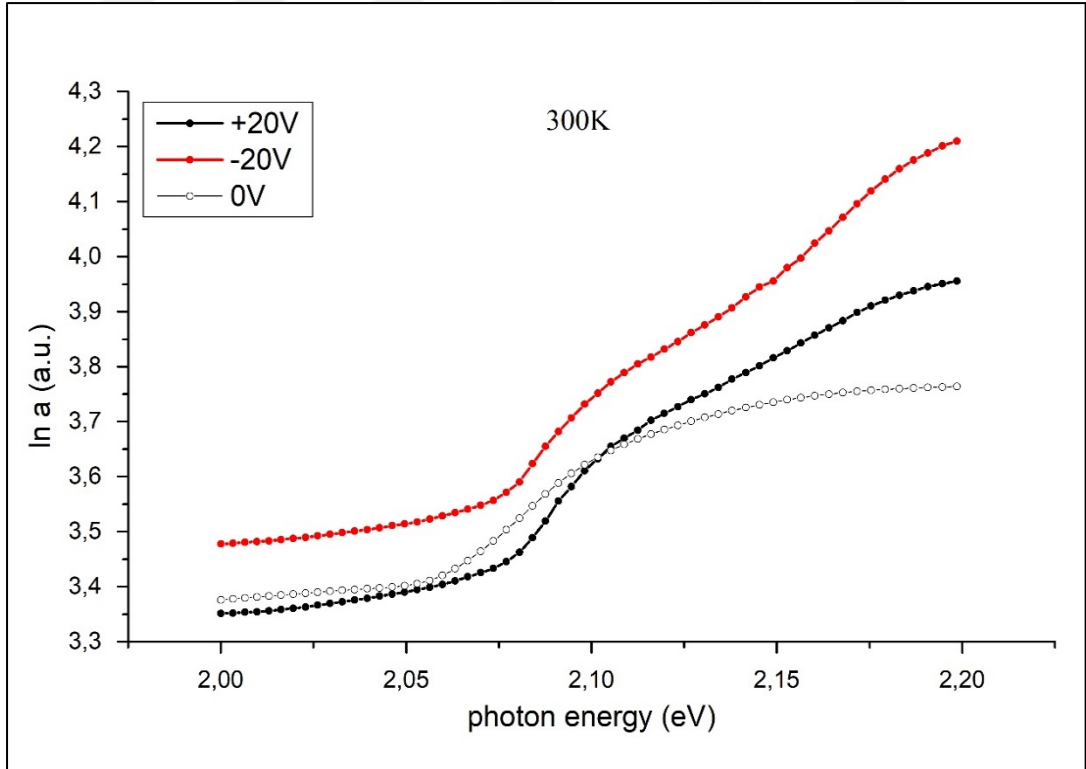
Şekil 5.6: 300K sıcaklığında, +5V, -5V ve 0V dış gerilimlerinde TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.



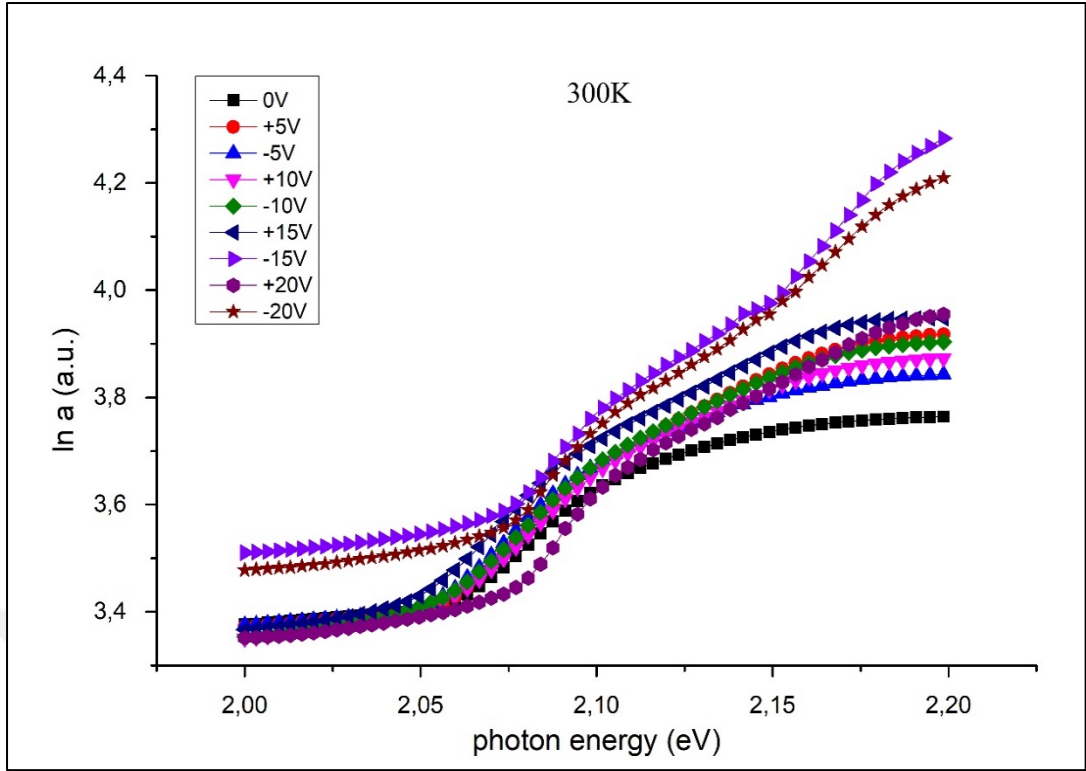
Şekil 5.7: 300K sıcaklığında, +10V, -10V ve 0V dış gerilimlerinde TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.



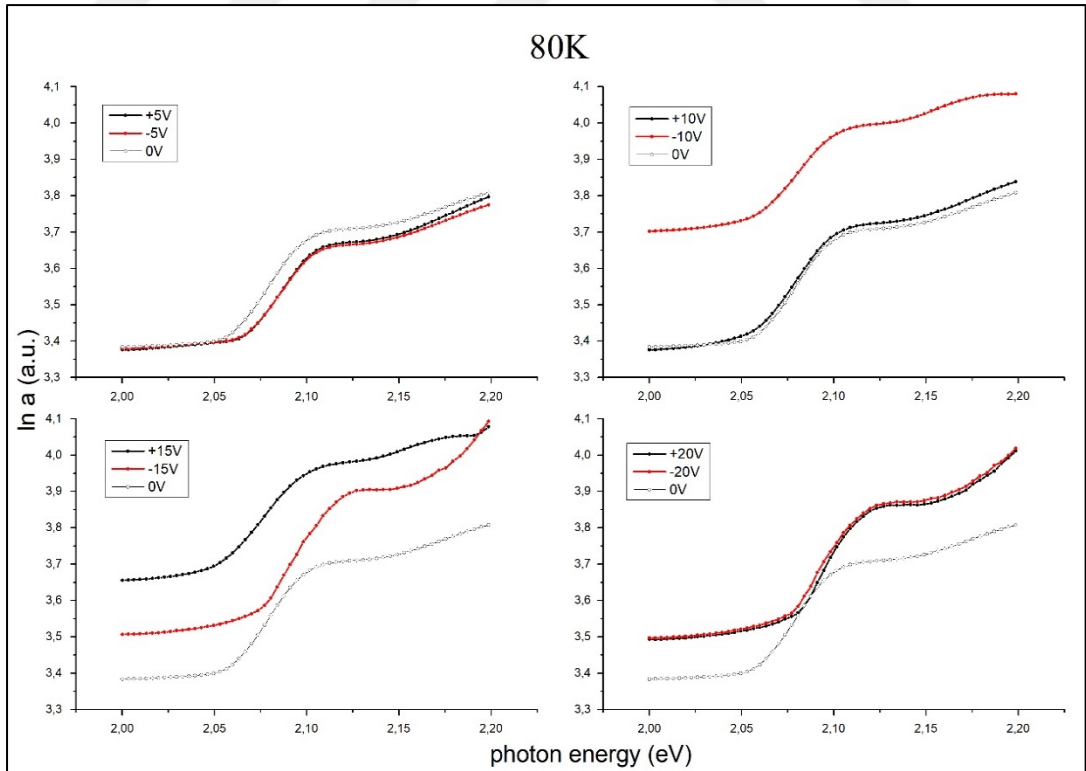
Şekil 5.8: 300K sıcaklığında, +15V, -15V ve 0V dış gerilimlerinde TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.



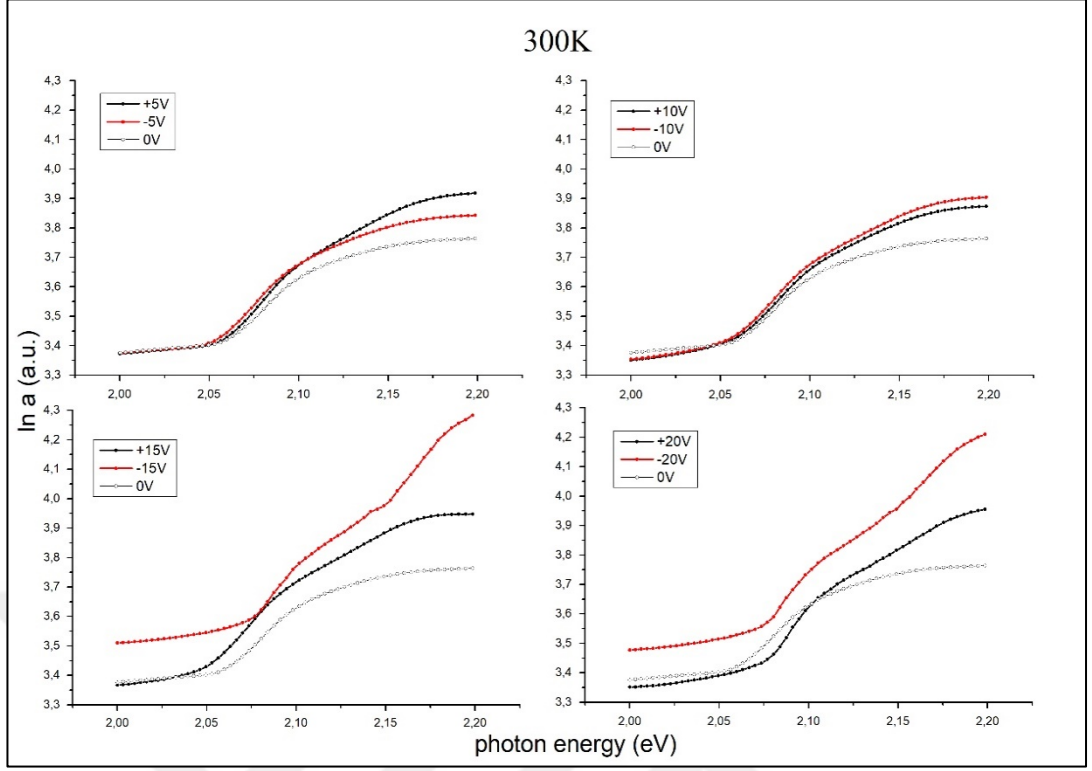
Şekil 5.9: 300K sıcaklığında, +20V, -20V ve 0V dış gerilimlerinde TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumu.



Şekil 5.10: 300K sıcaklığında, 0V, $\pm 5V$, $\pm 10V$, $\pm 15V$ ve $\pm 20V$ dış gerilim değerlerinde TlGaSe₂ kristalinin logaritmik soğurma spektrumu.



Şekil 5.11: 80K sıcaklığında, TlGaSe₂ kristalinin logaritmik soğurma spektrumlarının bir arada gösterimi.

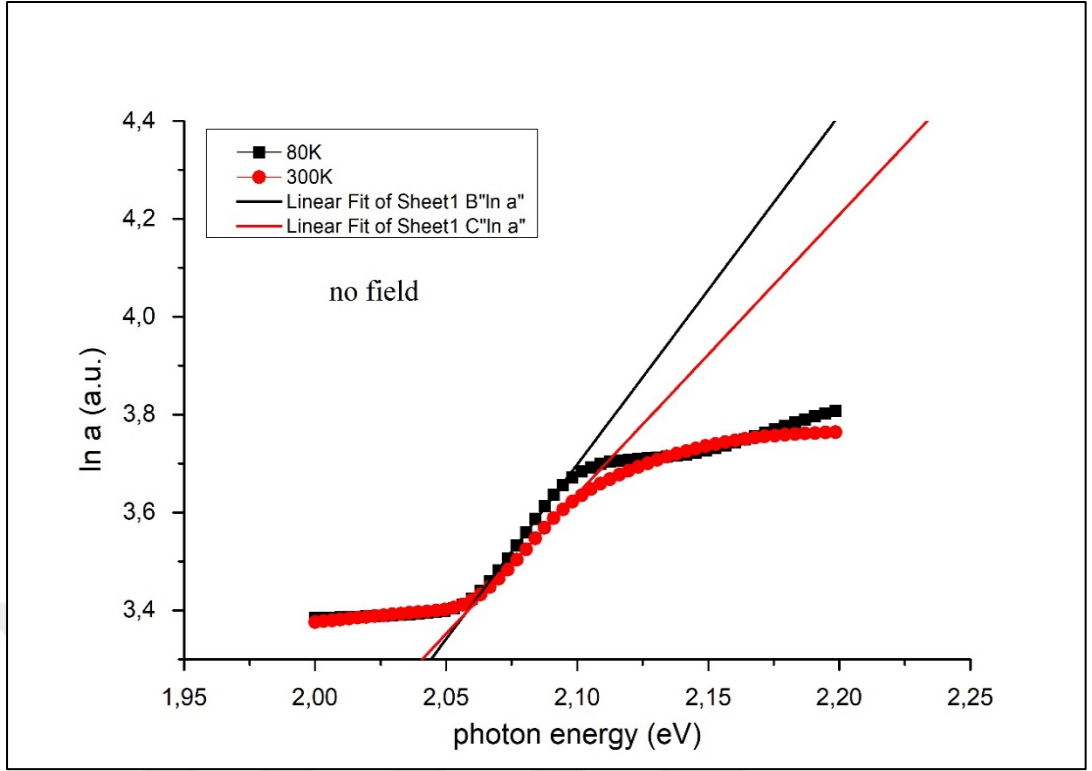


Şekil 5.12: 300K sıcaklığında, TlGaSe₂ kristali için logaritmik soğurma spektrumlarının bir arada gösterimi.

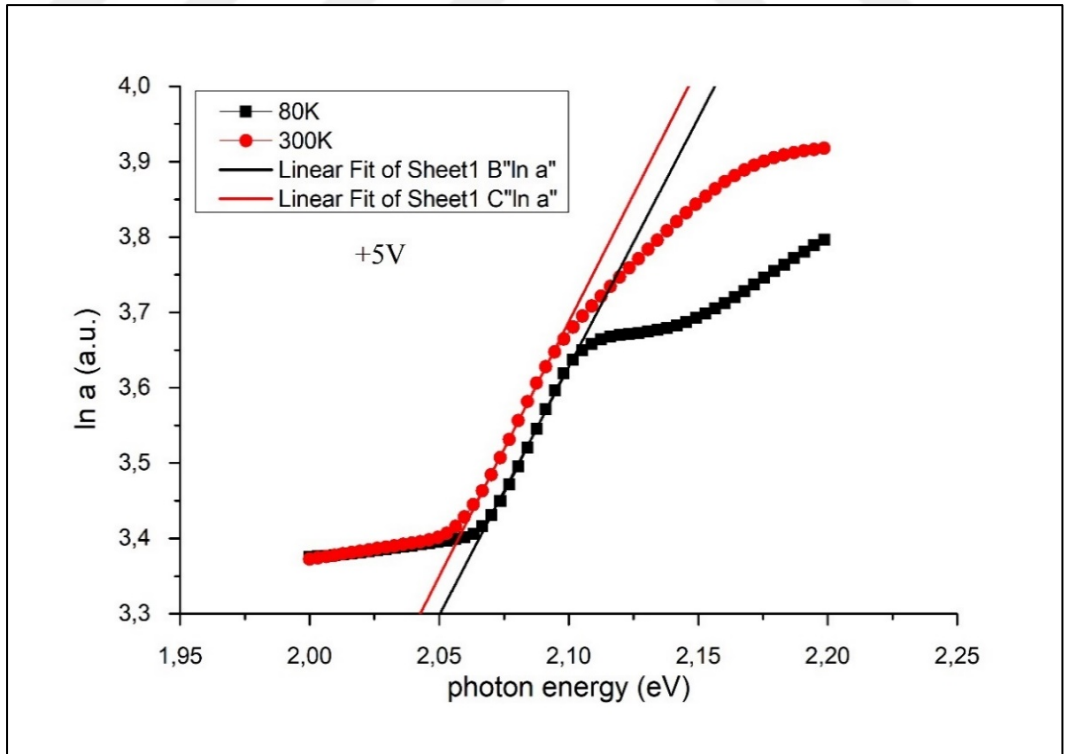
5.2. Tüm Gerilim Değerleri İçin Fit Edilmiş Soğurma Spektrumları

Bu kısımda, her bir gerilim değeri için 80K ve 300K sıcaklıklarındaki değerler tek bir grafikte gösterilecek şekilde ayrı ayrı logaritmik soğurma spektrumları fit edilmiştir. Buradaki amaç grafikleri fit ederek Urbach enerjilerini E_U elde etmektir. Böylece sıcaklığa bağlı E_U grafikleri elde edilebilir.

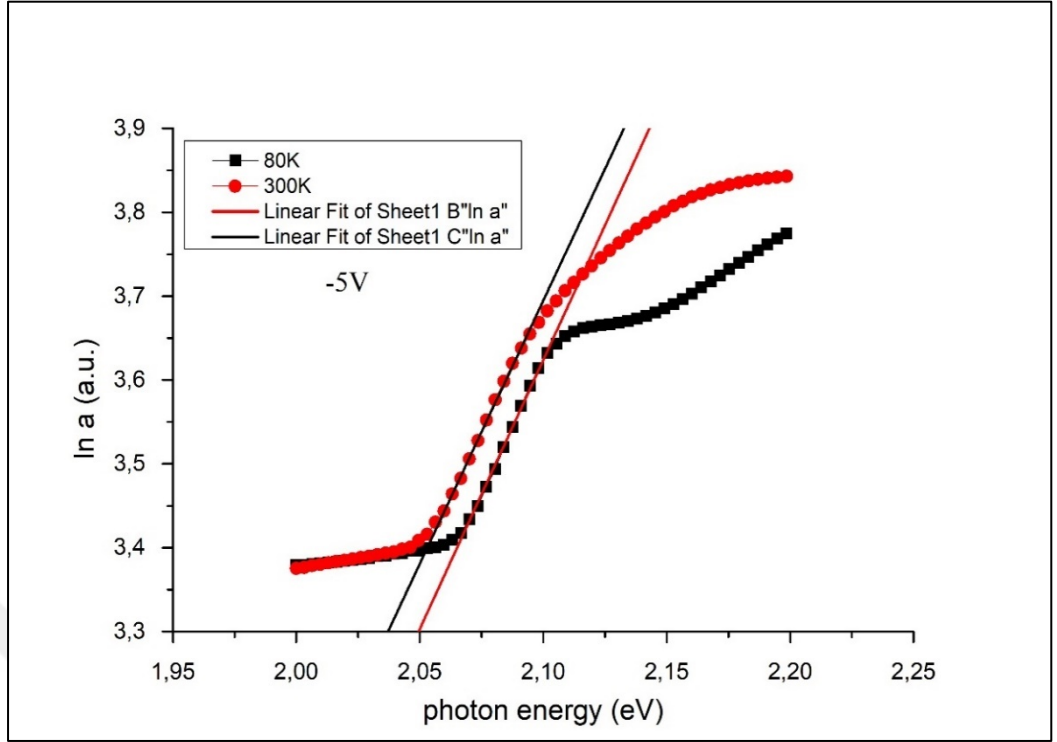
Buradaki grafikler TlGaSe₂ kristali için, 80K ve 300K sıcaklıklarında, sırasıyla 0V, +5V, -5V, +10V, -10V, +15V, -15V, +20V, -20V dış gerilim değerlerindeki logaritmik soğurma spektrumlarını ve fit edilmiş hallerini göstermektedir. Grafiklerdeki fitlerin eğimi bize Urbach enerjilerini E_U verecektir. Sıcaklığa bağlı Urbach enerji grafikleri de bir sonraki bölümde gösterilmektedir.



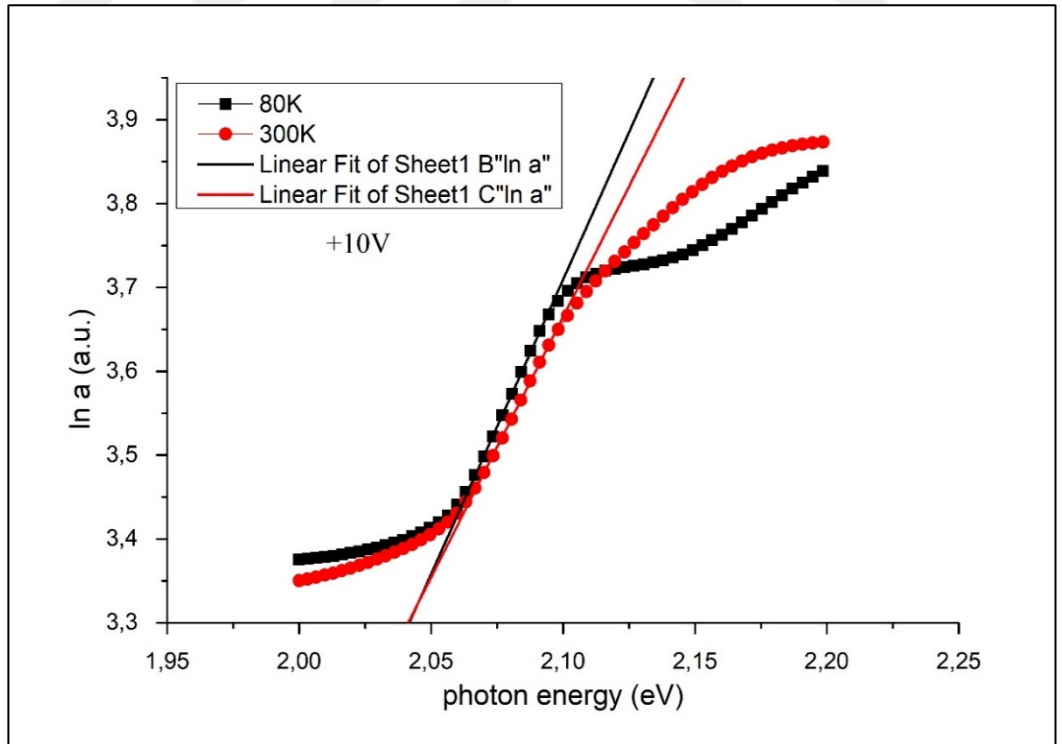
Şekil 5.13: Alanlı ölçüm için 80K ve 300K sıcaklıklarındaki logaritmik soğurma spektrumu.



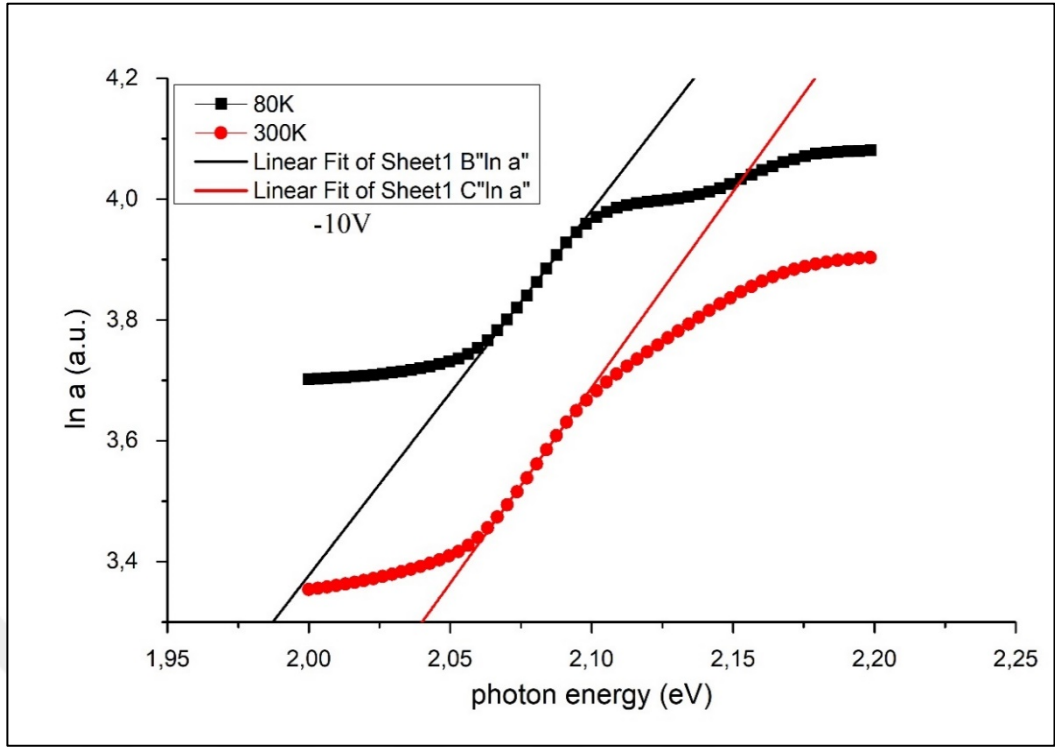
Şekil 5.14: +5V gerilim ile oluşan gömülü elektrik alan için 80K ve 300K sıcaklıklarındaki logaritmik soğurma spektrumu.



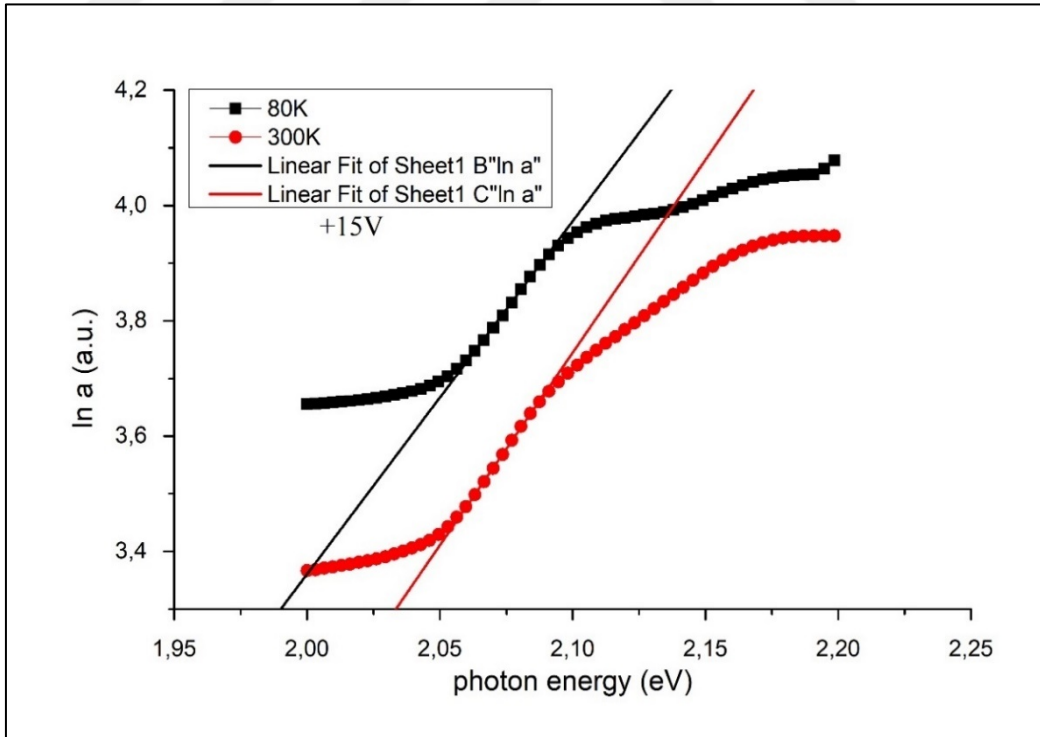
Şekil 5.15: -5V gerilim ile oluşan gömülü elektrik alan için 80K ve 300K sıcaklıklarındaki logaritmik soğurma spektrumu.



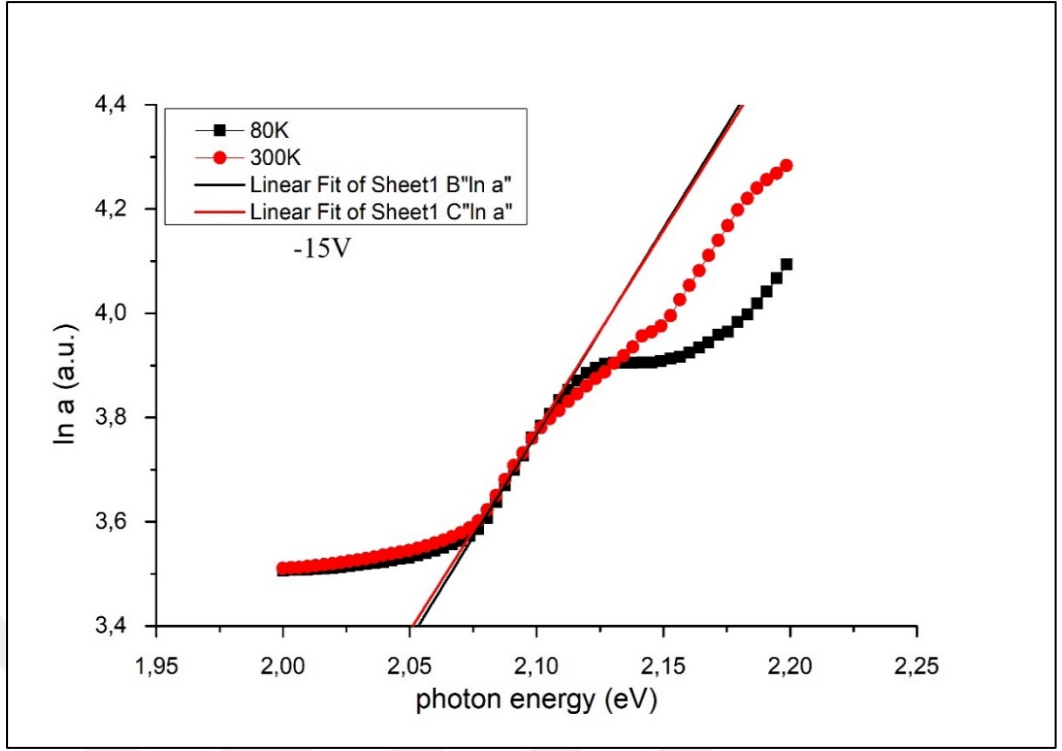
Şekil 5.16: +10V gerilim ile oluşan gömülü elektrik alan için 80K ve 300K sıcaklıklarındaki logaritmik soğurma spektrumu.



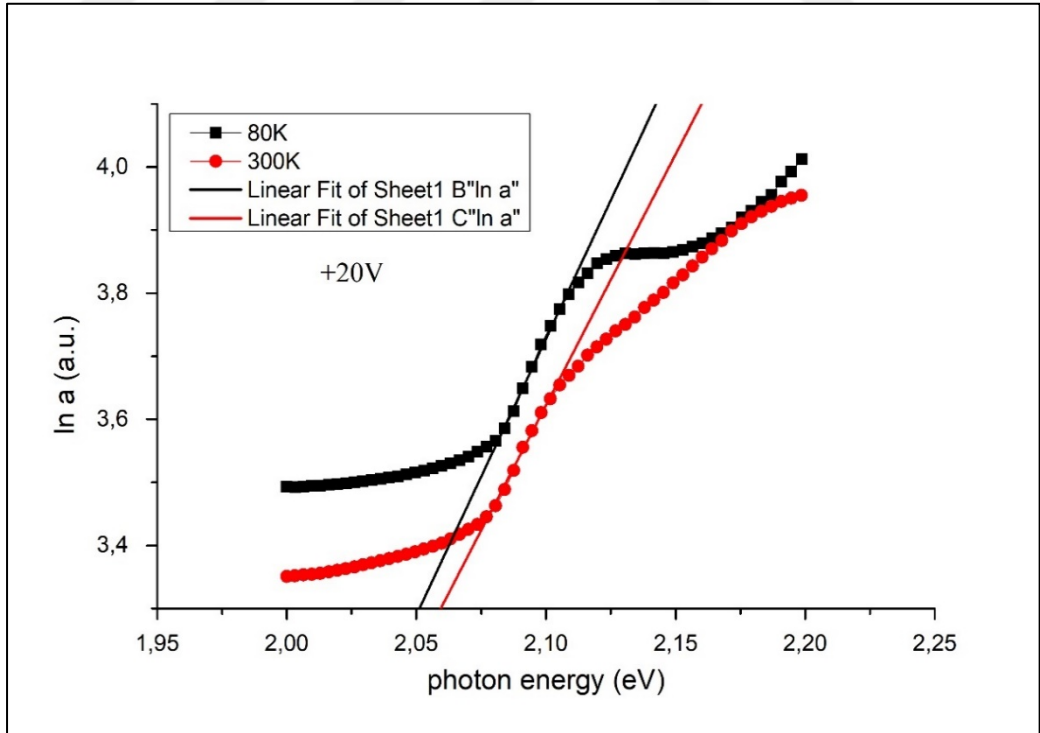
Şekil 5.17: -10V gerilim ile oluşan gömülü elektrik alan için 80K ve 300K sıcaklıklarındaki logaritmik soğurma spektrumu.



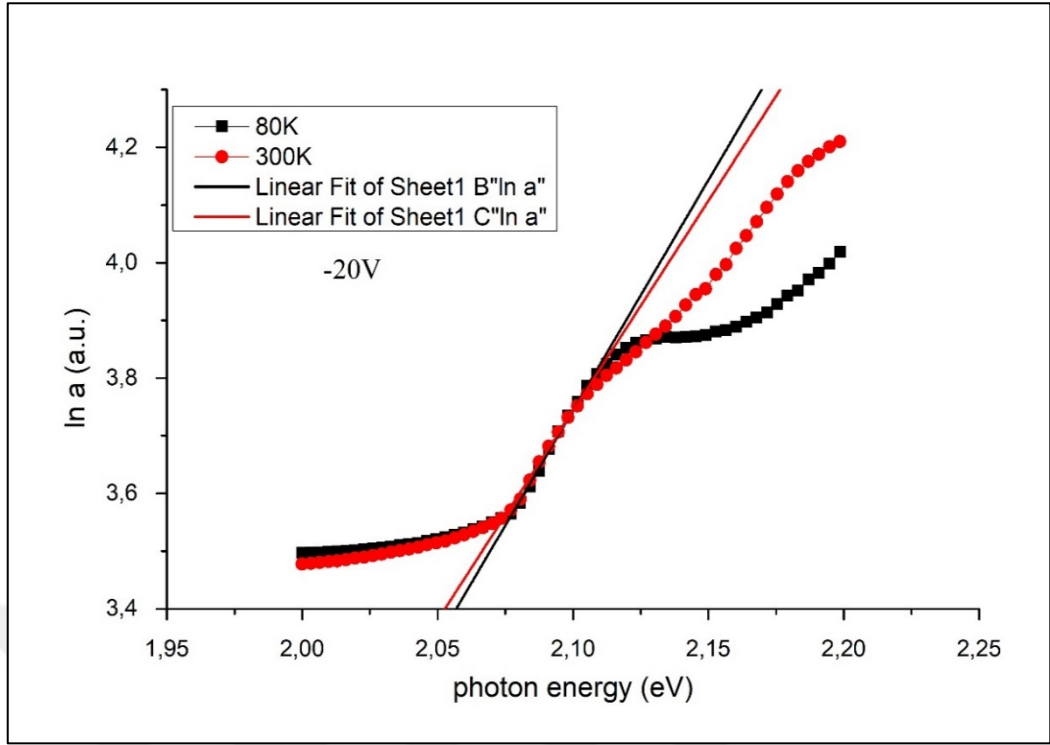
Şekil 5.18: +15V gerilim ile oluşan gömülü elektrik alan için 80K ve 300K sıcaklıklarındaki logaritmik soğurma spektrumu.



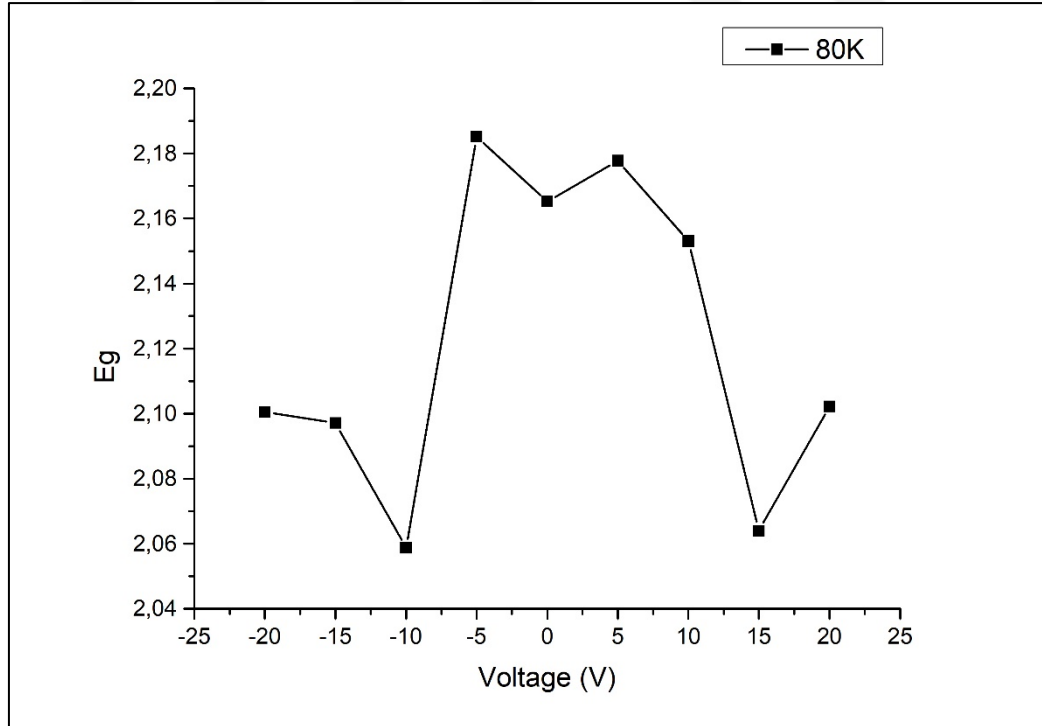
Şekil 5.19: -15V gerilim ile oluşan gömülü elektrik alan için 80K ve 300K sıcaklıklarındaki logaritmik soğurma spektrumu.



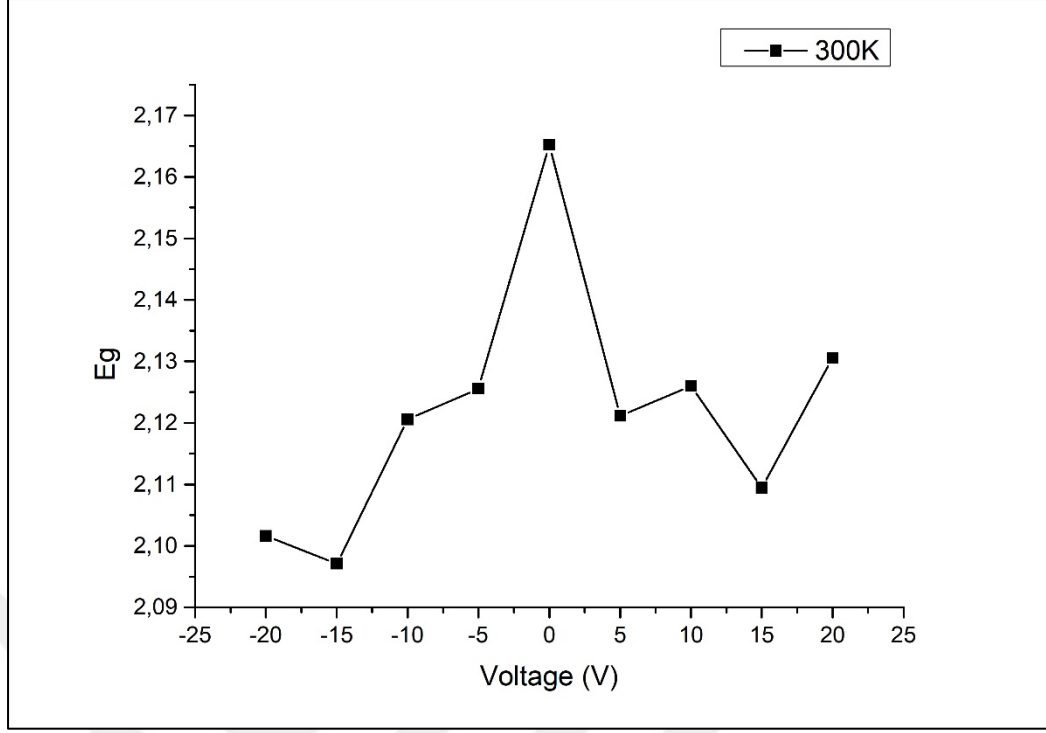
Şekil 5.20: +20V gerilim ile oluşan gömülü elektrik alan için 80K ve 300K sıcaklıklarındaki logaritmik soğurma spektrumu.



Şekil 5.21: -20V gerilim ile oluşan gömülü elektrik alan için 80K ve 300K sıcaklıklarındaki logaritmik soğurma spektrumu.



Şekil 5.22: 80K için TlGaSe_2 doğrudan bant enerjilerinin kristale gömülü elektrik alan amacı ile uygulanan dış gerilime bağıllığı.



Şekil 5.23: 300K için TlGaSe₂ doğrudan bant enerjilerinin kristale gömülü elektrik alan amacı ile uygulanan dış gerilime bağlılığı.

5.2.1. Deneysel Sonuçlar

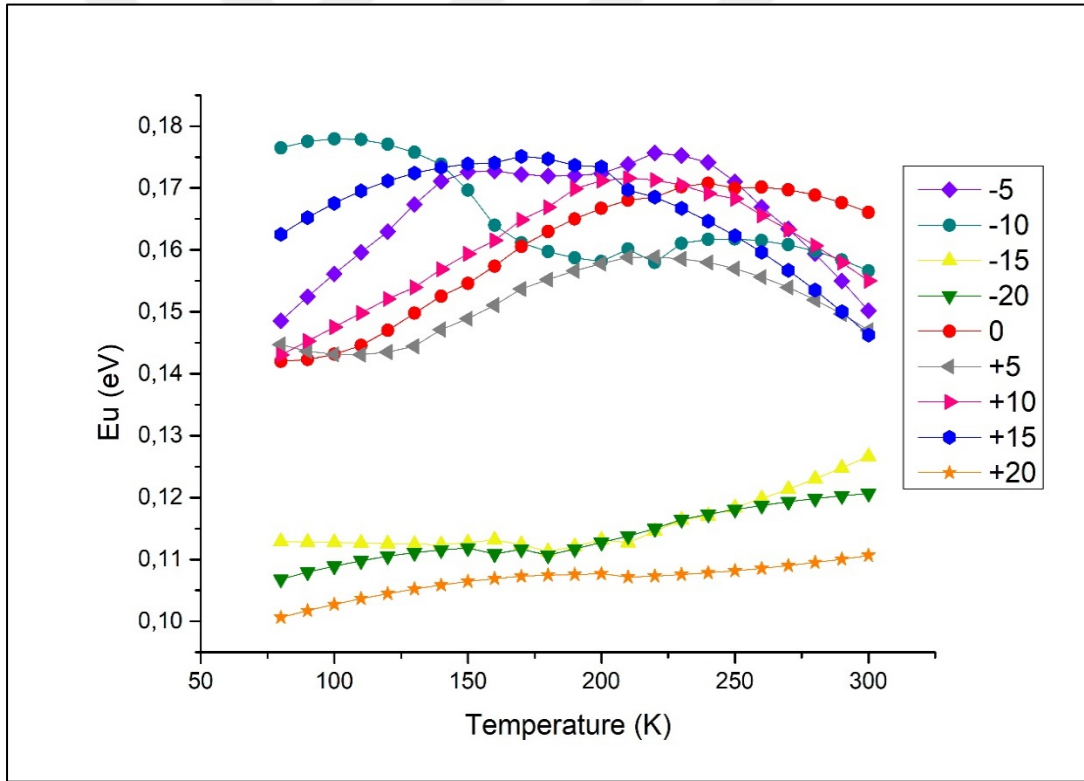
Burada logaritmik soğurma spektrumlarını kullanmamızdaki amaç Urbach enerjilerini elde etmektir. Grafiklerdeki fitlerin eğimi bize Urbach enerji değerlerini verir. Bunun sonucunda sıcaklığa bağlı Urbach enerji grafiklerine ulaşırız. Urbach enerji grafiklerini inceleyerek kristaldeki gömülü elektrik alanın kaynağı hakkında bilgi sahibi olabiliriz.

Şekil 5.22 ve 5.23 ise Eg parametrelerini göstermektedir. Eg parametrelerini elde edebilmek için sabit bir α değerinde 80K ve 300K sıcaklıklardaki enerjileri soğurma grafikleri üzerinden hesaplanmıştır. Bu işlem tüm gerilim değerleri için tekrarlanmıştır. Böylece uygulanan dış gerilime bağlı enerji grafikleri elde edilmiştir. Buradaki amaç gömülü elektrik alanın varlığını gösterebilmektir. Çünkü grafikleri incelediğimizde hemen hemen tüm gerilim değerlerinin alansız ölçümde elde edilen enerjiden küçük olduğu görülmektedir. Ölçümler esnasında numune dış gerilime maruz kalmadığından bu durum kristal içerisinde gömülü bir alanın var olduğunu düşündürmektedir.

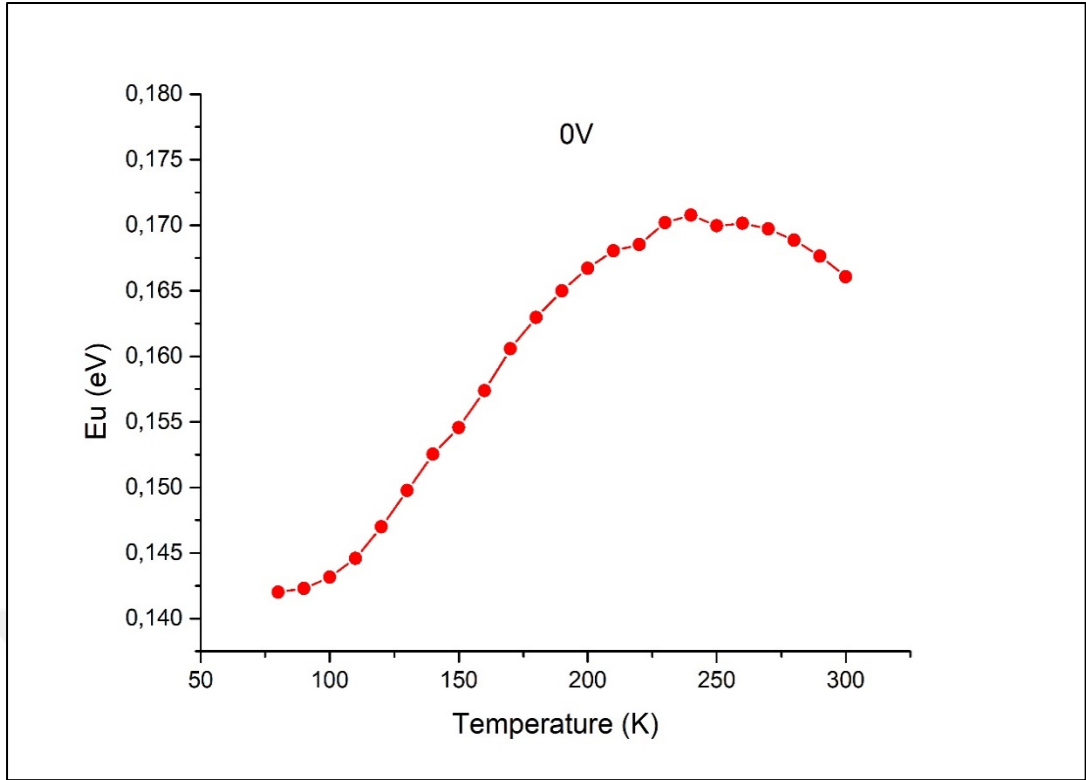
5.3. Tüm Gerilim Değerleri için Sıcaklığa Bağlı Urbach Enerjisi Grafikleri

Bu kısımda her bir dış gerilim değeri için ayrı ayrı Urbach enerjisi grafikleri elde edilmiştir. Urbach enerjisi, önceki kısımlarda bahsi geçen soğurma spektrumlarını anlamlandırmamızda yardımcı olacak bir parametredir. Teorik kısımda Urbach enerjisinden ayrıntılı olarak bahsedilmektedir.

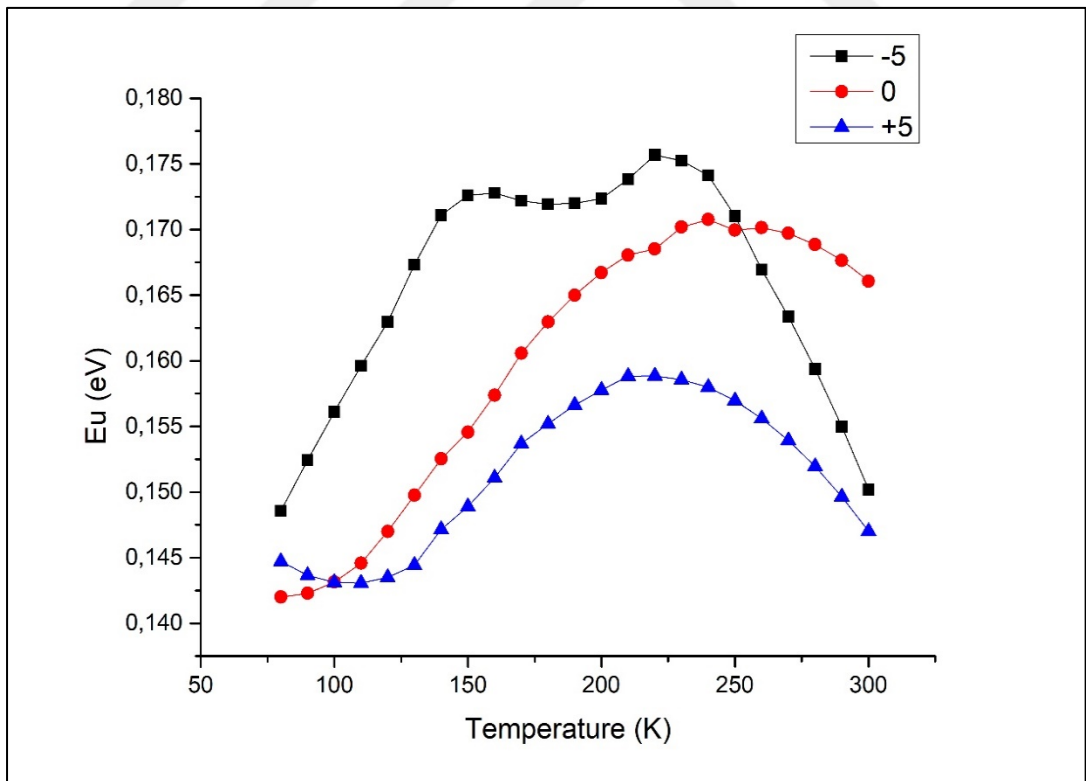
Şekil 5.24-5.29 TlGaSe₂ kristali için sırasıyla 0V, +5V, -5V, +10V, -10V, +15V, -15V, +20V, -20V dış gerilim değerlerinde, 80K-300K sıcaklık aralığındaki Urbach enerji E_U (eV) değerlerini göstermektedir. Şekil 5.24’de TlGaSe₂ kristali için, bahsi geçen dış gerilim değerlerinde, 80K-300K sıcaklık aralığındaki Urbach enerji E_U grafikleri bir arada gösterilmektedir.



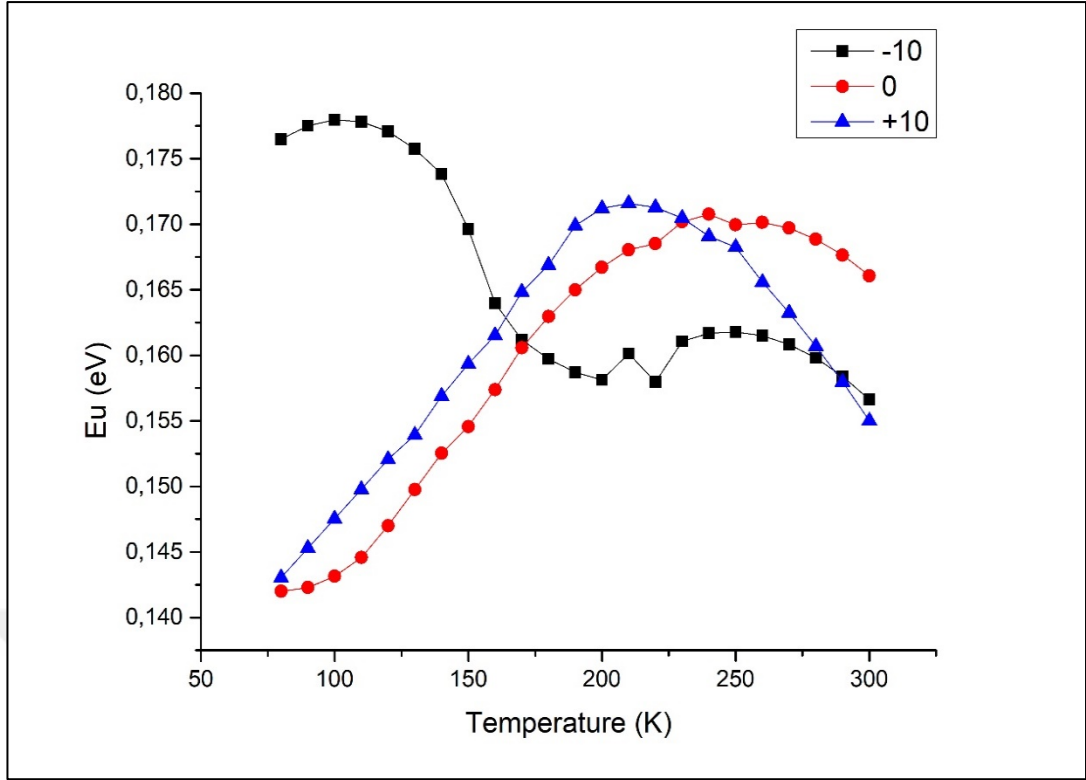
Şekil 5.24: 0V, ±5V, ±10V, ±15V ve ±20V dış gerilim değerleri için Urbach enerjisinin E_U sıcaklığa bağlılığı.



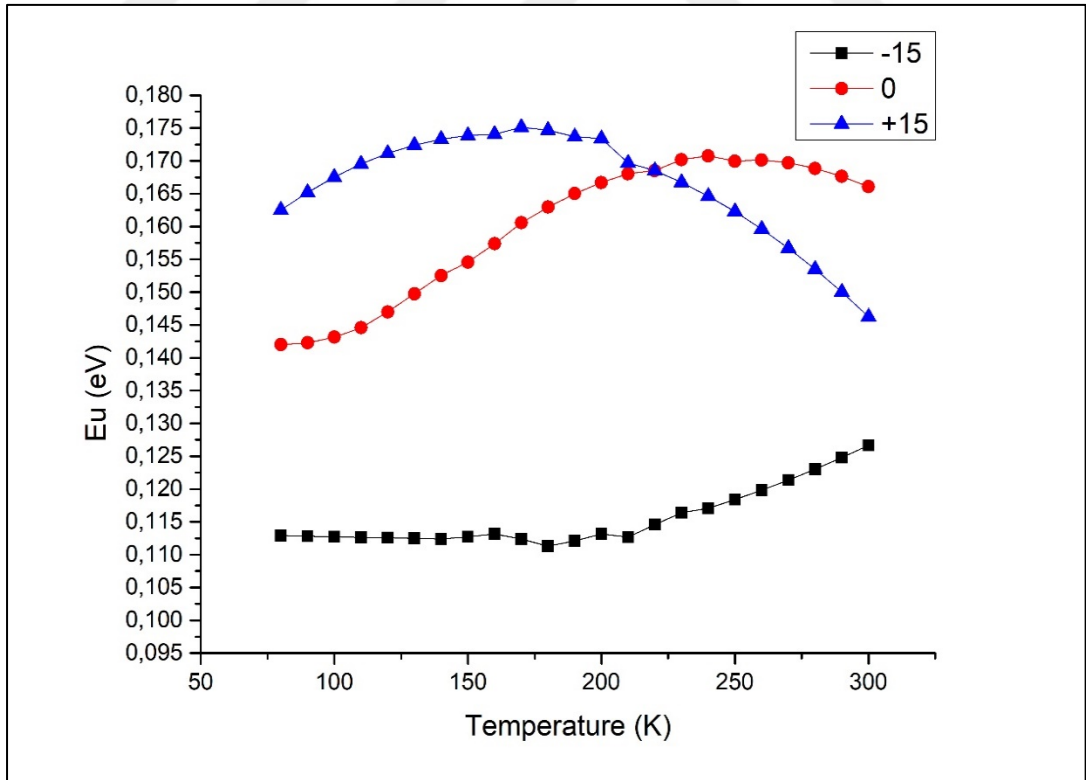
Şekil 5.25: Alansız ölçüm için, Urbach enerjisinin E_U sıcaklığa bağlılığı.



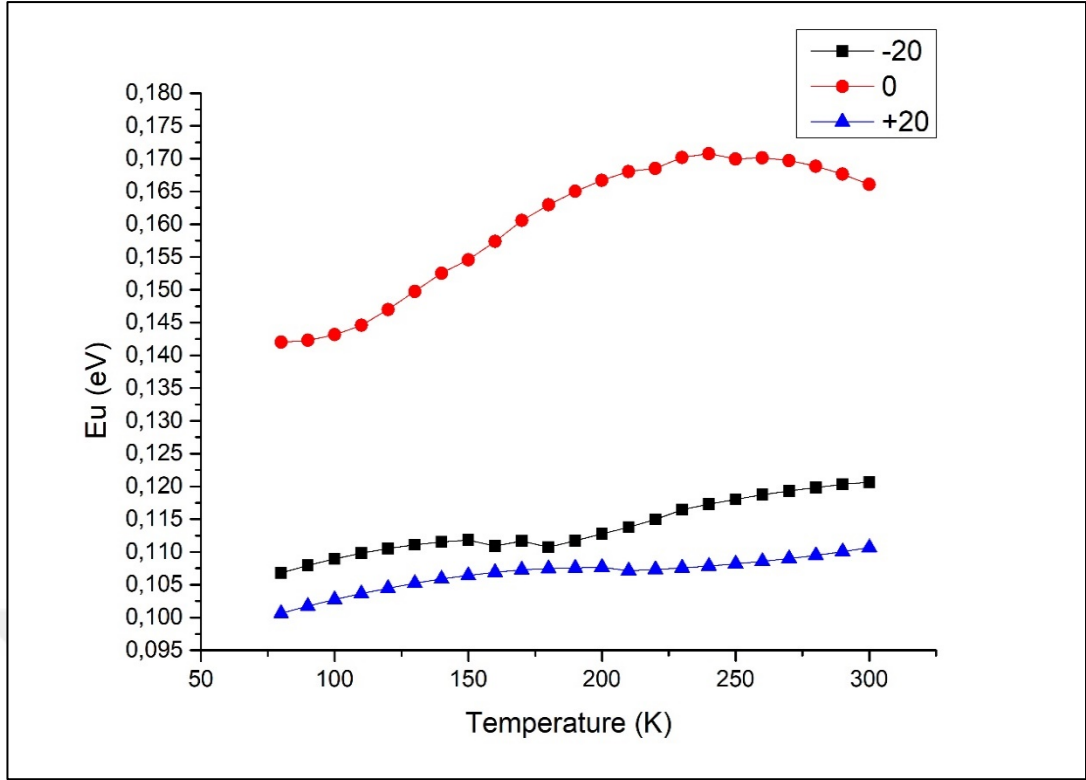
Şekil 5.26: +5V, 0V ve -5V için Urbach Enerjisinin E_U sıcaklığa bağlılığı.



Şekil 5.27: +10V, 0V ve -10V için Urbach Enerjisinin E_U sıcaklığa bağlılığı.



Şekil 5.28: +15V, 0V ve -15V için Urbach Enerjisinin E_U sıcaklığa bağlılığı.



Şekil 5.29: +20V, 0V ve -20V için Urbach Enerjisinin E_U sıcaklığa bağlılığı.

5.3.1. Deneysel Sonuçlar

Şekil 5.24 da tüm dış gerilim değerlerinin Urbach enerji grafikleri bir arada verilmektedir. Diğer grafiklerde alansız ölçümle alanlı ölçümlerin Urbach enerjileri kıyaslanmaktadır.

Sıcaklığa bağlı E_U grafiklerini incelediğimizde düşük gerilimlerde alanlı ve alansız değerler arasında pek bir fark olmadığı görülmektedir. Ancak, dış gerilim değeri arttıkça bu fark belirginleşmeye başlamaktadır. Özellikle şekil 5.28 ve 5.29 incelendiğinde -15V, -20V ve +20V dış gerilimlerinin alansız ölçümde elde edilen Urbach enerjisinden tamamen farklı enerji değerlerine sahip olduklarını söyleyebiliriz.

Urbach kuralından bahsederken kristaller için Urbach enerjisinin sıcaklıkla birlikte arttığından bahsedilmiştir (bkz. Sy:35). Ancak buradaki grafikleri inceleyecek olursak numunemiz bir kristal yarıiletken olmasına rağmen Urbach enerji grafikleri sıcaklıkla bir azalma göstermektedir. Amorf yarıiletkenlere özgü bu davranışın sebebinin kristalde mevcut derin seviye kusurları olduğu düşünülmektedir.

6. SONUÇ VE YORUM

Bu çalışmada TlGaSe₂ kristalinin gömülü elektrik alan altında optik soğurma kenarındaki kayma incelenmiştir. Gömülü elektrik alandan kasıt kristalde oluşan iç elektrik alandır. Literatürde katmanlı TlGaSe₂ kristalinin Urbach kenarının gömülü elektrik alanla değişimine dair bir çalışmaya rastlanmamıştır. Bu bakımdan sunulan çalışma literatürdeki bir boşluğun doldurulmasına katkı sağlayacaktır.

Kristale ölçüm öncesi dış gerilim uygulanmış ancak daha sonra bu gerilim numune üzerinden kaldırılmıştır. E_g-V grafikleri incelendiğinde kristalde Franz-Keldysh etkisi gözlenmiştir. Ölçüm esnasında kristal dış gerilime maruz bırakılmadığı için bu etkinin kristal içerisinde oluşan elektrik alandan kaynaklandığı düşünülmektedir. Sonuç olarak Franz-Keldysh etkisinin bize kristaldeki iç elektrik alanın varlığını gösterdiğini söyleyebiliriz.

Urbach enerji grafiklerini incelediğimizde ise bu iç elektrik alanın kaynağı hakkında bilgi sahibi olabiliriz. TlGaSe₂ katmanlı yarıiletkeninin kristal yapıda olduğundan daha önce bahsetmiştik. Ancak Urbach enerji grafikleri amorf yarıiletkenlerin sergilediği davranışı göstermektedir. Bu durumda kristal içerisinde rastgele dağılmış kusurlar olduğunu düşündürmektedir. Kristali elektrik alanda soğuturken bir şekilde kristal içindeki kusurlar aktifleşmiş olabilir. Kusurlar rasgele dağıldıklarından kristal içerisinde rasgele bir elektrik alan meydana gelir. Bu da amorf düzensiz bir yapıyı yansıtmaktadır. Elektronlar hissettikleri alanın orijinini ayırt edemeyeceklerinden Franz-Keldysh etkisinin gözlenmesine sebep olan iç elektrik alanın kaynağının aktive olan bu kusurlar olduğunu söyleyebiliriz.

Gömülü alandan başka, hafıza etkisi sayesinde, ölçüm öncesi uygulanan alan bir süre kristal üzerinde kalabilir. Bu alan da Franz-Keldysh etkisine yol açabilir.

Sonuçta elektriksel olarak aktif olan doğal derin seviye kusurlarından kaynaklanan yarıiletken malzemelerin içindeki lokalize iç elektrik alanları araştırmak için Franz-Keldysh etkisini kullanma olanağı sunulmaktadır.

KAYNAKLAR

- [1] Ateş A., Gürbulak B., Yıldırım M., Doğan S., Duman S., Yıldırım T., Tüzemen S., (2002), “Urbach’s Rule and Optical Properties for TlGaSe₂”, Turk J. Phys., 26, 127-131.
- [2] Offergeld G.R., (1963), “Semiconductive Materials Containing Thallium”, US Patent, 3110685.
- [3] Delgado G.E., Mora A.J., Pérez F.V., González J., (2007), “Growth and Crystal Structure of the layered compound TlGaSe₂”, Crystal Research Technology 42, 7, 663-666.
- [4] Helmut H., Wellmann B., (1967), “Über ternäre Chalkogenide des Thalliums mit Gallium und Indium”, Naturwissenschaft, 52, 42-43.
- [5] Hans J. Scheel, Peter Capper, Peter Rudolph, (2010), “Crystal Growth Technology: Semiconductors and Dielectrics”, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- [6] Dhanaraj G., Byrappa K., Prasad V., Dudley M. (Eds.), (2010), “Crystal Growth Techniques and Characterization: An Overview”, “Springer Handbook of Crystal Growth”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [7] Byrappa K., Ohachi T. (Eds), (2003), “Crystal Growth Technology”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [8] Web 1, (2019), <https://www.alineason.com/en/knowhow/crystal-growth/>, (Erişim tarihi: 26/06/2019).
- [9] Yuksek N.S., Kavas H., Gasanly N.M., Ozkan H., (2004), “Trapping Center Parameters of TlGaSe₂ Layered Crystals”, Physica B, 344, 249-254.
- [10] Yuksek N.S., Gasanly N.M., (2005), “Temperature dependence of Raman-active mode frequencies and linewidths in TlGaSe₂ layered crystals”, Crystal Research and Technology, 40, 264-270.
- [11] Qasrawi A.F., Gasanly N.M., (2004), “Electrical Conductivity and Hall Mobility in p-type TlGaSe₂ crystals”, Material Research Bulletin, 39, 1351-1357.
- [12] Qasrawi A.F., Gasanly N.M., (2004), “Hall effect, space-charge limited current and photoconductivity measurements on TlGaSe₂ layered crystals”, Semiconductor Science and Technology, 19, 505-509.
- [13] Henkel W., Hochhelmer H.D., Carlone C., Werner A., Ves S., Schnering H.G.v., (1982), “High-pressure Raman Study of the ternary chalcogenides TlGaS₂, TlGaSe₂, TlInS₂ and TlInSe₂”, Physical Review B 26, 3211-3221.

- [14] Panish A.M., (2008), "Electronic Properties and Phase Transitions in Low-Dimensional Semiconductors", *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20 (29), 293202/1-42.
- [15] Mustafaeva S.N., Aliev V.A., Asadov M.M., (1998), "Anisotropy of the Hopping Conductivity in TlGaSe₂ Single Crystals", *Physics of the Solid State*, 40 (1), 41-44.
- [16] Haniyas M., Anagnostopoulos A.N., Kambas K., Spyridelis J., (1992), "Electrical and Optical Properties of as-Grown TlInS₂, TlGaSe₂ and TlGaS₂ Single Crystals", *Materials Research Bulletin*, 27 (1), 25-38.
- [17] Mustafaeva S.N., Aliev V.A., Asadov M.M., (1998), "Investigation of DC Hopping Conduction in TlGaS₂ and TlInS₂ Single Crystals", *Physics of Solid State*, 40 (4), 561-563.
- [18] Abdullæva S.G., Mamedov N.T., Orudzhev G.S., (1983), "Band Structure of TlGaSe₂", *Physica Status Solidi-B*, 119 (41), 41-48.
- [19] Abdullæva S.G., Mamedov N.T., (1986), "Band Structure of TlGaSe₂ Ternary Layered Crystals", *Pyhsica Status Solidi-B*, 133, 171-177.
- [20] Kashida S., Yanadori Y., Otaki Y., Seki Y., Panich A.M., (2006), "Electronic Structure of Ternary Thallium Chalcogenide Compounds", *Physica Status Solidi (a)*, 203, 2666-2669.
- [21] El-Nahhas M.M., Sallam M.M., Rahman S.A., Ibrahim E.M., (2006), "Optical, Electrical Conduction and Dielectric Properties of TlGaSe₂ Layered Single Crystal", *Solid State Science*, 8, 488-499.
- [22] Kumar G.A., Thomas J., George N., Kumar B.A., Radhakrishnan P., Nampoori V.P.N., Vallabhan C.P.G., Unnikrishnan N.V., (2000), "Optical Absorption Studies of Free (H₂Pc) and Rare Earth (RePc) Phthalocyanine Doped Borate Glasses", *Physics and Chemistry of Glasses*, 41 (2), 89-93.
- [23] Baleva M., Goranova E., Darakchieva V., Kossionides S., Kokkosis M., Jordanov P., (2002), "Influence of Grain Size on the Optical Conductivity of β -FeSi₂ Layers", *Vacuum*, 69, 425-429.
- [24] Darakchieva V., Baleva M., Surtchev M., Goranova E., (2000), "Structural and Optical Analysis of β -FeSi₂ Thin Layers Prepared by Ion-beam Synthesis and Solid-State Reaction", *Physical Review B*, 62, 13057-13063.
- [25] Wemple S.H., DiDomenico Jr. M., (1971), "Behavior of the Electronic Dielectric Constant in Covalent and Ionic Materials", *Physical Review B*, 3, 1338-1351.
- [26] Wemple S.H., DiDomenico Jr. M., (1969), "Optical Dispersion and the Structure of Solids", *Physical Review Letters*, 23, 1156-1159.

- [27] Keiji Tanaka, (1980), "Optical Properties and Photoinduced Changes in Amorphous As S Films", *Thin Solid Films*, 66, 271-279.
- [28] El-Nahass M.M., El-Gohary Z., Soliman H.S., (2003), "Structural and Optical Studies of Thermally Evaporated CoPc Thin Films", *Optics & Laser Technology*, 35, 523-531.
- [29] Soliman H.S., Khalifa B.A., El-Nahass M.M., Ibrahim E.M., (2004), "Temperature Dependence of the Structural and Optical Properties of Thermally Vacuum Evaporated InSbSe₃ Thin Films", *Physica B: Condensed Matter*, 351, 11-18.
- [30] Sandoval-Paz M.G., Sotelo-Lerma M., Valenzuela-Jàuregui J.J., Flores-Acosta M., Ramírez-Bon R., (2005), "Structural and Optical Studies on Thermal-annealed In₂S₃ Films Prepared by the Chemical Bath Deposition Technique", *Thin Solid Films*, 472, 5-10.
- [31] Allakhverdiev K.R., (1999), "Two-photon Absorption in Layered TlGaSe₂, TlInS₂, TlGaS₂ and GaSe Crystals", *Solid State Communications*, 111, 253-257.
- [32] Urbach F., (1953), "The Long-Wavelength Edge of Photographic Sensitivity and of Electronic Absorption of Solids", *Physical Review*, 92, 1324.
- [33] Allakhverdiev K.R., Aldjanov M.A., Mamedov T.G., Salaev E.Y., (1986), "Anomalous Behavior of the Urbach Edge and Phase-Transitions in TlGaSe₂", *Solid State Communications*, 58, 295-299.
- [34] Gürbulak B., (1999), "The Optical Absorption Edge of p-type Tl_(1-x)GaPr_xSe₂ and TlGaSe₂", *Physica Scripta*, 60, 584-588.
- [35] Moss T.S., (1959), "Optical Properties of Semiconductors", Butterworth's Scientific Publication, London.
- [36] Pankove J.I., (1971), "Optical Processes in Semiconductors", Prentice Hall Inc., New Jersey.
- [37] Chihiro Hamaguchi, (2010), "Reflection and Absorption", "Basic Semiconductor Physics", 2nd Edition, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [38] Chihiro Hamaguchi, (2010), "Indirect Transition", "Basic Semiconductor Physics", 2nd Edition, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [39] Cardona M., Yu P.Y., (2010), "Modulation Spectroscopy", "Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties", 4th Edition, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [40] Chihiro Hamaguchi, (2010), "Franz-Keldysh Effect", "Basic Semiconductor Physics", 2nd Edition, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

- [41] Pankove J.I., (1971), "Absorption", "Optical Process in Semiconductors", Prentice Hall Inc., New Jersey.
- [42] Studenyak I., Kranjcec M., Kurik M.V., (2014), "Urbach Rule in Solid State Physics", International Journal of Optics and Applications, 4(3), 76-83.
- [43] Martienssen H.W., (1957), "Über die Excitonenbanden der alkalihalogenidkristalle", Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2, 257-267.
- [44] Kurik M.V., (1971), "Urbach Rule (Review)", Physica Status Solidi (a), 8, 9-30.
- [45] Cody G.D., (1992), "Urbach Edge of Crystalline and Amorphous Silicon: A Personal Review", Journal of Non-Crystalline Solids, 141, 3-15.
- [46] Kassem M.E., Higazy A.A., Zahran R.R., Kandeil A.Y., (1993), "Optical Properties of γ -Irradiated Low-Density Polyethylene", Materials Letters, 16, 236-242.
- [47] Kurik M.V., (1994), "Urbach Rule in Optics of Condensed Matter", Ukrainian Journal of Physics, 39, 1058-1062.
- [48] Kranjcec M., Desnica I.D., Studenyak I.P., Kovacs Gy.Sh., Potory M.V., Voroshilov Yu.V., Gebesh V.Yu., (1999), "Preparation and Fundamental Optical Absorption Edge in $\text{In}_4(\text{P}_2\text{Se}_6)_3$ Single Crystals", Materials Research Bulletin, 34, 2297-2307.
- [49] Abay B., Güder H.S., Efeoğlu H., Yoğurtçu Y.K., (2001), "Temperature Dependence of the Optical Energy Gap and Urbach-Martienssen's Tail in the Absorption Spectra of the Layered Semiconductor $\text{Tl}_2\text{GaInSe}_4$ ", Journal of Physics and Chemistry of Solids, 62, 747-752.
- [50] Zickus K., Audzijonis A., Batarunas J., Sileika A., (1984), "The Fundamental Absorption Edge Tail of Ferroelectric SbSI", Physica Status Solidi (b), 125, 645-651.
- [51] Shen Q., Toyoda T., (1999), "Photoacoustic Studies of Annealed $\text{CdS}_x\text{Se}_{1-x}$ ($x=0.26$) Nanocrystals in Glass Matrix", Japanese Journal of Applied Physics, 38, 3163-3167.
- [52] Kunets V.P., Kulish N.R., Kunets Vas.P., Lisitsa M.P., (2002), "Urbach's Rule Peculiarities in Structures with $\text{CdS}_x\text{Se}_{1-x}$ Nanocrystals", Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics, 5, 9-15.
- [53] Turko B.I., Kapustyanyk V.B., Rudyk V.P., Partika M.V., Kvasnytsya M.V., Vas'kiv A.P., (2007), "Manifestation of Size Effect in Behavior of the Intrinsic Absorption Edge of Nanostructured Polycrystalline Zinc Oxide Thin Films", Journal of Applied Spectroscopy, 74, 310-312.

- [54] Guranich P.P., Gerzanich E.I., Slivka A.G., Shusta V.S., Bobela V.A., (1992), "Phase p,Tx-diagram and Peculiarities of Physical Properties of $(\text{Pb}_x\text{Sn}_{1-x})_2\text{P}_2\text{Se}_6$ Crystals with an Incommensurate Phase", *Ferroelectrics*, 132, 173-183.
- [55] Noba K., Kayanuma Y., (1999), "Urbach Tail for Ferroelectric Materials with an Order-Disorder-Type Phase Transition", *Physical Review B*, 60, 4418-4421.
- [56] Studenyak I.P., Mykajlo O.A., Vysochanskii Yu.M., Cajipe V.B., (2003), "Optical Absorption Studies of Phase Transitions in CuCrP_2S_6 Layered Antiferroelectrics", *Journal of Physics:Condensed Matter*, 15, 6773-6779.
- [57] Studenyak I.P., Kranjcec M., Kovacs Gy.Sh., Panko V.V., Desnica D.I., Slivka A.G., Guranich P.P., (1999), "The Effect of Temperature and Pressure on the Optical Absorption Edge in $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{X}$ (X=Cl, Br, I) Crystals", *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 60, 1897-1904.
- [58] Studenyak I.P., Kranjcec M., Kovacs Gy.Sh., Desnica I.D., Panko V.V., Slivka V.Yu., (2001), "Influence of Compositional Disorder on Optical Absorption Processes in $\text{Cu}_6\text{P}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{I}$ Crystals", *Journal of Materials Research*, 16, 1600-1608.
- [59] Studenyak I.P., Kranjcec M., Kurik M.V., (2006), "Urbach Rule and Disorder Processes in $\text{Cu}_6\text{P}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{Br}_{1-y}\text{I}_y$ Superionic Conductors", *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 67, 807-817.
- [60] Kurik M.V., Tsikora L.I., (1974), "Exciton-Phonon Interaction in Crystals of Linear Polyacenes", *Physica Status Solidi (b)*, 66, 695-702.
- [61] Sumi H., Sumi, A. (1987), "The Urbach-Martienssen Rule Revisited", *Journal of the Physical Society of Japan*, 56, 2211-2220.
- [62] Studenyak I.P., Kranjcec M., Bilanchuk V.V., Kokhan O.P., Orliukas A.F., Kazakevicius E., Kezionis A. Salkus T., (2009), "Temperature Variation of Electrical Conductivity and Absorption Edge in $\text{Cu}_7\text{GeSe}_5\text{I}$ Advanced Superionic Conductors", *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 70, 1478-1481.
- [63] Kurik M.V., (1991), "Experimental Evaluation of Exciton-Phonon Interaction Constant", *Soviet Physics-Solid State*, 33, 615-618.
- [64] Beaudoin M., DeVries A.J.G., Johnson S.R., Laman H., Tiedje T., (1997), "Optical Absorption Edge of Semi-Insulating GaAs and InP at High Temperatures", *Applied Physics Letters*, 70,3540-3542.
- [65] Yang Z., Homewood K.P., Finney M.S., Harry M.A., Reeson K.J., (1995), "Optical Absorption Study of Ion Beam Synthesized Polycrystalline Semiconducting FeSi_2 ", *Applied Physics*, 78, 1958-1963.

- [66] Sumi H., Toyozawa Y., (1971), "Urbach-Martienssen Rule and Exciton Trapped Momentarily by Lattice Vibration", *Journal of the Physical Society of Japan*, 31, 342-357.
- [67] Redfield D., (1963), "Effect of Defect Fields on the Optical Absorption Edge", *Physical Review*, 130, 916-918.
- [68] Dow D., Redfield D., (1972), "Toward a Unified Theory of Urbach's Rule and Exponential Absorption Edge", *Physical Review B*, 5, 594-610.
- [69] Skettrup T., (1978), "Urbach's Rule Derived From Thermal Fluctuations in the Band-Gap Energy", *Physical Review B*, 18, 2622-2631.
- [70] Szczyrbowski J., (1981), "The Exponential Shape of the Optical Absorption Edge Tail", *Physica Status Solidi (b)*, 105, 515-524.
- [71] Liebler J.G., Schmitt-Rink S., Haug H., (1985), "Theory of the Absorption Tail of Wannier Excitons in Polar Semiconductor", *Journal of Luminescence*, 34, 1-7.
- [72] Grein C.H., John S., (1989), "Temperature Dependence of the Urbach Optical Absorption Edge: A Theory of Multiple Phonon Absorption and Emission Sidebands", *Physical Review B*, 39, 1140-1151.
- [73] Skumanich A., Frova A., Amer N.M., (1985), "Urbach Tail and Gap States in Hydrogenated a-SiC and a-SiGe alloys", *Solid State Communications*, 54, 597-601.
- [74] Studenyak I.P., Kranjcec M., Bilanchuk V.V., Kokhan O.P., Orliukas A.F., Kezionis A., Kazakevicius E., Salkus T., (2010), "Temperature and Compositional Behavior of Electrical Conductivity and Optical Absorption Edge in $\text{Cu}_7\text{Ge}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_5\text{I}$ Mixed Superionic Crystals", *Solid State Ionics*, 181, 1596-1600.
- [75] Godmanis I.T., Trukhin A.N., Huebner K., (1983), "Exciton-Phonon Interaction in Crystalline and Vitreous SiO_2 ", *Physica Status Solidi (b)*, 116, 279-287.
- [76] Weinstein I.A., Zatsepin A.F., (2004), "Modified Urbach's Rule and Frozen Phonons in Glasses", *Physica Status Solidi (c)*, 1, 2916-2919.
- [77] Bletskan D.I., Kabacij V.N., Studenyak I.P., Frolova V.V., (2007), "Edge Absorption Spectra of Crystalline and Glassy PbGeS_3 ", *Optics and Spectroscopy*, 103, 772-776.
- [78] Kranjcec M., Studenyak I.P., Kurik M.V., (2009), "On the Urbach Rule in Non-Crystalline Solids", *Journal of Non-Crystalline Solids*, 355, 54-57.
- [79] Seyidov M.Y., Sahin Y., Erbahar D., Suleymanov R.A., (2006), "Electret States in TlGaSe_2 ", *Physica Status Solidi A*, 203, 3781-3790.

ÖZGEÇMİŞ

Dilara Uysal 1991 yılında İstanbul'da doğdu. 2009-2014 yılları arasında Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsü Fen Fakültesi Fizik Anabilim Dalı'nda lisans eğitimi aldı. Lisans eğitimini bölüm ikincisi olarak tamamladı ve 2016 yılında Gebze Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans eğitimine başladı. 2019 yılından itibaren Gebze Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda doktora eğitimi almaktadır.

