

ZnO BİLEŞİK YARIİLETKENİNİN  
OPTİK PARAMETRELERİNİN  
İNCELENMESİ

HÜLYA ŞAHİN

YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI  
2011

CUMHURİYET ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ZnO BİLEŞİK YARIİLETKENİNİN  
OPTİK PARAMETRELERİNİN İNCELENMESİ

HÜLYA ŞAHİN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

TEZ DANIŞMANI  
DOÇ. DR. EBRU ŞENADIM TÜZEMEN  
SİVAS

2011

Bu çalışma Cumhuriyet Üniversitesi Fen/Sağlık Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanmış ve jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ \_\_\_\_\_

Üye Doç. Dr. Ebru Şenadım \_\_\_\_\_  
TÜZEMEN

Üye Yrd. Doç. Dr.Hülya DOĞAN \_\_\_\_\_

Üye (Danışman) Doç. Dr. Ebru Şenadım \_\_\_\_\_  
TÜZEMEN

### ONAY

Bu tez çalışması, / / tarihinde Enstitü Yönetim Kurulu tarafından belirlenen ve yukarıda imzaları bulunan jüri üyeleri tarafından kabul edilmiştir.

\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Mustafa DEĞİRMENCİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ

Bu tez Cumhuriyet Üniversitesi Senatosu'nun 24.09.2008 tarihli ve 007 sayılı toplantısında kabul edilen Fen/Sağlık Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Tez Yazım Kılavuzu adlı yönergeye göre hazırlanmıştır.

## ÖZET

### ZnO BİLEŞİK YARIİLETKENİNİN OPTİK PARAMETRELERİNİN İNCELENMESİ

HÜLYA ŞAHİN

Yüksek Lisans Tezi Fizik Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Ebru ŞENADIM TÜZEMEN

2011, 67 Sayfa

Bu çalışma kapsamında yüksek geçirgenlikleri ve düşük özdirençleri nedeni ile önemli optoelektronik uygulamaları bulunan ZnO ve Al katkılı ZnO filmlerinin optik özellikleri çalışılmıştır. % 10 Al katkılı ZnO filmi atmalı filtreli katodik vakum ark depolama yöntemi ile <111> yönüne  $15^0$  eğimli GaAs (100), p-Si ve cam üzerine 20 kV tetikleyici ve 500 V ark voltajı altında oda sıcaklığında büyütülmüştür. Daha sonra ZnO:Al (% 10) filmler  $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ ' de 1 saat hava atmosferinde tavlansmıştır. Filmin optik özellikleri spektrofotometrik ölçümler ile incelenmiş ve sonuçlar ayrıntılı olarak yorumlanmıştır. Özellikle yansıma ölçümlerinin geliş açısına aşırı bağlı olduğu görülmüştür.

Bu çalışma sırasında Sivas Cumhuriyet Üniversitesi Nanoteknoloji laboratuvarında bulunan Cary 5000 UV-VIS-NIR Spektrofotometre sistemi kullanılmıştır ve bu tez kapsamında ilk kez kullanılan bu sistemin detaylı bir tanıtımı verilerek, bu alanda çalışacak olan öğrenciler için çok önemli bir kaynak olması planlanmıştır.

## ABSTRACT

### INVESTIGATION OF THE OPTICAL PARAMETERS OF ZnO COMPOUND SEMICONDUCTOR

Hülya ŞAHİN

Master of Science Thesis, Department of physics

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Ebru Şenadım TÜZEMEN

2011, 67 pages

In this study, optical properties of ZnO and Al doped ZnO films have been investigated. They have high transmission and low resistivity properties which leads to important optoelectronic applications. 10% Al doped ZnO films have been grown on GaAs (100) which is  $15^{\circ}$  inclined toward  $\langle 111 \rangle$  direction, p-Si and glass substrates at room temperature under 20 kV trigger and 500 V arc voltage by using pulsed filtered cathodic vacuum arc deposition system. Later, ZnO:Al (10 %) films were annealed at 500 °C and under aerial atmosphere conditions during one hour. Optical properties of the films have been analyzed by using spectrophotometric measurements and the results were interpreted in detail. Particularly, it is seen that reflection measurements are strongly depend on incidence angle.

During this work, Cary 5000 UV-VIS-NIR spectrophotometer system at Cumhuriyet University Nanotechnology Laboratory in Sivas have been used. This is the first usage of the system therefore a detailed description of the system and its usage is explained in the thesis so that this thesis could be an important source for the future students which will study in this field.

## TEŞEKKÜR

Tez çalışmam boyunca bilgi ve deneyimleri ile hiç bir zaman desteğini esirgemeyen değerli hocam Doç. Dr. Ebru Şenadım TÜZEMEN'e sabırlı yol göstericiliği ve yakın ilgisi için en içten sevgi ve saygılarımla teşekkür ederim.

Çalışmam sırasında büyük yardımlarını gördüğüm, bilgi ve deneyimlerinden yararlandığım Cumhuriyet Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü öğretim üyeleri sayın Prof. Dr. Sezai ELAGÖZ'e ve sayın Prof. Dr. Hüseyin SARI'ya en içten teşekkürlerimi ve saygılarımı sunarım.

Cumhuriyet Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü'nün birbirinden kıymetli hocalarına teşekkür ederim.

Bu günlere gelmem için ellerinden gelenin en iyisini yapan, desteklerini benden bir an bile ayırmayan sevgili anneme, sevgili babama ve canım abime sonsuz teşekkürler.

Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'nde görev yapan herkese yardımlarından dolayı teşekkürler...

Çalışmalarım boyunca emeği geçen ve manevi destekleri ile yanımda olan herkese teşekkürler...

## İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	v
ABSTRACT.....	vi
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	viii
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	xi
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	xiv
SİMGELER DİZİNİ.....	xv
1 GİRİŞ.....	1
2 OPTİK ÖZELLİKLER.....	3
2.1 Optiksel Yöntemlerin Sınıflandırılması.....	3
2.2 Optik Sabitler.....	5
2.2.1 Karmaşık Kırılma İndisi ve Dielektrik Sabiti.....	8
2.2.2 Yansıma.....	10
2.2.2.1 Dağınık Yansıma Teorisi.....	10
2.2.3 Soğurma.....	12
2.2.3.1 Temel Soğurma.....	13
2.2.3.1.1 İzinli Doğrudan Geçişler.....	14
2.2.3.1.2 Yasaklı Doğrudan Geçişler.....	15
2.2.3.1.3 Dolaylı Bantlar Arasında Dolaylı Geçişler.....	16
2.2.4 Film Kalınlığı Hesabı.....	18
3 ZnO İNCE FİMLERİN ÖZELLİKLERİ.....	24
3.1 Giriş.....	24
3.2 Kristal Yapısı.....	24



3.3 Mekaniksel Özellikler .....	26
3.4 Elektriksel Özellikler .....	26
3.5 Isıl Özellikler.....	26
3.5.1 Isıl genleşme katsayıları .....	26
3.5.2 Isıl iletkenlik.....	27
3.5.3 Özgül Isı .....	27
3.6 Optik Özellikler.....	28
3.7 Alüminyum Katkılı ZnO (ZnO:Al).....	28
4 CARY 5000 UV-VIS-NIR SPEKTROFOTOMETRE SİSTEMİ .....	29
4.1 Katı Numune Tutucu.....	32
4.2 Dağınık Yansımaya Aksesuarı (İç (internal) DRA 900).....	34
4.2.1 Teori .....	35
4.2.1.1 Yansımaya ölçümleri.....	36
4.2.1.2 Geçirgenlik ölçümleri .....	36
4.2.1.3 Doğruluğa ve hassasiyete etki eden faktörler .....	37
4.2.1.3.1 Açıklık alanı/ Toplam yüzey alanı oranı.....	37
4.2.1.3.2 Düzgün olmayan kaplama, eskime ya da kirlenme .....	37
4.2.1.3.3 Numunenin yanlış yerleştirilmesi .....	37
4.2.1.3.4 Girintili numune.....	38
4.2.1.3.5 Referans ışın zayıflaması: .....	38
4.2.1.3.6 Kaçak ışık .....	39
4.2.1.3.7 Parlak tuzak hatası .....	39
4.2.1.3.8 Referans malzemeler ve numune arasındaki farklar.....	39
4.2.1.3.9 Referans malzemedeki hata .....	40
4.2.2 Optik Dizayn .....	41
4.2.3 Özellikleri.....	43
4.3 Mutlak (Absolute) Düzgün Yansımaya Aksesuarı .....	44
4.3.1 Özellikleri.....	45
4.4 Dış (External) Düzgün Yansımaya Aksesuarı .....	45
4.4.1 Özellikleri.....	46
5 İNCE FİLMLEİN OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ .....	47

5.1 ZnO:Al/p-Si İnce Filmlerin Deney Sonuçları .....	47
5.2 ZnO:Al/GaAs İnce Filmlerin Deney Sonuçları.....	51
5.3 ZnO:Al/cam İnce Filmlerin Deney Sonuçları .....	54
5.4 ZnO/cam İnce Filmlerin Deney Sonuçları .....	57
KAYNAKLAR.....	64
ÖZGEÇMİŞ.....	67

## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1	Optik ortama gelen ışığın yansımaları, yayılması ve iletimi.....	3
Şekil 2.2	Bir ışık ışını bir optik ortam boyunca yayılırken oluşabilecek olaylar.....	4
Şekil 2.3	İnce bir filmde çok yansımalı ışık geçirimi.....	6
Şekil 2.4	Yansımanın iki bileşeni (düzgün ve dağınık yansıma). $n$ normal.....	10
Şekil 2.5	Kubelka-Munk sisteminin şematik gösterimi.....	12
Şekil 2.6	Yarıiletkenlerde soğurma grafiği.....	13
Şekil 2.7	Parabolik bir bant yapısında doğrudan geçiş.....	14
Şekil 2.8	Dolaylı geçişler.....	16
Şekil 2.9	Alttaş üzerindeki bir ince film boyunca ışığın geçişinin şematik gösterimi.....	18
Şekil 2.10	Spektrofotometreden elde edilen geçirgenlik spektrumundaki bazı girişim saçaklarının gösterimi.....	19
Şekil 2.11	Şekil 2.9’ da gösterilen ince filmin geçirgenlik spektrumundaki zarfların gösterimi .....	20
Şekil 2.12	Şekil 2.10’daki geçirgenlik spektrumunun maksimum ve minimum noktalarından kırılma indisinin belirlenmesi .....	22
Şekil 3.1	ZnO’ nun hegzagonal vürtzit yapısı. Büyük gri küreler O atomlarını, küçük siyah küreler Zn atomlarını göstermektedir.....	25
Şekil 3.2	ZnO’nun kaya tuzu (solda) ve çinko sülfür (sağdaki) fazları. Gri küreler O atomlarını, siyah küreler Zn atomlarını göstermektedir.....	25
Şekil 3.3	ZnO’nun ısı genleşme katsayısının sıcaklığa göre grafiği.....	27
Şekil 4.1	Cary 5000 UV-VIS-NIR Spektrofotometre Sistemi.....	29
Şekil 4.2	Cary 5000 Spektrofotometre sisteminin iç yapısının şematik gösterimi.....	30

Şekil 4.3	Katı numune tutucusunun numune bölmesine yerleştirilmesi.....	33
Şekil 4.4	Katı numune kayıcıya takılı olan V-tutucu (1) ve ayırıcı (1a).....	33
Şekil 4.5	Katı numune kayıcısı (2), pimler (2a) ve kilitleme plakası (2b). ....	34
Şekil 4.6	Çeşitli film tutucular.....	34
Şekil 4.7	İç DRA 900.....	35
Şekil 4.8	Bir entegte küre tarafından saçılan ışığın toplanması.....	36
Şekil 4.9	Numune ve küre duvarı arasında bir boşluk olduğunda geniş açı saçılımının bir kısmının kaybolması.....	38
Şekil 4.10	Geniş açılı yansımanın bir kısmının küre duvarları tarafından engellenmesi.....	38
Şekil 4.11	DRA ile birlikte verilen referans tabakaları. a) Büyük referans tabakası b) Çıkıntılı referans tabakası.....	40
Şekil 4.12	Işığı dağıtan numuneler düz bir PTFE referans tabakaya göre ölçülür.....	40
Şekil 4.13	Çıkıntılı PTFE referans tabaka. ....	40
Şekil 4.14	DRA'nın optiksel dizaynı.....	41
Şekil 4.15	Küre kapağının D konumunda dağınık yansıma, S konumunda toplam yansıma ölçülür.....	42
Şekil 4.16	Mutlak Düzgün Yansıma Aksesuarı.....	44
Şekil 4.17	Strong'un orjinal dizaynı.....	45
Şekil 4.18	Dış Düzgün Yansıma Aksesuarının Optiksel Dizaynı.....	46
Şekil 4.19	Dış Düzgün Yansıma Aksesuarı.....	46
Şekil 5.1	p-Si üzerine büyütülen ZnO:Al' nin toplam ve dağınık yansımasının dalgaboyuna göre değişimi.....	48

Şekil 5.2	p-Si üzerine büyütülen ZnO:Al' nin $(F(R)*E/d)^2 \cdot 10^{11}$ 'in enerjiye göre değişimi.....	49
Şekil 5.3	p-Si üzerine büyütülen ZnO:Al' nin farklı açılarda düzgün yansımalarının dalgaboyuna göre değişimi.....	50
Şekil 5.4	GaAs üzerine büyütülen ZnO:Al' nin toplam ve dağınık yansımalarının dalgaboyuna göre değişimi.....	51
Şekil 5.5	GaAs üzerine büyütülen ZnO:Al' nin $(F(R)*E/d)^2 \cdot 10^{11}$ 'in enerjiye göre değişimi.....	52
Şekil 5.6	GaAs üzerine büyütülen ZnO:Al' nin farklı açılarda yansımalarının dalgaboyuna göre değişimi.....	53
Şekil 5.7	Cam üzerine depolanan ZnO:Al'nin geçirgenliğinin dalgaboyuna göre değişimi.....	54
Şekil 5.8	Cam üzerine depolanan ZnO:Al'nun $(\alpha E)^2 - E'$ ye göre değişimi.....	55
Şekil 5.9	Cam üzerine depolanan ZnO'nun geçirgenliğinin dalgaboyuna göre değişimi.....	57
Şekil 5.10	Cam üzerine depolanan ZnO'nun $(\alpha E)^2 - E'$ ye göre değişimi.....	58
Şekil 5.11	Kırılma indisinin dalgaboyuna göre değişimi.....	59
Şekil 5.12	ZnO'nun dielektrik sabitinin (gerçel) enerjiye göre değişimi.....	60
Şekil 5.13	ZnO'nun dielektrik sabitinin (sanal) enerjiye göre değişimi.....	61

## ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1	Cary 5000 UV-VIS-NIR spektrofotometrenin teknik özellikleri.....	31
Çizelge 4.2	Farklı özellikteki numunelerin ölçümü için uygun referans malzemeler	39
Çizelge 4.3	İç DRA' nın özellikleri.....	43
Çizelge 4.4	Mutlak düzgün yansıma aksesuarının özellikleri.....	45
Çizelge 5.1	Farklı alttaşlar üzerine üretilmiş olan ZnO:Al' nin 400, 550 ve 600 nm dalgaboylarındaki soğurma katsayıları ( $\alpha$ ).....	56
Çizelge 5.2	Literatürde yayınlanan değerler ile bu çalışmadaki cam alttaş üzerine depolanan ZnO'nun değerlerinin karşılaştırılması.....	62

## SİMGELER DİZİNİ

$A$	Soğurma
$a$	Örgü sabiti
$c$	Işık hızı
$C_p$	Özgül ısı
$d$	Film kalınlığı
$E_g$	Yarıiletkenin enerji bant aralığı
$E_i$	İlk durum enerji seviyesi
$E_s$	Son durum enerji seviyesi
$E_p$	Fonon enerjisi
$\tilde{\epsilon}_r$	Materyalin karmaşık dielektrik sabiti
$\epsilon_1$	Karmaşık dielektrik sabitinin gerçel kısmı
$\epsilon_2$	Karmaşık dielektrik sabitinin sanal kısmı
$f$	Frekans
$h$	Planck sabiti
$hf$	Foton enerjisi
$hf_a$	Soğurma enerjisi
$hf_e$	Yayımlım enerjisi
$I$	Işık şiddeti
$k$	Dalga vektörü
$\kappa$	Sönüm katsayısı
$m_e^*$	Elektronun etkin kütlesi
$m_h^*$	Holün etkin kütlesi
$n$	Kırılma indisi
$R$	Yansıma
$R_\infty$	Ortamın dağınmık yansıması
$s$	Alttaşın kırılma indisi
$T$	Geçirgenlik
$v$	Işığın ortamdaki hızı
$\alpha$	Soğurma katsayısı
$\lambda$	Işığın dalgaboyu
$\lambda_g$	Gelen ışığın dalgaboyu
$\omega$	Açısal frekans

## 1 GİRİŞ

Günümüzde çok yaygın bir kullanım alanına sahip olan yarıiletken malzemeler transistör, diyot, güneş pili ve dedektör gibi pek çok katı hal aygıtın temelini oluşturmaktadır. Gelişen teknolojiye paralel olarak çeşitli biçimlerde ve çok işlevli devre elemanları olarak giderek daha küçük hacimler içerisine değişik görevler yüklenecek şekilde yarıiletkenlerin yerleştirilebilmesi, bu maddelerin temel tercih nedenlerinden biri olmuştur.

Yarıiletken ince filmlerin üretim teknolojileri geniş uygulama alanına sahip olduğu için, 1 nm den birkaç  $\mu\text{m}$  ye kadar uzanan kalınlık bölgesinde geniş uygulama alanına sahiptir. İnce filmlerin sentezi hacimsel materyaller için kullanılanlardan farklıdır. Materyal özellikleri analiz edildiğinde yüzey/hacim oranı ve/veya yüzey içeriği, yüzey mobilitesi, yüzey topolojisi, kristalografik yönelim ve stres etkilerinin farklı olmasından dolayı hacimsel yapıda ve ince film yapısında farklılıklar gösterdiği gözlenir.

Periyodik tablodaki II B ve VI A grubu elementlerinin etkileşimiyle oluşan bileşikler iletim ve değerlik bantları arasında oldukça geniş bant aralığı sağlayan yüksek iyonikliğe, geniş ve direk bant aralığına, yüksek optik geçirgenliğe sahiplerdir. Fotoelektrik ve opto-elektronik uygulamalarda kullanılan aygıtlara baktığımız zaman II-VI grubu bileşiklerinin ve bu grup içinde yer alan ZnO yarıiletken ince filmlerin önemi görülmektedir. Çinko elementleri periyodik tabloda geçiş elementleri grubunda yer alır. Düşük kaynama sıcaklığına sahip olduğu için özellikle pirometalurjik metal üretiminde çok belirleyici bir etmendir.

ZnO oda sıcaklığında. 3.37 eV yasak enerji bant aralığına ve yüksek eksitonik bağlanma enerjisine (60 meV) sahip önemli bir malzemedir [1,2]. Optik ve elektriksel karakterizasyonu spektral analiz, fotoiletkenlik, iletkenliğin sıcaklıkla değişimi gibi birçok yöntemle yapılabilir. Yüksek güç, yüksek sıcaklık, yüksek frekans devrelerinde kullanılabilirler. Diğer yarıiletkenlere göre yüksek enerjili elektron radyasyonuna karşı dirençli oldukları için, parçacık radyasyonunun yüksek olduğu uzay araştırmalarında ve nükleer santraller gibi karasal uygulamalarda da kullanılabilirler.

Çinko oksit (ZnO) günümüzde birçok teknolojik uygulamaları olan ve potansiyel olarak birçok yeni uygulama alanı olan bir yarıiletkendir. Bu uygulamaları:

- Morötesi (UV) ışık yayıcılar (LED'ler ve ışıklı paneller),
- Spin fonksiyonel aygıtlar (polarize ışık yayıcılar, Spin alan etkili transistörler, kuantum bazlı sayısal aygıtlar),



- Biyo-algılayıcılar,
- Gaz algılayıcılar,
- ZnO nanorod aygıtlar,
- Yüzey akustik dalga (SAW) aygıtları gibi ana hatlarıyla listelemek mümkündür.

Katkısız ZnO ince filmler yüksek optik geçirgenliğe sahip olmasına rağmen, genellikle düşük iletkenliğe sahiptirler. Ancak, III grubu metal katkılayıcılar ile (örneğin Al, In, Ga) uygun bir şekilde katkılandığında ZnO ince filmlerinin elektriksel iletkenliği artar, dirençleri azalır ve aynı derecede ısıl kararlılıkları gelişir. Alüminyum katkılı ZnO (ZnO:Al veya AZO) optik geçirgen, iletken filmler, elektriksel ve optiksel uygulama alanlarında fonksiyonel materyal olarak karşımıza çıkmaktadır. Görünür dalga boyundaki, yüksek elektriksel iletkenlikleri ile geçirgenlikleri bilimsel araştırmalarda ve geçirgen elektrot, LED'ler, LD'ler (Lazer Diyot), güneş enerjisi hücreleri, OLED'ler için anot elektrodu, dokunmatik ekranlar gibi teknolojik uygulamalarda dikkat çekicidir. Uygulama için yüksek kalitede ince AZO film hazırlamada filmin yapısal, elektriksel ve optiksel özelliklerini analiz etmek çok önemlidir.

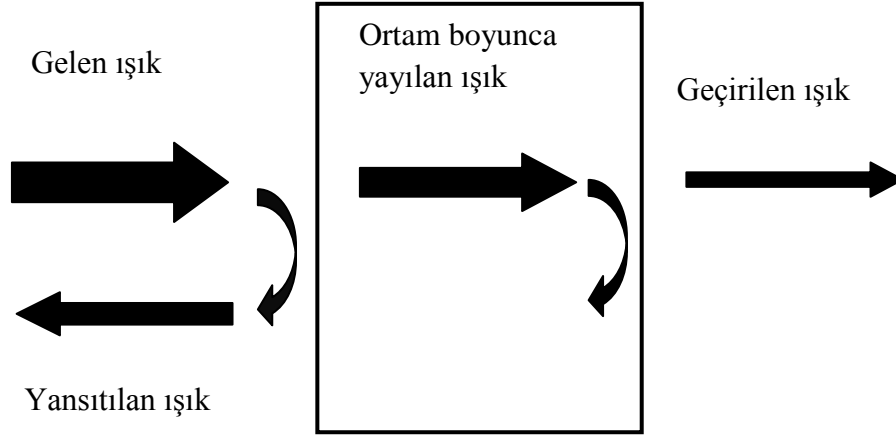
Yapılan tez çalışmasında % 10 Al katkılı ZnO filmi atmalı filtreli katodik vakum ark depolama yöntemi ile <111> yönüne  $15^{\circ}$  eğimli GaAs(100), p-Si ve cam üzerine 20 kV tetikleyici ve 500 V ark voltajı altında oda sıcaklığında büyütülmüştür. ZnO:Al (% 10) film  $500^{\circ}\text{C}$ ' de 1 saat hava atmosferinde tavlammıştır. Tavlammış ve tavlannmamış tüm filmlerin optik özellikleri spektrofotometrik ölçümler ile incelenmiştir.

ZnO:Al' nin toplam (dağınık ve düzgün yansıma) ve dağınık yansıma ölçümleri, dağınık yansıma aksesuarı (İç DRA 900) ile çift ışınlı bir spektrofotometre (Cary 5000, Varian) kullanılarak 200-800 nm aralığında ölçülmüştür. Ayrıca 30 ve 60 derecede düzgün yansıma ölçümü yapmak için Harrick Scientific's dış düzgün yansıma aksesuarları (ERA, External Reflection Accessories) kullanılmıştır.

## 2 OPTİK ÖZELLİKLER

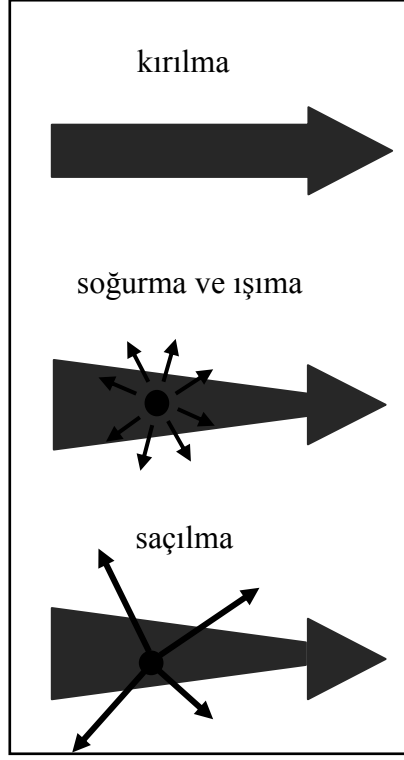
### 2.1 Optiksel Yöntemlerin Sınıflandırılması

Işık ile yarıiletkenlerin etkileşimi fotonik ve optoelektronik aygıtlar için büyük bir öneme sahiptir [3]. Işık bir yarıiletkene çarptığı zaman yansıma, geçirgenlik ve soğurma gerçekleşir. Yarıiletkenin bu cevabı ışığın foton enerjisine (ya da dalgaboyuna) bağlıdır. Şekil 2.1 bir optik ortam üzerine gelen ışık ışınını göstermektedir. Işığın bir kısmı ortamın ön yüzeyinden yansıtılır. Geri kalan kısmı ortama girer ve ortam boyunca yayılır. Eğer bu ışığın birazı arka yüzeye ulaşırsa, tekrar yansıtılabilir ya da diğer ortama geçirilebilir. Geçirilen ışığın miktarı ön ve arka yüzeylerdeki yansıtma ve aynı zamanda ortam boyunca yayılan ışığın yoluyla ilişkilidir [4].



Şekil 2. 1 Optik ortama gelen ışığın yansıması, yayılması ve iletimi[4]

Optik ortam boyunca ışık yayılırken gerçekleşebilecek olaylar Şekil 2.2' de gösterilmiştir. Kırılma, bir ışık ışınının (ya da bir başka elektromanyetik ışınının) bir saydam maddeden bir başkasına, geçerken doğrultusunu değiştirmesidir. Kırılmaya ışık hızındaki değişme neden olur. Işın yayılırken ışının kırılması ışığın şiddetini etkilemez [4].



**Şekil 2. 2** Bir ışık ışını bir optik ortam boyunca yayılırken oluşabilecek olaylar [4]

Işığın soğrulması söndürmeye neden olurken, ışığın kırılması dalganın hızındaki bir azalmaya neden olur. Materyale gelen ışık ışınının hem dalga hem parçacık yapısı düşünülerek ışığın ortam değiştirdiği göz önüne alınırsa, yani eğer gelen ışının enerjisi artarsa dalgaboyunda bir azalma görülür. Gelen fotonlarla atomlar bazen uyarılabilir. Eğer uyarılan atomlar kendiliğinden yayınımla tekrar yayılırsa, ışıma soğurmayla birlikte oluşabilir. Saçılma ışığın yeniden yönlendirilmesine neden olur. Şekil 2.2’ de gösterilen soğurma ve saçılma sürecinde okun azalan genişliği ışındaki sönmeyi gösterir [4].

Eğer ışığın frekansı ile ortamdaki atomların geçiş frekansı rezonans halinde ise soğurma yayılım boyunca meydana gelir. Bu durumda, ışın yayıldıkça sönecektir. Ortamın geçirgenliği açıkça soğurmayla ilişkilidir, çünkü sadece soğrulmayan ışık geçebilecektir [4].

Işıma, katı haldeki bir materyalde uyarılan atomlar tarafından ışığın kendiliğinden yayılma sürecine verilen genel isimdir. Işıma soğurucu bir ortamda ışığın yayılmasıyla meydana gelebilir ve ışık tüm doğrultularda yayılır.

Saçılma ışık yön değiştirdiğinde gerçekleşen bir olaydır. Fotonların toplam sayısı değişmez fakat ışık diğer yönlerde yeniden yönlendirildiği için, ileri yönde giden fotonların sayısı azalır. Dolayısıyla saçılmada soğurma gibi aynı söndürme etkisine sahiptir. Eğer saçılan ışığın frekansı değişmez ise saçılma elastik olarak adlandırılır, frekans değişirse saçılma elastik olmayan olarak adlandırılır. Eğer frekans artarsa elastik olmayan saçılma yönteminde foton enerjideki fark, ortamdan alınır ya da frekans azalırsa enerji ortama verilir [4].

## 2.2 Optik Sabitler

2.1 kısmında açıklanan optik olaylar, makroskobik seviyedeki ortamın özelliklerini belirlemek için kullanılan parametrelerin sayısı ile ölçülebilir.

Bir materyalin yüzeyinde gerçekleşen yansıma olayı  $R$  sembolüyle gösterilen yansıma ile geçirgenlik ise  $T$  (ya da transmissivity) ile belirlenir. Eğer soğurma ya da saçılma yoksa o zaman enerjinin korunumundan;

$$R + T = 1 \quad [2.1]$$

olur.

Saydam bir ortam boyunca ışığın yayılması kırılma indisi ( $n$ ) olarak tanımlanır. Kırılma indisi boşluktaki ışığın hızının ( $c$ ) ortamdaki ışığın hızına ( $v$ ) oranı ile belirlenir [4].

$$n = \frac{c}{v} \quad [2.2]$$

Işık maddeden geçerken kırılma indisi dalgaboyu ile değişir. Bu kırılma indisinin önemli özelliğidir. Kırılma indisi genel olarak dalgaboyu arttıkça azalır.

Bir optiksel ortam tarafından ışığın soğrulması ortamın soğurma katsayısı ( $\alpha$ ) ile açıklanabilir. Eğer ışın  $x$  yönünde yayılıyorsa ve  $x$  konumundaki şiddet (birim alan başına optiksel güç)  $I(x)$  ise, o zaman  $dx$  kalınlıklı bir dilimde şiddetin azalışı;

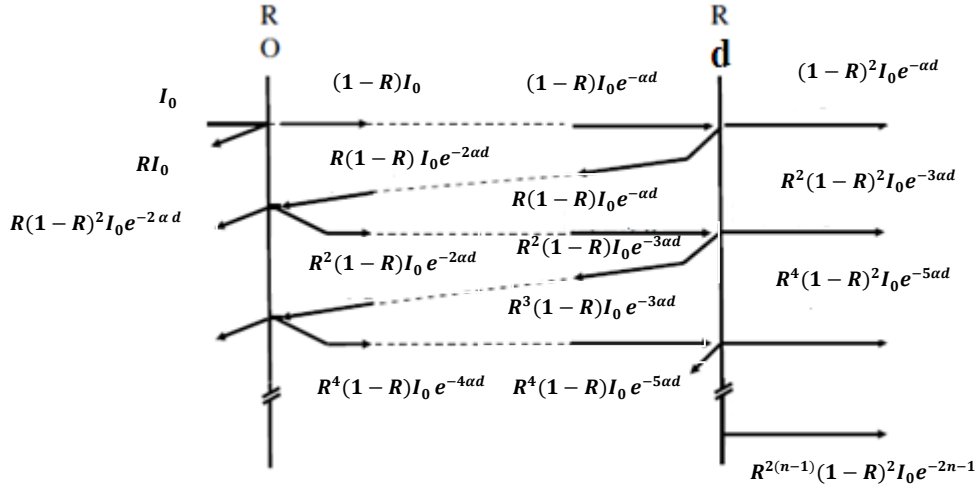
$$dI = -\alpha dx I(x) \quad [2.3]$$

ile verilir. Beer yasasını elde etmek için 2.3 denkleminin integrali alınır,

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha x} \quad [2.4]$$

burada  $I_0$ ,  $x = 0$ 'daki optiksel şiddettir. Soğurma katsayısı frekansın güçlü bir fonksiyonudur [4].

İnce filmin toplam geçirgenliğini bulmak için Şekil 2.3' te gösterildiği gibi iki bölge alabiliriz.



Şekil 2. 3 İnce bir filmde çok yansımali ışık geçirimi [5]

Girişim ihmal edildiği zaman  $d$  kalınlığındaki bir ince filme  $I_0$  şiddetinde tek renkli ışık düşürülürse film içine giren ışık miktarı  $I$ ;

$$I = (1 - R) I_0 \quad [2.5]$$

şeklinde yazılabilir. İkinci bölgeye ulaşan ışık şiddeti ise;

$$I = I_0 (1 - R) e^{-\alpha d} \quad [2.6]$$

dir. Filmden geçen ışık miktarı;

$$I = I_0 (1 - R)^2 e^{-\alpha d} \quad [2.7]$$

dir. Bu şekilde iç yansımalar devam ettirilirse yansıyan ışık miktarının her yansımada bir;

$$I = R^{2n} (1 - R)^2 I_0 e^{-(2n+1)\alpha d} \quad [2.8]$$

terimi kadar arttığı görülür. Bu artış göz önüne alınırsa filmin toplam ışık geçirgenliğinin;

$$I = (1 - R)^2 I_0 e^{-\alpha d} \left( \sum_r R^{2n} e^{-2n\alpha d} \right) \quad [2.9]$$

olduğu görülür. Bu geometrik bir seridir. Böylece toplam geçirgenlik numune tarafından yansıtılan ışık şiddetinin numune üzerine gelen ışık şiddetine oranı şeklinde tanımlanır [6]

$$T = \frac{I}{I_0} \quad [2.10]$$

Bu iç yansımalar şekilde gösterildiği gibi devam ettirilirse toplam geçirgenlik;

$$T = \frac{(1-R)^2 e^{-\alpha d}}{1-R^2 e^{-2\alpha d}} \quad [2.11]$$

şekline indirgenir. Bu son denklemden çok soğurucu bölge için  $d \gg 0$  yaklaşımı yapıldığında;

$$T = (1 - R)^2 e^{-\alpha d} \quad [2.12]$$

$T$ , daha sade bir hal alır. Burada eğer  $R$  ve  $d$  biliniyorsa, denklem  $\alpha$  için çözülebilir [5].

Bir optiksel ortamın soğurması bazen optiksel yoğunluk (O.D) cinsinden ölçülebilir. Bu bazen soğurma (absorbance,  $A$ ) olarak adlandırılır. Optiksel yoğunluk doğrudan soğurma katsayısıyla ilişkilidir.

$$A = \log_{10} \left( \frac{1}{T} \right) = -\log_{10} T \quad [2.13]$$

$$T = (1 - R)^2 e^{-\alpha d} \quad [2.14]$$

$$2.3 \log_{10} T = \ln[(1 - R)^2 e^{\alpha d}] \quad [2.15]$$

$$-2.3A = \ln(1 - R)^2 - \alpha d \quad [2.16]$$

$$\alpha = \frac{1}{d} [2.3A + \ln(1 - R)^2] \quad [2.17]$$

elde edilir. 2.17 denklemini yardımıyla soğurma katsayısı hesaplanır ve bu değer optik karakterizasyonda kullanılabilir [5].

### 2.2.1 Karmaşık Kırılma İndisi ve Dielektrik Sabiti

Bir ortamın optik özelliğini karmaşık kırılma indisi verir. Eğer bir ortamda dipollere ek olarak serbest taşıyıcılar da var ise ortamın kırılma indisinin karmaşık bir sayı ile ifade edilmesi gerekecektir. Bu durumda kırılma indisinin gerçel kısmı dalganın ortamdaki ilerlemesini, sanal kısmı (yok etme indisi) ise dalganın ortamda soğrulmasını göstermektedir. Bu genellikle;

$$\tilde{n} = n + i\kappa \quad [2.18]$$

ile tanımlanır [4].

Denklem 2.2 'de tanımlanan normal kırılma indisi ( $n$ ), karmaşık kırılma indisinin ( $\tilde{n}$ ) gerçel kısmıdır. Karmaşık kırılma indisinin ( $\tilde{n}$ ) sanal kısmı ise sönüm katsayısıdır( $\kappa$ ).

$\alpha$  ve  $\kappa$  arasındaki ilişki karmaşık kırılma indisi ile bir ortam boyunca düzlem elektromanyetik dalganın yayılımı dikkate alınarak elde edilebilir. Eğer dalga  $x$  yönünde yayılırsa, elektrik alanın konuma ve zamana bağlılığı;

$$\varepsilon(x, t) = \varepsilon_{0x} e^{i(kx - \omega t)} \quad [2.19]$$

şeklinde verilir, burada  $k$  ışığın dalga vektörü,  $\omega$  açısal frekansı,  $|\varepsilon_{0x}|$  ise  $t=0$  ve  $x = 0$ 'daki genliktir.  $n$  kırılma indisli soğurucu olmayan bir ortamda, ışığın dalgaboyu kırılma indisi ( $n$ ) ile azalır. Buna göre;

$$k = \frac{2\pi}{(\lambda/n)} = \frac{n\omega}{c} \quad [2.20]$$

olacaktır.

Denklem 2.20 soğurucu ortam olması durumunda karmaşık kırılma indisi ile geliştirilebilir [4].

$$k = \frac{\tilde{n}\omega}{c} = (n + i\kappa) \frac{\omega}{c} \quad [2.21]$$

Denklem 2.19'daki  $k$  yerine 2.21 denklemini yazılırsa;

$$\varepsilon(x, t) = \varepsilon_{0x} e^{i(\omega \tilde{n} x/c - \omega t)} = \varepsilon_{0x} e^{-\kappa \omega x/c} e^{i(\omega n x/c - \omega t)} \quad [2.22]$$

elde edilir [4].

Bir ışık dalgasının optiksel şiddeti elektrik alanın karesiyle orantılıdır, yani;  $I \propto \epsilon \epsilon^*$  dır. Buna göre şiddet,  $2(\kappa\omega/c)$  ye eşit bir azalım sabiti ile ortamda üssel olarak azalır. Denklem 2.4 'te verilen Beer yasası ile bunu karşılaştırırsak;

$$\alpha = \frac{2 \kappa \omega}{c} = \frac{4 \pi \kappa}{\lambda} \quad [2.23]$$

olur, burada  $\lambda$  boşluktaki ışığın dalga boyudur. Buna göre sönün katsayısı( $\kappa$ ) soğurma katsayısı( $\alpha$ ) ile doğrudan orantılıdır.

Maxwell denklemlerinden elde edilen standart sonuçların kullanılmasıyla bağlı dielektik sabitini ( $\epsilon_r$ ) kırılma indisiyle ilişkilendirebiliriz.

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad [2.24]$$

Bu bize kırılma indisi ( $n$ ) karmaşık ise bağlı dielektrik sabitinde ( $\epsilon_r$ ) karmaşık olması gerektiğini gösterir. Bundan dolayı karmaşık bağlı dielektrik sabiti;

$$\tilde{\epsilon}_r = \epsilon_1 + i\epsilon_2 \quad [2.25]$$

şeklinde tanımlanır [4].

Denklem 2.24' den

$$\tilde{n}^2 = \tilde{\epsilon}_r \quad [2.26]$$

olur. 2.18, 2.25 ve 2.26 denklemlerini kullanarak karmaşık kırılma indisi( $\tilde{n}$ ) ile karmaşık dielektrik sabitinin ( $\tilde{\epsilon}_r$ ) gerçel ve sanal kısımları arasındaki ilişkileri çıkarabiliriz. Burada;

$$\epsilon_1 = n^2 - \kappa^2 \quad [2.27]$$

$$\epsilon_2 = 2 n \kappa \quad [2.28]$$

ve

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \epsilon_1 + (\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad [2.29]$$

$$\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( -\epsilon_1 + (\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad [2.30]$$



Ölçülebilir optik özellikler 2.29 ve 2.30 denklemleri vasıtasıyla  $n$  ve  $\kappa'$  nın  $\epsilon_1$  ve  $\epsilon_2$ 'ye dönüştürülmesiyle bulunabilirler. Soğurma katsayısı ( $\alpha$ ) denklem 2.23 kullanılarak  $\kappa'$  dan bulunurken, kırılma indisi  $n$ 'den direk olarak hesaplanır. Yansımaya ( $R$ ) hem  $n$  hem de  $\kappa'$  ya bağlıdır.

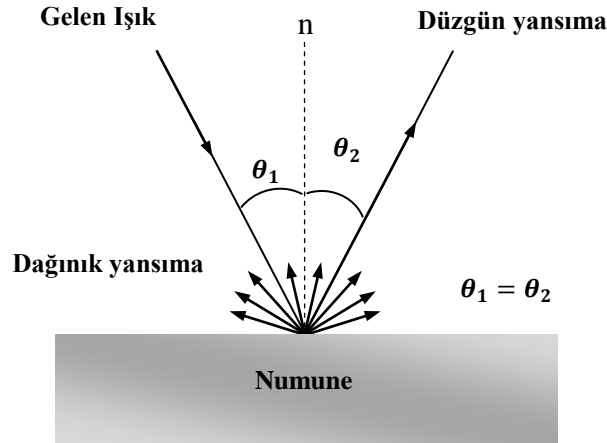
$$R = \left| \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + \kappa^2}{(n + 1)^2 + \kappa^2} \quad [2.31]$$

Bu formül normal gelişteki hava ve ortam arasındaki yansımaya verir [4].

### 2.2.2 Yansımaya

Işık ışınlarının yansıtıcı bir yüzeye çarparak doğrultu ve yön değiştirip geldiği ortama geri dönmesi olayına yansımaya denir. Yansımaya olayında ışığın hiçbir özelliği değişmez (hız, frekans, renk gibi).

Yansımaya, düzgün ve dağınık olmak üzere iki bileşenden oluşur. Düzgün yansımaya ayna gibi bir numune yüzeyinden yansımadır. Dağınık yansımaya ise mat bir görünüm veren pürüzlü yüzeyden ışığın farklı yönlerde yansımaya ile oluşur.



Şekil 2. 4 Yansımayaın iki bileşeni (düzgün ve dağınık yansımaya) (  $n$ , normal)

#### 2.2.2.1 Dağınık Yansımaya Teorisi

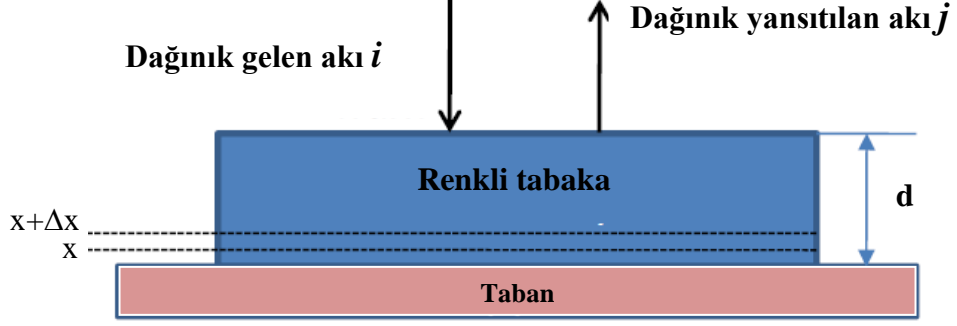
Belli bir ortam üzerine gelen ışık ortam boyunca yayılırken, kırılma, yansımaya, soğurma, kırınım ve yayılma gibi çok sayıda farklı olaylardan etkilenir. Işığın davranışı

üzerindeki net etki çoğunlukla ortamın özelliklerine göre değişmektedir. Yansıma kaynak ve gözlemci açısının tüm kombinasyonları için yansımayı tanımlayan Çift Yönlü Yansıma Dağılım Fonksiyonu (Bidirectional Reflectance Distribution Function, BRDF) tarafından tamamen karakterize edilebilir. Bunun için kaynak, materyal ve gözlemci geometrisine bağlı çiftyönlü özelliğinin belirlenmesi gerekmektedir. Işığın Fresnel yasasına göre yansıtıldığı yerde bu yansımalar her yöne dağılır (Düzgün ve dağınık yansıma). Bir yüzeyde ışığın her yöne eşit şekilde saçılması ideal dağınık yansımayı gösterir [7].

Spektrumun görünür bandında yansıma oldukça önemlidir, çünkü yansıma insanlar tarafından algılanan nesnenin rengini benzersiz olarak tanımlar. Bir takım farklı modeller spektrumun bu bölümündeki yansımayı açıklamak için geliştirilmiştir. Ancak görünür bandın dışındaki dalgaboylarına duyarlı olan sensörler kullanıldığı zaman ortamın yansıması diğer dalga bantlarında da eşit derece de önemlidir [7].

### **Kubelka ve Munk teorisi**

Kubelka ve Munk düzlemsel tabana paralel olan renkli tabakanın basit bir modelinin temelinde diferansiyel denklemlerin bir sistemini kullanarak 1931' de çok yaygın olarak kullanılan teoriyi önerdiler [8,9]. Bu teori, bir ortamın yansımasını hesaplamak için Schuster'in [10] önceden yaptığı teorisine üzerine geliştirilmiştir [7]. Kubelka-Munk teorisinde materyal boyunca gelen yönündeki akı  $i$  ve yansıma yönündeki akı  $j$  olmak üzere iki akı kullanılmıştır. Kubelka ve Munk ortamın soğurmasını  $K$  sabiti ile ortamdaki saçılmayı  $S$  sabiti ile tanımlamışlardır. Bu sabitler ortamın kalınlığından aynı oranda bağımsızlardır. Bu sistemin temelinde ortamdaki farklı tabakanın davranışını açıklamak için diferansiyel denklemler bulunmaktadır. Bu sonuçlar tabakanın davranışını açıklamak için ortamın tüm kalınlığı boyunca toplanabilir. Sistemin şematik gösterimi Şekil 2.5' te gösterilmektedir [7].



**Şekil 2. 5** Kubelka-Munk sisteminin şematik gösterimi [7]

Kubelka-Munk teorisinde birçok basitleştirilmiş varsayımlar kullanılmaktadır. Kubelka ve Munk materyalin izotropik ve homojen olduğunu varsaymaktadır, fakat materyaller kalınlıklarına göre küçük saçılma merkezleri içerirler. Buna ek olarak Kubelka ve Munk düzgün bileşeni olmayan ışığı ortamın tamamen dağıttığını ve yansıttığını varsayarlar. Sınır etkilerini önlemek amacı ile renkli tabakalara bitişik yüzeylerin düzlemsel, paralel ve sonsuz oldukları kabul edilmektedir. Floresan gibi kendiliğinden yayılımın etkileride bu teoride ihmal edilir [7].

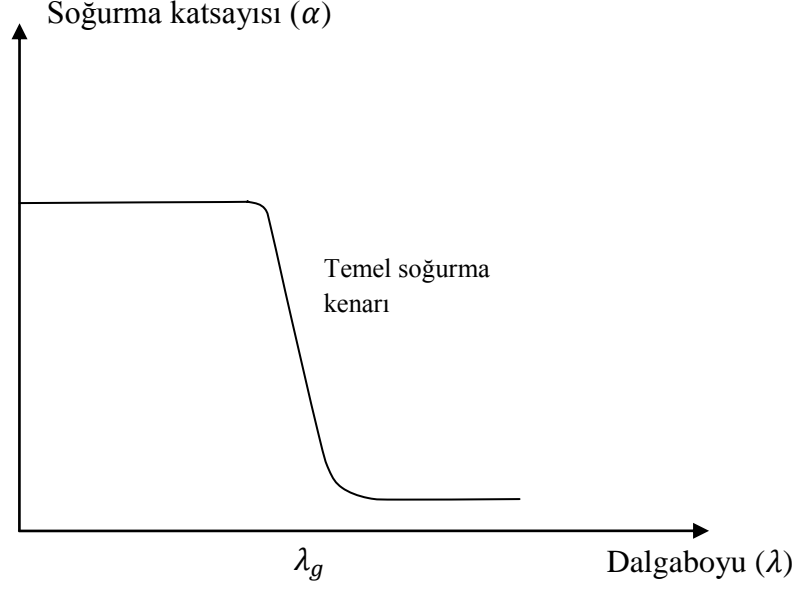
$$F(R_{\infty}) = \frac{(1 - R_{\infty})^2}{2 R_{\infty}} = \frac{K}{S} \quad [2.32]$$

Burada,  $K$  = soğurma katsayısı,  $S$  saçılma katsayısı ve  $R_{\infty}$  numunenin dağınmık yansımasıdır.

2.32 denklemini Kubelka-Munk fonksiyonu olarak adlandırılır ve bu denklem bu teorinin dağınmık yansıma için çeşitli teorilerin niçin çok yaygın şekilde kullanıldığını gösterir [11].

### 2.2.3 Soğurma

Yarıiletken bir numunenin bant aralığını belirlemek için en yaygın şekilde kullanılan yöntem optik soğurma yöntemidir.



**Şekil 2. 6** Yarıiletkenlerde soğurma grafiği [12]

Şekil 2.6' da gelen ışığın dalga boyunun soğurmaya karşı grafiği verilmiştir. Burada  $\lambda_g$ ; gelen ışının soğurulabilmesi için gerekli dalgaboyu sınırındır. Bu dalga boyundan daha büyük dalgaboylarında yani daha düşük enerjili ışınlarda yarıiletken soğurma yapmamıştır. Gelen ışığın dalga boyu  $\lambda_g$  değerine ulaştığı anda yarıiletkenin soğurması ani bir artış göstererek yüksek bir değere ulaştıktan sonra enerji artışı foton sayısını arttırmayacağından soğurma sabit kalmıştır. Yasak enerji aralığı  $E_g$  olan bir yarıiletkene, enerjisi  $E_g$  'ye eşit veya daha büyük enerjili bir ışın geldiğinde ( $h f \geq E_g$ ) yarıiletken soğurma yapabilir dolayısıyla soğurma için sağlaması gereken koşul;

$$\lambda \leq h c / E_g \quad [2.33]$$

eşitliği ile ifade edilir. Burada  $\lambda$ ; gelen ışığın dalgaboyu,  $E_g$ ; yarıiletkenin yasak enerji aralığı,  $h$ ; Planck sabiti,  $c$ ; ışık hızını ifade etmektedir [12].

### 2.2.3.1 Temel Soğurma

Temel soğurma, değerlik bandından iletim bandına bir elektronun, banttan banda veya eksiton geçişlerine karşılık gelen soğurmadır. Temel soğurma kendini soğurma spektrumundaki hızlı artışla belli eder ve bir yarıiletkenin yasak enerji aralığını belirlemede kullanılır.

Bir fotonun momentumu  $h/\lambda$ , kristalin momentumu  $h/a$  ( $a$ , örgü sabiti) ile kıyaslandığında çok küçük olduğundan foton soğurma esnasında elektronun momentumu korunmalıdır. Verilen bir  $hf$  foton enerjisi için soğurma katsayısı  $\alpha(hf)$ , elektronun ilk durumdan son duruma geçiş olasılığı  $P_{i_s}$ , ilk durumdaki elektron yoğunluğu  $n_i$  ve son durumdaki elektron yoğunluğu  $n_s$  ile orantılıdır ve

$$\alpha(hf) = A \sum P_{i_s} n_i n_s \quad [2.34]$$

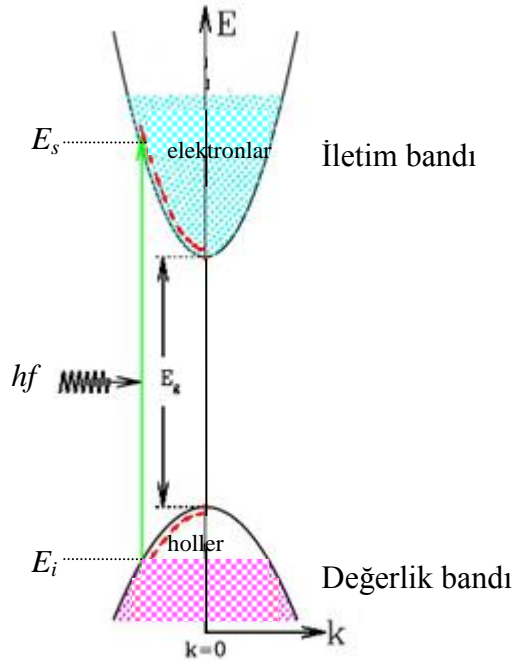
ile verilir. Bu bağıntı  $0 \text{ K}$ 'de katkısız yarıiletkenler için tüm alt durumların dolu ve tüm üst durumların boş olduğu kabul edilmiştir [5].

### 2.2.3.1.1 İzinli Doğrudan Geçişler

Şekil 2.7' de gösterildiği gibi iki doğrudan enerji çukuru arasında soğurma geçişleri düşünülürse, tüm momentum korunumlu geçişler izinli olmalıdır.  $E_i$ ' deki her başlangıç durumu  $E_s$  deki son durumla birleştirilir ve;

$$E_s = hf - |E_i| \quad [2.35]$$

olarak verilir.



Şekil 2. 7 Parabolik bir bant yapısında doğrudan geçiş

Parabolik bir bantta;

$$E_s - E_g = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_e^*} \quad \text{ve} \quad E_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_h^*} \quad [2.36]$$

dir. Böylece,

$$hf - E_g = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left( \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) \quad [2.37]$$

elde edilir.

Birleştirilmiş durumların yoğunluğu;

$$N(hf) d(hf) = \frac{8 \pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = \frac{(2m_r)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} (hf - E_g)^{1/2} d(hf) \quad [2.38]$$

ile verilir. Burada  $m_r$  indirgenmiş kütle olup;

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \quad [2.39]$$

şeklinde verilir. Soğurma katsayısı;

$$\alpha(hf) = A^* (hf - E_g)^{1/2} \quad \text{ve} \quad A^* \approx \frac{q^2 \left( 2 \frac{m_h^* m_e^*}{m_h^* + m_e^*} \right)^{5/2}}{n c h^2 m_e^*} \quad [2.40]$$

ile verilir [5].

### 2.2.3.1.2 Yasaklı Doğrudan Geçişler

Bazı materyallerde kuantum seçim kuralları direk geçiş için  $k = 0$  da izinsiz,  $k \neq 0$  da izinlidir. Geçiş olasılığı  $k^2$  ile artar. Şekil 2.8 için bunun anlamı geçiş olasılığının  $(hf - E_g)$  ile orantılı artmasıdır. Doğrudan geçişlerde durum yoğunluğu  $(hf - E_g)^{1/2}$  ile orantılı olduğundan soğurma katsayısı;

$$\alpha(hf) = A' (hf - E_g)^{3/2} \quad [2.41]$$

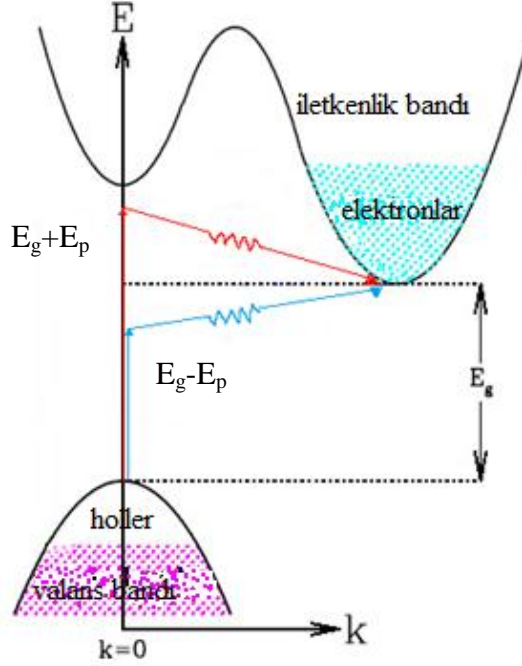
ile verilir. Burada  $A'$ ,

$$A' = \frac{4}{3} \frac{q^2 \left( 2 \frac{m_h^* m_e^*}{m_h^* + m_e^*} \right)^{5/2}}{n c h^2 m_e^* m_h^* hf} \quad [2.42]$$

şeklinde verilir [5].

### 2.2.3.1.3 Dolaylı Bantlar Arasında Dolaylı Geçişler

Bir geçiş enerji ve momentumun her ikisinde bir değişim gerektirirse, iki aşamalı işlem gerekir. Momentum Şekil 2.8’ de görüldüğü gibi fonon etkileşmesi yoluyla korunur.



Şekil 2. 8 Dolaylı geçişler

Bu fononların her biri tipik bir  $E_p$  enerjisine sahiptir.  $E_s - E_i$  geçişini sağlamak için bir fonon ya soğurulur ya da yayınlanır.

Yayımlım durumunda;

$$hf_e = E_s - E_i + E_p \quad [2.43]$$

Soğurma durumunda;

$$hf_a = E_s - E_i - E_p \quad [2.44]$$

bağıntıları ile verilir [5].

Dolaylı geçişlerde değerlik bandının tüm doldurulmuş durumları iletim bandının tüm durumları ile bağlı olabilir.  $E_i$  enerjili başlangıç durumlarının yoğunluğu,

$$N(E_i) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} (2m_h^*)^{3/2} |E_i|^{1/2} \quad [2.45]$$

dir.  $E_s$  enerjili durum yoğunluğu ise,

$$N(E_s) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} (2)^{3/2} (E_s - E_g)^{1/2} \quad [2.46]$$

dir. 2.43 ve 2.44 denklemlerini kullanarak;

$$N(E_s) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} (2m_e^*)^{3/2} (hf - E_g \mp E_p + E_i)^{1/2} \quad [2.47]$$

şeklinde yazılabilir. Soğurma katsayısı 2.45 denkleminin ve 2.46 denkleminin verileri ile çarpımından elde edilir;  $\alpha$ , fononlarla etkileşme olasılığıyla orantılıdır. Fononların sayısı Bose-Einstein istatistiği ile verilir [6].

$$N_p = \frac{1}{\exp \frac{E_p}{kT} - 1} \quad [2.48]$$

Böylece soğurma katsayısı;

$$\alpha(hf) = A f(N_p) \int_0^{-(hf - E_g \mp E_p)} |E_i|^{1/2} (hf - E_g \mp E_p + E_i)^{1/2} dE_i \quad [2.49]$$

şeklinde yazılabilir. Gerekli matematiksel işlemlerden sonra fonon soğurmasıyla geçiş için soğurma katsayısı  $hf > E_g - E_p$  olmak üzere;

$$\alpha_a(hf) = \frac{A (hf - E_g + E_p)^2}{\exp \frac{E_p}{kT} - 1} \quad [2.50]$$

bulunur. Fonon yayılımı olasılığı  $N_p + 1$  ile orantılıdır. Fonon yayımlı geçiş için soğurma katsayısı  $hf > E_g + E_p$  için;

$$\alpha_e(hf) = \frac{A (hf - E_g - E_p)^2}{1 - \exp(-\frac{E_p}{kT})} \quad [2.51]$$

Hem fonon yayılımı hem de fonon soğurulması,  $hf > E_g + E_p$  durumunda mümkün olduğundan soğurma katsayısı  $hf > E_g + E_p$  için;

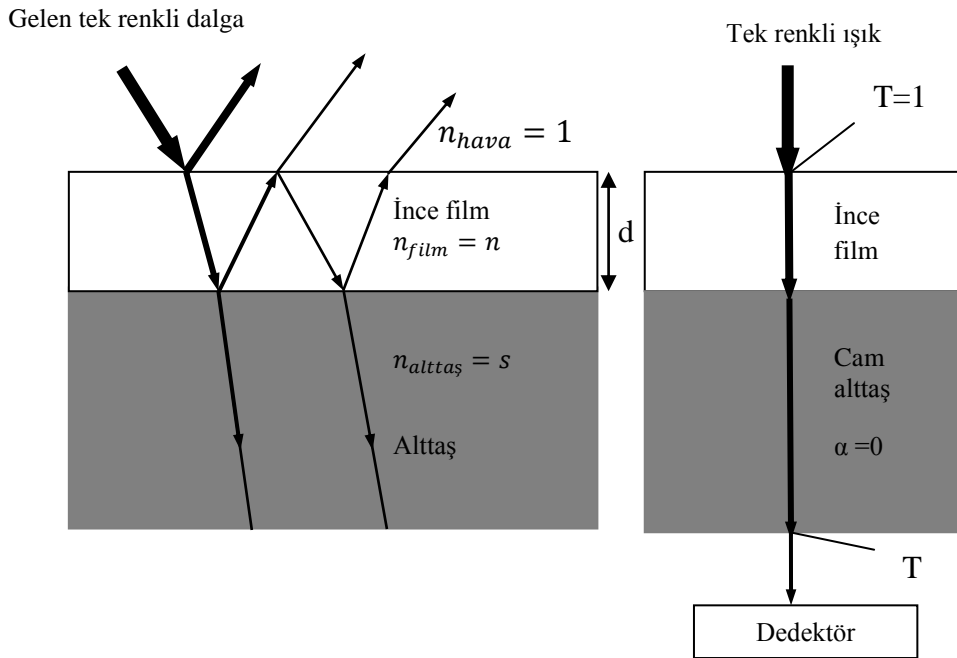


$$\alpha(hf) = \alpha_a(hf) + \alpha_e(hf) \quad [2.52]$$

şeklinde gösterilir [6].

### 2.2.4 Film Kalınlığı Hesabı

Geçirgen cam ya da diğer alttaşlar (örneğin safir) üzerine depolanan ince filmlerin optik sabitleri geçirgenliğin incelenmesiyle ölçülür. Optik geçirgenlik ( $T$ ) filmin kalınlığı ( $d$ ), gelen ışığın dalgaboyu ( $\lambda$ ), alttaşın kırılma indisi ( $s$ ), filmin kırılma indisi ( $n$ ) ve optik soğurma katsayısına ( $\alpha$ ) bağlı olan oldukça karmaşık bir fonksiyondur [13].



**Şekil 2. 9** Alttaş üzerindeki bir ince film boyunca ışığın geçişinin şematik gösterimi[13]

Şekil 2. 9' da gösterildiği gibi filme tek renkli dalga geldiğinde filmin geçiş kenarında çoklu girişimler oluşacaktır. Şekil 2. 9' da gösterildiği gibi kırılma indisi  $s$  olan alttaş üzerine depolanan ince filmin optik özellikleri Swaneopel [14] tarafından geliştirilen geçirgenlik formülünden;

$$T = \frac{A x}{B - C x \cos \theta + D x^2} \quad [2.53]$$

hesaplanabilir. Burada;

$$A = 16 n^2 s \quad [2.54a]$$

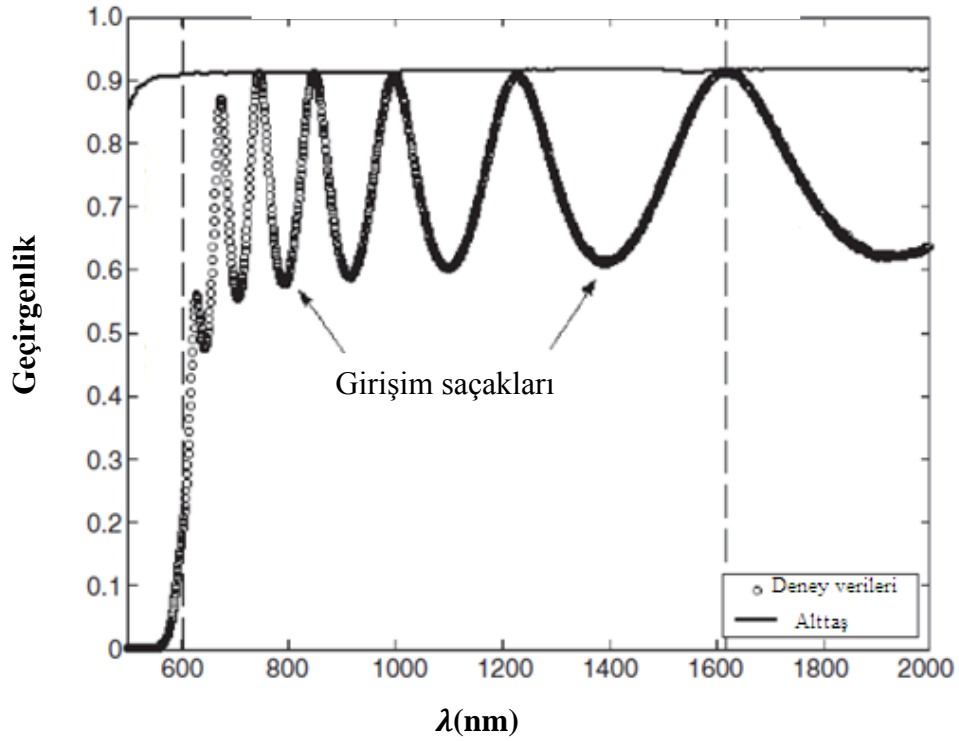
$$B = (n + 1)^3 \quad [2.54b]$$

$$C = 2 (n^2 - 1) (n^2 - 1) \quad [2.54c]$$

$$D = (n^2 - 1)^3 (n - s^2) \quad [2.54d]$$

$$\theta = \frac{4 \pi n d}{\lambda} \quad [2.54e]$$

$$x = \exp(-\alpha d) \quad [2.54f]$$

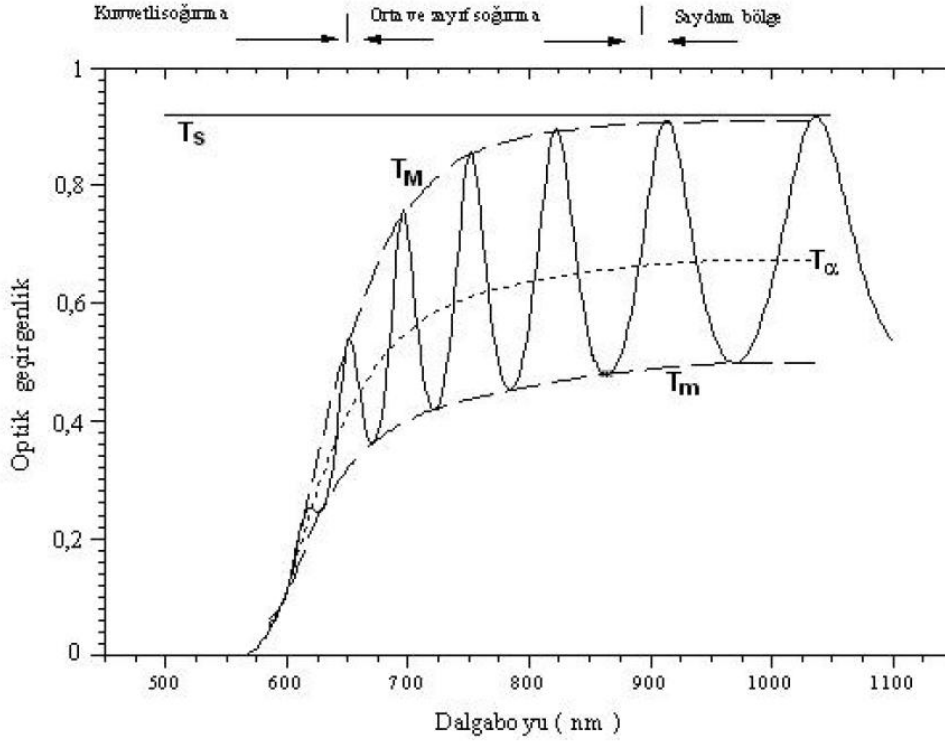


**Şekil 2.10** Spektrofotometreden elde edilen geçirgenlik spektrumdaki bazı girişim saçaklarının gösterimi[13]

Bazı ince filmlerde optik özellikler bulunmadan önce alttaşın kırılma indisi ( $s$ ) bulunmalıdır. Kontrol edilebilir dalgaboyu aralığında soğurmanın ihmal edildiği durumlarda ( $K \leq 0.1$  ve  $\alpha \leq 10^{-2}$ ) cam alttaş için kırılma indisi;

$$s = \frac{1}{T_s} + \sqrt{\frac{1}{T_s^2} - 1} \quad [2.55]$$

dir. Burada  $T_s$  spektrofotometreden ölçülen geçirgenlik değeridir.



**Şekil 2. 11** Şekil 2.9’ da gösterilen ince filmin geçirgenlik spektrumundaki zarfların gösterimi [15]

Şekil 2.11’ de gösterildiği gibi geçirgenlik spektrumunda girişim saçaklarının maksimumu ve minimumu etrafında iki zarf oluşturulmuştur. Bu iki zarf optik özellikleri bulmak için kullanılabilir.

Optik geçirgenlik spektrumunda maksimumları;

$$2nd = m\lambda \quad [2.56]$$

ve minimumları;

$$2nd = (m + 1/2) \lambda \quad [2.57]$$

denklemleri belirler ( m tamsayı olmak üzere).

2.54e denklemindeki  $nd$  yerine 2.56 denklemini yazılır ve  $\cos \theta = 1$  kullanılırsa girişim desenindeki maksimumlar ( $T_M$ );

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad [2.58]$$

ve 2.54e denklemindeki  $nd$  yerine 2.57 denklemini yazılır ve  $\cos \theta = -1$  kullanılırsa girişim desenindeki minimumlar ( $T_m$ );

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad [2.59]$$

elde edilir [13].

Şekil 2.11 geçirgenlik eğrisinin maksimum ve minimumlarından geçen  $\lambda'$  nın bir fonksiyonu olan  $T_M(\lambda)$  ve  $T_m(\lambda)$  zarf eğrilerini gösterilmektedir. Şekil 2.11 geçirgenlik spektrumunun geçirgenlik değerine göre 3 bölgeye ayrıldığını gösterir.

Kuvvetli soğurma bölgesinde  $T_M$ ,  $T_m$  ve  $T_\alpha$  birleşir.  $x \ll 1$  olduğundan 2.53 denklemini;

$$T_\alpha \approx \frac{Ax}{B} \quad [2.60]$$

olarak ifade edilir. 2.60, 2.54a ve 2.54b denklemlerinin kullanılmasıyla;

$$x = \frac{(n+1)^3 (n+s)^2}{16 n^2 s} \quad [2.61]$$

elde edilir [13].

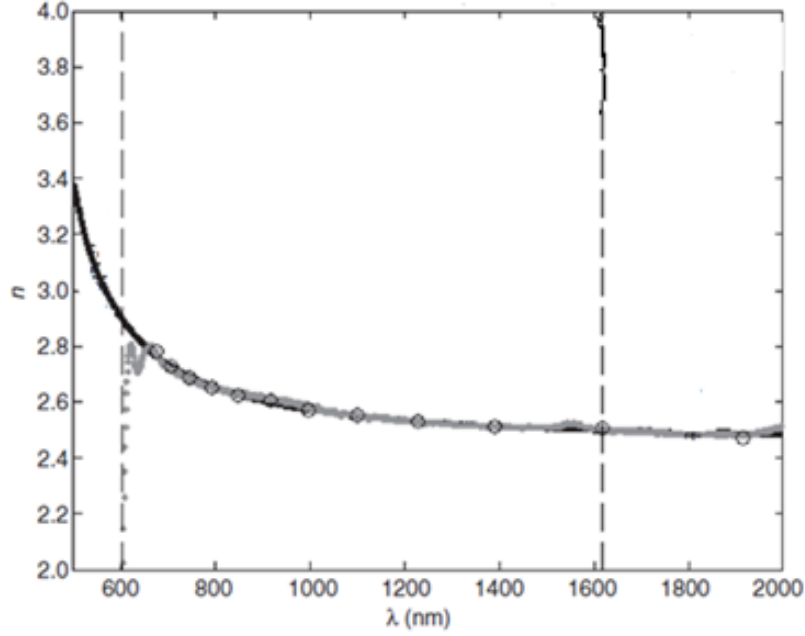
Orta ve zayıf soğurma bölgesi soğurma katsayısının sıfır olmadığı, kırılma indisi ve  $x$  değerinin birden küçük olduğu bölgedir. 2.54, 2.58 ve 2.59 denklemlerinden yararlanılarak;

$$\frac{1}{T_M} - \frac{1}{T_m} = \frac{2C}{A} \quad [2.62]$$

elde edilir. 2.54 denklemlerinden yararlanılarak;

$$n = \left[ N + (N^2 - s^2)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad [2.63]$$

elde edilir. Burada  $N = 2s \left[ \frac{T_M - T_m}{T_M T_m} \right] + \frac{s^2 + 1}{2}$  dir. Soğurma bölgesindeki kırılma indisi ( $n(\lambda)$ ) 2.63 denkleminde hesaplanır [13].



**Şekil 2.12** Şekil 2.10'daki geçirgenlik spektrumunun maksimum ve minimum noktalarından kırılma indisinin belirlenmesi [13]

Filmin kırılma indisleri  $n_1$  ve  $n_2$  ve bunlara karşılık gelen  $\lambda_1$  ve  $\lambda_2$  olmak üzere filmin kalınlığı  $d$ ,

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2 (\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1)} \quad [2.64]$$

ile hesaplanır. Filmin kalınlığı ( $d$ ) hesaplandıktan sonra,  $x(\lambda)$  değeri bulunabilir. 2.58 denklemindeki  $T_M$  kullanıldığında;

$$x = \frac{E_M - [E_M^2 - ((n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4))]^{1/2}}{(n - 1)^3 (n - s)^2} \quad [2.65]$$

bulunur. Burada  $E_M = \frac{8n^2s}{T_M} + (n^2 - 1)(n^2 - s^2)$ ' dir.

Saydam bölge soğurma katsayısının ( $\alpha$ ) 0,  $x$  değerinin 1 olduğu bölgedir. Böylece;

$$T_M = \frac{2s}{s^2+1} \quad \text{ve} \quad T_m = \frac{4n^2s}{n^4 + n^2(s^2+1) + s^2} \quad [2.66]$$

elde edilir. Filmin kırılma indisi( $n$ ), sadece  $n$  ve  $s$ ' ye bağılı olan  $T_m$ ' den hesaplanabilir[13]

.

### 3 ZnO İNCE FİMLERİN ÖZELLİKLERİ

#### 3.1 Giriş

ZnO 60 meV 'lik geniş eksiton bağlanma enerjisi ve 3.37 eV'lik geniş band aralığına sahip olduğundan dolayı morötesi dedektör, lazer diyodlar, LED'ler gibi optik aygıtlar için kullanılabilen çok geniş uygulama alanlarına sahiptir. ZnO ince filmler görünür bölgede yüksek geçirgenlik ve yüksek elektriksel iletkenlik değerlerine sahiptir. Sahip olduğu özelliklerden dolayı ZnO ince filmler çalışıldığı ilk günden bu yana birçok ince film depolama yöntemiyle üretilmiş ve üretilen bu filmlerin elektriksel, optik ve yapısal özellikleri incelenmiştir. Günümüzde de ZnO ile ilgili çalışmalar yoğun olarak devam etmektedir [16].

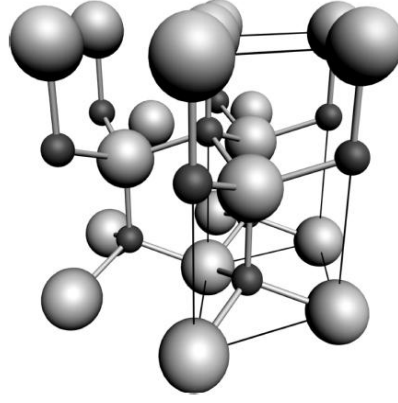
ZnO ince filmler kendi doğalarından dolayı n-tipi yapıya sahiplerdir. P tipi ZnO ince film elde etmek için n tipi ZnO ince filmleri katkılanmak gerekir. P tipi ZnO ince filmler elektriksel aygıtlar için yapılan uygulamalar açısından oldukça önem taşımaktadırlar. Güvenilir bir p tipi ZnO ince filmin üretilmesi ZnO optoelektronik aygıtların gelişimini oldukça hızlandıracaktır [16].

#### 3.2 Kristal Yapısı

Çinko oksit üç farklı kristal formunda bulunmaktadır. Bunlar hegzagonal, kübik çinko sülfür ve kaya tuzu'dur.

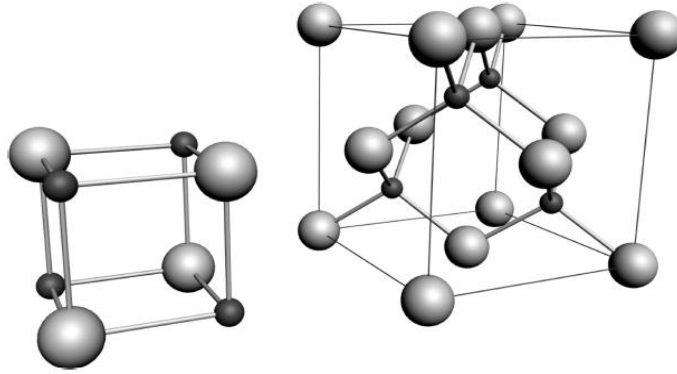
Çinko oksit hegzagonal (vürtzit-wurtzite) kristal örgüsü yapısında, çinko atomlarının konumu hemen hemen hegzagonal sıkı paket yapısındadır. Her oksijen atomu, dört çinko atomundan oluşan tetragonal (dörtgen) grubun arasında bulunur. Bütün bu dörtköşeli noktalar kristale polar simetrisini kazandıran hegzagonal eksenlerle aynı doğrultudadır. Çinko oksit'in vürtzit örgüsü Şekil 3.1' de görülmektedir [17].

Çinko oksit ince filmlerin külçe vürtzit yapısında olduğu birçok çalışmada belirtilmiştir. Tanecik büyüklüğü 50–300 Å arasında değişir. ZnO'da donör seviyesi taşıyıcı konsantrasyonuna bağlı olarak 0.02–0.05 eV aralığındadır. [17].



**Şekil 3. 1** ZnO' nun hegzagonal vürtzit yapısı. Büyük gri küreler O atomlarını, küçük siyah küreler Zn atomlarını göstermektedir [17].

Vürtzit faza ek olarak ZnO aynı zamanda Şekil 3.2' de gösterildiği gibi kübik çinko sülfür ve kaya tuzu ( NaCl ) yapılarında da kristalleşir. Kaya tuzu ZnO yaklaşık 10 GPa gibi yüksek basınçta yarı kararlı fazdadır ve epitaksiyel olarak kararlı değildir. Çinko sülfür ZnO sadece kübik yapılar üzerine büyütüldüklerinde kararlıdır. Teorik hesaplamalar çok yüksek sıcaklıklarda kübik sezyum klorür fazının mümkün olabileceğini gösterir [16].



**Şekil 3. 2** ZnO'nun kaya tuzu( soldaki ) ve çinko sülfür( sağdaki ) fazları. Gri küreler O atomlarını, siyah küreler Zn atomlarını göstermektedir [16].



### 3.3 Mekaniksel Özellikler

Mekaniksel özellikler yarıiletkenin külçe modülü, piezoelektrik gibi özellikleriyle ilişkilidir. Hegzagonal kristaller için  $C_{11}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$  ve  $C_{44}$  olmak üzere beş bağımsız elastik sabiti vardır.[6]

Düşük simetriden ZnO vürtzit yapı kendiliğinden varolan polarizasyona neden olur. Geleneksel yaklaşım kullanılarak oluşturulan bazı deneyler vardır. Bu deneylerde aynı materyalin düşük ve yüksek simetriden yapıları için kendiliğinden olan polarizasyon değerleri belirlenir ve birbirleriyle karşılaştırılır. Tipik sertlik ölçümleri üçgen veya küresel şekil gibi kesin şekillere sahip olan geleneksel elmas uç tip kullanılarak yapılır. Materyalin sertliği ile ilgili bilgiler derinliğe duyarlı girinti ölçümlerinden elde edilebilir [17].

### 3.4 Elektriksel Özellikler

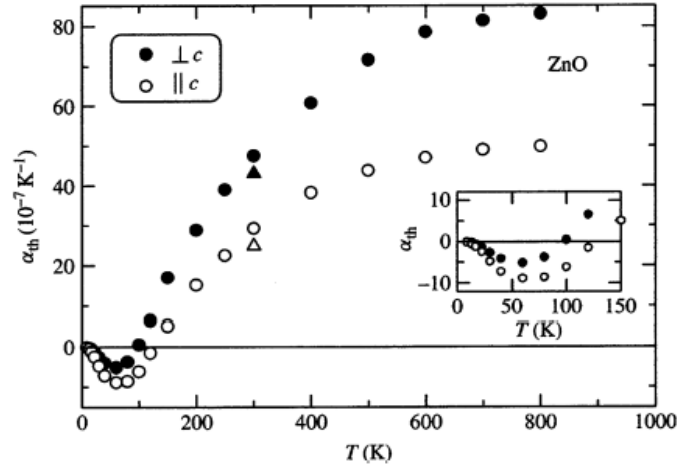
ZnO ince filmlerin iletkenliğini açıklayabilmek için elektriksel özellikler üzerine birçok araştırma yapılmaktadır. Film hazırlamada kullanılan metotlar ve büyütme oranı taşıyıcının sıcaklığı ve yapısı, ilk kaplama ısıl işlem sıcaklığı, film kalınlığı, katkı türü ve konsantrasyonu gibi kaplama parametreleri iletkenliği etkileyen faktörlerdir. Bütün yarıiletken oksit filmler n-tipi iletkenliğe sahiptir. Bu filmlerdeki iletkenlik elektronları, oksijen boşluklarıyla veya fazla metal iyonlarıyla birlikte donör seviyelerinden sağlanır. Bu donör seviyeleri kimyasal indirgenme ile kolayca sağlanır. ZnO'in katkılanması iletkenliği artırır [17].

### 3.5 Isıl Özellikler

Bu kısımda vürtzit ZnO' nun ısıl genişleme katsayısını, ısıl iletkenliğini ve özgül ısısını içeren ısıl özellikler anlatılacaktır.

#### 3.5.1 Isıl genişleme katsayıları

Materyalin ısıl genişleme katsayısını sıcaklığın bir fonksiyonu olarak örgü bozulması açıklar. ZnO için 300 K' deki ısıl genişleme katsayıları  $\alpha_a = 4,31 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  ve  $\alpha_c = 2,49 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  olarak verilir.



Şekil 3. 3 ZnO'nun ısıl genişleme katsayısının sıcaklığa göre grafiği [16]

### 3.5.2 Isıl iletkenlik

Bir yarıiletkenin ısıl iletkenliği  $\kappa$  ( $W\ cm^{-1}K^{-1}$ ) yüksek güçteki ve yüksek sıcaklıktaki cihazlar dikkate alındığı zaman önemli bir özelliktir. Isıl iletkenlik serbestliğin dönme, titreşim ve elektronik derecelerde etkilenmiş kinetik bir özelliğidir ve saf bir kristaldeki fonon-fonon saçılmaları tarafından çoğunlukla sınırlandırılır. Diğer çoğu yarıiletkenler gibi ZnO' da çok sayıda nokta kusurları içerir ve bu kusurlar ısı iletkenliği üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Isıl iletkenliğin en yüksek ölçüm değerleri buhar fazda büyütülen numuneler üzerinde yapılan çalışmalarda alınmıştır [16].

### 3.5.3 Özgül Isı

Materyalin özgül ısısı materyal içindeki örgü titreşimleri, serbest taşıyıcılar ve kusurlardan etkilenir. Yüksek kalite ve saflıktaki kristallerdeki özgül ısı ölçümleri için literatürde kullanılabilir veriler sınırlıdır. ZnO'nun özgül ısı kapasite değeri sabit basınçta  $C_p = 40.3\ J\ mol^{-1}\ K^{-1}$ , dir [16].

### 3.6 Optik Özellikler

ZnO 'nun oda sıcaklığındaki enerji band aralığı mor ötesi bölgede yayılıma uygun olan 3.37 eV 'tur. Bu yüzden ZnO GaN ( 3.4 eV ) ve ZnSe (2.7 eV) ile karşılaştırıldığında mavi-morötesi yayıcı olarak daha ilgi çekicidir.

Yarıiletkenin optik özellikleri iç ve dış etkiler olmak üzere sınıflandırılır. İç geçişler valans bandındaki holler ile iletim bandındaki elektronlar arasında olmaktadır. Dış geçişler, katkılama veya kusurların enerji band aralığında kesikli enerji seviyelerini meydana getirmeleriyle bağlantılıdır.

Işımanın sona ermesi ve ışınım pikinin genişleme etkileri olduğu için yarıiletkenlerin optik geçişleri düşük sıcaklıklarda gözlenmektedir. Bu nedenle yarıiletkenlerin optik geçişlerinin incelemeleri düşük sıcaklıkta ( $\sim 4 K$ ) yapılır. Yarıiletkenlerin boyutlarının küçülmesiyle kuantum etkileri ve yüzey etkilerine bağlı olarak optik özelliklerde ilginç değişimler ortaya çıkar [18].

### 3.7 Alüminyum Katkılı ZnO (ZnO:Al)

Katkısız ZnO ince filmler yüksek optik geçirgenliğe sahip olmasına rağmen, genellikle düşük iletkenliğe sahiptirler. Ancak, III grubu metal katkılayıcılar ile (örneğin Al, In, Ga) uygun bir şekilde katkılандığında ZnO ince filmlerinin elektriksel iletkenliği artar, dirençleri azalır ve aynı derecede ısıl dengeleri gelişir. Alüminyum katkılı ZnO (ZnO:Al veya AZO) optik geçirgen, iletken filmler, elektriksel ve optiksel uygulama alanlarında fonksiyonel materyal olarak karşımıza çıkmaktadır. Görünür dalga boyundaki, yüksek elektriksel iletkenlikleri ile geçirgenlikleri bilimsel araştırmalarda ve geçirgen elektrot, LED'ler, LD'ler (Lazer Diyot), güneş enerjisi hücreleri, OLED' ler için anot elektrodu, dokunmatik ekranlar gibi teknolojik uygulamalarda dikkat çekicidir. Uygulama için yüksek kalitede ince AZO film hazırlamada filmin yapısal, elektriksel ve optiksel özelliklerini analiz etmek çok önemlidir.

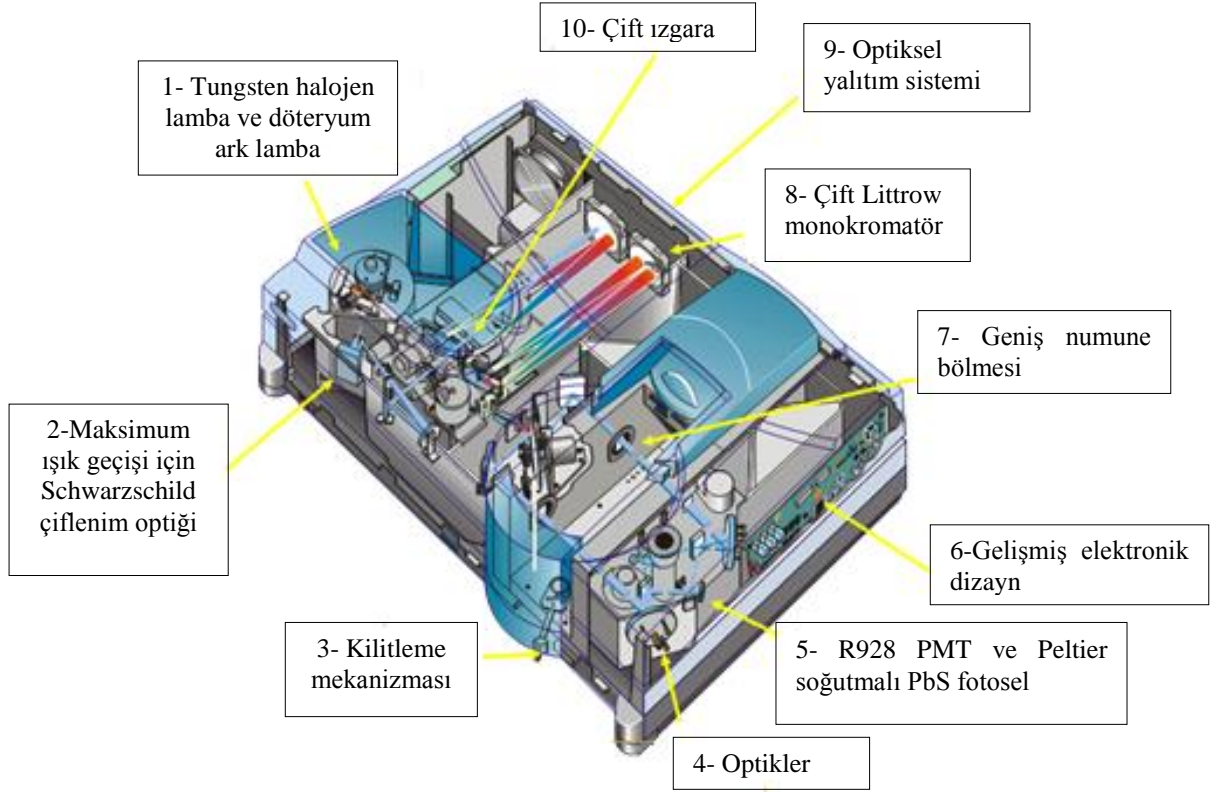
#### 4 CARY 5000 UV-VIS-NIR SPEKTROFOTOMETRE SİSTEMİ

Bu bölümde Cumhuriyet Üniversitesi Nanoteknoloji laboratuvarında kurulu olan ve bu çalışmada kullanılan Cary 5000 UV-VIS-NIR Spektrofotometre sisteminin detaylı incelenmesi yapılmıştır.



**Şekil 4.1** Cary 5000 UV-VIS-NIR Spektrofotometre Sistemi

Cary 5000 UV-VIS-NIR Spektrofotometre sisteminin dalgaboyu aralığı 175 nm-3300 nm arasında ultraviyole – görünür bölge ve yakın kızılötesi arasındadır. Cary 5000 Spektrofotometre UV-VIS-NIR spektrofotometrelerinin araştırma-kalite referansıdır. Bu cihaz düşük ultraviyolede yakın kızıl ötesine kadar doğru ölçümlere imkan verir. Cary 5000 yüksek performansın gerekli olduğu akademik laboratuvarlar ve endüstride kullanmak için ideal bir spektrofotometredir [19].



**Şekil 4. 2** Cary 5000 Spektrofotometre sisteminin içyapısının şematik gösterimi[19]

Cary 5000 Spektrofotometre çift ışınlı, oran kaydedici, çift Littrow monokromatöre sahip (Şekil 4.1’de 8), morötesi-görünür-yakın kızılötesinde ölçüm yapan, 2x400 mm odak uzaklığına sahip, çift yönlü ızgaraları (Şekil 4.1’de 10) bulunan ve bilgisayar tarafından kontrol edilen bir sistemdir. Gürültüyü düşürmek ve çevre koşulları etkisini önemli ölçüde azaltmak için optiksel yalıtım sistemi özelliği vardır (Şekil 4.1’de 9) . UV-VIS dedektörü olarak yüksek performanslı R928 fotonçoğaltıcı tüp, yakın kızılötesi (NIR) dedektörü olarak en uygun düşük gürültü ve temel lineer performans için elektroısısal (electrothermally) kontrollü kurşun sülfür fotosel (photocell) kullanılmıştır (Şekil 4.1’de 5). Görünür ve yakın kızılötesi kaynak tungsten halojen, UV kaynak olarak döteryum ark lamba kullanılmıştır (Şekil 4.1’de 1). Dalgaboyu doğruluğunu otomatik olarak doğrulamak için Hg lamba modülü standart olarak verilir. Lambalar önceden ayarlanmıştır ve kolayca değiştirilir. “Plug-and-Go” lamba tasarımlarının geniş bir yelpazesini destekler. Benzersiz hassasiyetteki kilitleme mekanizması (Şekil 4.1’de 3) spektrofotometrenin ışık yolundaki aksesuarları hızlı ve tekrarlanabilir olarak yerleştirmemizi sağlar. Cary kilitleme mekanizması aletleri hizalamak için kullanılır.

Çizelge 4.1 Cary 5000 UV-VIS-NIR spektrofotometrenin teknik özellikleri[19]

<b>Monokromatör</b>	Çift Littrow monokromatör
<b>Izgara</b> (Çift taraflı 70x45 mm)	
UV-VIS:	250 nm de 1200 çizgi / mm
NIR:	1192 nm'de 300 çizgi/mm
<b>Işın Ayırma Sistemi:</b>	Işık kesici 30 Hz
<b>Dedektörler</b>	
UV- VIS:	R928 fotonçoğaltıcı tüp
NIR:	Peltier soğutmalı PbS fotosel
<b>Sınırlayıcı Çözünürlük (nm)</b>	
UV-VIS	< 0.05
NIR	< 0.2
<b>Dalgaboyu aralığı (nm)</b>	175 – 3300
<b>Dalgaboyu tekrarlanabilirliği ( nm )</b>	
Bir UV-VIS çizgi kaynağının tekrarlayan taramasının pik ayrımı:	< 0.025
Bir NIR çizgi kaynağının tekrarlayan taramasının pik ayrımı:	< 0.1
UV-VIS daki 10 ölçümdeki standart sapma:	< 0.05
NIR daki 10 ölçümdeki standart sapma:	< 0.025
<b>Dalgaboyu doğruluğu ( nm )</b>	
UV-VIS:	+ / - 0.1
NIR:	+ / - 0.4
<b>Fotometrik doğruluk (Abs):</b>	
0.3 Abs(Çift açıklık yöntemi )	
UV-VIS:	< 0.0003

Çizelge 4.1 Cary 5000 UV-VIS-NIR spektrofotometrenin teknik özellikleri (devam)

<b>Fotometrik lineerlik(Abs)</b> (Filtre tekniği eklenerek yapılan tüm testler, UV-Vis 500 nm ;NIR: 1200 nm)	
UV-VIS	
1 Abs	< 0.0005
2 Abs	< 0.001
3 Abs	< 0.005
NIR	
1 Abs:	< 0.001
2 Abs:	< 0.005
<b>Fotometrik ekran</b>	
Abs:	9.9999
%T:	200.0000
<b>Fotometrik kararlılık ( Abs / hr ):</b>	< 0.0002
<b>RBA ile birlikte Fotometrik aralık ( Abs ):</b>	8

Cary 5000 UV-VIS-NIR Spektrofotometresinin aksesuarları:

- Katı Numune Tutucu
- İç Dağınık Yansımaya Aksesuarı ( İç (Internal) DRA 900)
- Mutlak Düzgün Yansımaya Aksesuarı
- Dış (External) Düzgün Yansımaya Aksesuarı ( HARRICK ERA 30G ve 60G)

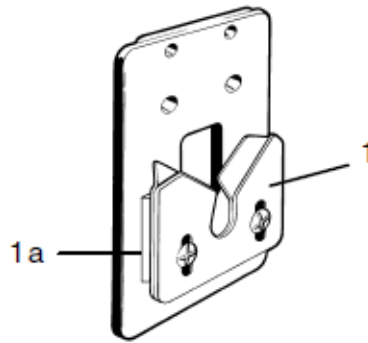
#### 4.1 Katı Numune Tutucu

Katı numune tutucu filtreler, cam, tekstil ve diğer katı numunelerin geçirgenlik ve soğurma ölçümlerinin yapılması için kullanılır.



**Şekil 4. 3** Katı numune tutucusunun numune bölmesine yerleştirilmesi

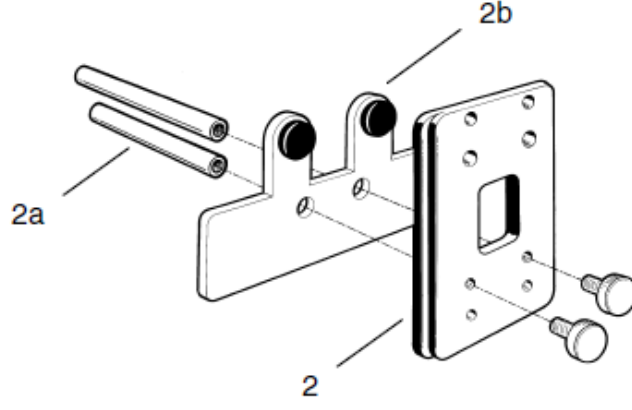
Cary 5000 iki katı numune tutucu ile birlikte gelir. Her katı numune tutucu standart, 1 mm, 5 mm, 10 mm gibi çeşitli açıklıklardaki katı numune kayıcı ile birlikte gelir. Katı numuneleri tutması için iki tane 'V' tutucu verilmektedir. Bunlar katı numune kayıcıları üzerine iki vidayla tutturulur. Numuneler V-tutucu ve katı numune kayıcısı arasında yerleştirilir. İnce numuneler sadece kenarları tutulacak şekilde yerleştirilir.



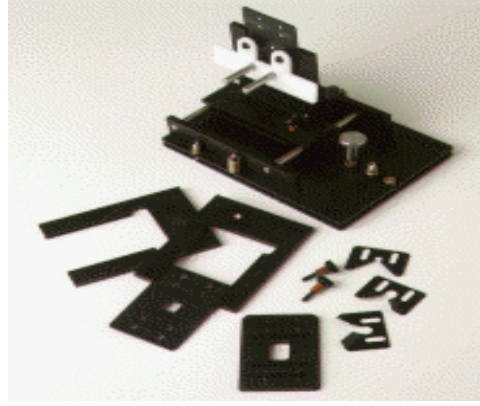
**Şekil 4. 4** Katı numune kayıcıya takılı olan V-tutucu (1) ve ayırıcı (1a)

Alternatif olarak, aşağıdaki şekilde gösterildiği gibi 2 tane 40 mm'lik pimler kullanarak katı numune kayıcısına kilitleme plakası takabilirsiniz. Bu düzenleme büyük numuneleri ölçmek için kullanılır [20].





**Şekil 4. 5** Katı numune kayıcısı (2), pimler (2a) ve kilitleme plakası (2b)



**Şekil 4. 6** Çeşitli film tutucular

#### **4.2 Dağınık Yansıma Aksesuarı (İç (internal) DRA 900)**

Dağınık yansımayı ölçmek için kullanılan aksesuar genellikle entegre küredir. Boyalı yüzeylerin yansıma spektrumlarının elde edilmesi, renk ölçümleri ve karakterizasyonu ve güneş enerjili malzemelerin karakterizasyonu entegre kürenin uygulamaları arasındadır. Entegre küreler, numunenin saçılma etkileri sonucunda ışık kaybı nedeniyle standart tekniklerin yetersiz kaldığı yerlerde bulanık, yarı saydam veya opak malzemelerin geçirgenliğini ölçmek için kullanılırlar. Mercek gibi cihaz ışınını dağıtan numuneler dağınık yansıma aksesuarıyla ölçülebilir.



**Şekil 4. 7 İç DRA 900**

Cary 5000 iç dağınık yansımaya aksesuarı 110 mm çaplı bir entegre küreden oluşmaktadır. Kaplama Politetrafloroetilen (PTFE) dir. Politetrafloroetilen (PTFE) (Teflon) polimerin ticari adıdır. Teflon, florlanmış etilen polimeri olan bir politetrafloroetilendir. Flor atomlarıyla doymuş uzun ve düz bir karbon zincirinden meydana gelmiş moleküler yapı, atomlar arasındaki kuvvetli bağlar sebebiyle oldukça inert özelliklere sahiptir. Isıya, kimyevi maddelere, neme, elektrik atlamasına (dielektrik), sürtünmeye dayanıklı olan Teflon hiçbir maddeye yapışmaz, sürtünme katsayısı bütün katı cisimlerinden küçüktür (0,06). Politetrafloroetilen (PTFE) UV VIS performansını korurken, NIR performansını ortaya koyar.

Küre kolaylıkla cihazın numune bölmesindeki kilitleme mekanizmasına yerleştirilir. Numunenin yansımaya ölçümü bir referans malzemeye (PTFE) ya da standart referans malzemeye göre yapılır. Referans malzeme alt yapıyı oluşturmak için kullanılır[21].

#### **4.2.1 Teori**

Entegre küreler genellikle yansımaya ve geçirgenlik ölçerler. Bağlı spektral yansımaya aynı geometrik ve spektral koşullar altında standart bir yüzey kadar numune tarafından yansıtılan akış oranı olarak tanımlanır. Benzer şekilde bağlı spektral geçirgenlik aynı geometrik ve spektral koşullar altında standart bir yüzey kadar numune tarafından geçirilen akış oranı olarak tanımlanır. Geçirgenlik için standart yüzey havadır. Entegre

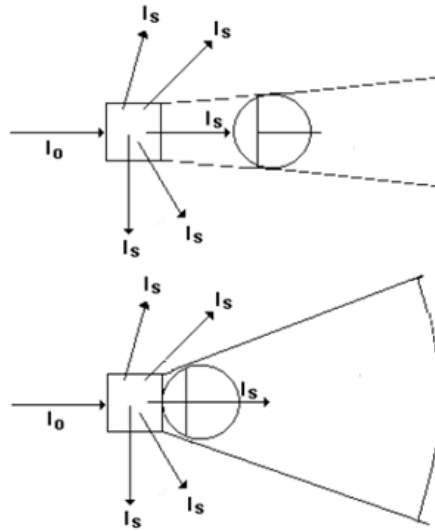
kürenin geometrisinden dolayı, çoğu yansıtılan ya da geçirilen ışını toplama yeteneğine ve dedektörü entegre eden bir sinyalin varlığına sahiptir.

#### 4.2.1.1 Yansıma ölçümleri

İlk olarak, PTFE referansı ile yansıma deliği kapatılır ve bir alt yapı (zero-baseline) alınır. Daha sonra PTFE referansı çıkarılır ve numune yansıma deliğine yerleştirilir. Numune yüzeyinden yansıyan ışın küre tarafından toplanır. Dolayısıyla yansıma referansa göre ölçülür.

Toplam (düzgün ve dağınık, S) ya da sadece dağınık yansıma (D) iki farklı şekildeki küre deliğine numunenin yerleştirilmesi ile ölçülebilir. Düzgün yansıma, toplam yansımadan dağınık yansımanın çıkarılması ile hesaplanabilir ya da Cary Mutlak Düzgün Yansıma Aksesuarı düzgün yansımanın kesin değerini vermek için kullanılabilir.

#### 4.2.1.2 Geçirgenlik ölçümleri



**Şekil 4. 8** Bir entegre küre tarafından saçılan ışığın toplanması. ( $I_0$  = gelen ışığın şiddeti,  $I_s$  =saçılan ışığın şiddeti)

Entegre küre saçılan ışının yüksekçe verimli bir toplayıcısıdır. Dizaynından dolayı, dağınık yansıma aksesuarı yüksek alttaban (background) soğurması, zayıf sinyal-gürültü oranı ve eğimli alt yapı içeren saçıcı numuneler ile ilişkili olan

problemlerin çoğunun üstesinden gelir. Opak ya da dağıtıcı katı numunelerin geçirgenliği ölçüldüğü zaman DRA kullanılırken, bu aksesuar aynı zamanda bulanık olan sıvıların ölçümlerinde de kullanılabilir.

#### **4.2.1.3 Doğruluğa ve hassasiyete etki eden faktörler**

DRA kullanıldığı zaman ölçüm doğruluğunu etkileyebilen önemli faktörler:

##### **4.2.1.3.1 Açıklık alanı/ Toplam yüzey alanı oranı**

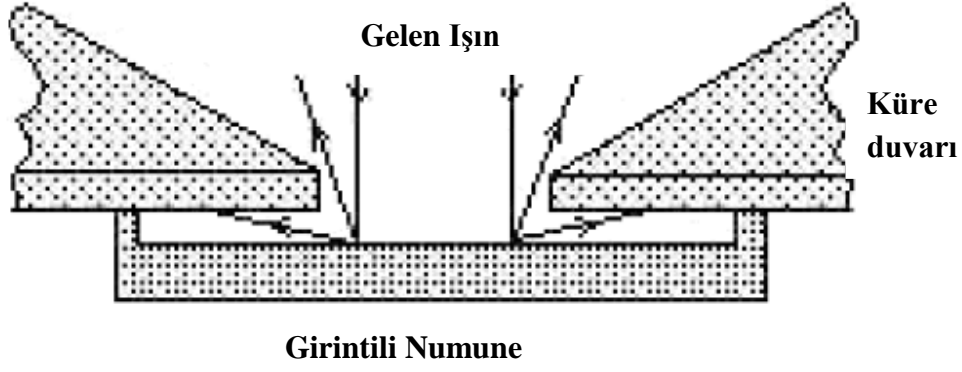
Yansıyan ışığın bir kısmı deliğin kenarlarından kaçar. Bu sinyal gürültü oranı azaltan yani ölçümün hassasiyetini azaltan etkiye sahiptir. CIE'ye (Uluslararası Aydınlatma Komisyonu) göre bu oran  $< \%10$  dur. Bu rakam Cary İç DRA için sadece  $< \%3$  'tür.

##### **4.2.1.3.2 Düzgün olmayan kaplama, eskime ya da kirlenme**

Bu aksesuar hem kusursuz toz yoğunluğu hem de kürenin içinin düzgün kaplanmasını sağlayan benzersiz bir işlemle Politetrafloroetilen (PTFE) ile kaplanmıştır. PTFE uzun ömürlüdür ve sarı değildir. PTFE'nin yansıması 200-2500 nm arasında  $\% 96$  üzerindedir ve 350-1800 nm arasında  $\% 99$  'dan daha fazladır. Küre sigara ya da diğer kirleticilere maruz kalmazsa sonsuza kadar yansımasını korur. Plastik malzemeler ile teması kaplamayı kirlendirir.

##### **4.2.1.3.3 Numunenin yanlış yerleştirilmesi**

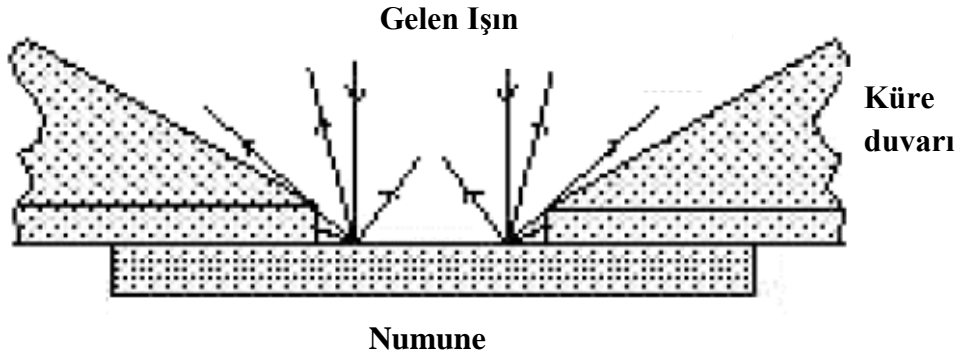
Teori, numune yerleşiminin küre duvarının içine uyum sağlayacağını varsayar. Fakat numune küre duvarının dışındaki bir yere yerleştirilirse küre duvarı ile numune arasındaki boşluk yansıyan ışığın kaybolmasına neden olur. Bu da büyük hatalara yol açabilir.



**Şekil 4. 9** Numune ve küre duvarı arasında bir boşluk olduğunda geniş açı saçılımının bir kısmının kaybolması.

#### 4.2.1.3.4 Girintili numune

Teori numunenin küre duvarının içine denk geleceği şekilde yerleştirildiğini varsayar. Ancak numune küre duvarının dışına yerleştirilirse delik boşluğu kenarları sonlu bir kalınlığa sahiptir ve geniş açılarda yansıtılan ışının bir kısmı küre duvarı tarafından kesilebilir. Yansıma deliğinin kenarları bu hatayı azaltmak için uygun kaplanmışır.



**Şekil 4. 10** Geniş açılı yansımanın bir kısmının küre duvarları tarafından engellenmesi.

#### 4.2.1.3.5 Referans ışın zayıflaması:

Numune ışınındaki aksesuar, ışık ışınına oldukça çok zayıflattığı zaman referans ışın zayıflaması çok faydalı olur. Böyle durumlarda, referans ışının zayıflaması gürültüyü arttıracaktır ve dedektör iki önemli ölçüde farklı sinyaller görmeyeceği için, cihazın dinamik aralığı önemli ölçüde artacaktır. Kelepçeler bu amaç için referans ışın

penceresinde kullanılır. Eğer referans ışın zayıflamasına gerek olursa, metalik vidalar tavsiye edilir.

#### 4.2.1.3.6 Kaçak ışık

Eğer yayılan ışın, yansıma deliğinde çok fazla yoğunlaşırsa, küre duvarının yansımalarının bir kısmı numunenin yansıması ile karışır. Eğer bu alt yapı ve numune ölçümü arasında uyumlu değilse bu yüksek bir ölçüm verir.

#### 4.2.1.3.7 Parlak tuzak hatası

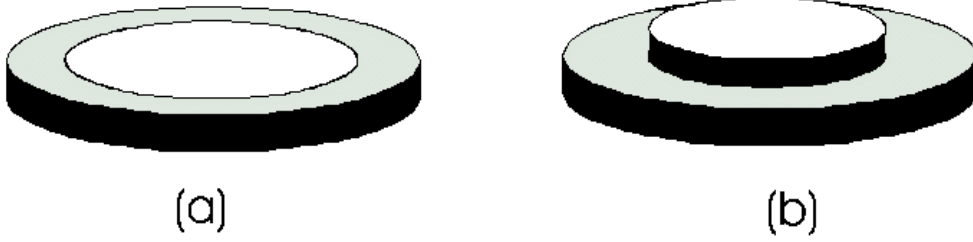
Sadece dağınık yansıma ölçülmek istendiğinde düzgün bileşenin soğrulması için parlak tuzak hatası kullanılır. Parlak tuzaklar tipik olarak cilalı siyah piramit şeklinde ışık tuzakları, mat siyah kaplı oyuklar ya da ustura bıçağı Fresnel ışık tuzaklarıdır. Bu nedenle, pek çok numunenin yansıması standart boyutlu ışık tuzakları tarafından engellenemeyen düzgün piklere genişletilmiştir. Cary DRA geçirgenlik deliğinin dışındaki düzgün bileşeni yansıtması ile bu hataların kaynağını yok eder.

#### 4.2.1.3.8 Referans malzemeler ve numune arasındaki farklar

Referans malzemenin numune ile benzer özelliklere sahip olması ve yansımalarının benzer olması önemlidir. Eğer çok kötü yansıtan bir malzeme son derece yansıtıcı referans malzemeye göre ölçülürse büyük hatalar çıkabilir.

Çizelge 4.2 Farklı özellikteki numunelerin ölçümü için uygun referans malzemeler [21]

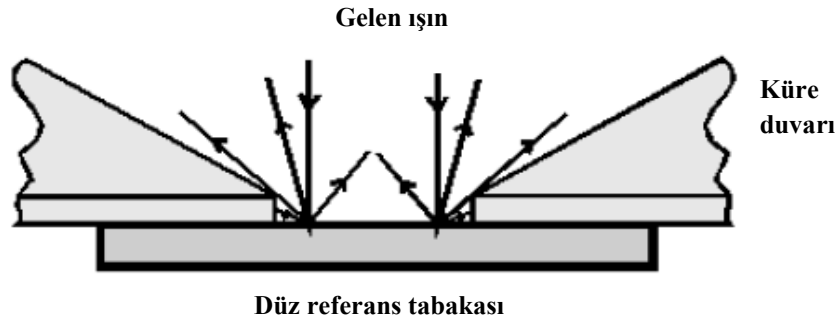
Yüzey tipi	Yansıma	Referans Disk
Mat	Yüksek	PTFE referans tabaka
Mat	Düşük	Labsphre dağınık yansıma standartları
Parlak	Yüksek	Çıkıntılı PTFE referans tabaka
Parlak	Düşük	NIST SRM 2021



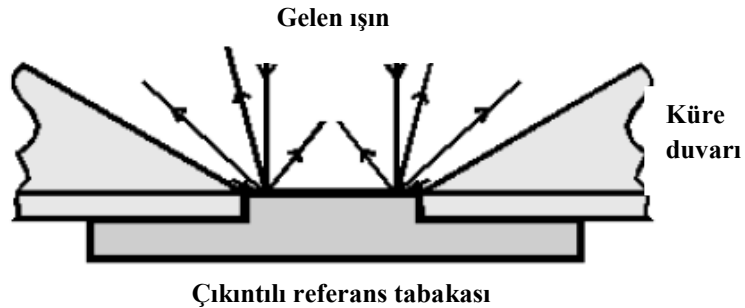
Şekil 4. 11 DRA ile birlikte verilen referans tabakaları. a) Düz referans tabakası  
b) Çıkıntılı referans tabakası

#### 4.2.1.3.9 Referans malzemedeki hata

Eğer bir değeri hesaplamak için kullanılan referans malzeme doğru değilse, bu numunenin yansımalarının belirlenmesini engelleyecektir. Referans malzemeleri çiziksiz ve temiz tutmak için özen gösterilmelidir.



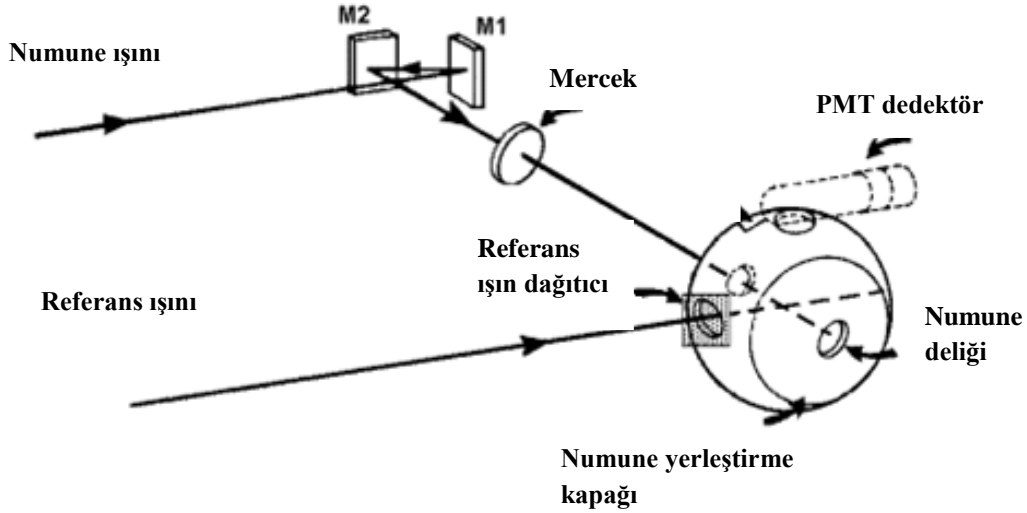
Şekil 4. 12 Işığı dağıtan numuneler düz bir PTFE referans tabakaya göre ölçülür.



Şekil 4. 13 Düzgün numuneler çıkıntılı PTFE referans tabakasına göre ölçülür.

#### 4.2.2 Optik Dizayn

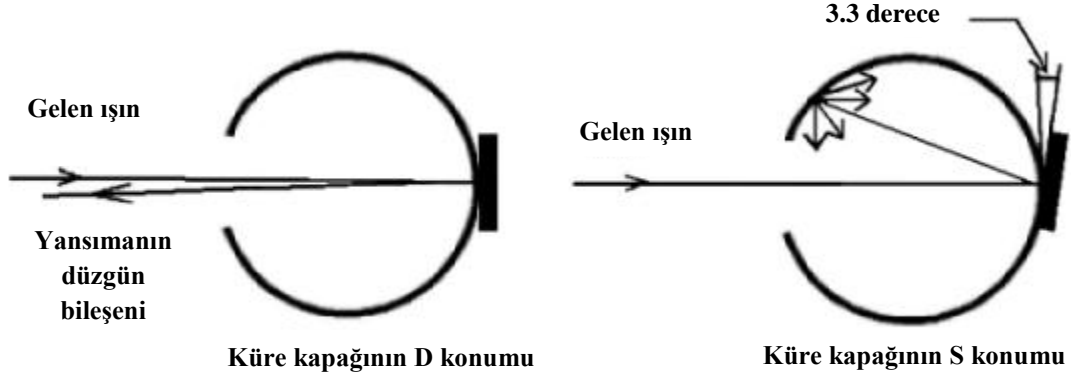
İç DRA-900 aksesuarının optisel dizaynı Şekil 4.13'te gösterilmiştir.



Şekil 4. 14 DRA'nın optik dizaynı

1. Numune ışını M1 aynasına çarpar ve M2' den yansır.
2. Işın mercekler vasıtasıyla yol alır ve geçirgenlik deliği içinde ve yansıma deliği üzerinde odaklanır.
3. Yansıyan ışın dedektör tarafından ölçülmeden önce küre boyunca yayılır.
4. Referans ışın referans deliği boyunca direk olarak küreye girer ve yayılır.
5. Çıkarılabilir numune yerleştirme kapağı D ve S olmak üzere iki konuma sahiptir:
  - a) D konumunda, numune düzleminin normaline gelen ışının açısı yaklaşık sıfır derecedir. Yansımanın düzgün bileşeni geçirgenlik deliği boyunca geri yansıtılır ve açılı merceklerin bükülmesiyle tekrardan küre içine girişi engellenir. Bu konumda sadece dağınık yansıma ölçülür.
  - b) S konumundaki kapak ile, gelen açı minimum 3.3 derecedir. Düzgün bileşen küre duvarına çarpacaktır ve küre içinde dağılacaktır. Böylece toplam yansıma ölçülmüş olacaktır.





**Şekil 4. 15** Küre kapağının D konumunda dağınık yansıma, S konumunda toplam yansıma ölçülür.

Küre 5 deliğe sahiptir:

- 1) Numune ışın geçirgenlik deliği ( 19 mm x 17 mm )
- 2) Numune ölçüm deliği ( 16 mm çaplı )
- 3) Referans ışın deliği ( 11mm x 13 mm )
- 4) NIR dedektör deliği ( 11 mm çaplı )
- 5) Foton çoğaltıcı tüp (PMT) deliği ( oval, 30 mm uzunluk, 14 mm genişlik )

Fotonçoğaltıcı tüp numune referans ışını tarafından aydınlatılan kürenin üstüne yerleştirilmiştir. Işın görüntü boyutları, geçirgenlik deliği 11 mm x 13.44 mm, yansıma deliği 12.50 mm x 7.11 mm'dır [21].

### 4.2.3 Özellikleri

Çizelge 4. 3 İç DRA' nın özellikleri [21]

+85 volt DC		<b>DRA 900</b>	<b>DRA 1800</b>	<b>DRA 2500</b>
<b>Dalgaboyu aralığı(nm)</b>	<b>Cary 4000</b>	200-900	200-900	200-900
	<b>Cary 5000</b>	200-900	200-1800	200-2500
	<b>Cary 6000i</b>	200-900	200-1800	200-1800
<b>Dedektörler</b>	<b>UV/ VIS</b>	R928 PMT	R928 PMT	R928 PMT
	<b>NIR</b>		TE <sup>#</sup> soğutmalı InGaAs	TE <sup>#</sup> soğutmalı InGaAs
<b>Küre yarıçapı</b>	110 mm			
<b>İç kaplama</b>	Politetrafloroetilen(PTFE)			
<b>Kaplama yoğunluğu</b>	1 gr/cm <sup>3</sup>			
<b>Kaplama kalınlığı</b>	4 mm			
<b>Delik alanı/toplam yüzey alanı oranı</b>	%3			
<b>Yansıma deliği boyutu</b>	16 mm yarıçaplı			
<b>Mimumum numune boyutu</b>	Yaklaşık 8 mm x 12 mm			
<b>Maksimum numune boyutu</b>	100 mm x 200 mm			

Yukarıda mavi renkli olan kısımlar aletin ve DRA'ların tavsiye konfigürasyonunu işaret eder. Diğer konfigürasyonlardaki çalışmaktadır fakat performansı sabit değildir.

### 4.3 Mutlak (Absolute) Düzgün Yansıma Aksesuarı

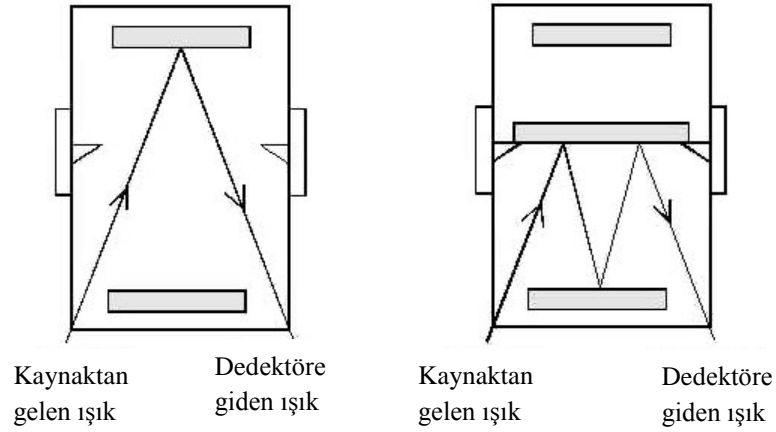
Mutlak düzgün yansıma aksesuarı ayna gibi bir numune yüzeyinden yansımayı ölçmek için tasarlanmıştır. Mutlak düzgün yansıma aksesuarının uygulamaları arasında ayna ya da parlak boyalar gibi yüzeylerin farklı tiplerinin düzgün yansımalarının ölçümü vardır. Bunlara ek olarak, bu aksesuar ince kaplamaların film kalınlıklarının ölçümü ya da optik yüzeyin parlama derecesinin belirlenmesinde kullanılabilir. Numuneler karşılaştırmalı ölçümlere olanak veren her iki ışına da yerleştirilebilir.



Şekil 4.16 Mutlak Düzgün Yansıma Aksesuarı

Bu aksesuar Cary 5000 nin numune bölmesine yerleştirilir. Optik elemanlar, diğer ölçümler için diğer aksesuarların cihaza yerleştirilmesi ve çıkarılmasına çabucak ayarlanmasına imkan veren çıkarılabilir düzleme monte edilmiştir.

Bu aksesuar ilk defa Strong tarafından tanımlanan VW şeklinin (Şekil 4.17) bir modifikasyonunu kullanır. Strong'un yöntemi numune yansıma ölçümü ve kalibrasyon yapmak için karşılaştırma aynaları gibi uyumlu aynalar kullanarak mutlak düzgün yansımayı hesaplar. Bu yöntemdeki problem, karşılaştırma aynalarının başlangıçta olduğu gibi her zaman aynı kalacağını varsaymasıdır [21].



Şekil 4.17 Strong'un orjinal dizaynı.

#### 4.3.1 Özellikleri

Çizelge 4.4 Mutlak düzgün yansıtma aksesuarının özellikleri

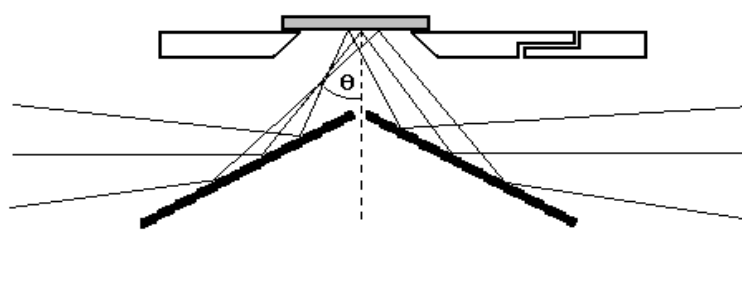
<b>Dalga boyu aralığı:</b>	175-3300 nm
<b>Geliş açısı:</b>	7°
<b>Minumum numune boyutu:</b>	İkili yansımalar için 25 mm yarıçaplı, tek yansıtma için 12 mm yarıçaplı
<b>Maksimum numune boyutu:</b>	Numune bölmesinin yüksekliği ve genişliği sınırlandırır.
<b>Maksimum numune kalınlığı:</b>	35 mm

#### 4.4 Dış (External) Düzgün Yansıtma Aksesuarı

Bu aksesuar sabit gelme açısıyla bir düzlem yüzeyinden düzgün yansıtmayı ölçmek için kullanılır. Dış düzgün yansıtma aksesuarı (ERA) numuneden gelen ışın ve direk ışın için sadece iki ayna kullanır ve kolay hizalama ve yüksek tekrarlanabilirlik sağlar. Dış düzgün yansıtma aksesuarları UV-VIS'da genellikle metalik alttaş üzerindeki filmlerin çalışmaları ve epitaksiyel film kalınlıklarının ölçümlerinde faydalıdır. Geliş açısı amaca uygun olarak seçilir.

#### 4.4.1 Özellikleri

- Bu aksesuarda ölçüm yapılırken numune yatay konulur. Yani numuneler yatay numunelik tabakasının üzerine aşağı bakacak şekilde yerleştirilir.
- Bu aksesuar geniş açısı 30 derece ve 60 derece olan iki takımdan oluşmaktadır (HARRICK ERA 30G ve 60G).
- Basit bir şekilde ayarlanır.
- En uygun performans için yüksek veri elde edilir.



Şekil 4. 18 Dış Düzgün Yansımaya Aksesuarının Optik Dizaynı.

- Büyük numunelerin küçük alanlarını ya da küçük numuneleri incelemek için değiştirilebilir maskeler kullanılır. Maskeler 3, 6 ve 13 mm yarıçaplı üç farklı boyuttadır.
- Orta kızılötesi bölgede yansımaya ölçümleri için yansımaya referansı tercihe göredir.
- Katı numune tutucusuna monte edilebildiği gibi yüzeyde monte edilebilir.
- Ayarlama (alignment) aynası vardır.



Şekil 4. 19 Dış Düzgün Yansımaya Aksesuarı

## 5 İNCE FİLMLERİN OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Bu bölümde Atmalı Filtreli Katodik Vakum Ark Depolama yöntemiyle üretilmiş olan ZnO:Al/p-Si, ZnO:Al/GaAs, ZnO:Al/cam, ZnO/cam filmlerin optik özellikleri incelenmiştir. Bu özellikleri bulmak için Cary 5000 UV-VIS-NIR Spektrofotometre sistemi kullanılmıştır.

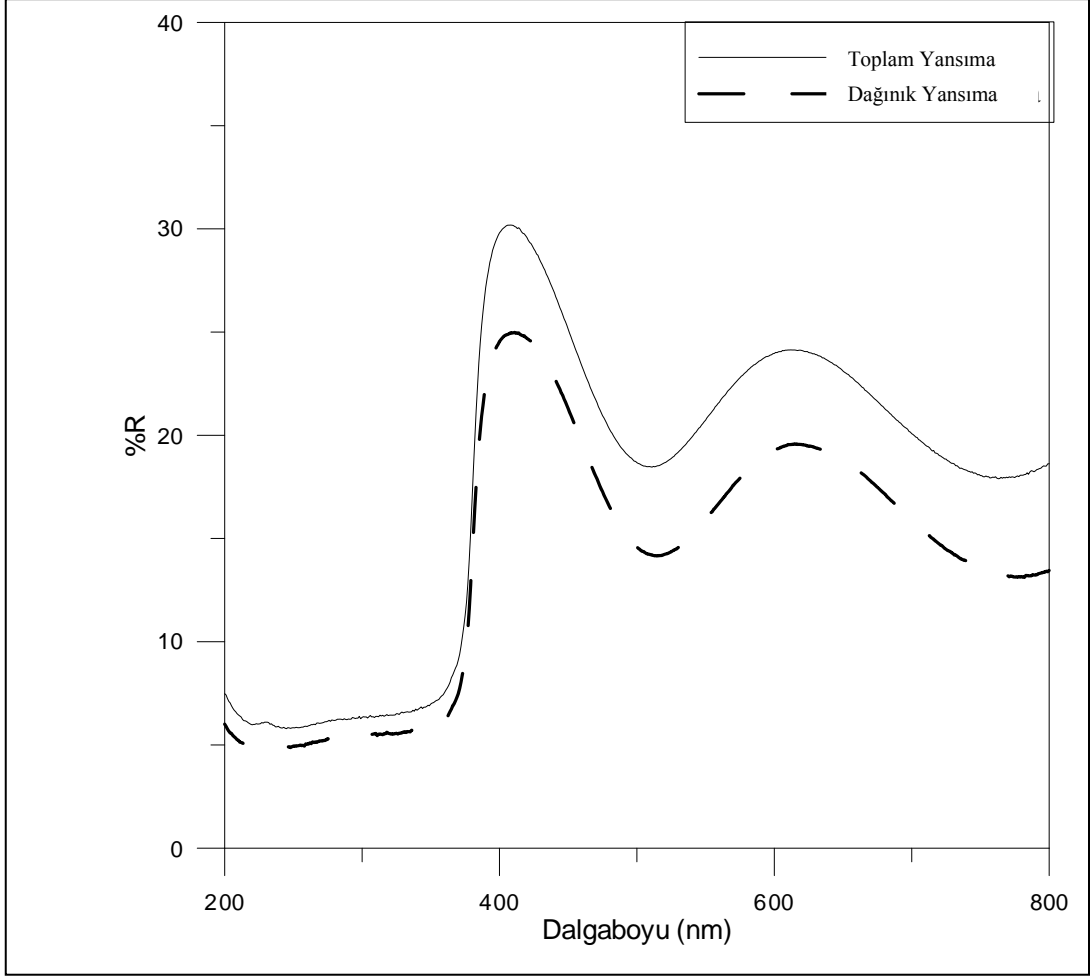
Filmlerin kalınlıkları spektrofotometreden alınan değerler kullanılarak hesaplanmıştır. Ölçülen spektrumların görünür bölgesindeki piklerinden yararlanarak filmlerin kalınlıkları hesaplanmıştır. Cam alttaş üzerine büyütülen filmlerin enerji bant aralığı  $(\alpha E)^2-E$  grafiği çizilerek bulunmuştur. Fakat p-Si ve GaAs üzerine büyütülen filmlerin enerji bant aralığı dağınık yansıma grafiğinden faydalanarak Kubelka–Munk yöntemiyle bulunmuştur. Dağınık yansıma spektrumunda, bir numuneden ve ideal bir soğurucu olmayan referans numuneden saçılan ışığın oranı dalgaboyunun bir fonksiyonu olarak ölçülür. Numunenin dağınık yansıması ( $R_\infty$ ), soğurma ( $K$ ) ve saçılma katsayıları ( $S$ ) arasındaki ilişki Schuster-Kubelka-Munk fonksiyonu ile ilişkilidir [22].

$$F(R_\infty) = \frac{(1-R_\infty)^2}{2 R_\infty} = \frac{K}{S} \quad [5.1]$$

### 5.1 ZnO: Al/p-Si İnce Filmlerin Deney Sonuçları

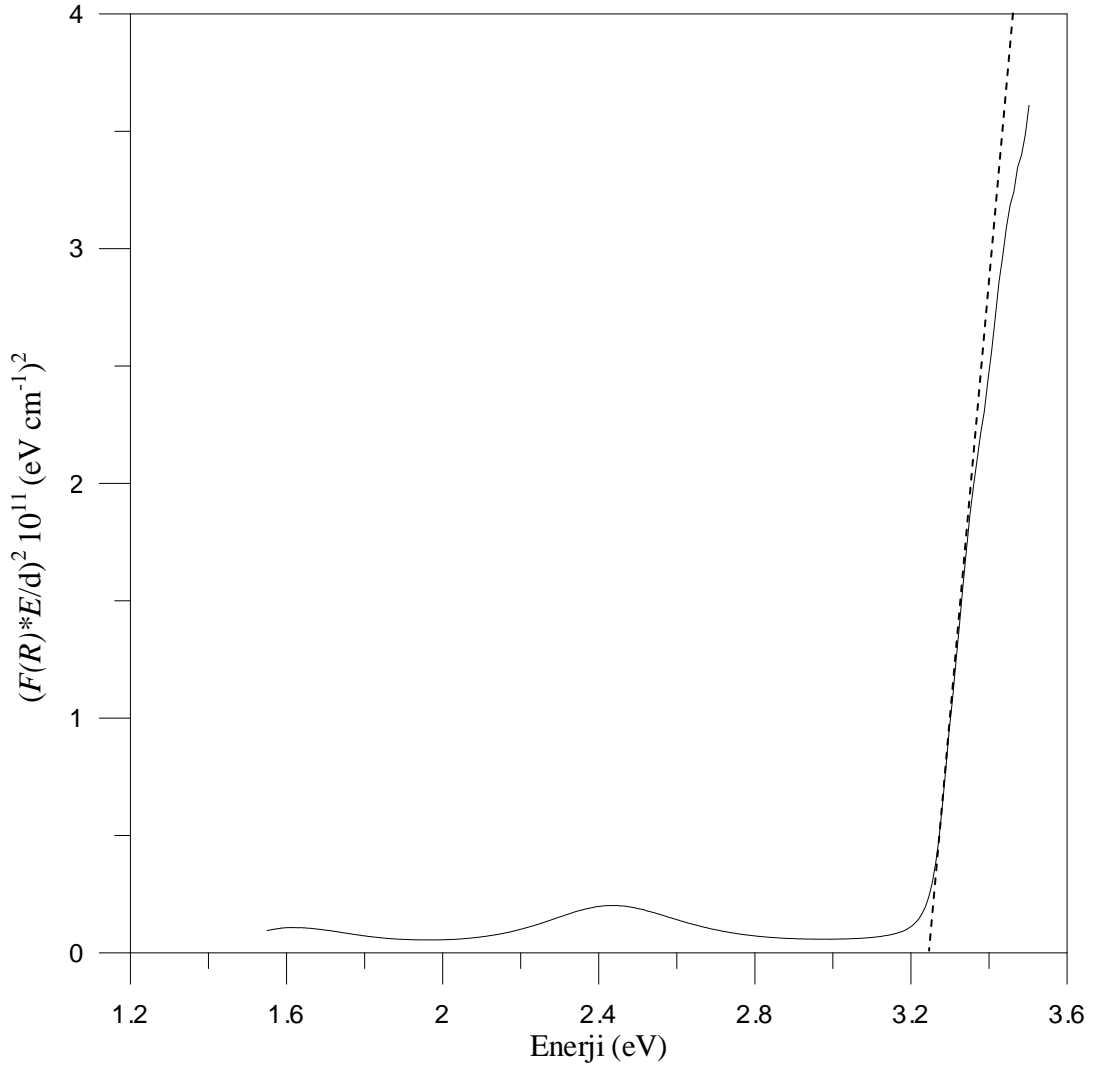
Optik özellikleri bulmak için kullanılan Cary 5000 UV-VIS-NIR Spektrofotometre sisteminin dalgaboyu aralığı 175 nm- 3300 nm arasında ultraviyole – görünür bölge ve yakın kızılötesi arasındadır. Bu cihaz düşük ultraviyolede yakın kızıl ötesine kadar doğru ölçümlere imkan verir. ZnO:Al' nin toplam (düzgün ve dağınık) ve dağınık yansıması 110 mm çaplı entegre küreden oluşan dağınık yansıma aksesuarı (İç DRA 900) ile 200-800 nm dalgaboyu aralığında ölçüldü. Veriler UV-VIS'de 600 nm/min tarama oranında, 1 nm'lik bir veri aralığında, 2 nm'lik bir sinyal bant genişliğinde ve 0.1 s'lik sinyal ortalama zamanda toplanmıştır.

Sırasıyla, 20 kV ve 500 V tetikleyici ve ark voltajıyla birlikte,  $\sim 3.5 \times 10^{-4}$  Torr taban basıncı  $\sim 7.6 \times 10^{-3}$  Torr çalışma basıncında, oda sıcaklığında p-Si alttaş üzerine depolanan ZnO: Al (%10 katkılı) filmi 500 °C' de ve 1 saat tavlansmıştır.



**Şekil 5.1** p-Si üzerine büyütülen ZnO:Al' nin toplam ve dağınk yansımalarının dalgaboyuna göre değişimi

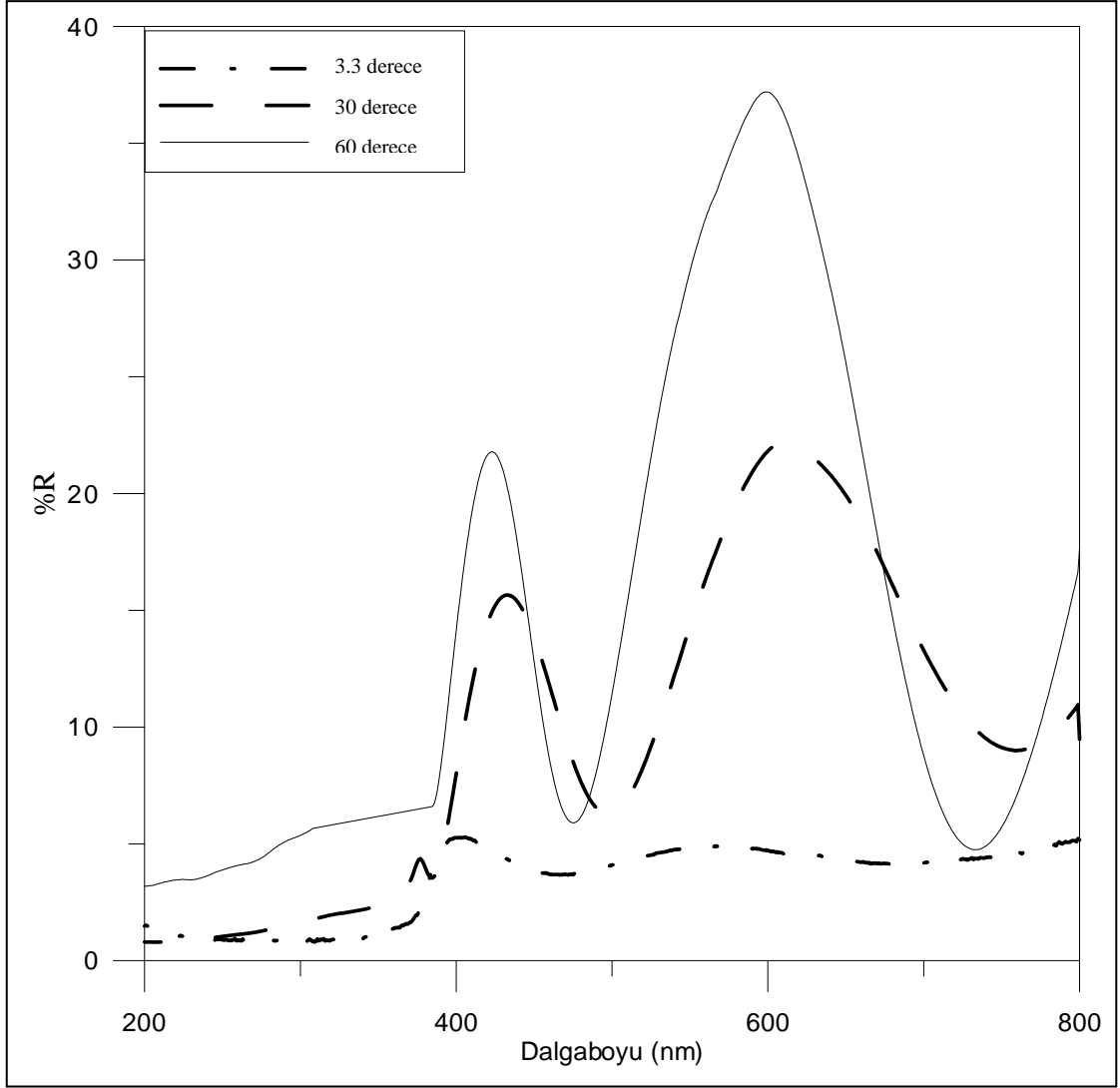
DRA aksesuarından faydalanarak ölçülen toplam yansımaya ve dağınk yansımaya grafikleri Şekil 5.1' de görülmektedir. Burada  $E_g$ 'den daha uzun dalga boyundaki vadiler ve pik görünümleri girişimden kaynaklanmaktadır. Her iki grafikte görüldüğü gibi ZnO:Al ince filmi keskin bant kenar soğurması göstermektedir. Dağınk yansımaya grafiğinden faydalanarak yasak enerji bant aralığı bulunmuştur.



**Şekil 5.2** p-Si üzerine büyütülen ZnO:Al' nin  $(F(R)*E/d)^2 10^{11}$ 'in enerjiye göre değişimi

Şekil 5.2' de  $(F(R)*E/d)^2$ 'nin enerjiye göre değişimi görülmektedir. Burada d filmin kalınlığıdır. Bu şekilden faydalanarak ZnO:Al' nin enerji bant aralığı Kubelka-Munk fonksiyonu kullanılarak bulunmuştur.  $(F(R)*E/d)^2$ 'nin enerjiye göre grafiğinde görüldüğü gibi grafiğe çizilen teğetin enerji eksenini kestiği nokta yasak enerji aralığını vermektedir ve bu değer  $3.239 \pm 0.011$  eV olarak bulunmuştur.



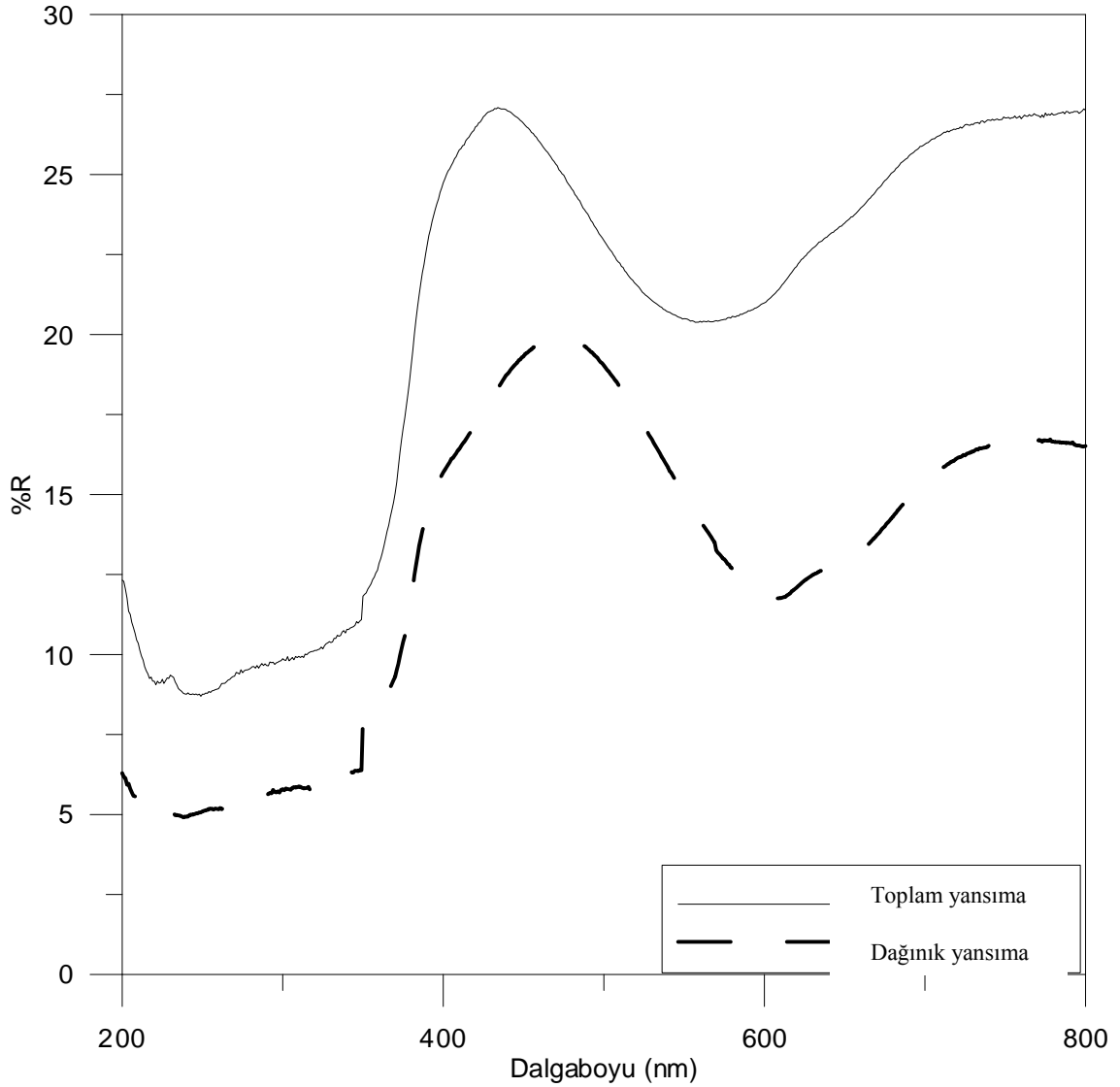


**Şekil 5.3** p-Si üzerine büyütülen ZnO:Al' nin farklı açılarda düzgün yansımalarının dalgaboyuna göre değişimi

Şekil 5.3'te ZnO:Al' nin yansımının gelen açığa bağlılığı gösterilmektedir. Burada 30 ve 60 derecelik ölçümler Dış (External) Düzgün Yansımaya Aksesuarı, 3.3 derecelik ölçüm ise DRA'dan alınan toplam yansımadan dağınık yansımının (Şekil 5.1) çıkarılması ile bulunmuştur. Şekilde görüldüğü gibi gelen açının yansımaya üzerindeki etkisi çok baskındır. Grafiklerin vadilerinden faydalanarak kalınlık değerleri  $d_{3.3}=410.00\pm 1.38$  nm  $d_{30}=416.32\pm 1.14$  nm,  $d_{60}=427.61\pm 1.48$  nm olarak bulunmuştur. Farklı açılarda kalınlıkların farklı çıkması, kalınlığın açığa bağlı bir sabite ve  $\sin\theta$ 'ya bağlı olmasından kaynaklanmaktadır.

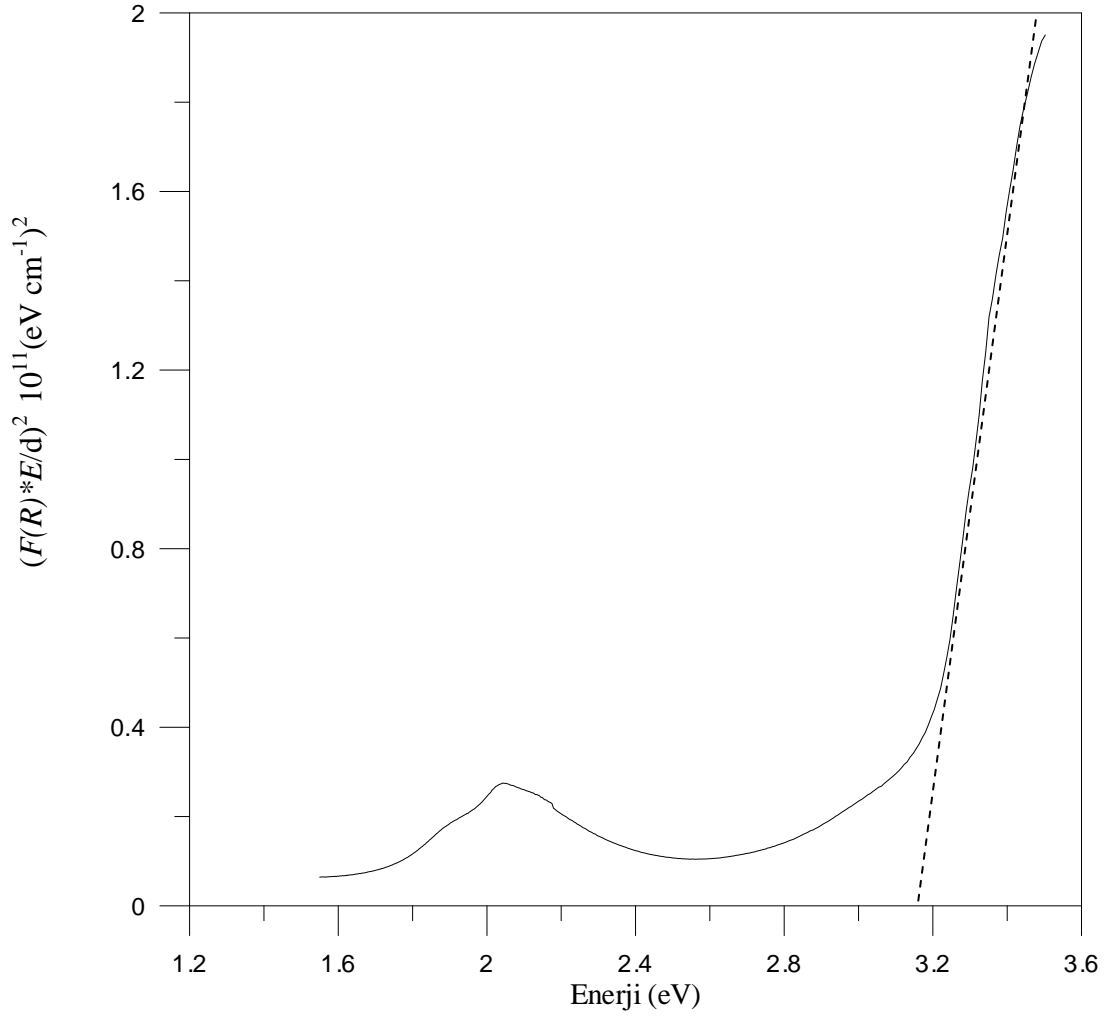
## 5.2 ZnO:Al/GaAs İnce Filmlerin Deney Sonuçları

Sırasıyla, 20 kV ve 500 V tetikleyici ve ark voltajıyla birlikte,  $\sim 3.5 \times 10^{-4}$  Torr taban basıncı  $\sim 7.6 \times 10^{-3}$  Torr çalışma basıncında, oda sıcaklığında GaAs alttaş üzerine depolanan ZnO: Al (% 10 katkı) filmi 500 °C' de 1 saat tavlannmıştır.



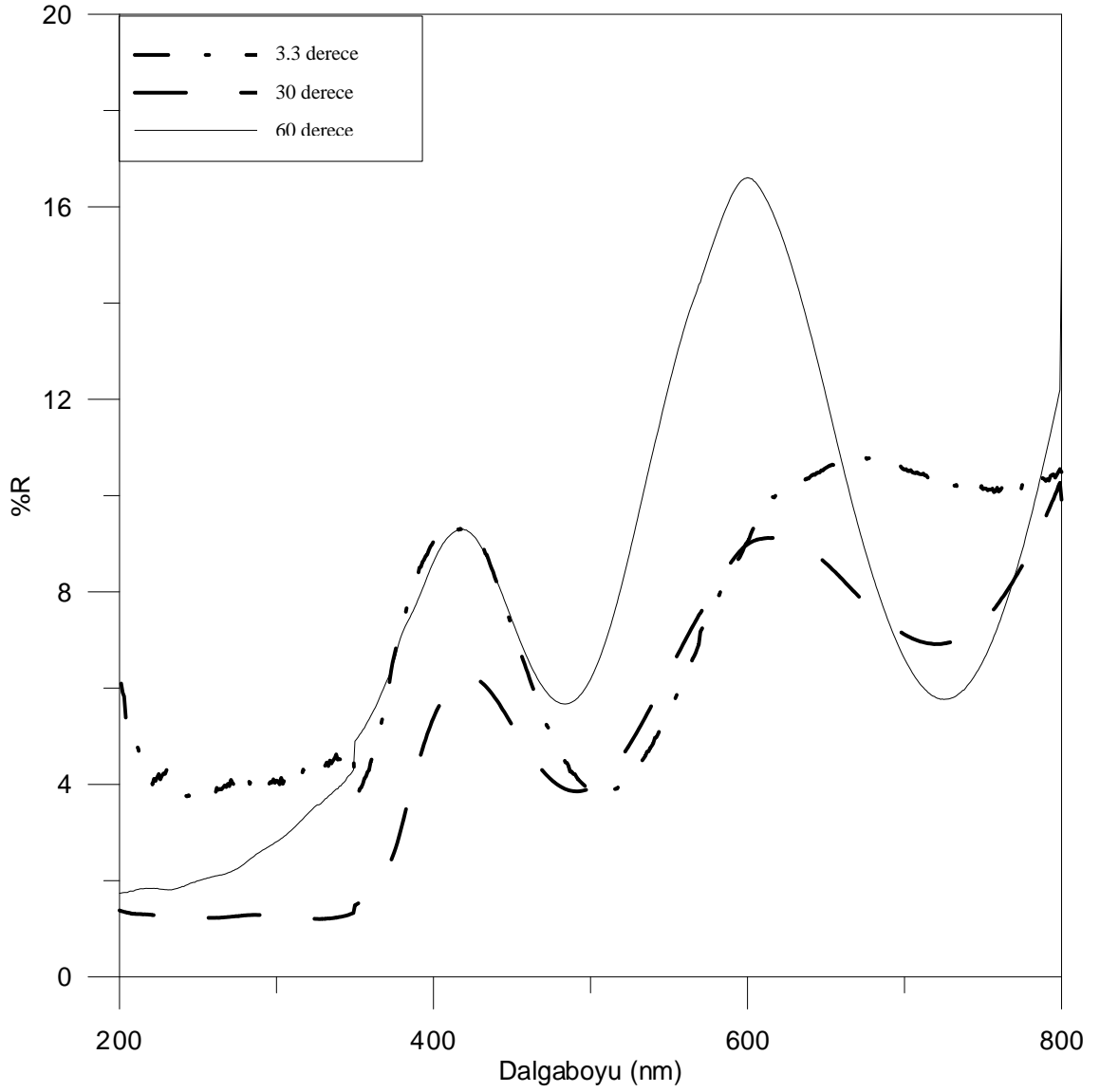
Şekil 5.4 GaAs üzerine büyütülen ZnO:Al' nin toplam ve dađınık yansımalarının dalgaboyuna göre deđişimi

Şekil 5.4' de  $E_g$ 'den daha uzun dalga boyundaki vadiler ve pik görünümleri girişimden kaynaklanmaktadır. ZnO:Al toplam yansımada keskin bant kenar sođurması gösterdiği halde, dađınık yansımada daha yayvan bir sođurma kenarı göstermiştir.



**Şekil 5.5** GaAs üzerine büyütülen ZnO:Al' nin  $(F(R)*E/d)^2 \cdot 10^{11}$ 'in enerjiye göre değişimi

Şekil 5.5' de ZnO:Al/GaAs'nin  $(F(R)*E/d)^2$ 'nin enerjiye göre değişimi görülmektedir. Bu şekilden faydalanarak ZnO:Al' nin enerji bant aralığı Kubelka-Munk fonksiyonu kullanılarak hesaplanmış ve  $3.190 \pm 0.012$  eV olarak bulunmuştur.

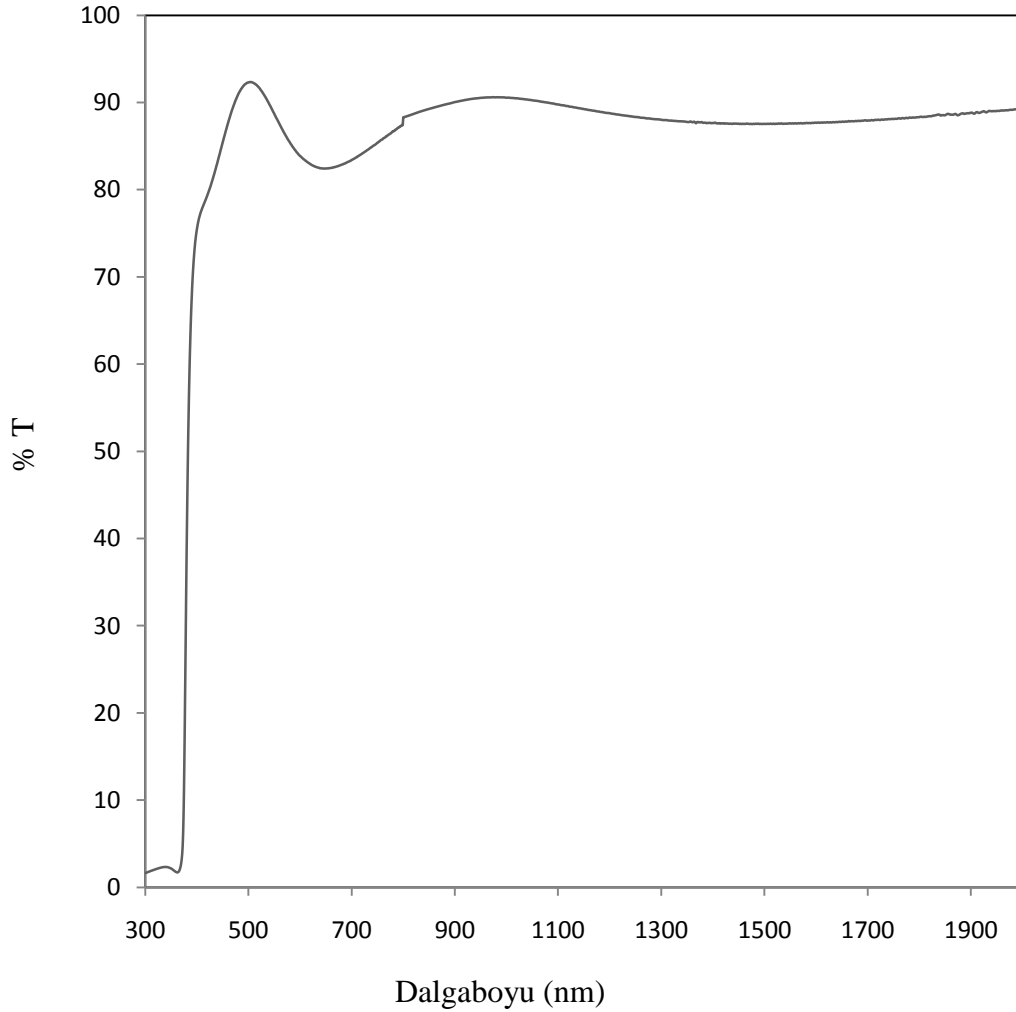


**Şekil 5.6** GaAs üzerine büyütülen ZnO:Al' nin farklı açılarda yansımalarının dalgaboyuna göre değişimi.

Şekil 5.6'da ZnO:Al' nin yansımının gelen açığa bağlılığı gösterilmektedir. Şekil 5.3'e benzer olarak burada da gelen açının etkileri çok baskındır. Bu etkiyi  $d_{3.3}=422.20\pm 1.38$  nm,  $d_{30}=447.72\pm 1.42$  nm,  $d_{60}=461.35\pm 1.59$  nm olarak bulunan kalınlık değerlerinde görmekteyiz.

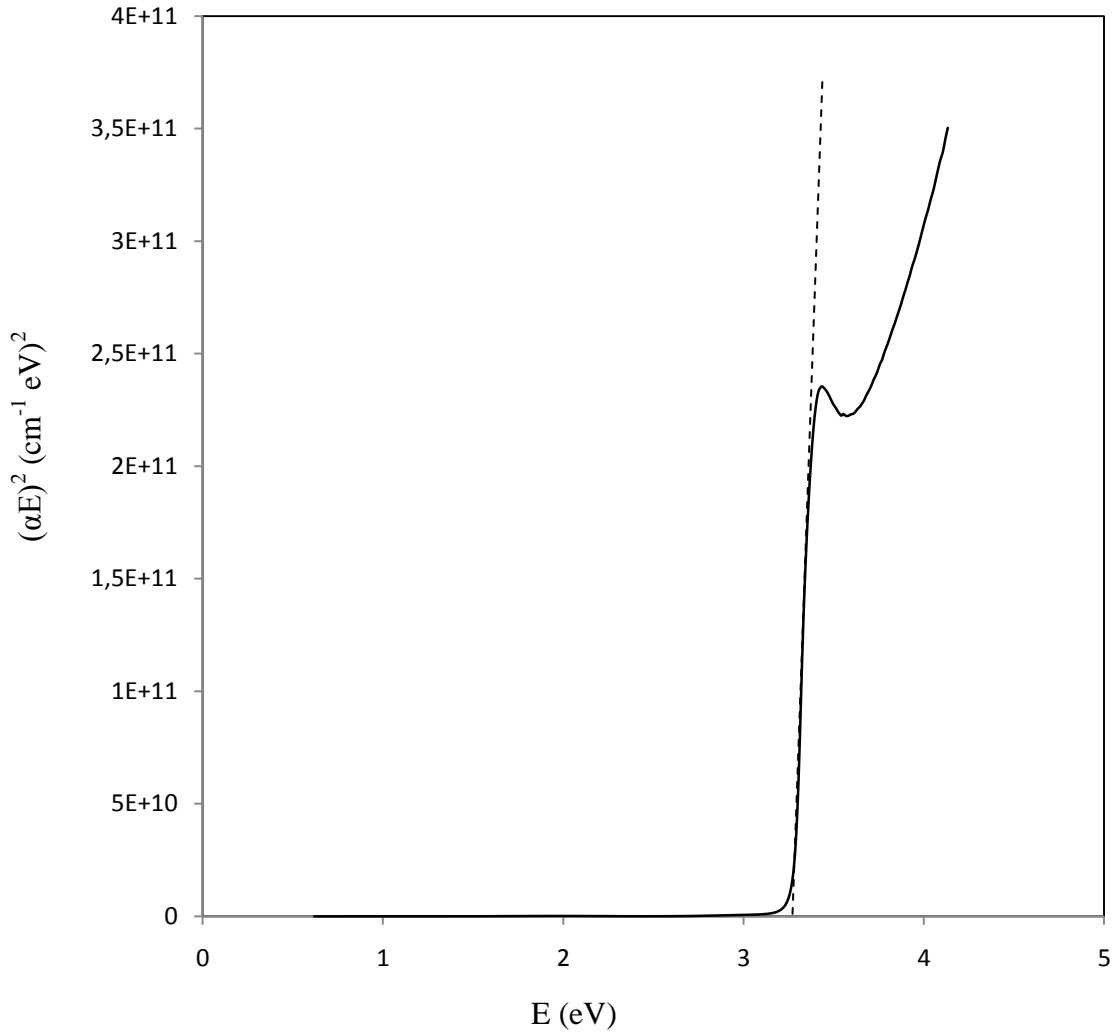
### 5.3 ZnO:Al/cam İnce Filmlerin Deney Sonuçları

Sırasıyla, 20 kV ve 500 V tetikleyici ve ark voltajıyla birlikte,  $\sim 3.5 \times 10^{-4}$  Torr taban basıncı  $\sim 7.6 \times 10^{-3}$  Torr çalışma basıncında, oda sıcaklığında cam alttaş üzerine depolanan ZnO:Al (% 10 katkılı) filmi 500 °C' de 1 saat tavlannmıştır.



**Şekil 5.7** Cam üzerine depolanan ZnO:Al' nin geçirgenliğinin dalgaboyuna göre değişimi

Şekil 5.7' de görüldüğü gibi geçirgenlik görünür bölgede % 93'lere kadar çıktığı halde NIR bölgede % 88' lere düşmüştür. Burada maksimum ve minimumlardan faydalanarak kalınlık hesabı yapılmış ve ZnO:Al filminin kalınlığı  $288.05 \pm 1.016$  nm olarak bulunmuştur.



**Şekil 5.8** Cam üzerine depolanan ZnO:Al' nın  $(\alpha E)^2$ -E ye göre değişimi

Spektrofotometreden alınan soğurma değerleri kullanılarak filmin soğurma katsayısı 5.2 denklemi ile hesaplanmıştır.

$$\alpha = \frac{1}{d} (2.3 A) \quad [5.2]$$

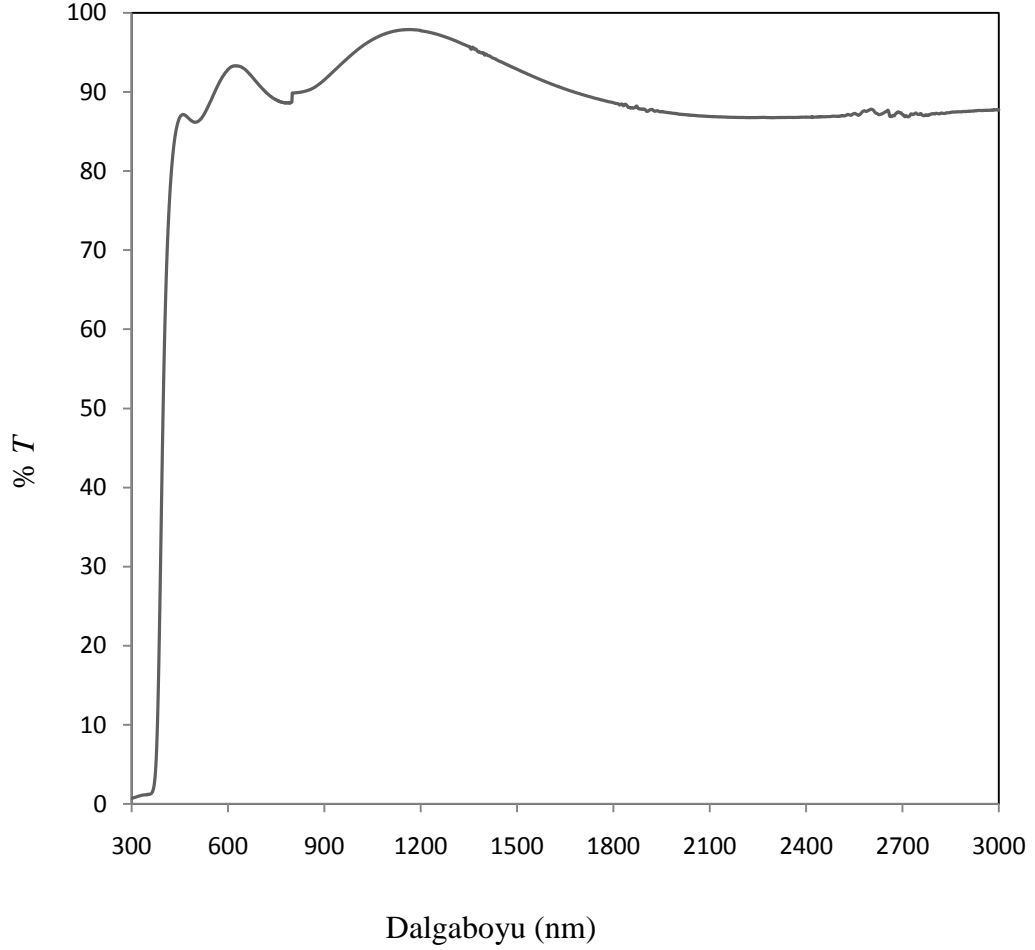
Burada  $A$  soğurma ve  $d$  filmin kalınlığıdır. Daha sonra enerji bant aralığını hesaplamak için  $(\alpha E)^2$  'nin  $E$ 'ye göre grafiği çizilmiştir. Bu grafiğe çizilen teğetin enerji eksenini kestiği nokta yasak enerji aralığını vermektedir. Sonuçta enerji bant aralığı  $E_g=3.264 \pm 0.012$  eV olarak bulunmuştur.

Çizelge 5.1 Farklı alttaşlar üzerine üretilmiş olan ZnO:Al' nin 400, 550 ve 600 nm dalgaboylarındaki soğurma katsayıları ( $\alpha$ )

	$\lambda=400$ nm	$\lambda=550$ nm	$\lambda=600$ nm
ZnO:Al/ GaAs	$5.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$	$5.9 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$	$7.9 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$
ZnO:Al/p-Si	$2.6 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$	$5.0 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$	$3.8 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$
ZnO:Al/cam	$0.9 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$	$0.4 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$	$0.6 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$

#### 5.4 ZnO/cam İnce Filmlerin Deney Sonuçları

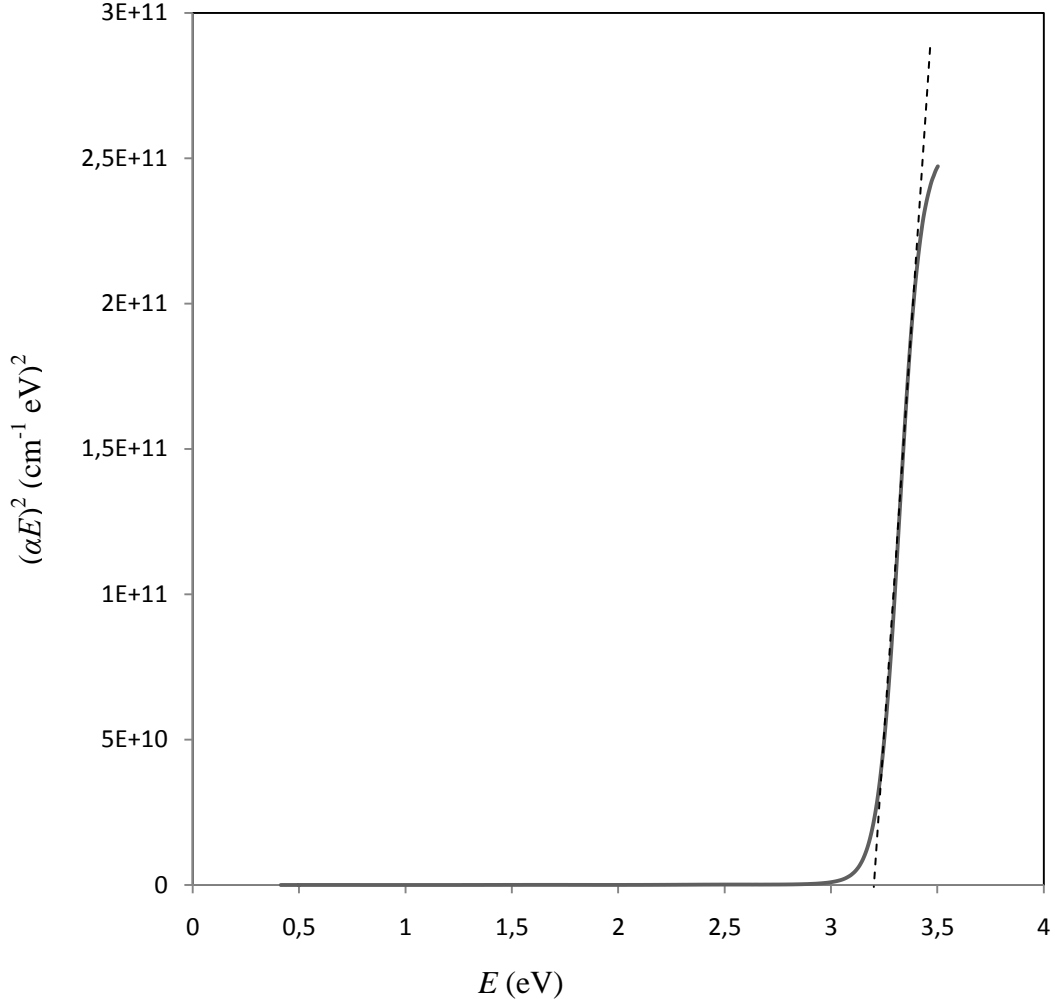
Çinko oksit (ZnO) 20 kV tetikleyici voltajı ve 500 V ve ark voltajıyla birlikte,  $\sim 6.5 \times 10^{-4}$  Torr çalışma basıncında, oda sıcaklığında cam alttaş üzerine depolanmıştır.



**Şekil 5.9** Cam üzerine depolanan ZnO'nun geçirgenliğinin dalgaboyuna göre değişimi

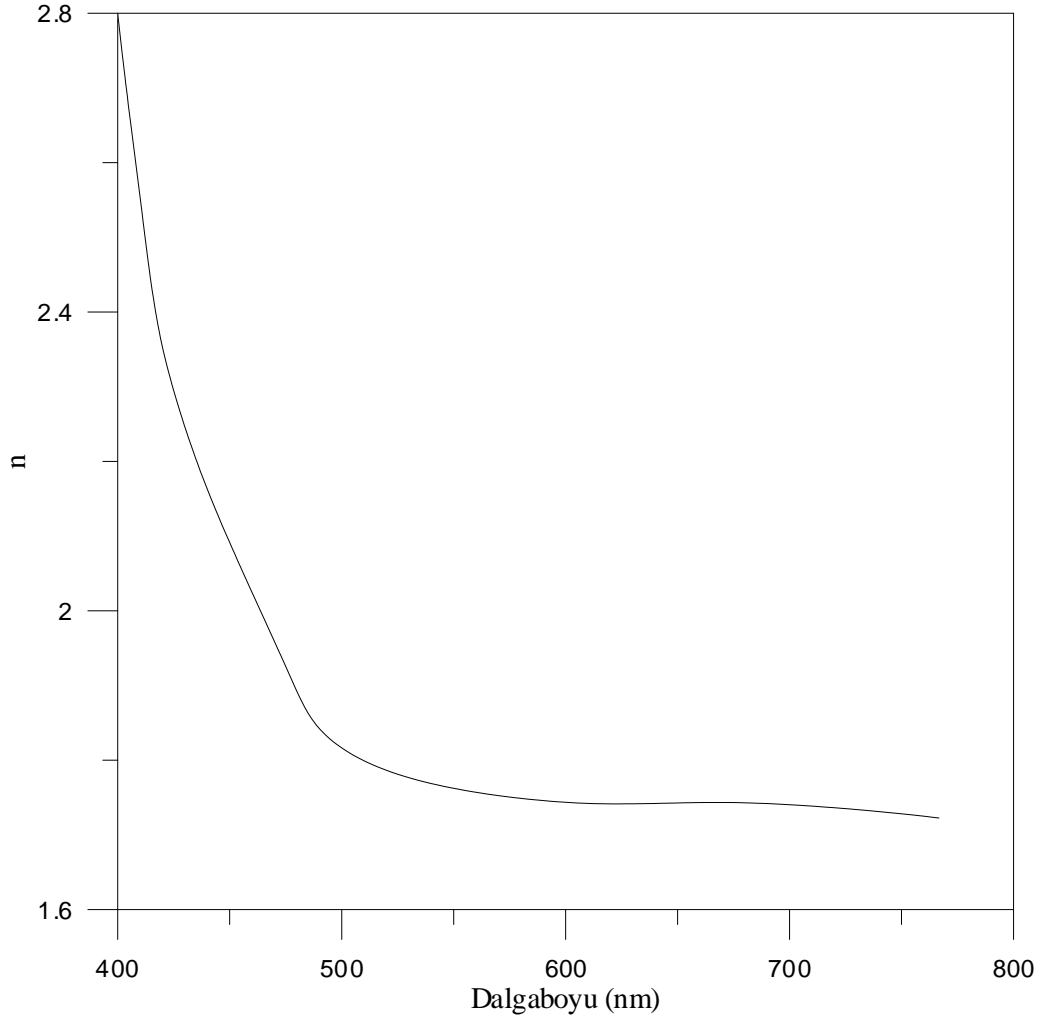
Şekil 5.9' da görüldüğü gibi geçirgenlik NIR bölgede %97' lere kadar çıkmıştır. Burada maksimum ve minimumlardan faydalanarak kalınlık hesabı yapılmış ve ZnO filminin kalınlığı  $310.13 \pm 1.12$  nm olarak bulunmuştur.





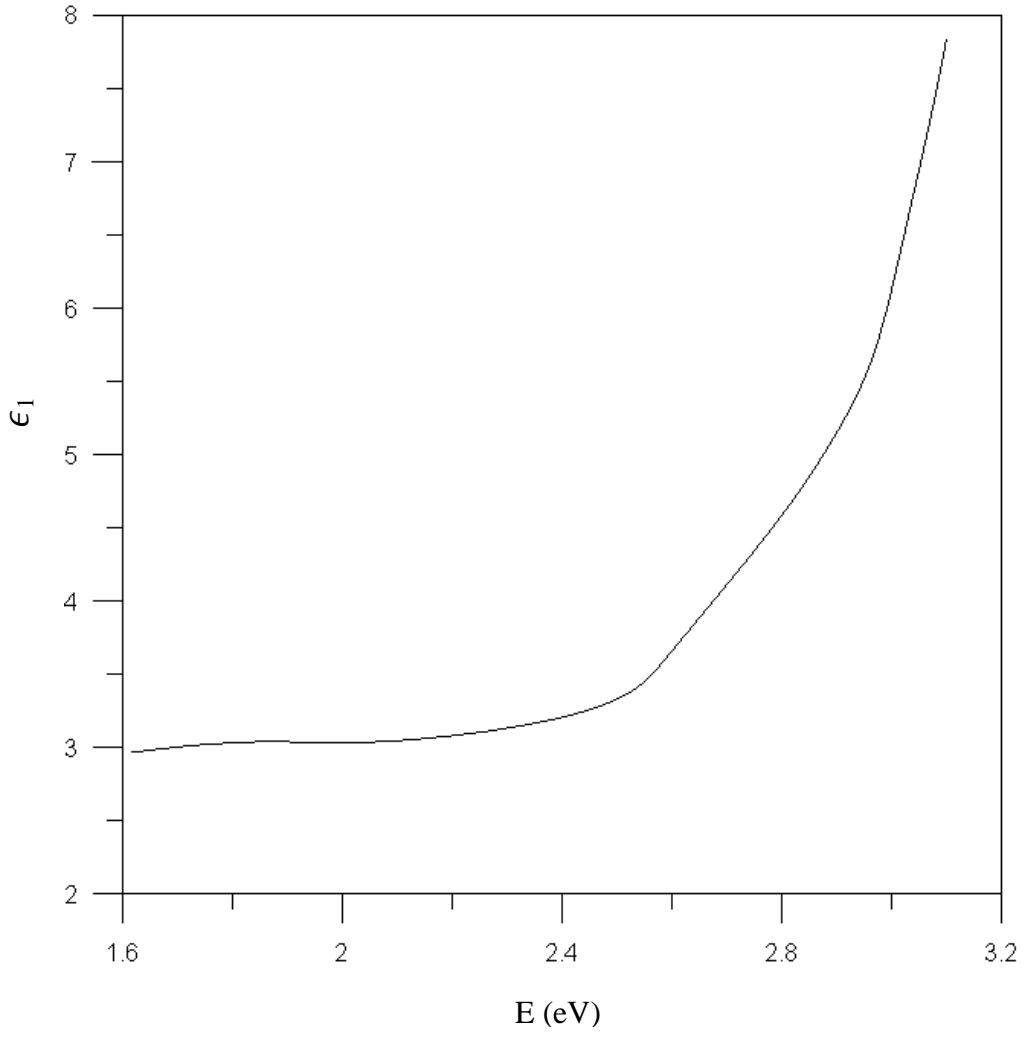
**Şekil 5.10** Cam üzerine depolanan ZnO'nun  $(\alpha E)^2$ -E ye göre değişimi

Spektrofotometreden alınan soğurma değerleri kullanılarak filmin soğurma katsayısı 5.2 denkleminde hesaplanmıştır. Daha sonra enerji bant aralığını hesaplamak için  $(\alpha E)^2$  'nin  $E$ 'ye göre grafiği çizilmiştir. Bu grafiğe çizilen teğetin enerji eksenini kestiği nokta yasak enerji aralığını vermektedir. Sonuçta enerji bant aralığı  $E_g=3.235\pm 0.013$  eV olarak bulunmuştur.

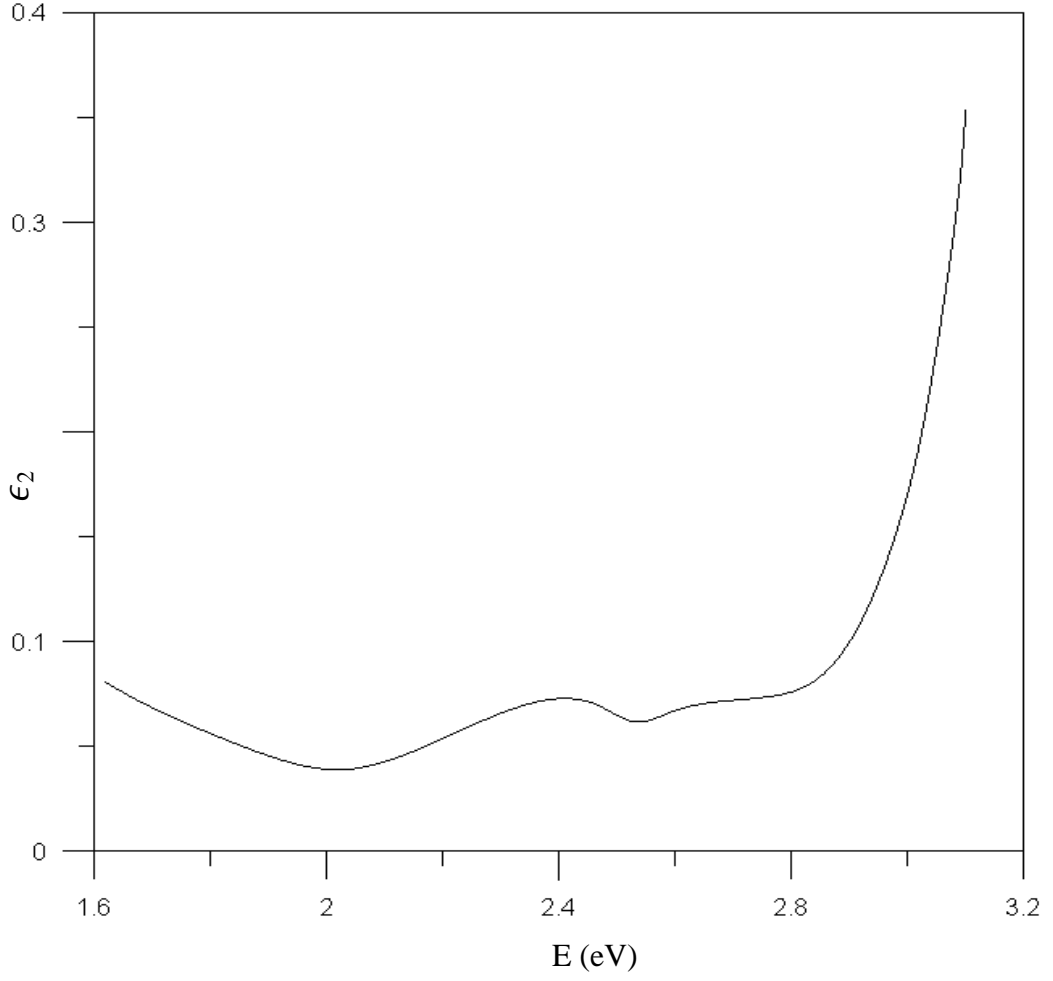


**Şekil 5. 11** Kırılma indisinin dalgaboyuna göre değişimi

Şekil 5.11 'de görünür bölgede ZnO yarıiletken ince filmin kırılma indisinin dalgaboyuna göre değişimi gösterilmiştir. Burada kırılma indisi Swanepoel tarafından tanımlanan metot kullanılarak optik geçirgenlik ölçümlerinden belirlenmiştir [23]. Bu metot sadece filmde daha kalın olan geçirgen alttaş üzerine depolanan ince filmlere uygulanır. Şekil 5.11'de dalgaboyu arttıkça kırılma indisinin azaldığı görülmektedir. Ayrıca kırılma indisi uzun dalgaboyunda hemen hemen sabit kalırken, kısa dalgaboyunda hızlı artış göstermiştir.



**Şekil 5. 12** ZnO'nun dielektrik sabitinin (gerçel) enerjiye göre değişimi



**Şekil 5. 13** ZnO'nun dielektrik sabitinin (sanal) enerjiye göre değişimi

20 kV ve 500 V tetikleyici ve ark voltajıyla birlikte,  $\sim 6.5 \times 10^{-4}$  Torr çalışma basıncında, oda sıcaklığında cam alttaş üzerine depolanan ZnO'nun dielektrik sabitinin sanal ve reel değerleri Şekil 5.12 ve 5.13'de gösterilmektedir. Bu değerler kırılma indisi ve sönüm katsayısından faydalanarak denklem 2.27 ve 2.28'den hesaplanarak bulunmuştur. Bulunan bu sonuçların literatürle çok uyumlu olduğu gözlenmiştir ve bu sonuçlar Çizelge 5.2' de verilmiştir.

Çizelge 5.2 Literatürde yayınlanan değerler ile bu çalışmadaki cam alttaş üzerine depolanan ZnO'nun değerlerinin karşılaştırılması.

Referanslar	Kalınlık (nm)	Enerji bant aralığı (eV)	Kırılma indisi	Dielektrik sabiti
ZnO/cam (Bu tezde)	310.13±1.12	3.235±0.013	500 nm'de 1.85	Gerçel:2.9-7.8 Sanal:0.04-0.36
[24]		Al %0 3.25-3.35		
[25]		Al %0 3.24		
[26]	300-350	500 nm'de 3.24-3.32	500 nm'de 1.94-2.03	
[27]	200- 600	3.27-3.30		
[28]		3.19		
[29]				Gerçel:3.75-5.25 Sanal:0.01-0.1

## Sonuç

Sivas Cumhuriyet Üniversitesi Nanoteknoloji laboratuvarında bulunan Cary 5000 Spektrofotometre sistemi ince filmlerin optik analizinde kullanılmaktadır. Bu tezde optik spektrofotometre cihazı ve bu cihazla yapılabilecek taramalar anlatılmış ve hangi aksesuarla hangi taramanın yapılabileceği detayları ile verilmiştir. Daha sonra II-VI grubu bileşik yarıiletken ölçümleri yapılmış ve analiz edilmiştir.

Yarıiletken teknolojisi, günümüzde daha kolay üretilebilen, daha dayanıklı, daha ucuz yarıiletken malzeme üretebilme arayışı içindedir. Bu yarıiletkenlerden II-VI grubu bileşik yarıiletkenler geniş enerji bant aralığına sahiptir ve kısa dalgaboylu fotonik aygıtlara ve yüksek güç, yüksek frekanslı elektronik aygıtlara olan ihtiyaçları karşılayabilmelerinden dolayı bunlara olan ilgi gün geçtikçe artmaktadır.

Çinko oksit (ZnO), II-VI gurubu bileşik yarıiletkenler ailesinin bir üyesidir. Yüksek geçirgenliğe, direk enerji bant aralığına (3.37 eV) sahiptir. Bu yüzden teknolojik önemi çok büyüktür. Polikristal ZnO'nun değişken dirençler, fosforlar, şeffaf iletken filmler, nano boyutlarda elektrotlar gibi birçok uygulaması da vardır.

ZnO ince filmlerin optik özelliklerinin belirlenmesi, ZnO kullanılarak yapılmış ya da yapılacak olan aygıtların karakteristiğini belirlemek açısından oldukça büyük bir önem taşımaktadır.

Bu çalışmada, atmalı filtreli katodik vakum ark depolama yöntemiyle üretilen ZnO:Al/ p-Si, ZnO:Al/GaAs ve ZnO:Al/cam filmlerinin optik özellikleri spektroskopik yöntemle incelenmiştir. Çizelge 5.1'de görüldüğü gibi cam üzerine üretilen ZnO:Al' nin soğurma katsayısının diğerlerine göre çok küçük olduğu gözlenmiştir. Ayrıca GaAs üzerine büyütülen ZnO:Al filminde p tipi katkılamanın uygun tavlama şartlarında mümkün olabileceği düşünülmüş [30, 31, 32] ve bundan sonraki çalışmalarda bu filmin elektriksel ölçümlerinin yapılması planlanmıştır.

Bu çalışmanın devamında ZnO/cam filminin optik parametreleri ve literatürdeki değerleri Çizelge 5.2' de karşılaştırmalı olarak verilmiş ve değerlerin uyumlu olduğu gözlenmiştir.

## KAYNAKLAR

- [1] Srikant V. and Clarke D.R.(1998). J. Apple Phys. 83 5447.
- [2] Mang A., Reimann K. and Rubenacke St. (1995). Solid State Commun. 94-251.
- [3] Grundmann Marius (2006). The Physics of Semiconductors, Germany.
- [4] Fox Mark (2001). Optical Properties of Solids,Oxford University Press Inc.,New York,pp 1-8.
- [5] Pankove, J. I. (1971). Optical Process in Semiconductors. Dover Publications, Inc. New York, 422s.
- [6] Tüzemen Ş. Ebru, (2007). ZnO İnce Filmlerinin Eldesi ve Aygıt Üretimi için Parametrelerinin Optimizasyonu, Doktora Tezi, Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Adana.
- [7] Terence L. Haran (2008). Short-Wave Infrared Diffuse Reflectance of Textile Materials, Office of Graduate Studies College of Arts and Sciences Georgia State University.
- [8] Kubelka, P. (1948). New contributions to the optics of intensely light-scattering materials. I.Journal of the Optical Society of America,. 38: p. 448-457.,
- [9] Kubelka, P. and F. Munk, (1931). Reflection characteristics of paints. Zeitschrift furTechnische Physik, 12: p. 593-601.
- [10] Schuster, A. (1905). Radiation through a foggy atmosphere. Astrophysical Journal,. 21: p.1-22.
- [11] Philips-Invernizzi, B., D. Dupont, and C. Caze (2001). Bibliographical review for reflectance of diffusing media. Optical Engineering,. 40(6): p. 1082-92.

- [12] Köse S., (1993). Spray Pyrolysis Metodu ile Elde Edilen  $Cd_{1-x}Zn_xS$  Filimlerinin Bazı Fiziksel Özelliklerinin İncelenmesi, Doktora Tezi, Osmangazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Eskişehir.
- [13] Sing Jai (2006). Optical Properties of Condensed Matter and Applications, Clarcas Darwin University, Darwin, Australia, pp 14-19.
- [14] Swanepoel, R., (1983). Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon films, E: Science instrument, 16, 1214.
- [15] Kavasoğlu N., (2006) Kimyasal püskürtme sisteminde osilatör frekansının ZnO ve alaşımlarının elektrooptiksel özelliklerine etkisi, Doktora Tezi, Hacettepe Üniversitesi, Ankara.
- [16] Jagadish C. and Pearton S. (2006) Zinc Oxide Bulk, Thin Films and Nanostructures.
- [17] Hartnagel, H.L., Dawar, A.L., Jain, A.K. and Jagadish, C., (1995). Semiconducting Transparent Thin Films, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia.
- [18] Chung TING Fung (2007). Patterned synthesis and luminescent properties ZnO nanowire arrays.
- [19] Cary 5000 Preliminary Performance Data.
- [20] Cary 100/300/4000/5000/6000i Hardware Manual.
- [21] Cary WinUV Help and Videos.
- [22] Yakuphanoglu Fahrettin (2010). Electrical characterization and device characterization of ZnO microring shaped films by sol-gel method, Journal of Alloys and Compounds 507 184-189.



- [23] Naser M. Ahmed, Zaliman Sauli, Uda Hashim, Yarub Al-Douri Int. J. (2009). Investigation of the absorption coefficient, refractive index, energy band gap, and film thickness for  $\text{Al}_{0.11}\text{Ga}_{0.89}\text{N}$ ,  $\text{Al}_{0.03}\text{Ga}_{0.97}\text{N}$ , and GaN by optical transmission method *Nanoelectronics and Materials* 2 189-195.
- [24] Li X Y, Li H J, Wang Z J, Xia H, Xiong Z Y, Wang J X and Yang B C (2009). *Opt. Commun.* 282 247.
- [25] Joseph B, Manoj P K and Vaidyan V K 2006 *Ceram. Int.* 32 487.
- [26] Subramanyam T.K., Srinivasulu Naidu B., Uthanna S. (2000). *Cryst. Res. Technol.* 35 1193.
- [27] Lin S.S., Huan J.L. (2004), *Surf. Coat. Technol.* 185 222.
- [28] Caglar Mujdat, Ilican Saliha, Caglar Yasemin (2009) Influence of dopant concentration on the optical properties of ZnO: In films by sol-gel method *Thin Solid Films* 517 5023–5028.
- [29] Liu Y.C., Tung S.K., Hsieh J.H. (2006) . Influence of annealing on optical properties and surface structure of ZnO thin films *Journal of Crystal Growth* 287 105–111.
- [30] Dangbegnon, K. Talla, Botha J.R. (Basımda). Effect of the annealing environment on the optical properties of ZnO:Al/GaAs grown by MOCVD, *Journal of Luminescence*.
- [31] Botha J.R., Roro K. T., Weichsel C., Leitch A.W.R., Weber J. (2002). Arsenic-related recombination in MOVPE-grown ZnO/GaAs films, Superlattices and microstructures 26-32.
- [32] Zhang Z.Z, Shen D.Z, Lu Y.M., Zhang J.Y., Li B.H., Zhao D.X., Yao B., Fan X.W.(2007). Optical properties of ZnO fabricated on GaAs by molecular beam epitaxy, *Journal of Luminescence* 122-123 202-204.

## ÖZGEÇMİŞ

### Kişisel bilgiler

Adı Soyadı: Hülya ŞAHİN  
Doğum Yeri ve Tarihi: SİVAS, 1984  
Yabancı Dil: İngilizce  
E-posta Adresi: hulyaasahinn@gmail.com

### Eğitim ve Akademik Durumu

Lise: Sivas Atatürk Lisesi, 2001  
Lisans: Sakarya Üniversitesi, 2008