

**NANO TANECİKLİ TiO₂ İNCE FİLMLEİN
YAPISAL, MORFOLOJİK VE OPTİKSEL
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

Savaş SÖNMEZOĞLU

**Doktora Tezi
Fizik Anabilim Dalı
Doç. Dr. Güven ÇANKAYA**

**2010
Her hakkı saklıdır**

T.C.
GAZİOSMANPAŞA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

NANO TANECİKLİ TiO_2 İNCE FİLMLEİN YAPISAL,
MORFOLOJİK VE OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Savaş SÖNMEZOĞLU

TOKAT
2010

Her hakkı saklıdır

Doç. Dr. Güven ÇANKAYA ve Prof. Dr. Necmi SERİN danışmanlığında Savaş SÖNMEZOĞLU tarafından hazırlanan bu çalışma 26/11/2010 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Fizik Anabilim Dalı'nda Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: Prof. Dr. Fahrettin YAKUPHANOĞLU

İmza :



Üye: Prof. Dr. Muzaffer CAN

İmza :



Üye: Doç. Dr. Güven ÇANKAYA

İmza :



Üye: Doç. Dr. Uğur KÖLEMEN

İmza :



Üye: Yrd. Doç. Dr. Salih SAYGI

İmza :



Yukarıdaki sonucu onaylarım


Prof. Dr. Fahrettin YAKUPHANOĞLU
Enstitü Müdürü
06.11.2010

TEZ BEYANI

Tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu tezin yazılmasında bilimsel ahlak kurallarına uyulduğunu, başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunulduğunu, tezin içerdiği yenilik ve sonuçların başka bir yerden alınmadığını, kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapılmadığını, tezin herhangi bir kısmının bu üniversite veya başka bir üniversitedeki başka bir tez çalışması olarak sunulmadığını beyan ederim.

Savaş SÖNMEZOĞLU

ÖZET

Doktora Tezi

NANO TANECİKLİ TiO₂ İNCE FİMLERİNİN YAPISAL, MORFOLOJİK VE OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Savaş SÖNMEZOĞLU

Gaziosmanpaşa Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Güven ÇANKAYA
İkinci Danışman: Prof. Dr. Necmi SERİN

Bu doktora tez çalışması iki temel konu üzerine yoğunlaşmıştır; ilk olarak, sol-jel daldırma yöntemi kullanılarak nano tanecikli titanyum dioksit (TiO₂) ince filmi farklı tavlama sıcaklıklarında ve farklı alttaşlar (soda camı, quartz ve silisyum kristali) üzerinde büyütülmüştür. İkinci kısımda ise tavlama sıcaklığının ve alttaşın, büyütülen ince filmlerin yapısal, morfolojik ve optiksel özellikleri üzerine etkisi incelenmiştir. Tavlama sıcaklığının ve alttaşın optiksel özellikler üzerine etkisi filmlerin UV-VIS-NIR spektrumları çekilerek incelenmiştir. Cam ve Quartz üzerinde büyütülen ince filmler %90'nın üzerinde yüksek geçirgenliğe sahip olduğu görülmüştür. X-ışını kırınımı ve Atomik Kuvvet Mikroskobu kullanılarak filmlerin yapısal özellikleri araştırılmıştır. Quartz alttaş üzerinde büyütülen ince filmlerin yüksek sıcaklıklarda (1000 °C) faz değiştirdiği ve nano tanecikli olduğu görülmüştür. Silisyum alttaş üzerinde büyütülen ince filmlerin ise daha düşük sıcaklıklarda (500 °C) faz değiştirdiği ve nano tanecikli olduğu saptanmıştır. Alınan ölçümler değerlendirildiğinde filmlerin yapısal, morfolojik ve optiksel özelliklerinin kaplama yapılan alttaşın cinsine ve ara tavlama sıcaklığına göre değişiklikler gösterdiği tespit edilmiştir.

2010, 113 sayfa

Anahtar kelimeler: Titanyum dioksit (TiO₂) İnce Film, Yapısal, Morfolojik ve Optiksel özellikler, Sol-Jel Metodu.

ABSTRACT

Ph.D. Thesis

THE INVESTIGATION OF STRUCTURAL, MORPHOLOGICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF NANO PARTICLE TiO₂ THIN FILMS

Savaş SÖNMEZOĞLU

Gaziosmanpaşa University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Güven ÇANKAYA
Co-Advisor: Prof. Dr. Necmi SERİN

This doctoral of sciences thesis focuses on two main topics; firstly, nano structured titanium dioxide (TiO₂) thin films were grown on different substrate (soda glass, quartz and silicon crystal) and different annealing temperature using sol-gel dip coating method. Secondly, the influences of annealing temperature and substrate on structural, morphologic and optical properties of the thin films were investigated. The effect of annealing temperature and substrate on optical properties of the thin films were examined by taking the UV-VIS-NIR spectrum. The thin films, grown on soda glass and quartz substrate, have high transmittance above 90%. The structural properties of thin films were examined by using X-ray diffraction and Atomic Force Microscopy. It has shown that the thin films, grown on quartz substrate, at high temperatures (1000 °C) phase were changed, and nano structural was found. It has determined that the thin films, grown on silicon substrate, phase were changed at lower temperature (500 °C), and nano structural was found. The variations of structural, morphological and optical properties were observed depending of the substrate materials and annealing temperature.

2010, 113 pages

Keywords: Titanium dioxide (TiO₂) Thin Films, Structural, Morphologic and Optical Properties, Sol-Gel Method.

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmasının planlanmasında, laboratuvar çalışmaları süresince ve elde edilen sonuçların değerlendirilmesinde gerekli bilgi, destek ve yardımlarını esirgemeyen değerli hocalarım Sayın Doç. Dr. Güven ÇANKAYA ve Sayın Prof. Dr. Necmi SERİN'e, çalışmalarım süresince her konuda destek, ilgi ve yardımlarını unutamayacağım değerli hocam Sayın Prof. Dr. Tülay SERİN'e, laboratuvarlarını kullanımına açarak AFM analizlerinde yeni fikirler sunan değerli hocam Sayın Prof. Dr. Yalçın ELERMAN ve XRD analizleri için yardımlarını esirgemeyen Sayın Yrd. Doç. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK'e teşekkürü bir borç bilirim.

Doktora tez çalışmam boyunca bana maddi destek sağladığı için Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu - Bilim İnsanı Destekleme Daire Başkanlığı (TÜBİTAK-BİDEB) – 2211 Yurt İçi Doktora Burs Programına teşekkür ederim.

Eğitim ve öğrenim hayatım boyunca bugünlere kadar gelmemde emek ve çabalarını esirgemeyen bütün hocalarıma, maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman esirgemeyen sevgili anneme, babama ve kardeşlerime teşekkür ederim.

Bütün çalışmalarım da en büyük ilgi, fedakârlık ve desteği gördüğüm sevgili eşim Özlem ATEŞ SÖNMEZOĞLU'na ve neşesiyle hayatıma zevk katan biricik kızım İpek SÖNMEZOĞLU'na teşekkürü bir borç bilirim.

Savaş SÖNMEZOĞLU

Aralık, 2010

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
SİMGE ve KISALTMALAR DİZİNİ.....	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
ÇİZELGELER DİZİNİ	xiii
1. GİRİŞ.....	1
2. KURAMSAL TEMELLER.....	4
2.1. TiO ₂ 'in Kristal Yapısı	4
2.2. TiO ₂ 'nin Uygulama Alanları	7
2.3. Sol-Jel Yöntemi	8
2.3.1. Sol-Jel Yönteminde Kullanılan Bileşenler	9
2.3.1.1. Metal Alkoksitler	9
2.3.1.2. Katalizörler	9
2.3.1.3. Alkoller	10
2.3.2. Sol-Jel Oluşumu	10
2.3.3. Sol-Jel ile Film Kaplama Yöntemleri	11
2.3.3.1. Daldırma ile Kaplama Metodu	11
2.4. Yarıiletkenlerin Optiksel Özellikleri	14
2.4.1. Temel Soğurma	14
2.4.1.1. İzinli doğrudan geçişler.....	15
2.4.1.2. Yasak doğrudan geçişler	17
2.4.1.3. Dolaylı enerji bantları arasındaki dolaylı geçişler	17
2.4.1.4. Yüksek enerji geçişleri	20
2.4.1.5. Eksiton Soğurması	20
2.4.1.6. Bantlar arası geçişler	22
2.4.2. Örgü (veya Fonon) Soğurması	23
2.5. Optiksel Sabitler Arasındaki İlişkiler	24
2.5.1. Soğurma Katsayısının Hesaplanması.....	24
2.5.2. İnce Filmlerde Kalınlığın Hesaplanması	28

2.5.3. Kırılma İndisinin Hesaplanması	30
2.6. X-ışını Kırınımı (XRD).....	31
2.6.1. X-ışınlarının Oluşması.....	32
2.6.2. Kesiksiz Spektrum	33
2.6.3. Kesikli Spektrum	35
2.6.4. Bragg Yasası	39
2.6.5. Difraktometrenin Yapısı	41
2.7. Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM).....	43
3. MATERYAL VE YÖNTEM	47
3.1. Alt Tabakaların Hazırlanması	47
3.1.1 Cam alt tabaka yüzeyinin temizlenmesi	47
3.1.2. Quartz alt tabaka yüzeyinin temizlenmesi.....	47
3.1.3. Silisyum alt tabaka yüzeylerinin temizlenmesi.....	47
3.2. Sol-Jel Çözeltisinin Hazırlanması.....	48
3.3. İnce Filmlerin Kaplanması.....	50
3.3.1. Cam, quartz ve silisyum alt tabakalarına film kaplanması.....	50
3.4. Deneylede Kullanılan Cihaz ve Düzenekler	51
4. BULGULAR	54
4.1. TiO ₂ /Cam İnce Filmlerin UV-VIS-NIR Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular	54
4.2. TiO ₂ /Quartz İnce Filmlerin UV-vis Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular	58
4.3. TiO ₂ /Cam İnce Filmlerin XRD Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular	63
4.4. TiO ₂ /Quartz İnce Filmlerin XRD Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular	65
4.5. TiO ₂ /Si İnce Filmlerin XRD Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular...	67
4.6. TiO ₂ /Cam İnce Filmlerin AFM Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular	69
4.7. TiO ₂ /Quartz İnce Filmlerin AFM Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular.....	71
4.8. TiO ₂ /Si İnce Filmlerin AFM Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular...	75

5. TARTIŞMA ve SONUÇ	78
KAYNAKLAR	83
ÖZGEÇMİŞ	91

SİMGE ve KISALTMALAR DİZİNİ

nm	Nanometre
TiO ₂	Titanyum dioksit
ϵ_s	Yüksek dielektrik sabiti
n	Kırılma indisi
CMOS	Tamamlayıcı Metal-Oksit-Yarıiletken
MOSFET	Metal-Oksit-Yarıiletken-Alan Etkili-Transistörler
SiO ₂	Silisyum dioksit
Å ⁰	Angström
°C	Santigrat derece
ΔH	Helmholtz serbest enerjisi
ΔG	Gibbs enerjisi
S	Entropi
d	Özkütle
E_g	Yasak enerji aralığı
eV	Elektrovolt
Ti	Titanyum atomu
O	Oksijen atomu
R	Alkil grubu
M	Metal alkoksit
ROH	Alkol grubu bileşiği
H ₂ O	Su molekülü
OH	Hidroksil grubu
µm	Mikrometre
η	Viskozite
h	İnce filmin kalınlığı
γ_{LV}	Yüzey gerilim oranı
p_e	Denge durumunda yüzeyde oluşan basınç
p_i	l kadar uzaklıkta oluşan basınç
$\alpha(h\nu)$	Soğurma sabiti

$L(h\nu)$	Işık yoğunluğundaki düşüşün oranı
h	Planck sabiti
λ	Dalga boyu
c	Işık hızı
P_{if}	İlk durumdan son duruma geçiş olasılığı
n_i	İlk durumdaki elektronların yoğunluğu
n_f	Son durumdaki elektronların yoğunluğu
K	Kelvin
m_r	İndirgenmiş kütle
A	Sabit
N_p	Fonon sayısı
T^0	Sıcaklık
NaCl	Sodyum klorür
TO	Enine Optik mod
TA	Enine Akustik mod
LO	Boyuna Optik mod
LA	Boyuna Akustik mod
cm^3	Santimetreküp
R	Yansımaya
T	Geçirgenlik
k	Sönüm katsayısı
I	İnce filmde geçen ışık miktarı
I_0	Toplam gelen ışık miktarı
log	Logaritma
n_s	Alttaşın kırılma indisi
XRD	X-Işını Kırınımı
SWL	En kısa Dalga boyu Sınırı
W	Tungsten
Ni	Nikel
Cu	Bakır
θ	Açı

STM	Taramalı Tünelleme Mikroskobu
AFM	Atomik Kuvvet Mikroskobu
SEM	Taramalı Elektron Mikroskobu
TEM	Tünellemeli Elektron Mikroskobu
kCal	Kilokalori
DC	Doğru Akım
AC	Alternatif Akım
C ₃ H ₆ O	Aseton
HF	Hidroflorik asit
NH ₃ HF	Amonyum floride
ml	Mililitre
mol	Mol Sayısı
N ₂	Azot Gazı
NH ₄ OH	Amonyum hidroksit
HCl	Hidroklorik asit
H ₂ O ₂	Hidrojen peroksit
Ti(OC ₃ H ₇) ₄	Titanium tetraispropoxide
C ₂ H ₄ O ₂	Glasiyel asetik asit
pH	Asitlik derecesi (Potansiyel Hidrojen)
C ₂ H ₅	Trietilamin
C1	Cam altaş birinci numune
Q1	Quartz altaş birinci numune
S1	Silisyum altaş birinci numune
MΩ	Megaohm
Ω cm	Ohm.santimetre
N/m	Newton/metre
kHz	Kilohertz
Si	Silisyum
Mo	Molibden
Co	Kobalt
Fe	Demir
Cr	Krom

ŞEKİLLER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 2.1. Rutile ve anatase fazın örgü yapısı.....	4
Şekil 2.2. Sol-jel kaplama tekniği ile elde edilen malzeme türleri	11
Şekil 2.3. Daldırma ile kaplama yönteminin şematik gösterimi.....	12
Şekil 2.4. İzinli doğrudan geçişler	15
Şekil 2.5. Doğrudan olmayan geçişler	17
Şekil 2.6. Fonon soğurması ve fonon emisyonunun sıcaklığa bağımlılığı.....	19
Şekil 2.7. TiO ₂ 'nin enerji bant yapısının şematik diyagramı.	20
Şekil 2.8. Frenkel ve Mott-Wannier eksitonlarının şematik gösterimi.	21
Şekil 2.9. Değerlik alt-band yapısı ve band içi geçişler	22
Şekil 2.10. İnce bir tabakadaki soğurma	24
Şekil 2.11. İnce bir filmde çok yansımali ışık geçirimi	26
Şekil 2.12. Minimum noktalarının nereden alındığının gösterildiği UV-VIS spektrumu	29
Şekil 2.13. Zarf metodunda maksimum ve minimum noktalarının nereden alındığının gösterildiği UV-VIS spektrumu.....	30
Şekil 2.14. Uygulanan tüp voltajının bir fonksiyonu olarak Mo tüpünden elde edilen X-ışınları spektrumu.....	33
Şekil 2.15. 35 kV da molibdenin K spektrumu	36
Şekil 2.16. X-ışınları tüpünde mermi gibi hareket eden elektronlar atoma çarpar ve bir K elektronunu fırlatır. Bir L elektronu boşalan yere düştüğü zaman, K _α X-ışınları yayımlanır. Eğer bu mermi, elektron yerine, bir X-ışınları fotonu ise, saçılmış ışın daha düşük bir enerjide (daha uzun dalga-boyunda) olur. Bu olaya uyumsuz saçılma (incoherent, compton scattering) denir. Böylelikle K _α , fluoresan X-ışınları yayımlanır	37
Şekil 2.17. X-ışınları spektrumunun K-absorpsiyon kenarından daha kısa olan bütün dalga boylarının şiddetlerini epeyce azaltan bir β filtresinden geçtikten sonraki durumu.	38
Şekil 2.18. X-ışını kırınımında gelen ve kırınıma uğramış ışınlar	39

Şekil 2.19. Difraksiyon açısı.....	41
Şekil 2.20. Bir X-ışınları difraktometresinde düz bir numune θ açısı döndüğü zaman, 2θ açısı ile dönen bir sayacı bulunur. Numune odaklama dairesine (kesik çizgili) her zaman teğet olduğundan, difraksiyona uğramış demetlerde yaklaşık odaklanmış olurlar sistemi.....	42
Şekil 2.21. X-ışınları difraktometresinde demetleri paralel hale koyan aralıkların düzeni	43
Şekil 2.22. AFM'nin çalışma prensibi	45
Şekil 2.23. Uç-numune arasındaki Van der Waals kuvvetinin mesafe ile değişimi	46
Şekil 3.1. Çözelti hazırlama ve ince film kaplama aşamaları	49
Şekil 3.2. Isısal işlemlerde kullanılan 0-1200 °C Vecstar VCTF-4 difüzyon fırını	51
Şekil 3.3. UV-VIS-NIR spektrum ölçümleri için kullanılan Shimadzu UV-3600 spektrometre cihazı	52
Şekil 3.4. X-ışını kırınım spektrumlarının elde edilmesi için kullanılan Bruker D8 Advanced marka X-ışını kırınımı cihazı	52
Şekil 3.5. Yüzey analizlerinde kullanılan SPM Solver-PRO (NT-MDT) marka atomik kuvvet mikroskobu, destek noktası (cantilever) ve n-tipi silisyum ucun gösterimi	53
Şekil 4.1. Cam alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin geçirgenlik-dalga boyu eğrileri	54
Şekil 4.2. Cam alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$ grafiği...	56
Şekil 4.3. Cam alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin kırılma indisi - dalga boyu grafiği.....	57
Şekil 4.4. Cam alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin $n^2 - \lambda^{-2}$ grafiği.....	58
Şekil 4.5. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin geçirgenlik-dalga boyu eğrileri.....	59
Şekil 4.6. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$ grafiği.....	61
Şekil 4.7. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin kırılma indisi – dalga boyu grafiği.....	62

Şekil 4.8. Cam alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin $n^2 - \lambda^{-2}$ grafiği.....	63
Şekil 4.9. Cam alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri.	64
Şekil 4.10. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri.....	66
Şekil 4.11. Silisyum alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri.....	68
Şekil 4.12. Cam alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin iki ve üç boyutlu AFM görüntüleri (a) C1, (b) C2, (c) C3, (d) C4, (e) C5 ve (f) C6.....	69
Şekil 4.13. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin iki ve üç boyutlu AFM görüntüleri (a) Q1, (b) Q2, (c) Q3, (d) Q4, (e) Q5, (f) Q6, (g) Q7, (h) Q8, (i) Q9 ve (j) Q10.....	72
Şekil 4.14. Silisyum alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin iki ve üç boyutlu AFM görüntüleri (a) S1, (b) S2, (c) S3, (d) S4, (e) S5 ve (f) S6.....	76

ÇİZELGELER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Çizelge 2.1. Anatase ve rutile fazın kimyasal özellikleri.....	5
Çizelge 2.2. Anatase ve rutile fazda atomlar arası bağ uzaklıkları.	6
Çizelge 3.1. Cam, quartz ve silisyum yüzeylere kaplanmış TiO ₂ filmlerin hazırlama işlemleri	50
Çizelge 4.1. Cam alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin UV-VIS-NIR spektrumları yardımıyla hesaplanmış optiksel parametreleri.....	55
Çizelge 4.2. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin UV-VIS-NIR spektrumları yardımıyla hesaplanmış optiksel parametreleri.....	60
Çizelge 4.3. Cam alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri yardımıyla hesaplanmış kristal boyutu değerleri.....	65
Çizelge 4.4. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri yardımıyla hesaplanmış kristal boyutu değerleri.....	67
Çizelge 4.5. Silisyum alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri yardımıyla hesaplanmış kristal boyutu değerleri.....	68
Çizelge 4.6. Cam alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin AFM yardımıyla hesaplanmış ortalama tanecik ve pürüzlülük parametreleri.....	71
Çizelge 4.7. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin AFM yardımıyla hesaplanmış ortalama tanecik ve pürüzlülük parametreleri.....	71
Çizelge 4.8. Silisyum alt tabaka üzerindeki TiO ₂ ince filmlerin AFM yardımıyla hesaplanmış ortalama tanecik ve pürüzlülük parametreleri.....	75

1. GİRİŞ

Materyallerin çelikten yüz kat daha güçlü ama altıda biri ağırlıkta; nakliye işlemlerinin hem ucuz hem de sesten hızlı; bilgisayarın, günümüzde kullandığımız bilgisayarlardan milyonlarca kez daha güçlü ve daha etkili; kanser tedavisinde kullanılan ilaçların anında üretildiği ve gerekli olan vücut uzuvlarının kolayca üretilip hemen vücutla uyumlu halde kullanılabilirdiğini düşünebiliyor musunuz? Tüm bunlar, bir hayalperesttin tahminleri değil, aksine son derece ciddi ve saygın bilim adamlarının, hızlı gelişmekte olan bu yeni bilim dalını, yani nanoteknolojiyi tarif ederken vardıkları sonuçların yansımalarıdır.

Bu tür tahminleri imkânsız ya da mantıksız görebilirsiniz. Ama görmeyin! Wright kardeşlerin 1903 yılındaki ilk uçuş deneyiminden, 10 yıldan daha kısa bir süre önce, Royal Society başkanı Lord Kelvin, “havadan daha ağır uçan makinelerin olması imkansızdır” açıklamasını kendisinden son derece emin bir tavırla yapmıştı. 1943 yılında ise, IBM’in Yönetim Kurulu Başkanı Thomas Watson, şu meşhur sözleri sarf etmiştir: “Dünya pazarında muhtemelen sadece beş bilgisayara yer var”. Hatta saygıdeğer Albert Einstein da bu sözleri söylerken büyük bir yanılğı içerisindeydi: “Nükleer enerjiyi elde etmek için en ufak bir gösterge bile yok”. Nanoteknoloji’ nin ardındaki bilim tam manasıyla gerçek; o şimdiden hayatımızda; durmadan gelişiyor, yayılıyor ve büyüyor; hem de yaşam biçimimizi tepeden tırnağa değiştirmek için gün sayıyor.

Kelime anlamı olarak nanoteknoloji, aşırı küçük yapısal maddelerin üretimi, araştırılması ve bunlardan yararlanmanın teknikleri üzerinde çalışır. "Nano" sözcüğü Yunancadan alınmıştır ve "Cüce" anlamına da gelmektedir. Bir Nanometre (nm = metrenin milyarda biri) bir milimetrenin milyonda biri kadar bir uzunluktur ve bir insan saçının on binde biri kadar bir kalınlığa tekabül eder. Bu uzunluk terimi atom ve moleküllerin içindeki en küçük mesafeleri tanımlamak için kullanılır. Dört ile altı atom yan yana sıraladığında bu uzunluğa eşit bir uzunluk meydana getirirler. Nano mertebesindeki parçacıklar (Nano parçacıkları) veya nano tanecikli ince filmler (tanecik boyutu 100 nm’den daha az olan metal oksit filmler) bu teknolojinin yapı taşlarını teşkil ederler. Atomsal düzeydeki malzemelerin amaca yönelik yapılandırılmalarında ve bu kadar küçük boyuttaki özel fenomenlerden yararlanma birçok alanda yeni imkânların doğmasına yol açmıştır. Bu konu

üzerine ilginin yoğunlaşmasının temel sebebi maddelerin belli boyut aralığında hacimsel yapılarından farklı olarak olağandışı özellikler ve işlevsellik sergilemeleridir (Goldstain, 1997; Rao ve ark., 2005). Sıkça belirtilen nano tanecikli yapı özelliklerinin çekiciliğinin günümüzde bilinen nedenleri ise; kuantum boyut etkileri, elektronik yapısının boyut bağımlılığı, yüzey atomlarının benzersiz karakterleri ve yüksek yüzey/hacim oranı olarak ön plana çıkmaktadır (Liveri, 2006). Bunların yanı sıra, malzemelerin nanoboyut seviyesinde kontrolü nanotaşıyıcılar, sensörler, nanomakinalar ve yüksek yoğunluklu veri depolama hücreleri gibi kendine özgü işlevselliğe sahip minyatürleştirilmiş aygıtların gerçekleştirilmesine izin vermektedir (Goldstain, 1997; Rao ve ark., 2005; Miller ve ark., 2004; Liveri, 2006). Açıkça görülmektedir ki, nanoyapılı cihazların tasarlanmasını, üretimini ve işlevsel olarak kullanımını kapsayan nanoteknoloji alanındaki yeni gelişmeler için vazgeçilemez ilk adım nano tanecikli yapıların sentezlenmesidir.

Nano tanecikli ince metal oksitler; işlevsel malzemeler, aygıtlar ve sistemlerin gelişmesinde temel oluştururlar. Oksitlerin, değişken katyon değerliği ve ayarlanabilir oksijen eksikliği olmak üzere kendilerine has iki yapısal özelliği vardır. Bu özellikler sayesinde yeni ve ayarlanabilir elektriksel, kimyasal, optiksel ve manyetik özelliklere sahip malzemeler elde edilebilir (Wang ve Kang, 1998; Ginley ve Bright, 2000). Bu oksit malzemelerin nano yapılarının sentezi de kontrol edilebilen bir yapı ve morfoloji ile bilimsel ve teknolojik uygulamalar için çok önemlidir (Wang, 2003). Ayrıca ince filmlerin yeterli ölçüde tanımlanabilmesi için mikroskobik film özelliklerinin iyi bilinmesi gerekmektedir. Elementlerin kompozisyonu ve kimyasal bağlanma durumu, stokiyometri, topografi, yüzey pürüzlülüğü, kristal ve amorf yapıdaki ara yüzeyler ve kristal yapı gibi faktörler ince film özelliklerine doğrudan etki etmektedir (Bach ve Krause, 1997).

İnce metal oksit malzemeler arasında geniş bir bant aralığına sahip olan titanyum dioksit (TiO_2), yüksek dielektrik sabiti ($\epsilon_s \cong 110$), büyük kırılma indisi ($n \cong 2.4$), görünür bölgedeki yüksek geçirgenliği gibi optik ve elektriksel özelliklerinden dolayı üzerinde yaygın olarak çalışılan metal oksit yarıiletken malzemelerdendir (Suciu ve ark., 2009; Phadke ve ark., 2010; Kim ve ark., 2010). TiO_2 sahip olduğu bu özelliklerden dolayı dalga kılavuzları (Galatsis ve ark., 2002), güneş pilleri (Zhao ve ark., 2005; Que ve Hu, 2006), kozmetik ve boya maddeleri, fotokatalizörler ve optoelektronik devre elemanlarının

(Fujishima ve Honda, (1972)) yapımına kadar oldukça geniş bir uygulama alanına sahiptir. Yüksek dielektrik sabitine sahip malzemeler, Tamamlayıcı Metal-Oksit-Yarıiletken (CMOS) transistörlerde yalıtkan (gate insulator) olarak kullanılır (Albertin ve ark., 2007). Son zamanlarda, TiO_2 , Metal-Oksit-Yarıiletken-Alan Etkili Transistörler (MOSFET) ve Infrared detektörler gibi mikro elektronik devre elemanlarında kullanılan silisyum dioksitin (SiO_2) yerini almaya başlamıştır (Sberveglieri ve ark., 2000). Ayrıca Lityum bazlı pillerin ve elektrokromik aygıtların nano yapıları formlarında uygulamaları bulunur.

TiO_2 , özellikle gaz sensörleri uygulamalarında çok önemli bir yere sahiptir. TiO_2 ince filmlerin gaz algılama özelliği indirgeyici veya yükseltgen gaz molekülleri ile film yüzeyinin etkileşmesi ve sonuçta filmin elektriksel iletkenliğinin değişmesi esasına dayanır. Gaz sensörlerinde algılayıcı maddenin kimyasal kararlılığı, yüzey alanının gözenekli dolayısıyla büyük olması önemli parametrelerdendir (Sberveglieri ve ark., 2000).

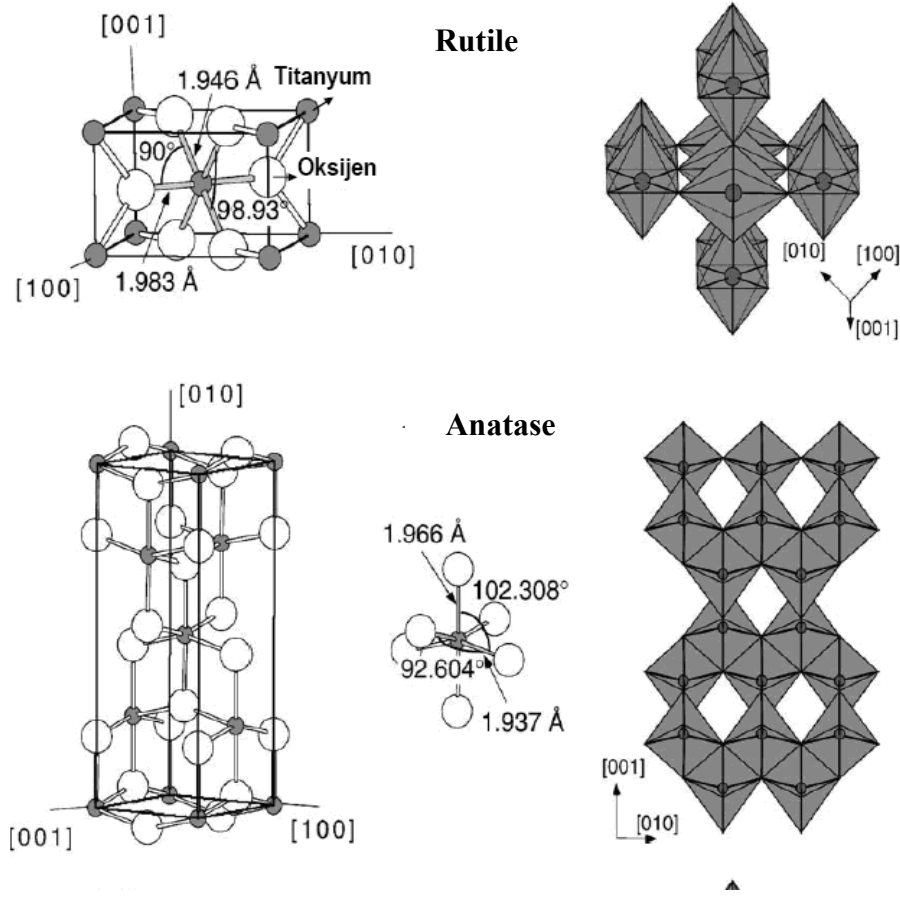
Nano tanecikli ince filmler, buharlaştırma, d.c. ve r.f. manyetik alanda sıçratma, lazer veya iyon demeti ile kaplama, metal-organik kimyasal buhar biriktirme ve sol-jel gibi çeşitli üretim yöntemleri ile elde edilebilmektedir (Bach ve Krause, 1997; Mattox, 1998; Ha ve ark., 1996; Vossen ve Kerner, 1991; Lin ve ark., 2009; Mai ve ark., 2009; Di Claudio ve ark., 2007; Cho ve Lee, 2008; Shinguu ve ark., 2006; Kim ve ark., 2006; Saini ve ark., 2007). Bu yöntemlerden sol-jel yöntemi ile sentezlenen nano tanecikli ince filmlerin optiksel, yapısal ve elektriksel özelliklerinin kontrolü daha kolaydır ve daha nitelikli filmler elde etmek söz konusudur.

Bu tez iki temel konu üzerine yoğunlaşmıştır; ilk olarak, sol-jel daldırma ile kaplama yöntemi kullanılarak günümüzde gittikçe artan öneme sahip olan nano tanecikli titanyum dioksit (TiO_2) ince filmi farklı tavlama sıcaklıklarında ve farklı altaşlar (soda camı, quartz cam ve silisyum kristali) üzerine büyütülecektir. İkinci kısımda ise tavlama sıcaklığının ve altaşın, büyütülen ince filmlerin optiksel, yapısal ve morfolojik özellikleri üzerine etkisi incelenecektir.

2. KURAMSAL BİLGİLER

2.1 TiO₂'in Kristal Yapısı

Titanyum dioksit (TiO₂), rutile (tetragonal, $a=b=4.584 \text{ \AA}$, $c=2.953 \text{ \AA}$), anatase (tetragonal, $a=b=3.782 \text{ \AA}$, $c=9.502 \text{ \AA}$) ve brookite (ortorombik, $a=9.166 \text{ \AA}$, $b=5.436 \text{ \AA}$, $c=5.135 \text{ \AA}$) olmak üzere üç farklı ana kristal yapısına sahiptir. Anatase form, piramit yapısındadır ve düşük sıcaklıklarda kararlıdır. Rutile formunun kristalleri ise iğne yapısındadır ve yüksek sıcaklıklarda oluşur. Yani, yarı kararlı form olan anatase fazın 700 °C'nin altındaki sıcaklıklarda elde edildiği, bunun üzerindeki sıcaklıklarda daha kararlı olan rutile faza dönüştüğü bilinmektedir. Bundan dolayı, uygulamalarda rutile ve anatase fazı diğerine oranla daha önemli bir rol oynamaktadır. Rutile yapı, anatase yapıdan 1.2–2.8 kcal/mol kadar daha kararlıdır. Rutile ve anatase fazlarının birim hücreleri Şekil 2.1'de gösterilmektedir.



Şekil 2. 1. Rutile ve anatase fazın örgü yapısı.

Her iki formda da temel yapı taşı, az veya çok bozunmuş sekiz yüzlü konfigürasyonda, altı tane oksijen iyonu (O^{2-}) tarafından çevrelenmiş bir titanyum (Ti^{+4}) iyonu tarafından oluşur. Bunun sonucunda birbirine farklı şekillerde bağlanan TiO_6 oktahedral (sekizyüzlü) ağları oluşmaktadır. Rutile ve anatase da her iki formu oluşturan TiO_6 oktahedral (sekizyüzlü) içindeki bağların dağılımı ve birleşmeleri birbirinden farklıdır. Her iki kristal yapı da, her bir sekizyüzlünün ve sekiz yüzlüyü oluşturan zincirlerin dizilişinden kaynaklanan farklılıklar gösterir. Bu farklı bağ yapısından dolayı optik, elektriksel ve yapısal özellikleri de birbirinden ayrı davranışlar sergiler.

Örgüler arasındaki yapısal farklılıklar, farklı kütle yoğunluklarına ve elektronik bant yapılarına neden olur. Dolayısıyla, TiO_2 'in her iki formunun da fiziksel ve kimyasal özellikleri birbirinden farklıdır. Çizelge 2.1'de rutile ve anatase faza ait fiziksel ve kimyasal özellikler verilmektedir.

Çizelge 2.1 Rutile ve anatase fazın kimyasal özellikleri.

(25 °C)	RUTİLE	ANATASE
ΔH_f^0 (kcal / mol)	224.6	225.8
ΔG_f^0 (kcal / mol)	211.4	212.6
S^0 (cal / deg.mol)	11.93	12.03
d (g / cm ³)	4.250	3.894
E_g (eV)	3.1	3.3

Anatase fazda TiO_6 sekiz yüzlüsü daha küçük simetriye dönüşür. Rutile fazda ise köşeleri paylaşan sekiz yüzlüler (001) düzlemini oluşturur ve köşelerinden alttaki sekiz yüzlünün yüzeyi ile bağlantılıdır. Rutile fazdaki sekiz yüzlü yapı tamamen düzenli değildir ve biraz ortorombik değişim gösterir. Anatase fazdaki sekiz yüzlü simetrisi, ortorombik yapıdaki simetriden daha düşük olacak şekilde büyük bir değişim gösterir. Ti katyon sitelerinin düşük simetrisi yozlaşmaları artırır ve bant yarılmaları oluşturarak daha dar bir iletim bandına neden olur (Diebold, 2003; Fahmi ve ark., 1993; Linsebigler ve ark., 1995; Tang ve ark., 1993).

Anatase fazın komşu oktahedralinin koordinasyon sayısı, rutile fazın koordinasyon sayısından daha küçüktür. Anatase fazın yapısında, her bir oktahedron 4'ü köşeden, 4'ü de kenarlardan olmak üzere sekiz komşusuyla temas halindedir, yani toplam 8 koordinasyon sayısına sahiptir. Rutile faz yapısında ise koordinasyon sayısı, 2'si kenardan, 8'i köşelerden olmak üzere 10'a eşittir.

Rutile ve anatase yapılarında atomlar arası uzaklıklar farklıdır. Bu fazlardaki atomlar arası uzaklıklar Çizelge 2.2'de verilmiştir. Anatase yapıda Ti-Ti atomları arası uzaklık rutile yapıdakinden daha büyüktür fakat Ti-O atomları arasındaki uzaklık daha küçüktür (Fahmi ve ark., 1993; Linsebigler ve ark., 1995; Tang ve ark., 1993).

Çizelge 2.2 Rutile ve anatase fazda atomlar arası bağ uzaklıkları.

	RUTİLE	ANATASE
Ti – Ti	2.96	3.04
Ti – Ti	3.57	3.79
Ti – O	1.94	1.91
Ti – O	1.99	1.95
O – O	2.52	2.45
O – O	2.78	2.80
O – O	2.96	3.04

Tavlama sırasında, yarı kararlı anatase ve brookite fazdan kararlı rutile faza doğru birinci derecede faz geçişi olur. Anatase →rutile, anatase→brookite→rutile, brookite→rutile, ve brookite → anatase → rutile şeklinde birden fazla faz geçişi vardır. Geçiş sırası deney koşulları, alttaş türü, alttaşın büyüklüğü ve tavlama sıcaklığı gibi özelliklere bağlıdır (Burns ve ark., 2004). Bu parametrelere bağlı olarak 400°C ve 1000°C arasında herhangi bir sıcaklıkta anatase faz, rutile faza geçebilir (Klein, 1988).

Titanyum dioksitin atomik boyutlardaki yüzey yapısı ile diğer fiziksel ve kimyasal özellikleri arasındaki ilişkinin çözümü yüzey bilimi adına çok büyük bir başarı olmuştur. Metal oksit sisteminde iyonik ve kovalent bağların her ikisinin birlikte bulunuşu dolayısıyla, yüzey yapısı diğer metal ve bilinen temel yarıiletkenlere kıyasla lokal yüzey

kimyasında iki kat daha güçlü bir etkiye sahiptir. Yıllardır TiO_2 üzerine sürdürülen yoğun çalışmalar, onun emsalsiz bir kristal yapıda olup benzersiz bir metal oksit yüzeyine sahip olduğunun ortaya çıkarmıştır.

Sonuç olarak TiO_2 kristal yapısı için şunlar söylenebilir; titanyum dioksit kristalinin polimorf yapısını belirleyen sentezleme yöntemidir. Çünkü sentezleme işlemi sırasında izlenen yol değişik faz gelişimlerine neden olmakta bu ise farklı parçacık boyutlu TiO_2 'nin oluşmasına sebebiyet vermektedir.

2.2. TiO_2 'nin Uygulama Alanları

TiO_2 'in fotokatalitik aktivite özelliğinin, 1970'lerde, Fujishima ve Honda (1972) tarafından ortaya atılmasından sonra, dünyada ciddi bir problem haline gelen çevre kirliliği sorunlarına çözüm yaratabileceği için bu konu üzerinde yoğun olarak çalışılmaya başlanmıştır. Frank ve Bard (1977), TiO_2 parçacıkları ile su içerisindeki siyanürü parçalayarak çevresel arıtma konusundaki ilk çalışmayı gerçekleştirmişlerdir. Bu çalışmanın ardından, organik ve inorganik su kirlerinin arıtılması üzerine çeşitli çalışmalar yapılmıştır (Ollis ve Al-Ekabi, 1993; Matthews, 1986 ve 1988; Tanguay ve ark., 1989; Taraba ve ark., 1986). TiO_2 parçacıklarının su arıtma işleminde kullanılmasından sonra, suyun içerisinden temizlenmesi gibi bir problemin ortaya çıkması TiO_2 'i, ince film gibi, farklı bir formda üreterek kullanma ihtiyacını ortaya çıkarmıştır. TiO_2 'in ince film olarak hazırlanması konusunda yapılan ilk çalışmalar Matthews (1987) ve Heller (1995) tarafından gerçekleştirilmiştir.

TiO_2 'in bilinen fotokatalitik oksitleme özelliğinin yanı sıra bir diğer özelliği de ışık etkisi ile yüzeyinin süperhidrofilik özellik kazanmasıdır. TiO_2 'in bu özelliği, buğulanmayan ve kendi kendisini temizleyebilen yüzeyler elde edilmesini sağlamaktadır (Wang ve ark., 1997; Shinguu ve ark., 2006). TiO_2 'in hidrofiliklik mekanizmasının (Wang ve ark., 1999) aydınlatılması ve mikroyapı (Katsumata ve ark., 2005), yüzey morfolojisi (Djaoued ve ark., 2010; Lee ve ark., 2000; Sakai ve ark., 1998) ve kristal yapı (Watanabe ve ark., 1999; Bockmeyer ve ark., 2009; Kumar ve ark., 2010) gibi parametrelerin TiO_2 'in hidrofilisitesine olan etkilerinin açığa kavuşturulması için çeşitli çalışmalar yapılmıştır.

Fotokatalitik TiO₂'in kanser tedavilerinde de etkili olabileceği Fujishima ve ark.(2000) tarafından ileri sürülmüştür. Tümör üzerine enjekte edilen TiO₂ partiküllerinin tümörün büyümesini engellediği kaydedilmiştir.

Bunların yanı sıra metal oksit yarıiletken yapıda olması durumunda iyi bir gaz sensörü olarak görev yapmakta olan titanyum dioksit (Sheveglie, 1992), oda sıcaklığında oksijene olan duyarlılığı yıllardır bilinen bir gerçektir.

Günümüzde titanyum dioksit, heterojen katalizör, hidrojen ve elektrik enerjisi üreten güneş pillerinde, foto kataliz, gaz sensörü, beyaz boya maddesi, korozyon korumalı kaplamalarda, seramiklerin optik kaplamalarında ve elektrikli cihazlarda varistör olarak kullanılır. Bununla birlikte, yerbilimde ve kemik naklinde biyolojik uyumluluğu dolayısıyla önemli bir rol oynamaktadır. Ayrıca yeni nesil MOSFET'lerde izolatör olarak, manyetik spin-valf sistemlerinde ara levha olarak, lityum tabanlı pillerin nano yapıları biçimlerinde ve elektrokromik cihazlarda kullanılmaktadır.

Son zamanlarda ise titanyum farklı yapıları gereği artık akıl almayacak birçok alanda kullanılır hale gelmiştir. Öyle ki farklı yöntemlerle büyütülen titanyum dioksit nanotüpler oldukça yeni bir çalışma olan hemoglobinin kontrol edilmesinde dahi kullanılır durumdadır.

2.3 Sol-Jel Yöntemi

Sol-jel kavramını açıklamak gerekirse; sol, katı malzemenin sıvı süspansiyonu içindeki haline verilen isimdir. Katı maddeler, sıvılar içinde dağılmış olarak dururlarsa bu sisteme sol denir. Moleküller arası Van Der Waals ve elektriksel itme kuvvetlerinin etkisi yerçekimi kuvvetine göre daha fazla olduğu için solü meydana getiren malzemeler dibe çökmez. İşte bu molekül çözelti içinde genişleyerek büyük bir boyuta ulaşırsa bu maddeye jel denir. Katı yapının devamlılığı, jele elastik bir özellik kazandırır (Brinker ve Scherer, 1990; George, 1992).

Sol-jel yöntemi, ilk olarak, rastlantı sonucu 1846 yılında keşfedilmiştir. Ebelmen tarafından hazırlanan bu karışım o dönemlerde fizikçiler tarafından yeterli ilgiyi görmemiştir. 1939 yılında SiO₂ ile film hazırlanabileceğini ortaya koyan Geffcken, önemli bir adım atmıştır. 1953 yılından sonra sol-jel yöntemi yaygınlaşmıştır (Klein, 1988).

Sol-jel yöntemi, teknolojide oldukça önemli bir yer tutmaktadır ve diğer kaplama yöntemlerine göre birçok avantajının olması sebebiyle bu yerini korumaktadır. Bu avantajlarını şöyle sıralayabiliriz; saf ve homojen filmlerin düşük ısılarda hazırlanabilmesi ve enerji tasarrufu sağlanması, değişik geometrilere sahip cisimler bu metotla homojen olarak kaplanabilmesi, kirliliğe sebep olmaması başlıca avantajlarıdır. Kimyasallarla ilgili bir sorun yoksa sol-gel yöntemi tehlikesizdir ve malzemeler kolay bulunur. En büyük avantajı ise, kaplanan filmin mikro yapısının kolayca kontrol edilebilir olmasıdır. Bu yöntem ile gözenekli yapı elde edilebildiği için düşük kırılma indisli filmler yapmak mümkündür. Bunun yanı sıra çok katlı kaplama yapmak mümkündür ve yöntem, cismin geometrisi ile sınırlı değildir. Bunlarla birlikte sol-jel yönteminin bazı dezavantajları vardır. Sol-jel yönteminin en olumsuz yanı kaplama işlemi sırasında çok fazla malzeme kaybı olmasıdır. Kullanılan kimyasal malzeme zor bulunuyor ise maliyeti yüksek olur, filmlerde karbon çözültisi kalır, kullanılan kimyasal sağlığa zararlı olabilir. Ayrıca, sol-jel metodunda hammadde maliyetinin yüksek olması, küçük gözeneklerin kalması, kaplama işleminin uzun sürmesi dezavantajlar olarak sayılabilir (Klein, 1988; Brinker ve Scherer, 1990).

2.3.1 Sol-Jel Yönteminde Kullanılan Bileşenler

2.3.1.1 Metal Alkoksitler

Metal alkoksitlerin geneli $M(OR)_x$ şeklindedir. Bu bileşende O oksijeni, M kaplanacak malzemeyi, R herhangi bir alkil grubunu, x valans durumunu temsil etmektedir. Bu bileşenler, OR grubu sayesinde reaksiyon vericidirler ve bu grup değiştirilerek yapıları da değişebilir. Başlangıç kimyasallarının tüm tipleri karışabilir olduğu sürece kullanılabilirler. İnce filmlerin üretiminde homojen bir kaplamayı sağlamak için Ti-alkoksitleri, Ti tuzlarından daha kullanışlı ve iyi sonuçlar vermektedir (Ohya ve ark., 2003).

2.3.1.2 Katalizörler

Hiçbir reaksiyona katılmayan ancak reaksiyon hızını arttıran malzemelere katalizör denir. Asitler ve bazlar, sol-jel yönteminde katalizör olarak kullanılırlar. Asit katalizör grubu organik ve inorganik olarak ikiye ayrılır. Asetik asit organik asittir, nitrik asit,

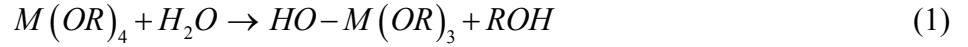
hidroklorik asit, hidroflorik asit inorganik asitlerdir. Baz katalizör grubunda ise amonyum hidroksit bulunmaktadır (Oh ve ark., 2004).

2.3.1.3 Alkoller

OH grubu ile bir alkil ya da başka bir molekülün birleşmesiyle alkoller oluşur. Alkoller sol-gel yönteminde başlangıçta kullanılırlar ve metal oksitlerle reaksiyona girerler. $C_2H_{2n+1}OH$ genel yapıları olup 'n' sayısı değişerek farklı alkoller oluşur. n, 1 değerini aldığımda metanol, 2 değerinde etanol ve 3 değerinde propanoldür (Alain, 1998).

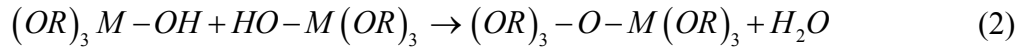
2.3.2 Sol-Jel Oluşumu

Sol-jel iki tür tepkime sonucunda oluşur. Bunlardan birincisi, hidroliz reaksiyonudur.

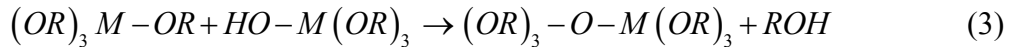


Bu ifade hidroliz reaksiyonunun genel ifadesidir. *ROH* alkol grubu bileşiğidir. H_2O ve katalizör durumuna göre *OR* grupları *OH* olana kadar reaksiyon devam eder. Açık bir şekilde ifade etmek gerekirse, hidroliz çözülmüş olan Ti katyonundan bir veya bir kaç tane su molekülü tarafından protonların uzaklaştırılması olarak tanımlanabilir. Hidroliz reaksiyonları metal tuz solüsyonlarının pH'ı değiştirilerek veya alkoksit solüsyonlarına su eklenmek suretiyle sonlandırılabilir.

İkinci reaksiyon türü ise yoğunlaştırma reaksiyonudur. İlk reaksiyonda hidrolize uğramış olan iki malzeme, oksijen köprüsü ile bağlanırlar.



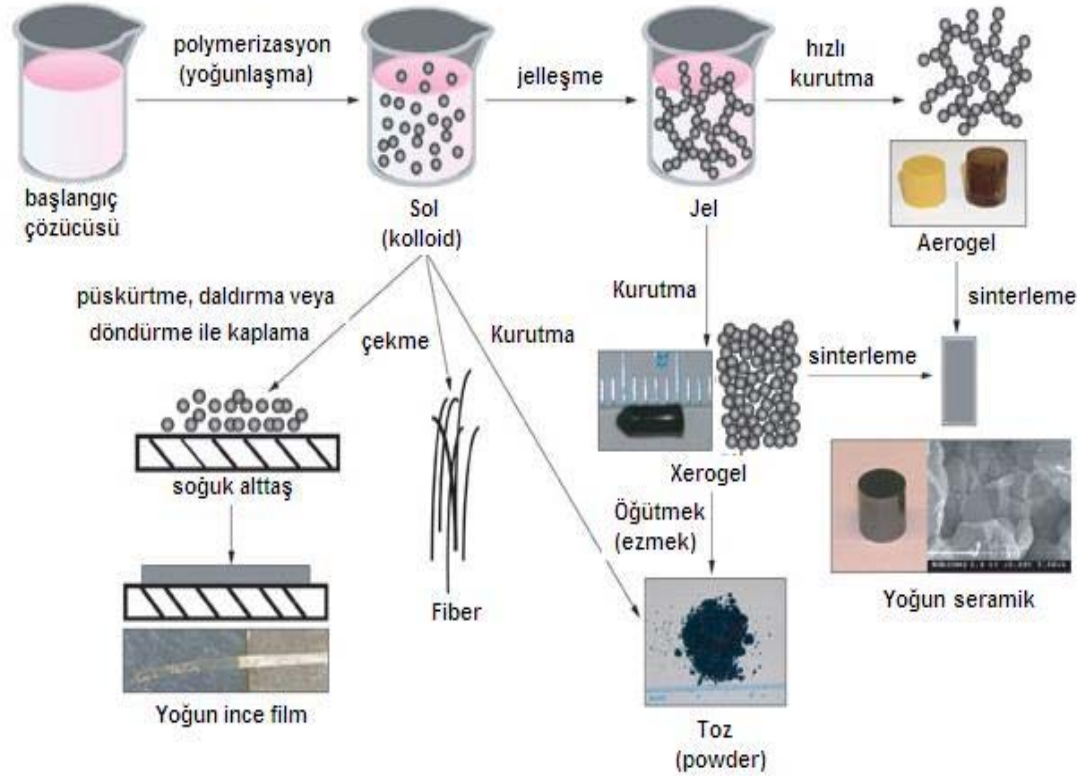
Eğer bileşenlerden biri hidrolize uğramışsa



şeklinde reaksiyonlar gerçekleşir. Bu durumda reaksiyon ürünleri hidrolize uğrar. Bu ürünler tekrar birleşerek yoğunlaştırma reaksiyonunu gerçekleştirirler. Yoğunlaştırma reaksiyonuyla büyük silikon bazlı moleküller elde edilebilir. Bu olaya polimerizasyon denir (Alain, 1998).

2.3.3 Sol-Jel ile Film Kaplama Yöntemleri

İnce film kaplamalarında sol-jel yöntemi yaygın olarak kullanılmaktadır (Şekil 2.2). Sol-jel işleminde, jelleşme öncesi akışkan sol veya çözelti herhangi bir yüzey üzerine yaygın olarak kullanılan daldırma, püskürtme ve döndürme teknikleriyle kaplanabilir. Bu çalışmada daldırma ile kaplama tekniği kullanılmıştır.

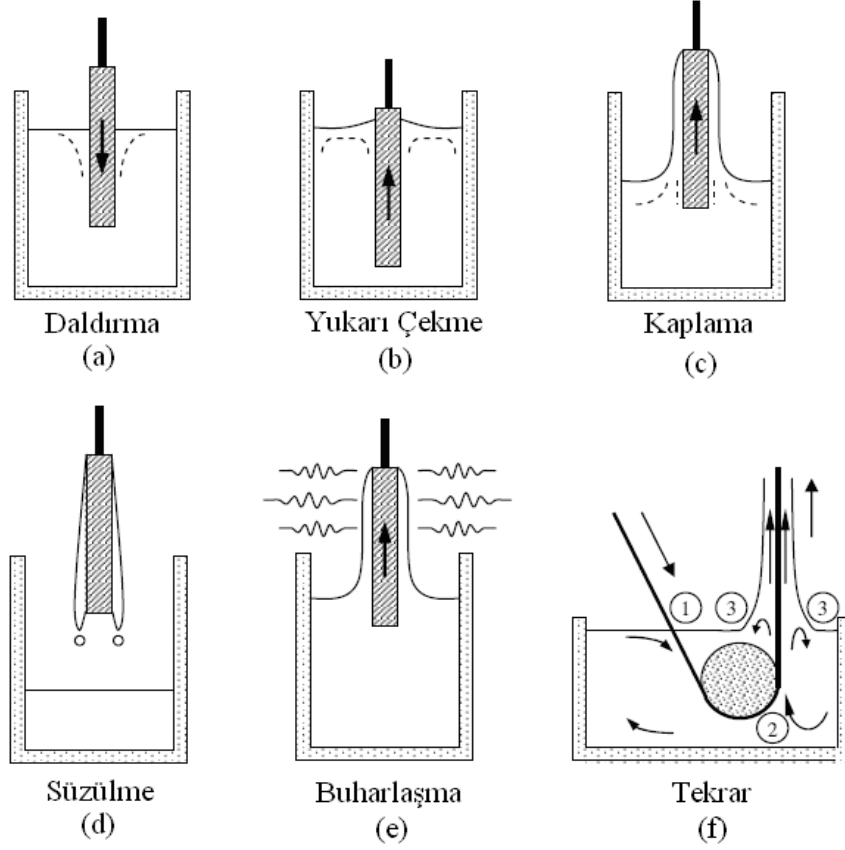


Şekil 2.2. Sol-jel kaplama tekniği ile elde edilen malzeme türleri (Alain, 1998).

2.3.3.1 Daldırma ile Kaplama Metodu

Bu metot genelde saydam tabakalar üretmek için kullanılır. Daldırarak kaplama metodu, hazırlanan çözelti içine kullanılan altlık malzemesinin belirli bir hızla daldırılıp ve yine aynı hızla geri çekilmesi esasına dayanır. Daldırma ile kaplama metodu beş aşamada gerçekleşir. Bu beş aşama şekilde Şekil 2.3’de gösterilmektedir.

Bu işlemler; daldırma (a), yukarı çekme (b), kaplama (c), süzülme (d), buharlaştırma (e), tekrarlama (f) aşamalarıdır. Bu işlem sonucunda film oluşturulur.



Şekil 2.3. Daldırma ile kaplama yönteminin şematik gösterimi.

Alkol gibi çözücülerde yapılan kaplamalarda süzülme safhasına gerek yoktur. Taşıyıcı sole daldırılıp çıkarıldığında kaplama alanı üzerinde sol ihtiva eden bir sınır tabaka oluşur. Kaplama ve süzülme aşamasında sözü edilen sınır tabaka, iç tabaka ve dış tabaka olmak üzere ikiye ayrılır. İç tabaka taşıyıcı ile birlikte hareket ederken dış tabaka ters yönde hareket ederek sole geri döner. Film kalınlığı aşağı ve yukarı doğru hareket eden tabakaları ayıran ana akıntının şiddetine (streamline çizgisi) bağlıdır. Film kalınlığını ve ana akıntının şiddetini, film kaplama bölgesindeki 6 kuvvet kontrol eder. Bunlar;

- 1.) Viskozite nedeniyle hareketli taşıyıcının yukarıya doğru çekme kuvveti
- 2.) Yerçekimi kuvveti

3.) Sıvının konkav menisküs eğrisinde yüzey gerilimi bileşke kuvveti

4.) Kaplama bölgesine gelen sıvının sınır tabakasının eylemsizlik kuvveti

5.)Yüzey gerilim gradyanı

6.) Ayırma ve birleştirme basıncı (1 μm 'den küçük kalınlıktaki filmler için önemli)

Eğer sıvının viskozitesi (η) ve taşıyıcı hızı (U) yeteri kadar büyük ise kaplanan filmin kalınlığı (h), viskoz sürüklenme ve yerçekimi kuvvetlerini dengeler. Bu durumda kalınlık;

$$h = c_1 \left(\frac{\eta U}{\rho g} \right)^{1/2} \quad (4)$$

olur. Burada ρ , sıvının yoğunluğu ve g , yerçekim ivmesidir. Ayrıca denklem (4)'deki c_1 , orantı katsayısıdır ve Newtoniyen sıvılar için 0.8 değerine eşittir. Taşıyıcının hızı ve sıvının viskozitesi yeteri kadar büyük değil ise, Landau ve Levich (1942) tarafından hesaplanan bağıntı kullanılır. Bu bağıntıda dengeleme viskoz sürüklenme ile sıvı buhar yüzey gerilimi oranı (γ_{LV}), denkleme ilave edilerek elde edilir.

$$h = 0.94 \frac{(\eta U)^{2/3}}{(\gamma_{LV})^{1/6} (\rho g)^{1/2}} \quad (5)$$

Kalınlığı hesaplamaya yarayan bu denklemlerin uygulanabilirliği konusunda yapılan çeşitli deneyler, uygulanabilirliğinin zayıf olduğunu göstermektedir. Kalınlık hesaplama konusunda, deney ile teori arasındaki farkların başlıca sebepleri şöyle sıralanabilir;

- pH etkisi,
- buharlaşma etkisi,
- viskozitenin sabit olmaması,
- her sıvının Newtoniyen sıvı olmaması.

Bütün bu etkiler, filmlerin gerçekte daha kalın olması ile sonuçlanır. Bu etkilerden en önemlisi buharlaşma etkisidir. Çünkü sol-jel ile elde edilen kaplamanın katılaştırılması buharlaşma sayesinde olur. Daldırma işlemi ile kaplanan filmlerde buharlaşma oranı, film yüzeyindeki gaz fazının yüzeyin dışına doğru yayılma oranı ile orantılıdır. Difüzyon aralığı çok ince tabaka ($l = 1\text{mm}$) içindeki gazın hareketine bağlıdır. Çünkü oluşan küçük bir

konveksiyon, difüzyonu çok fazla değiştirir. Buharlaşma oranı, ampirik kütle katsayısı k olmak üzere,

$$m = k(p_e - p_i) \quad (6)$$

olarak ifade edilir (Landau ve Levich, 1942). p_e denge durumunda yüzeyde oluşan basınç ve p_i ise l kadar uzaklıkta oluşan basınçtır. Buharlaşma oranı, sıvının derinliğinden bağımsızdır. Daldırma işlemi boyunca taşıyıcı hareketi buharlaşma oranı üzerinde etkili olsa da, pratikte ihmal edilebilir.

Daldırma yönteminin avantajların yanında, geniş yüzeyler için büyük daldırma kaplarına ihtiyaç duyulması ve fazla miktarda kaplama çözeltisi gerektirmesi gibi dezavantajları bulunmaktadır (Uhlmann ve Kreidl, 1984; Bach ve Krause, 1997). Daldırma yönteminde kaynama noktası düşük ve dolayısıyla hızlı kuruyan çözücüler (etanol, izopropanol, v.b.) tercih edilir. Ayrıca, kaplama kompozisyonunda kullanılan çözücünün, cam yüzeyini iyi ıslatabilme özelliği taşıması kaplamanın daha homojen olmasını sağlar.

2.4 Yarıiletkenlerin Optiksel Özellikleri

2.4.1 Temel Soğurma

Çeşitli dalga boylarında ışın içeren bir demet, şeffaf bir ortamdan geçirilirse, içinden bazı dalga boylarının kaybolduğu görülür. Buna ışığın soğurulması (absorplanması) denir. Yarıiletkenlerin bant yapısının incelenmesi için en basit metot soğurma spektrumunun ölçülmesidir. Soğurma sürecinde, enerjisi bilinen bir fotonla bir elektronu düşük enerji seviyesinden yüksek enerjisine uyarır.

Soğurma sabiti $\alpha(h\nu)$, $L(h\nu)$ ışık yoğunluğundaki düşüşün oranıyla ifade edilir.

$$\alpha(h\nu) = \frac{1}{L(h\nu)} = \frac{d[L(h\nu)]}{dx} \quad (7)$$

Soğurma; banttan banda ya da eksiton geçişlerini ifade eder. Yani bir elektronun değerlik bandından iletkenlik bandına uyarılmasıdır. Soğurmadaki hızlı artış ile kendini gösteren temel soğurma yarıiletkenin enerji aralığının belirlenmesinde kullanılır. Bununla beraber, geçişler için seçim kuralları vardır. Soğurma süreçleri hesaba katıldığı için, soğurma kenarında enerji aralığının sonuçları doğrudan geçiş süreçleri değildir.

Bir fotonun momentumu için h/λ (λ , ışığın dalga boyu), kristal momentumu h/a (a , örgü sabiti) ile karşılaştırıldığında çok küçüktür. Foton soğurma sürecinde elektronun momentumu korunur. $h\nu$ enerjisi ile verilen bir foton için $\alpha(h\nu)$ soğurma sabiti, ilk durumdan son duruma geçiş olasılığı olan P_{if} , ilk durumdaki elektronların n_i yoğunluğu ve son durumdaki n_f yoğunluğu ile orantılıdır. Bu durum $h\nu$ enerjisine eşit, farklı enerjilerle ayrılabilen mümkün olan tüm geçişlerin toplamı kadar olmak zorundadır.

$$\alpha(h\nu) = A \sum P_{if} n_i n_f \quad (8)$$

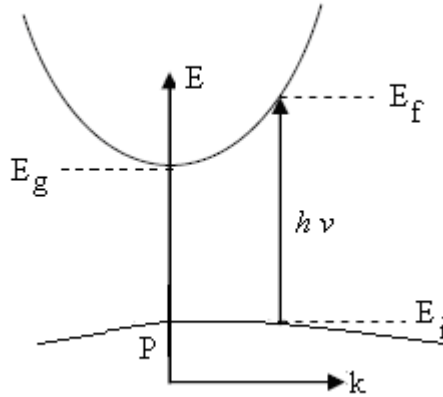
Bütün düşük seviyelerin dolu ve üst seviyeleri boş olduğu durumda katkısız yarıiletkenler 0 K'dedir (Pankove, 1971).

2.4.1.1 İzinli doğrudan geçişler

Şekil 2.4'te enerji bantlarının maksimumları arasında momentumun korunduğu tüm absorpsiyon geçişleri gösterilmektedir. Burada P_{if} olasılığındaki geçişler fotonun enerjisinden bağımsızdır.

$$E_f = h\nu - |E_i| \quad (9)$$

Denklemden de görüldüğü gibi, E_i enerjisi başlangıç durumu, E_f enerjisi son durumu bağlıdır.



Şekil 2.4. İzinli doğrudan geçişler (Pankove, 1971)

Parabolik bantlarda ise E_i ve E_f enerjileri,

$$E_f - E_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (10)$$

ve

$$E_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \quad (11)$$

şeklindedir. Bununla beraber,

$$h\nu - E_g = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) \quad (12)$$

ve direkt geçişler için toplam durum yoğunluğu aşağıdaki gibidir.

$$N(h\nu)d(h\nu) = \frac{8\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = \frac{(2m_r)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} (h\nu - E_g)^{1/2} d(h\nu) \quad (13)$$

Burada,

$$m_r = \frac{m_h^* m_e^*}{m_h^* + m_e^*} \quad (14)$$

bağıntısı ile verilen m_r indirgenmiş kütlelerdir ve böylece soğurma katsayısı

$$\alpha(h\nu) = A^* (h\nu - E_g)^{1/2} \quad (15)$$

ile verilir. Burada

$$A^* \approx \frac{q^2 \left(2 \frac{m_h^* m_e^*}{m_h^* + m_e^*} \right)}{n c \hbar^2 m_e^*} \quad (16)$$

ile belirlidir (Pankove, 1971).

Kırınım indisi $n=4$ kabul edildiğinde ve boşluk ve elektronun etkin kütlelerinin serbest elektronun kütlesine eşit olduğu varsayıldığında $\alpha(h\nu)$ aşağıdaki gibi olur.

$$\alpha(h\nu) \cong 2 \times 10^4 (h\nu - E_g)^{1/2} \text{ cm}^{-1} \quad (17)$$

Burada $h\nu$ ve E_g , eV ile ifade edilmektedir.

2.4.1.2. Yasak doğrudan geçişler

Şekil 2.4'teki modelde de görüldüğü gibi, geçiş olasılığı $(h\nu - E_g)$ ile orantılı olarak artar. Doğrudan geçişlerdeki durumların yoğunluğu $(h\nu - E_g)^{1/2}$ ile orantılıdır, soğurma sabiti spektral bağılılığı

$$\alpha(h\nu) = A' (h\nu - E_g)^{3/2} \quad (18)$$

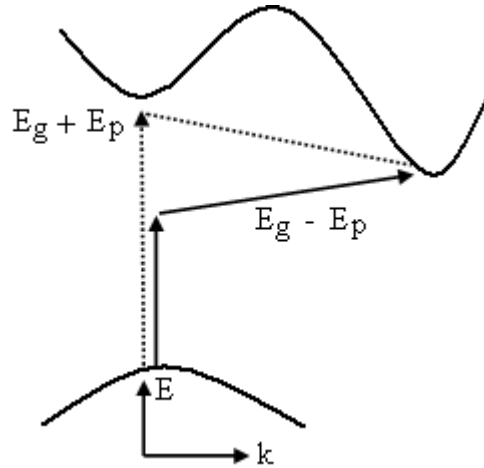
şeklindedir. Burada A' aşağıdaki gibi verilir.

$$A' = \frac{4q^2 \left(\frac{m_h^* m_e^*}{m_h^* + m_e^*} \right)^{3/2}}{3nc h^2 m_e^* m_h^* h\nu} \quad (19)$$

Eşitliğin paydasındaki $h\nu$, $(h\nu - E_g)^{3/2}$ ile karşılaştırıldığında yavaş değişir (Pankove, 1971).

2.4.1.3. Dolaylı enerji bantları arasındaki dolaylı geçişler

Geçiş, enerji ve momentumun her ikisinde de bir değişim gerektirdiğinde bu süreç iki adımda gerçekleşir. Çünkü foton momentumda bir değişim sağlamaz. Şekil 2.5'te gösterilen fonon etkileşimi yoluyla momentum korunur. Fonon, örgü titreşiminin bir kuantumudur. Fononların geniş bir spektruma uygun olmasına rağmen, sadece fononlar gereken momentum değişimiyle kullanılır. Bunlar genellikle boyuna ve enine akustik fononlardır. Bu fononların her biri karakteristik E_p enerjisine sahiptir.



Şekil 2.5. Doğrudan olmayan geçişler (Pankove, 1971).

Bu nedenle E_i 'den E_f 'ye geçişi tamamlandığında bir fonon yayınlanır ya da soğurulur.

Bu iki durum sırasıyla şöyle belirtilir.

$$\begin{aligned} h\nu_e &= E_f - E_i + E_p \\ h\nu_a &= E_f - E_i - E_p \end{aligned} \quad (20)$$

Doğrudan olmayan geçişlerde, iletkenlik bandının bütün boş durumları, tamamıyla değerlik bandının işgal edilmiş durumlarına bağlıdır. E_i enerjisindeki ilk durumların yoğunluğu

$$N(E_i) = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3} (2m_h^*)^{3/2} |E_i|^{1/2} \quad (21)$$

ve E_f enerjisinde durumların yoğunluğu

$$N(E_f) = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3} (2m_e^*)^{3/2} (E_f - E_g)^{1/2} \quad (22)$$

şeklinde verilir. Denklem (20), denklem (22)'de yerine yazılır ve düzenlenirse,

$$N(E_f) = \frac{1}{2\pi^2\hbar^3} (2m_e^*)^{3/2} (h\nu - E_g \mp E_p + E_i)^{1/2} \quad (23)$$

elde edilir. Soğurma katsayısı, denklem 21'de verilen ilk durumların yoğunluğu $h\nu \mp E_p$ ile ayrılmış olan mümkün olan bütün durumların toplamı şeklinde denklem 17'de verilen son durumun çarpımıyla orantılıdır. α , fononların etkileşiminin olasılığı ile orantılıdır. Bu olasılık E_p enerjili N_p fononun bir fonksiyonudur ($f(N_p)$). Bose-Einstein istatistiği ile verilen fononların sayısı aşağıdaki gibidir.

$$N_p = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_p}{kT}\right) - 1} \quad (24)$$

Böylece

$$\alpha(h\nu) = A f(N_p) \int_0^{-(h\nu - E_g \mp E_p)} |E_i|^{1/2} (h\nu - E_g \mp E_p + E_i)^{1/2} dE_i \quad (25)$$

yazılır. Denklem 24, denklem 25’de yerine yazıldıktan sonra integrali alındığında, fonon soğurmasıyla bir geçiş için soğurma katsayısı $h\nu > E_g - E_p$ olduğu durumda aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\alpha_a(h\nu) = \frac{A(h\nu - E_g + E_p)^2}{\exp\left(\frac{E_p}{kT}\right) - 1} \quad (26)$$

Fonon yayılmasının olasılığı $N_p + 1$ ’e oranlanırsa, fonon yayılımı ile bir geçiş için soğurma katsayısı $h\nu > E_g - E_p$ olduğu durumda

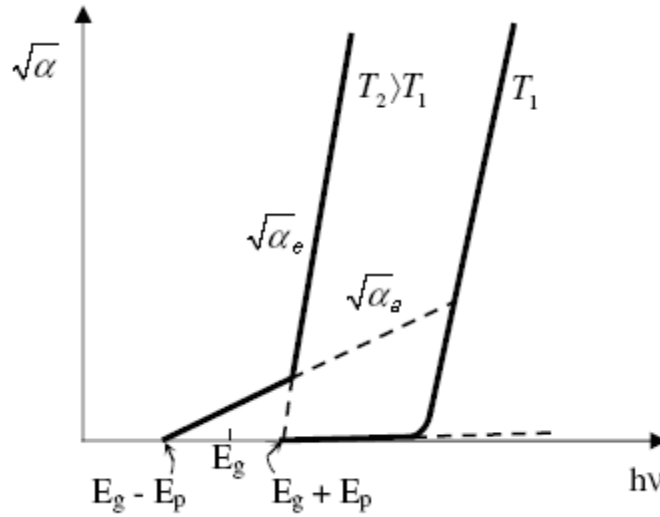
$$\alpha_e(h\nu) = \frac{A(h\nu - E_g - E_p)^2}{1 - \exp\left(-\frac{E_p}{kT}\right)} \quad (27)$$

şeklinde yazılabilir (Pankove, 1971).

$h\nu > E_g + E_p$ olduğu durumda fonon yayılımı ve fonon soğurmasının her ikisinin de olması mümkündür. Bu durumda soğurma katsayısı için

$$\alpha(h\nu) = \alpha_a(h\nu) + \alpha_e(h\nu) \quad (28)$$

yazılır.

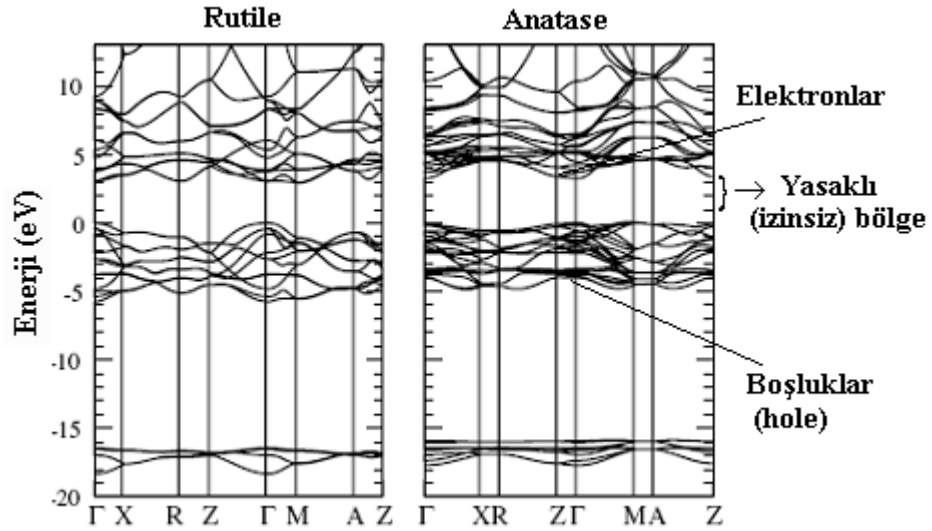


Şekil 2.6. Fonon soğurması ve fonon emisyonunun sıcaklığa bağımlılığı (Pankove, 1971).

Çok düşük sıcaklıklarda fonon yoğunluğu çok küçük (denklem 27'de payda büyük), bununla beraber, α_a 'da çok küçük olur. α_a ve α_e 'nin sıcaklığa bağlılığı Şekil 2.6'te gösterilmiştir. Burada görüldüğü gibi α 'nın karekökü $h\nu$ ile doğru orantılıdır.

2.4.1.4. Yüksek enerji geçişleri

Şekil 2.7'de iletkenlik bandından en düşük enerji bandına doğru giderken yüksek enerjilerde, değerlik bandından iletkenlik bandının ayrıldığı enerji-momentum diyagramı görülmektedir. Değerlik bandından iletkenlik bandına doğrudan geçişler momentum uzayında hemen hemen bütün noktalarda ortaya çıkabilir (Seçim kurallarıyla yasaklanan noktalar dışında). Bu geçişler, enerji aralığından daha büyük enerjilere sahiptir. Sonuç olarak yüksek geçişlere izin verilen iletkenlik ve değerlik bandının her ikisinde de alt bantlar vardır.



Şekil 2.7. TiO₂'nin enerji bant yapısının şematik diyagramı (Daude ve ark., 1977).

2.4.1.5. Eksiton soğurması

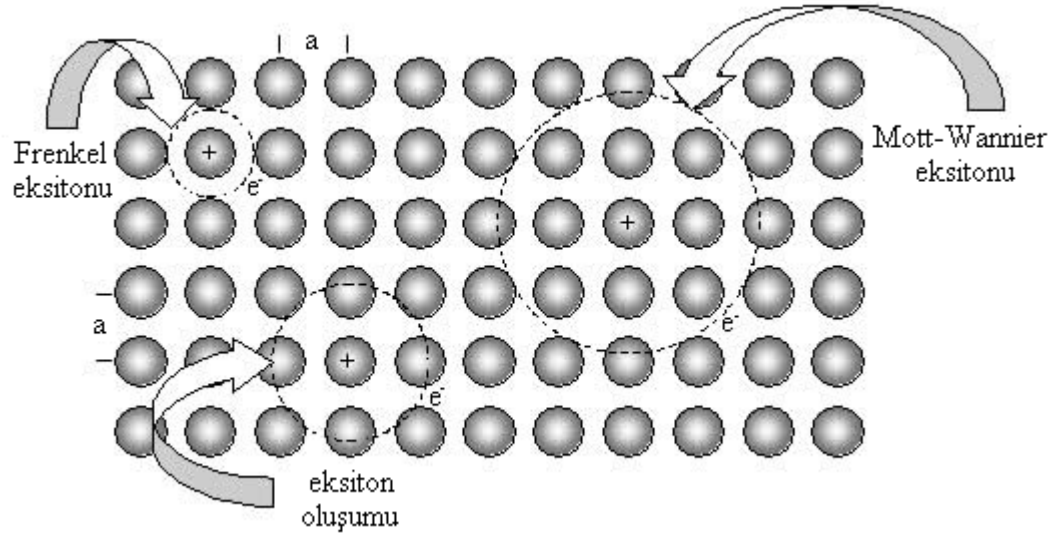
Bir kristalde optik soğurmanın olmadığı enerji aralığı, yasak enerji aralığıdır. Bir kristalin yasak enerji aralığına tekabül eden enerji için optik soğurmanın olmaması beklenir. Fakat yansıma ve soğurma spektrumları çoğu kez enerji aralığının tam altında

foton enerjileri için bir yapı oluşturur. Bu yapı foton soğurması ile kovalent bağdan bir elektronun kopması ve geride kalan yapı pozitif olarak iyonize olmuştur. Bu pozitif yük ile bir elektron arasında çekici bir coulomb etkileşmesi vardır. Bu elektrona da Eksiton denir. Bir Eksiton kristal içinde serbestçe hareket edebilir ve enerji taşır. Doğrudan aralıklı yarıiletkenlerin kenar soğurmalarında keskin pikler genellikle eksitonların yapısında ortaya çıkar, ya da doğrudan olmayan aralıklı yarıiletkenlerin soğurma kenarlarında basamaklar şeklinde ortaya çıkar (Liang, 1970).

Eksitonlar için iki farklı yaklaşım vardır (Şekil 2. 8).

- 1- Frenkel Eksitonu: Ortalama elektron-boşluk mesafesi kadar küçüktür ve sıkı bağlıdır.
- 2- Mott-Wannier Eksitonu: Ortalama elektron-boşluk mesafesi kadar büyüktür ve zayıf bağlıdır.

Doğrudan aralıklı yarıiletken materyallerde foton enerjisi $h\nu = E_g - E_x$ (E_x ; eksitonun bağlanma enerjisi) olduğu zaman serbest eksitonlar ortaya çıkar Eksitonlar düşük kinetik enerjiyle oluşturabildiklerinden, yüksek enerjili fotonlar tarafından da katkı sağlanabilir. Bu yüzden banttan banda geçiş bölgesinde, soğurma katsayısına bir bileşen katkıda bulunur



Şekil 2.8. Frenkel ve Mott-Wannier eksitonlarının şematik gösterimi.

Doğrudan olmayan aralıklı materyallerde, fonon katılımında momentum korunumuna ihtiyaç vardır. Bundan dolayı soğurma katsayısındaki artış,

$$h\nu = E_g - E_p - E_x \quad (29)$$

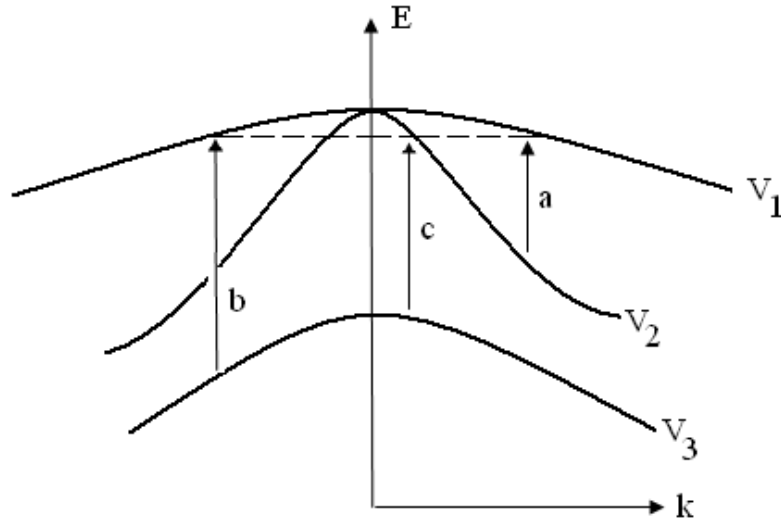
şeklinde fonon soğurmasıyla geçiş için yazılabilir. Fonon yayınlımlı geçiş için,

$$h\nu = E_g + E_p - E_x \quad (30)$$

şeklinde yazılabilir. Fonon spektrumunun optik (O) ve akustik (A) dalların her birinde iki enine (T) ve bir boyuna (L) fononları vardır. Geçişlerde birden fazla fononun katkısı vardır ve bu geçişler soğurma ya da ışmanın farklı kombinasyonları olabilir. Bundan dolayı soğurma kenarında basamakların sayısı fazladır (Lim ve ark., 2008).

2.4.1.6. Bantlar arası geçişler

Birçok yarıiletkenin değerlik (valans) bandı, spin-orbital etkileşimleriyle ayrılmış üç alt banttandır. Bant yapısı Şekil 2.9’da görülmektedir.



Şekil 2.9. Değerlik alt-band yapısı ve band içi geçişler.

Örneğin, p tipi yarıiletkenlerde, boşluklarda değerlik bandının en üstü doldurulduğu zaman, foton-soğurma geçişlerinin üç tipini yapması mümkündür.

- Hafif kütleli boşluk (hole) bandı V_2 ‘den yoğun kütleli boşluk bandı V_1 ‘e geçiş,
- Ayrılmış V_3 bandından yoğun kütleli boşluk bandı V_1 ‘e geçiş,

c) Ayrışmış V_3 bandından hafif kütleli boşluk bandı V_2 'ye geçişler şeklinde foton soğurma geçişleri mümkündür.

Spin-orbital ayrılma enerjisinden daha küçük enerji aralığına sahip yarıiletkenlerde $V_3 \rightarrow V_1$ ve $V_3 \rightarrow V_2$ geçişleri temel soğurmalar tarafından gizlenmiş olabilir. Eğilmiş $E(k)$ değerlik bandı yüzeyine sahip yarıiletkenler, $V_2 \rightarrow V_1$ geçişlerine uygun soğurma piklerinin güçlü simetrik olmayan değişimlerini gösterir.

2. 4. 2. Örgü (veya Fonon) Soğurması

İki ve daha çok bileşenli yarıiletkenlerde, farklı cins atomlar arası bağlanma elektrik dipollerin bir bütünü seklindedir. Bu dipoller, dipolün titreşim modu, ışımının frekansına eşit olduğu zaman, elektromagnetik alandan enerji soğurabilir ve ışıma birkaç maksimum değere ulaşır. Bu durum spektrumun uzak kızılötesi bölgesinde ortaya çıkar. Genellikle titreşim modları karmaşıktır, temel titreşimlerin (çok fononlu ışıma) birkaç titreşiminden ibarettir. Bununla beraber, iki ya da daha çok fonon momentumun korunumuna uygun ışıma yapmak zorundadır. Yarıiletkenler iki enine optik mod (TO), iki enine akustik mod (TA), bir boyuna optik mod (LO), bir boyuna akustik moda (LA) sahiptir. Bazen iki enine modlar benzer $E_p(k)$ dispersiyon karakteristiğine sahiptir (Lim ve ark., 2008)..

Katılarda ve sıvılarda örgü (veya fonon) soğurması üç temel sürece ayrılabilir:

- 1- Artık ışıma süreci:** Bu ışığın elektrik alanında titreşim yapan dipol momentlerin (örneğin NaCl) bağlanmasından dolayı hemen hemen sıfır dalga vektörlü fononların oluşturulmasıyla iyonik materyallerde meydana gelir.
- 2- Çoklu fonon süreci:** İyonik ve kovalent kristallerde meydana gelmektedir. Bir titreşim modu, atomlardaki yükleri aniden indükler ve aynı zamanda ikincil bir mod ise indüklenmiş yüklerin bir titreşimine sebep olur. Soğurma, iki fononun frekanslarının farkı ve toplamı değerlerinde meydana gelir.
- 3- Tek fonon süreci:** Kovalent materyallerde meydana gelir. Tek bir fononun oluşturulması, bir hücre başına üç veya daha çok atom varsa dipol momentinde bir değişmeye eşlik edecektir.

Yukarıda açıkladığımız temel soğurma ve örgü (veya fonon) soğurması dışında, band aralığındaki kusurlu seviyeler ve kirlilikten dolayı geçişler sebebiyle ve amorf materyallerde bir soğurma süreci elektrik iletkenlikte bir ac kaybı gibi çok alçak frekanslarda da soğurma meydana gelebilir (Lim ve ark., 2008).

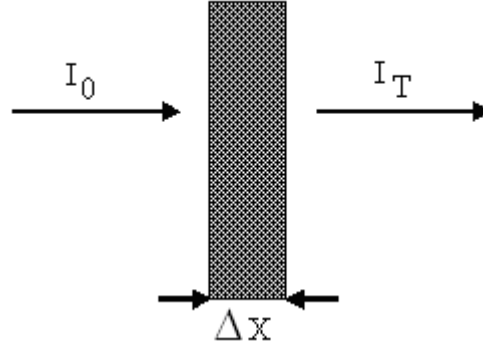
2.5. Optiksel Sabitler Arasındaki İlişkiler

2.5.1 Soğurma Katsayısının Hesaplanması

Tek renkli ışık demetinin soğurucu özelliğe sahip örnek üzerine

$$-\Delta I = I_T - I_0 = I_0 \alpha \Delta x \quad (31)$$

α , soğurma katsayısıdır ve soğurucu ortamın ve ışığın dalga boyunun karakteristiğini gösterir. Işığın şimdi iki ya da daha fazla ince Δx kalınlığındaki tabakalardan geçtiğini düşünelim (Şekil 2.10).



Şekil 2.10. İnce bir tabakadaki soğurma.

Soğurma katsayısı, verilen materyalin karakteristiğini gösterecek ve gelen ışın şiddetinden bağımsız olacaktır. Böylece Δx kalınlığındaki plakanın arkasına yerleştirilen ikinci plaka ile ilk plakadan geçen ışığın şiddeti biraz daha az azalacaktır. Fakat buraya gelen ışık şiddeti birinciye gelenden az olacağından daha az kayıp olacaktır. Fakat mutlak kayıp az olsa da her iki tabakadan olan ışık kaybı oranı eşit olacaktır. Bu N tabaka olsa da geçerli olur. Bu durumda aşağıdaki bağıntılar elde edilecektir.

$$\Delta I = -I_0 \alpha \Delta x \quad (32)$$

$$\alpha = -\frac{\Delta I}{I_0 \Delta x} \quad (33)$$

Burada α soğurucu materyalin her birim kalınlıktan kaynaklanan azalma oranını veya soğuruculuğunu göstermektedir. Katmanları dx gibi çok küçük kalınlıklara indirgersek, ışık her katmanı geçerken soğurulan ilk ışık şiddeti oranının kesri olan $\frac{dI}{I_0}$ oranı böylece;

$$\frac{dI}{I_0} = -\alpha dx \quad (34)$$

şekline gelecektir. Toplam x kalınlığından geçen ışık şiddetindeki azalmayı bulmak için bu ifade, $x=0$ 'da I_0 ve $x=x$ 'de I_T olmak üzere entegre edilirse;

$$\int_0^x \frac{dI}{I_0} = -\alpha \int_0^x dx \quad (35)$$

$$\ln\left(\frac{I_T}{I_0}\right) = -\alpha x \quad (36)$$

$$I_T = I_0 e^{-\alpha x} \quad (37)$$

Elde edilen bu üssel soğurma yasasıdır ve Lambert tarafından geliştirilmiştir.

Buradan gördüğümüz gibi soğurma için Beer-Lambert yasası:

$$\alpha = \frac{I}{I(\lambda)} \frac{dI(\lambda)}{dx} \quad (38)$$

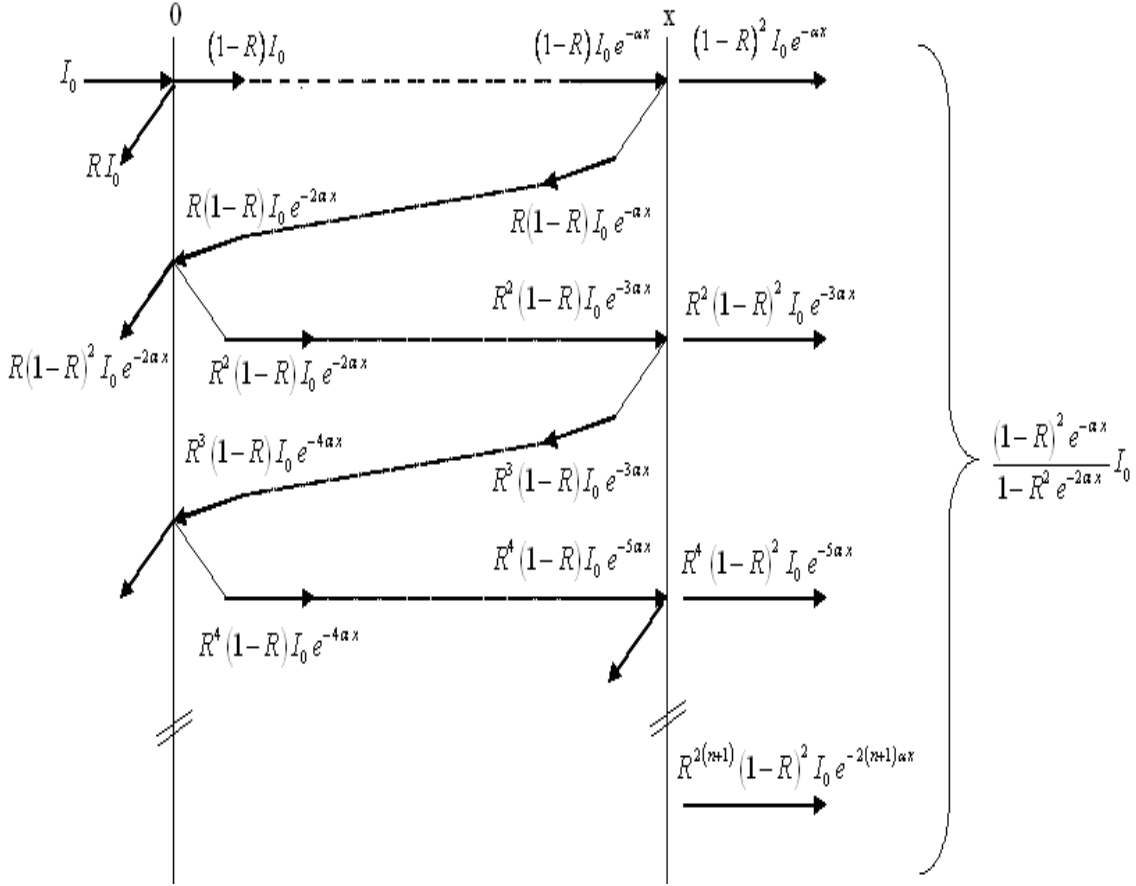
şeklinde yazılabilir. Burada $I(\lambda)$ ışık şiddetini, x ortam içinde gidilen yolu ve α ise soğurma katsayısını göstermektedir. Yansıma R ;

$$R = \frac{(n_2 - n_1)^2 + k^2}{(n_2 + n_1)^2 + k^2} \quad (39)$$

şeklinde verilebilir. n ve k kırılma indisinin gerçek ve sanal kısımlarıdır. Görünür bölgede k , n 'den çok küçük olduğundan (39) denklemi;

$$R = \frac{(n_2 - n_1)^2}{(n_2 + n_1)^2} \quad (40)$$

şekline indirgenir. TiO_2 ince filminin toplam geçirgenliği bulmak için Şekil 2.11'de gösterildiği gibi iki bölge alabiliriz (Pankove, 1971).



Şekil 2.11. İnce bir filmde çok yansımali ışık geçirimi (Pankove, 1971).

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

$$I = (1-R)I_0 \quad (41)$$

şeklinde yazılabilir. İkinci bölgeye ulaşan ışık şiddeti ise;

$$I = I_0 (1-R) e^{-\alpha x} \quad (42)$$

şeklinindedir. Filmden geçen ışık miktarı;

$$I = I_0 (1-R)^2 e^{-\alpha x} \quad (43)$$

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

$$I = R^{2n} (1-R)^2 I_0 e^{-(2n+1)\alpha x} \quad (44)$$

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

$$I = (1-R)^2 I_0 e^{-\alpha d} \left(\sum_{n=0}^{\infty} R^{2n} e^{-2n\alpha x} \right) \quad (45)$$

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

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (46)$$

Bu iç yansımalar şekilde gösterildiği gibi devam ettirilirse toplam geçirgenlik;

$$T = \frac{(1-R)^2 e^{-\alpha x}}{1-R^2 e^{-2\alpha x}} \quad (47)$$

şekline indirgenir (Pankove, 1971). Bu son denklemde çok soğurucu bölge için $d \gg 0$ yaklaşımı yapıldığında;

$$T = (1-R)^2 e^{-\alpha x} \quad (48)$$

Geçirgenlik, daha sade bir hal alır. Burada eğer R ve d bilinirse, eşitlik α için çözülebilir.

$$A = \log_{10} \left(\frac{1}{T} \right) \Rightarrow A = -\log_{10} T \quad (49)$$

(48) denkleminin logaritması alınır ve düzenlenirse,

$$2.3 \log_{10} T = \ln \left[(1-R)^2 e^{-\alpha x} \right] \quad (50)$$

(50) denkleminin sol tarafındaki 2.3 katsayısı logaritmik artışın yanında ihmal edilir ve denklem yeniden düzenlenirse,

$$-A = \ln(1-R)^2 - \alpha x \quad (51)$$

$$\alpha = \frac{1}{x} \left[A + \ln(1-R)^2 \right] \quad (52)$$

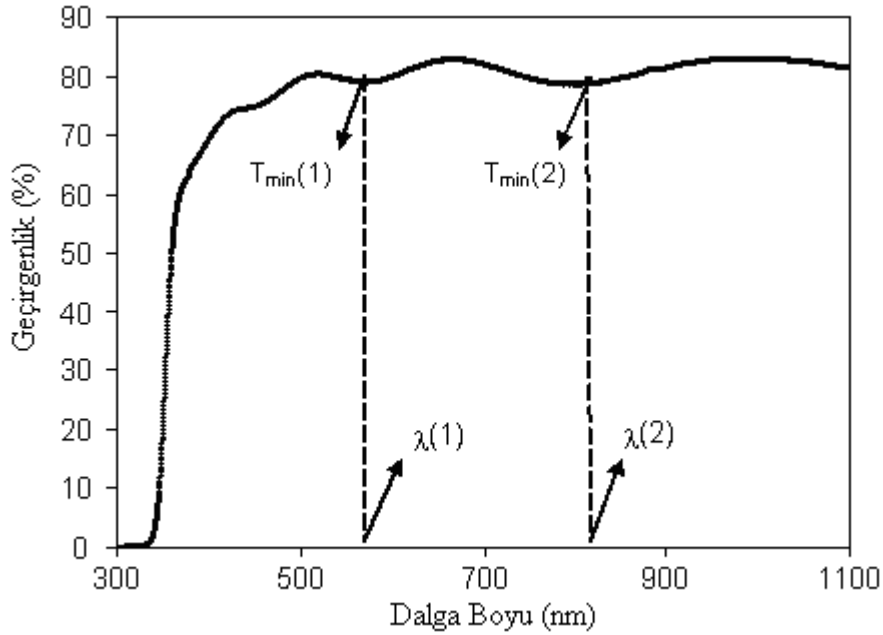
elde edilir. Geçirgenliği çok yüksek olan ince filmlerin soğurma katsayısı, denklemdeki R yansıma değerini içeren kısmı ihmal ederek hesaplanmaktadır. A ifadesi spektrometreden aldığımız geçirgenlik verileri ile elde edilir. Kısaca,

$$\alpha = -\frac{1}{x} \left[\ln \left(\frac{1}{T} \right) \right] \quad (53)$$

Soğurma katsayısı hesaplanıp diğer optik parametrelerin hesaplanmasında kullanılabilir.

2.5.2. İnce Filmlerde Kalınlığın Hesaplanması

Yarıiletken ince filmlerin yapısal, optiksel ve elektriksel özelliklerinin incelenmesinde filmin kalınlığı büyük bir önem taşır. Film kalınlığı kalınlık ölçen aletlerle bulunabileceği gibi bazı filmlerde geçirgenlik grafiğinden hesaplanarak da bulunabilir. Bu hesaplama yöntemlerinden biri UV-VIS spektrumunda pik veren filmlerde kullanılmaktadır. UV-VIS spektrumundaki ardı ardına gelen piklerin iki tanesinin maksimum ya da minimum noktasından yola çıkılarak kalınlık hesaplanabilmektedir. Şekil 2.12’de herhangi bir numunenin UV-VIS spektrumunda minimum noktalarının nereden alındığı gösterilmiştir.



Şekil 2.12. Minimum noktalarının nereden alındığının gösterildiği UV-VIS spektrumu.

$\lambda(i)$ dalga boyuna karşılık gelen i .nci $T_{\min}(i)$ geçirgenlik değeri, (54) eşitliğindeki ifade ile verilir;

$$T_{\min}(i) = \frac{4n_f^2(i)n_s}{(n_f^2(i) + n_s)^2} \quad (54)$$

Bu eşitlikten $n_f(i)$ çekilirse,

$$n_f(i) = \left[\frac{(n_s(2 - T_{\min}(i)) + 2n_s(1 - T_{\min}(i))^{1/2})}{T_{\min}(i)} \right]^{1/2} \quad (55)$$

şeklinde elde edilir (Swanepoel, 1983). Verilen eşitlikte UV-VIS spektrumundan yararlanarak bulduğumuz $T_{\min}(1)$ ve $T_{\min}(2)$ değerleri sırasıyla yerine konularak $n_f(1)$ ve $n_f(2)$ değerleri hesaplanır. Burada n_s camın kırılma indisidir. Camın kırılma indisi eşitlik (56) ile bulunur;

$$n_s = \frac{1}{T_s} + \left(\frac{1}{T_s} - 1 \right)^{1/2} \quad (56)$$

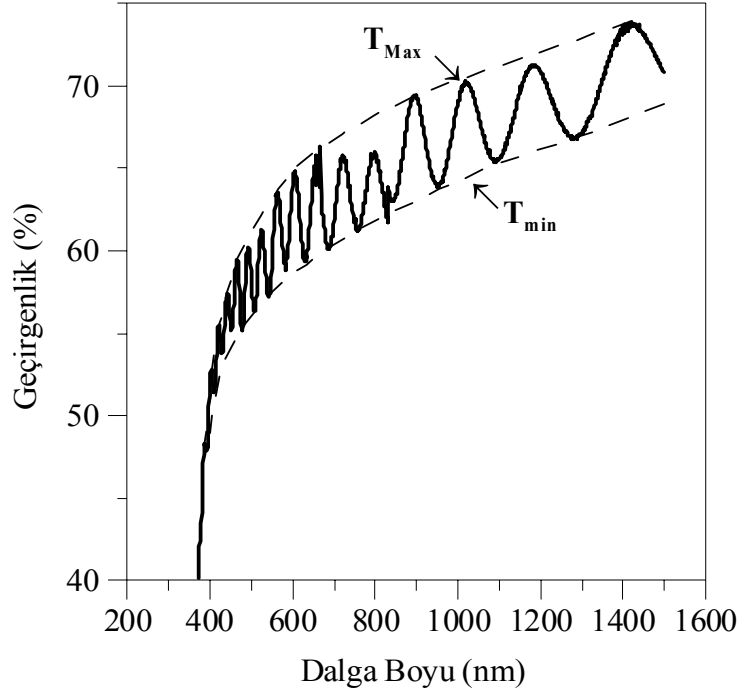
burada T_s sadece camın UV-VIS spektrumunda görünür bölgedeki geçirim yüzdesidir. Bu ifadeler (57) bağıntısında yerine konularak;

$$x = \frac{\lambda(1)\lambda(2)}{2(n_f(1)\lambda(2) - n_f(2)\lambda(1))} \quad (57)$$

x , film kalınlığı hesaplanabilir. Maksimum noktalarının da bu şekilde kullanılmasıyla aynı kalınlık bulunur (Swanepoel, 1983).

2.5.3. Kırılma İndisinin Hesaplanması

Kırılma indisi, birçok çalışmada zarf metodu kullanılarak belirlenmiştir. Zarf metodunda, geçirgenlik eğrisi zarf içine alınır. En üst ve en alt zarflara belirli dalga boylarına karşılık gelen T_{\max} ve T_{\min} değerleri belirlenmektedir (Şekil 2.13).



Şekil 2.13. Zarf metodunda maksimum ve minimum noktalarının nereden alındığının gösterildiği UV-VIS spektrumu.

Aşağıdaki formül kullanılarak kırılma indisi hesaplanmaktadır (Swanepoel, 1983).

$$n = \left[N + (N^2 - n_s^2)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (58)$$

Burada N ,

$$N = \frac{(n_s^2 + 1)}{2} + 2n_s \frac{(T_{\max} - T_{\min})}{T_{\max} T_{\min}} \quad (59)$$

ile tanımlanır ve n filmin kırılma indisi, n_s cam alt tabakanın kırılma indisi ve değeri 1.53'tür.

2.6. X-Işını Kırınımı (XRD)

Atomlar veya atom gruplarının üç boyutlu uzayda belirli bir simetri düzeni içerisinde periyodik olarak tekrarlanmasına kristal yapı adı verilir. Kristal katıların yapısı hakkındaki bilgiler, numunenin dış görünüşünün makroskopik veya mikroskopik olarak incelenmesinden elde edilir. Bununla birlikte görünür ışık kullanılarak yapı hakkında bilgiler elde edemeyiz. Çünkü görünür ışığın dalga boyu, kristalin atom ve molekülleri arasındaki boşluklarla kıyaslandığında oldukça büyüktür. X-ışınlarının dalga boylarının, kristal içindeki boşluklarla aynı boyutta olması kristal hakkında bilgi elde etmeyi kolaylaştırmaktadır.

Bir malzemenin atomik yapısını görüntülemek, yüksek çözünürlüğe sahip çeşitli elektron mikroskopları kullanılarak mümkündür. Fakat bilinmeyen yapıları belirlemek veya yapısal parametreleri tayin etmek için kırınım spektrumlarını kullanmak gerekir. Katıların kristal yapılarını incelemek için en çok kullanılan kırınım tekniği X-ışını kırınımıdır.

Kristal yapının varlığı ve kristal yapı içerisindeki atomların dizilişleri, X-ışını kırınım spektrumları kullanılarak, ilk defa 1912 yılında Max von Laue tarafından incelenmiştir. X-ışınlarının dalga boyları atomik boyutla kıyaslanabilecek kadar küçüktür. Dalga boyu X-ışınının dalga boyu kadar küçük olan nötronlar veya elektronlar kullanılarak da kristalin yapısı hakkında bilgi elde edilebilir. Fakat en fazla kullanılan metot X-ışını kırınım spektrumlarıdır (Bacon, 1966).

Materyallerin kristal yapıları ile ilgili çalışmalarda X-ışınlarının kırınımından yararlanılmaktadır. Bir X-ışının enerjisi, dalga boyu ile ters orantılıdır ve enerjisi $E = hc / \lambda$ 'dır. Dalga boyu ise 0,1 Å ile 100 Å arasında değişir. Kristal çalışmalarında 0,2 Å ile 2,5 Å arasındaki dalga boylu X-ışınları kullanılır.

X-ışınlarının kristalde kırınıma uğraması için belirli geometrik şartların gerçekleşmesi gerekmektedir. X-ışınları bir kristal üzerine düşürüldükleri zaman kristaldeki atomlara ait elektronları aynı frekansta titreşmeye zorlarlar. Böylece, kristaldeki elektronlar, her yönde aynı dalga boyunda ışın yayınlırlar. Kristaldeki her atomun bütün elektronları, X-ışınlarının saçılmasına katkıda bulunurlar ve küresel dalga şeklinde aynı faz ile aynı frekansta ışına yaparlar. Aynı frekansta ışına yapan bu örgü noktalarındaki atomlar birer

kaynak gibi davranırlar. Bu ışınlar bazı yönlerde birbirlerini kuvvetlendirirken bazı yönlerde ise zayıflatırlar. Yani, bu ışınlar yapıcı ve yıkıcı girişim yaparlar. Girişim ile kuvvetlenmiş ışınlar, fotoğraf filmi üzerinde spektrum oluştururlar.

X-ışını kırınımı ile filmlerin kalınlık, kimyasal bileşim, amorflik, tek kristal ya da polikristal durum, kristal yapı bozuklukları, kristal içerisinde bulunabilecek katkı atomları, kristalografik yönelim, örgü parametreleri, tane boyutu ve benzeri pek çok özellik incelenebilmektedir

Bir malzeme için yapılan basit kimyasal analiz ancak malzeme içerisinde var olan elementlerin hangileri olduğu hakkında bilgi verebilir. Halbuki X-ışını kırınımı ile malzemenin içinde bulunan kimyasal bileşenlerin cinsi ve bu bileşenlerin malzeme içinde hangi fazda buldukları belirlenerek nitel analiz yapılabilir.

Aynı zamanda nicel analiz de mümkündür. Çünkü malzeme içinde var olan bileşenlerin sahip olduğu piklerin şiddeti, bu bileşenin malzeme içindeki oranına bağlıdır. Bu şekilde bilinmeyen bir malzeme, kırınım spektrum ve JCPDS (Joint Committee on Powder Diffraction Standards) kartları kullanılarak tayin edilebilir. XRD ile kimyasal analizde kullanılacak bilinmeyen malzeme zarar görmez ve ayrıca küçük bir parçası bu analiz için yeterlidir. Bir cismin toz deseni o cismin karakteristik bir özelliğidir.

Spektrum üzerindeki piklerin şiddetlerine, yarı pik genişliklerine ve zemin (background) şiddetine bakılarak malzemenin kristalleşmesi hakkında bilgi edinilebilir. İyi bir kristalleşme seviyesine sahip malzemenin XRD spektrumu, şiddeti minimum olan bir zemin üzerinde bulunan yüksek şiddetli ve yarı pik genişlikleri dar olan piklere sahiptir. Eğer zemin şiddeti yüksek, yarı pik genişlikleri geniş ve pik şiddetleri düşük ise kristalleşme seviyesinin kötü olduğu söylenebilir. Spektrum üzerinde zemin şiddetinin yüksek olması düşük şiddete sahip pikleri görüntülenemeyecek hale getirir (Nuffield, 1966).

2. 6. 1. X-Işınlarının Oluşması

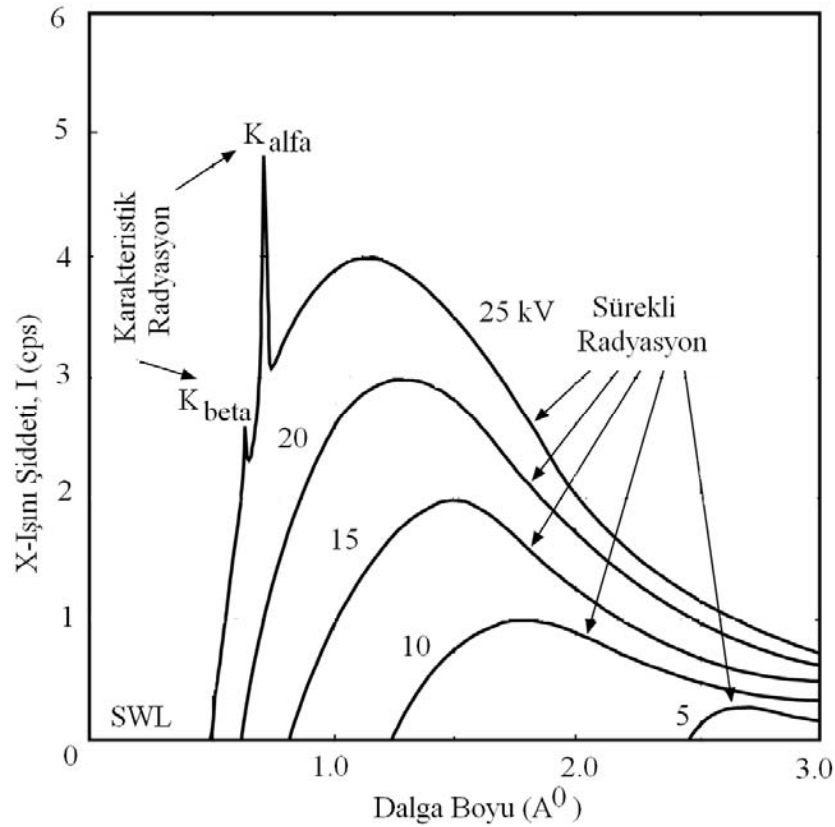
Bir anot tarafından yayınlanan X-ışınlarının bir dalga boyu spektrumu vardır. Bu ışınlar bir kristal vasıtasıyla analiz edilirse, iki tür spektrumun olduğu ortaya çıkar. Spektrumun bir kısmı, dalga boylarının sürekli bir şerididir. Bu beyaz ışımaya sürekli/kesiksiz spektrum

denir. Işınımın diğer bir kısmı ise birçok keskin pik olarak beliren dalga boylarını kapsar. Buna belirgin/kesikli spektrum denir.

2.6.2. Kesiksiz Spektrum

Bu spektrumda şiddet, en kısa dalga boyu sınırı (SWL=Shortest Wave Limit) denilen belirli bir minimum dalga boyuna çıkıncaya kadar sıfırdır (Şekil 2.13). Sürekli spektrum, bu sınırdan keskin olarak başlar ve hemen bir maksimuma artar (yaklaşık 1.5 katına kadar) ve sonra dalga boyu arttığında şiddeti yavaşça azalır.

Şekil 2.14'ten de görüldüğü gibi, X-ışınlarının şiddeti dalga boyunun bir fonksiyonu olup, uzun dalga boylarında azalır. Anot-katot gerilimi arttıkça, maksimum şiddetli dalga boyunun değeri küçülmekte, buna karşın minimum şiddetli dalga boyunun değeri büyümektedir. Diğer bir ifadeyle, gerilim ve SWL ters orantılıdır. Her eğri için belirli bir minimum dalga boyu değerinin, yani SWL'nin altında yayım yoktur.



Şekil 2.14. Uygulanan tüp voltajının bir fonksiyonu olarak Mo tüpünden elde edilen X-ışınları spektrumu (Çizgi genişlikleri ölçekli değildir (Cullity, 1960)).

Bu minimum dalga boyu kuantum teorisi vasıtasıyla açıklanabilir. Her eğri için minimum dalga boyu (λ_0) fotonların yayınlanması için elektronun kinetik enerjisi aşağıdaki gibi verilir:

$$E_0 = e.V \quad (59)$$

Burada, E_0 , elektronun enerjisini (erg), e , elektron yükünü (4.8×10^{-10} e.s.b.) ve V ise anot ile katot arasındaki gerilimi (kV) tanımlar. Fotonun enerjisi ise aşağıdaki gibidir:

$$E_0 = h.v_0 \quad (60)$$

E_0 , fotonun enerjisi (erg), h Planck sabiti (6.62×10^{-27} erg.sn) ve v_0 fotonun ışınım frekansıdır. Bir elektron bir atoma çarptığında, kinetik enerjisinin tamamını, kısa-dalga boyu sınırındaki bir X-ışınları fotonunun enerjisine dönüştürür. Diğer bir ifadeyle, elektronun enerjisi fotonun enerjisine eşit olur:

$$e.V = h.v_0 \quad (61)$$

Frekans, minimum dalga boyuna ve ışık hızı arasındaki bağıntı $v_0 = c/\lambda_0$ şeklindedir. O halde, fotonun enerjisi için aşağıdaki bağıntı yazılabilir:

$$e.V = h.v_0 = h \frac{c}{\lambda_0} \quad (62)$$

ve bu denklemden minimum dalga boyu $\lambda_0 = hc/e.V$, değerler yerine konulup hesaplandığında $\lambda_0 = 12.394/V$ sonucu elde edilir.

En küçük dalga boyuna (λ_0) ait fotonlar uyarma elektronlarının bütün enerjilerine sahip bulunuyorlar. Eğer elektronların bütün enerjisi fotona geçmiyorsa bir kısım enerji ısıya dönüşüyor demektir; şu halde foton haline geçen enerji $h.v_0$ dan küçüktür:

$$E_0 > E_1 = h.v_1 = h \frac{c}{\lambda_1} \quad (63)$$

Yayılan fotonların dalga boyları λ_0 dan büyüktürler. Bu durumu büyük dalga boylarına doğru yayılan spektrumda görüyoruz.

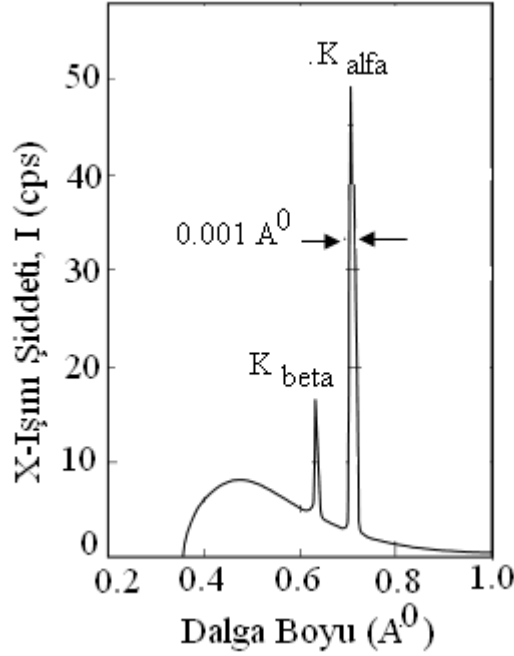
Kesiksiz spektrum yayımına ait eğriler yaklaşık olarak çizilmişlerdir; zira bütün X-ışınları detektörlerinin hassasiyeti X-ışınlarının dalga boyu ile değişir. Yani detektörler her λ için aynı hassasiyeti göstermezler. Bu problemin teorik olarak çözülmesi şu anda olanaksızdır. Zira uyarma elektronları anodun çeşitli derinliklerine kadar elastik olmayan çarpmalarla inerler. X-ışınları anot yüzeyine nispetle çeşitli derinliklerde meydana gelirler ve çeşitli yönlerde yayınlanırlar. Böylece fotonların hangi derinlikte meydana geldiği ve derin atom katlarından meydana gelmiş ışınların yüzeye çıkarken uğradığı soğurmanın değeri bilinmemektedir.

Kesintisiz spektrumların mekanizmasını daha iyi anlayabilmek için çok ince anotlar üzerinde (100 Å) deneyler yapılır. Bu şartlar altında X-ışınları yayımına sebep olan elektronların hızları yaklaşık olarak aynıdır.

Belirli bir hızla gelen elektronun atomlar tarafından ani frenlenmesi kesintisiz spektrumu ortaya koyuyor. Bu açıklama kesintisiz spektrumun klasik elektro-manyetizma teorisine dayandırır, fakat bu teori en küçük dalga boyunun izahını yapamamaktadır.

2.6.3. Kesikli Spektrum

Bu spektrumdaki dalga boyları, ışınlarını yayımlayan anoda özgüdür. Bu çizgiler atomların karakteristik emisyon çizgileridir. Tungsten (W) anotlu X-ışınları tüplerinde kesiksiz, bakır (Cu), nikel (Ni), kobalt (Co), demir (Fe) veya krom (Cr)'dan yapılmış olanlarda kesikli spektrum daha etkindir. Aslında kesiksiz ve kesikli spektrum birlikte bulunur (Şekil 2.15). Kesiksiz spektrum üzerinde belirli dalga boylarında ani bir şiddet artması görülür.



Şekil 2.15. 35 kV da molibdenin K spektrumu (Cullity, 1960).

Bu emisyon çizgilerinin yayılması anot atomlarının elektronların bombardımanına maruz kalmaları dolayısıyla E_0 temel enerji durumundan E_1 enerjili uyarılmış atom haline gelmesi ve bu son durumda kalamayan atomun temel duruma dönmek için serbest bıraktığı enerjinin foton halinde yayınlanmasıdır:

$$E_0 - E_1 = h\nu \quad (64)$$

Atomun, E_0 temel enerji durumundan E_1 uyarılmış durumuna geçişi, elektron demetine ait elektronların çarpması sonucu atomun bir iç elektronunu sonsuza yollamasıyla olur. Bu kararsız halde kalamayan atomda dış elektronlar bir şelale halinde iç katlara doğru düşerler. Yukarıdaki elektron hareketleri neticesi atom çeşitli dalga boylarında elektromanyetik yayım yapar.

Elektron demetindeki her elektronun enerjisi $e.V$ 'dir. Bu enerji aynı zamanda elektronun kinetik enerjisidir:

$$\frac{1}{2}mv^2 = e.V = E \quad (65)$$

Şu halde elektron demetine ait elektronların atomun bazı elektronlarını sonsuza yollaması için belirli bir enerjiye sahip olmaları gerekir. Belirli bir sınır enerjiye sahip

olmaksa, belirli V değerlerini gerektirir.

Mesela atomun K seviyesindeki bir elektronu çarpışma neticesi sonsuza yollanmış bulunuyorsa, L seviyesindeki atom elektronlarından bir tanesi K seviyesine düşer:

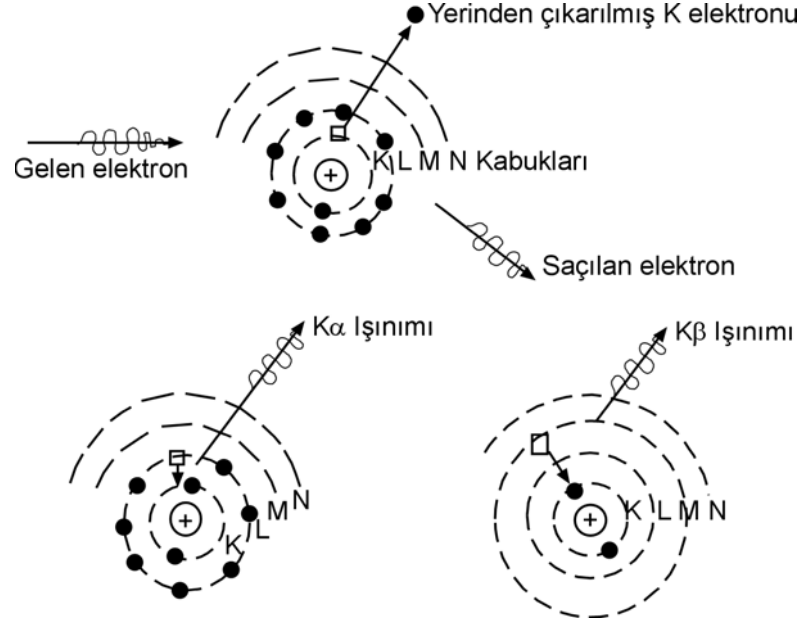
$$E_K - E_L = h\nu_{K_\alpha} \quad (66)$$

Eğer elektron L den değil, M seviyesinden geliyorsa:

$$E_K - E_M = h\nu_{K_\beta} \quad (67)$$

Böylece anot atomlarına ait K_α ve K_β ışınları elde edilir.

Bir atomda K, L, M, N, O, P, Q gibi elektronun bulunduğu kabuklar mevcuttur. X-ışınları çizgileri, yunan alfabeli alt-simgeleri eklenmiş olarak K, L, M, N..... ile gösterilir ve sırasıyla K dizisi çizgileri, L dizisi çizgileri..... olarak adlandırılan tek dalga boyulu çizgilerden oluşur. L, M ve N dizileri çizgilerinin hepsi, K dizilerinden daha uzun boylu, fakat daha zayıf olurlar. K dizilerinin oluşum süreci şöyledir: Bir mermi gibi hareket ederek hedefe vuran elektron, bir atomun K seviyesinden, bu düzeyde bir elektron boşluğu bırakarak, elektron söker. Bu boşluk, L, M ve N düzeylerinden bir elektronun boşluk olan düzey üzerine düşmesiyle doldurulur. Bu düşüşe karşılık gelen enerji farkı, belirli bir frekans ve dalga boyunda bir ışınım olarak yayımlanır, aralarındaki bağıntı $E=h.c/\lambda$ biçimindedir. K seviyesindeki bir elektronu sökülmiş bir atomda dış elektronik katlardan gelen elektron L kabuğundan geliyorsa K_α , M kabuğundan geliyorsa K_β , N kabuğundan geliyorsa K_γ spektrumu yayınlanır. Eğer uyarma, elektron kaybı L seviyesinde oldu ise ve elektron hemen bir dıştaki M kabuğundan geliyorsa yayımlanan çizgiler L_α spektrumunu meydana getirir (Şekil 2.16). $K_{\alpha 1}$ ve $K_{\alpha 2}$ çizgileri L-kabuğuna; K_β ise M-kabuğuna elektronlarının düşmeleri neticesinde oluşur. K_β sürecinde yayımlanan enerji, K_α 'dan daha yüksektir, dolayısıyla K_α 'nın dalga boyu daha kısadır.

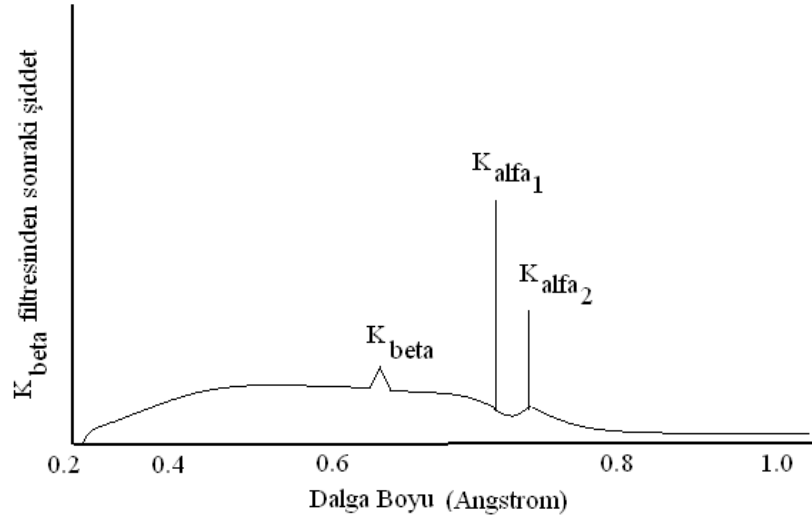


Şekil 2.16. X-ışınları tüpünde mermi gibi hareket eden elektronlar atoma çarpar ve bir K elektronunu fırlatır. Bir L elektronu boşalan yere düştüğü zaman, K_{α} X-ışınları yayımlanır. Eğer bu mermi, elektron yerine, bir X-ışınları fotonu ise, saçılmış ışın daha düşük bir enerjide (daha uzun dalga-boyunda) olur. Bu olaya uyumsuz saçılma (incoherent, Compton scattering) denir. Böylelikle K_{α} , floresan X-ışınları yayımlanır (Barrett, 1984).

X-ışınları emisyon çizgileri ayırma gücü önemli vasıtalarla incelendiğinde K_{α} çizgisinin $K_{\alpha 1}$ ve $K_{\alpha 2}$, K_{β} çizgisinin $K_{\beta 1}$ ve $K_{\beta 2}$ çiftinden meydana geldiği görülecektir. Bu çift yayın çizgisi aynı elektronik alt kabukta bulunup, spinleri yüzünden aynı enerji seviyeleri işgal eden elektronların K kabuğu üzerine düşmesi ile meydana gelir. Bu nedenle dalga boyları çok yakın yayım çizgileri gözlenir. Örneğin, $K_{\alpha 1} - K_{\alpha 2}$ için $\Delta\lambda = 1.540598 - 1.544418 = 0.004 \text{ \AA}$ dır.

Bir X-ışınları tüpü kesintili ve kesintisiz spektrumu aynı zamanda yayımlar. Kesintisiz spektrumun şiddeti atom çizgilerinininkine nazaran çok zayıftır. Atomun belli bir seviyesi, özellikle K kabuğu, tarafından yayınlanan kesikli spektrumun sadeliği dolayısıyla X-ışınları tüpleri oldukça monokromatik bir ışın yayımlarlar. K-soğurma kenarı K_{α} ve K_{β} çizgileri arasındaki bir dalga boyunda olan bir metal, soğurucu olarak seçilirse, K-kenarından daha

kısa dalga boylarındaki bütün ışınlar, uzunlardan daha fazla soğurulacaktır. Bu metalin uygun kalınlıkta bir şerit demetin içine yerleştirilirse, şerit istenmeyen bir sürü dalga boylarını epeyce azaltacak veya hemen hemen yok edecek ve K_{α_1} ve K_{α_2} dalga boylarını difraksiyon deneylerinde kullanabilmek üzere yine de yeterli şiddette bırakacaktır. Böyle bir soğurucuya K_{β} süzgeci denir.



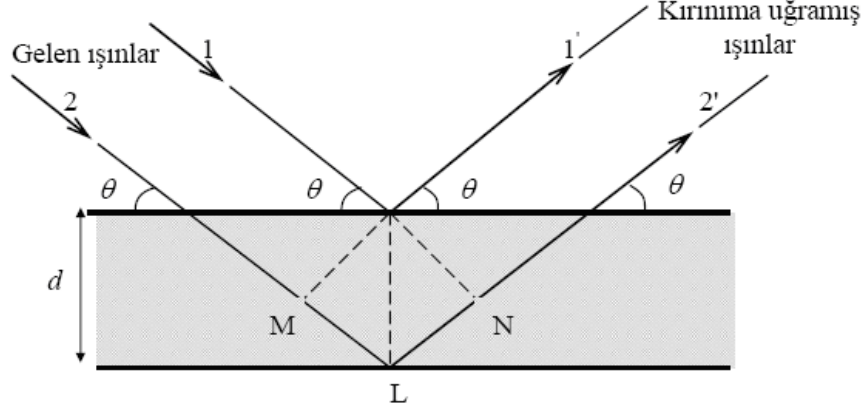
Şekil 2.17. X-ışınları spektrumunun K-absorpsiyon kenarından daha kısa olan bütün dalga boylarının şiddetlerini epeyce azaltan bir β filtresinden geçtikten sonraki durumu (Barrett, 1984).

X-ışınları tam anlamıyla monokromatik yapmak için metalik yapraklardan yapılmış filtreler kullanılır. Yukarıdaki şekilde Cu'nun K_{α} ve K_{β} 'sını ayırmak için Ni'den bir yaprak kullanılır. Bu Ni yaprağını K_{α} pek az zayıflayarak, halbuki K_{β} çok önemli bir absorpsiyona uğrayarak geçerler (Şekil 2.17).

2. 6. 4. Bragg Yasası

Kristal yapının incelenmesinde Bragg yasasından yararlanılır. Bu yasaya göre, monokromatik X-ışınları kristalin paralel düzlemlerine θ açısı yaparak gelsin ve atomların paralel düzlemleri arasındaki uzaklıkta d olsun. Kristale giren X-ışınlarının kırılmadığı

kabul edilirse, X-ışınları atomların oluşturduğu düzlemlerden θ açısı yaparak yansıyacaktır (Şekil 2.18).



Şekil 2.18. X-ışını kırınımında gelen ve kırınıma uğramış ışınlar.

Bu ışınlar yol farkından dolayı birbirlerini kuvvetlendirici veya zayıflatıcı yönde etkileyebilirler. Girişim kuvvetlendirici ise 1 ve 2 nolu ışınlar arasındaki yol farkı, dalga boylarının tam katlarına eşit olmalıdır. O halde, yol farkı,

$$\text{Yol farkı} = |ML| + |LN| = d \sin \theta + d \sin \theta \quad (68)$$

ile verilir. Buradan,

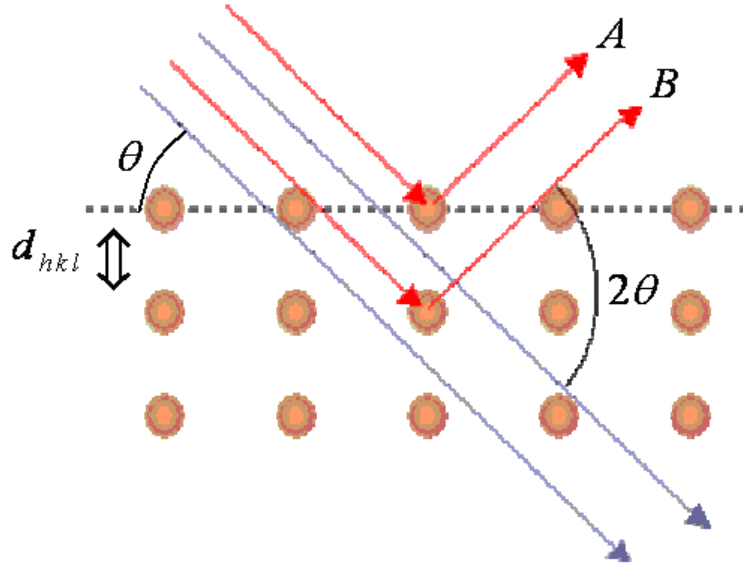
$$2 d \sin \theta = n \lambda \quad (69)$$

yazılır. Bu eşitlik Bragg yasası olarak bilinir. Burada; d , kristal düzlemleri arası mesafe; $n=1,2,3,\dots$ değerlerini alabilen bir tam sayı; λ , ışının dalga boyudur. X-ışınları kristalografisinde genellikle $n=1$ alınır. Çünkü kırınıma uğrayan ışının şiddeti hızla azalır.

X-ışını kırınım verileri üç değişik metot kullanılarak belirlenebilir ve bu kırınım metotlarının çalışma prensipleri Bragg yasasına dayanmaktadır. Bu metotlar arasındaki farklılıklar kullanılan numune ve ışıktan kaynaklanır. Bu metotlar; *Laue metodu*, *döner kristal metodu* ve *toz metodu*'dur. Laue metodunda, numune olarak tek kristal ve değişen dalga boylu ışınlar kullanılır. Bu metotta Bragg açısı θ sabit tutulur. Döner kristal metodunda, yine tek kristal ancak sabit dalga boylu ışınlar kullanılır. Bragg açısı θ için değişen değerler elde edilir. Toz metodunda ise, tek dalga boylu ışınlar ile polikristal veya toz haline getirilmiş numuneler kullanılır. Bu metotta da Bragg açısı θ değişkendir.

Dolayısıyla polikristal yapıdaki materyallerin incelenmesinde kullanılan tek metot toz metodudur. Bu metotta kırınım spektrumları, ışınların şiddetine ve değişen açılara bağlı olarak elde edilir. Elde edilen piklerin açı değerlerine göre, d mesafesi hesaplanır ve kristal yapı belirlenir. Piklerdeki şiddetlerin, dar ve keskin olması, kristallenmenin iyi olduğu anlamına gelir (Cohen, 1966; Nuffield, 1966; Cullity, 1960).

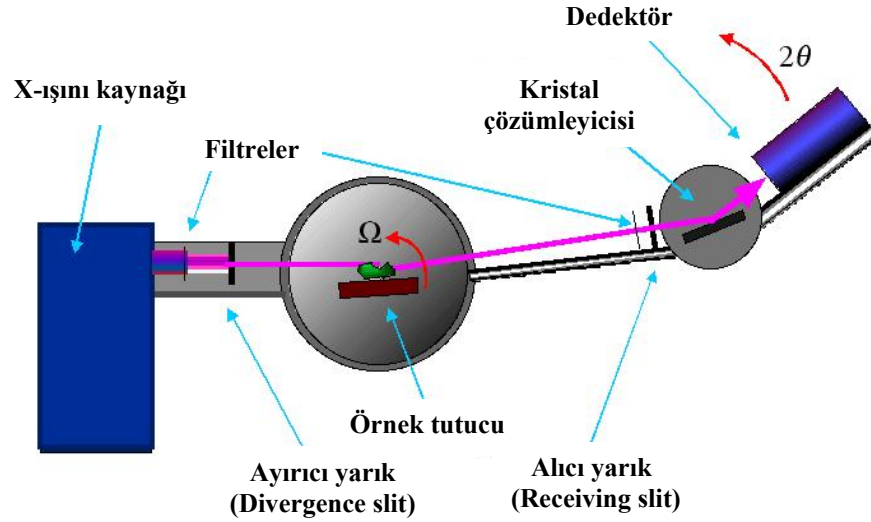
Bragg yasasında iki nokta gözden kaçırılmamalıdır. Bunlardan birincisi, gelen demet, yansıtan düzlemin normali ve difraksiyon demeti her zaman aynı düzlemdir. İkincisi, difraksiyon demeti ile gelen demet arasındaki açı daima 2θ 'dır (Şekil 2.19). Bu açı difraksiyon açısı olarak adlandırılır (Nuffield, 1966).



Şekil 2.19. Difraksiyon açısı.

2. 6. 5. Difraktometrenin Yapısı

Difraktometreler, toz difraksiyonunda kameralar kadar çok kullanılır (Şekil 2.20). Bir toz difraktometrede numune etrafında dönecek şekilde, bir kol üzerinde hareketli bir sayaç bulunur. Numune bir yassı düzlem olup, sayaç ile aynı eksen etrafında döner; dönme hızı, sayacın dönme hızının tam olarak yarısı olur. Bundan dolayı, numune yüzeyi, her zaman gelen ve difraksiyona uğrayan demetlerin tam ortasında yerleşiktir. Diğer bir deyimle, numune yüzeyi gelen ve difraksiyona uğrayan demetlerle θ açısı ve sayaç ise gelen demet ile her zaman 2θ açısı yapar.



Şekil 2.20. Bir X-ışınları difraktometresinde düz bir numune θ açısı döndüğü zaman, 2θ açısı ile dönen bir sayacı bulunur. Numune odaklama dairesine (kesik çizgili) her zaman teğet olduğundan, difraksiyona uğramış demetler de yaklaşık odaklanmış olurlar (Barrett, 1984).

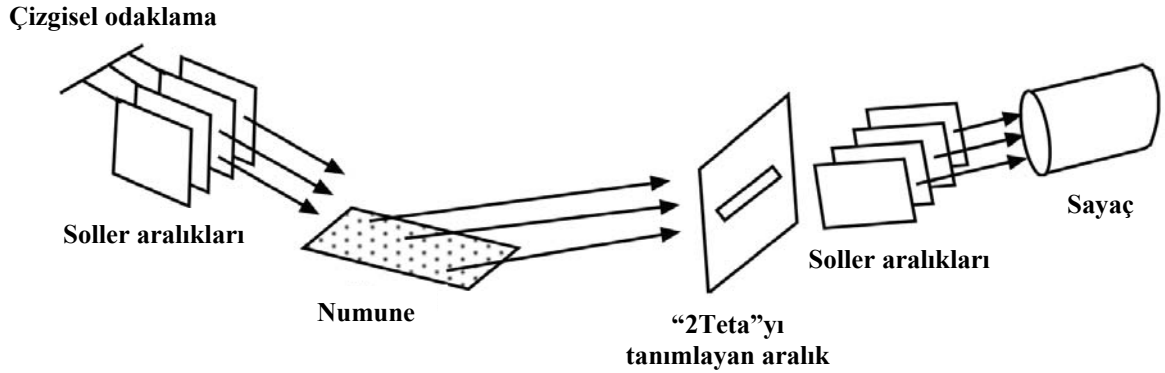
Bu geometrik yapının amacı; difraksiyona uğrayan demeti, difraksiyon açısı ne olursa olsun bütün difraksiyona uğrayan demetler için sayacın önündeki aralığı üzerine odaklamaktır. Şöyle ki, X-ışınları tüpündeki aralık, sayactaki aralık ve numune yüzeyi yaklaşık olarak hepsi, bir silindir yüzeyi veya "odaklama dairesi" üzerine yerleşik olduğunda, daha önce de değinilen odaklama koşulu sağlandığından, X-ışınları tüpünden gelen demetler ıraksak olsa bile odaklama meydana gelir.

Kağıt düzleminde bulunmayan herhangi ışın için, örneğin dönme eksenine dik olmayan ışınlarda odaklama tam değildir. Böyle ışınları kaldırmak üzere, gelen ve difraksiyona uğrayan demetlerin her ikisinde de "Soller" aralıkları kullanılır. Genellikle numune silindirik yerine yassı olduğu için, bu odaklama tam değildir. Bundan başka, 2θ değiştikçe odaklama dairesinin çapı da değişir, bu yüzden numune üzerindeki sabit bir eğrilik, 2θ açılarının bütün bölgesi üzerinde odaklamayı oluşturamaz.

Bir difraktometrede Soller aralıklarının yerleştirilişini Şekil 2.21'de gösterilmektedir. Bu aralıklar ince filmler ile ayrılmış ve bir diğerine paralel, ince metal levhaların

kümeleridir. Levhaların uzunlukları ve aralarındaki mesafeler X-ışınları dağılımını, seçilmiş bir açı derecesine sınırlar. Onlar şiddeti azaltmalarına rağmen, difraktometreyi uygun bir şekilde çalıştıracak yeterli bir şiddet kalır.

İşlem, senkron bir motor vasıtasıyla sabit hızlarla numune ve sayacın sürekli olarak dönmesi şeklinde veya her birinde belirli bir zaman aralığı bekleyen, seçilmiş büyüklüklerde adımlar şeklinde olabilir. Daha ayrıntılı cihazlarda sürekli ve adimsal dönmeler programlanabilir ve bir bilgisayar ile kontrol edilebilir. Sayacın çıkışı sayısal olarak yazdırılır veya bir grafik yazıcısı ile otomatik olarak çizdirilir; hatta daha sonraki işlemler için bir bilgisayarda saklanabilir. X-ışınları şiddetinin uzunca bir süre boyunca tam olarak sabit tutulması çok önemli olduğundan, difraktometre ile kullanılan bütün X-ışınları jeneratörlerinde X-ışınları şiddetini ayarlayan kontrol devreleri vardır. Ayrıca, hem yüksek gerilimi hem de filaman akımını kontrol eden düğmeler bulunur (Barrett, 1984).

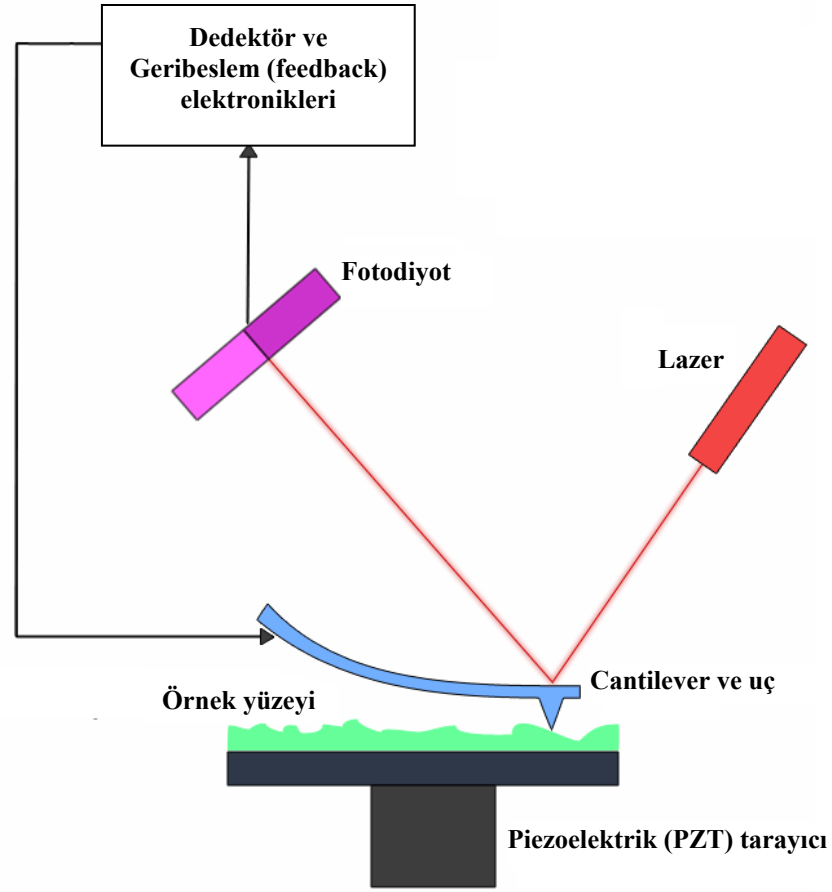


Şekil 2.21. X-ışınları difraktometresinde demetleri paralel hale getiren düzenek (Barrett, 1984).

2.7. Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM)

Taramalı Tünelleme Mikroskobu (STM) sayesinde çok sayıda iletken malzemenin yüzeyi atomik ölçekte başarılı bir biçimde araştırılmıştır. STM'nin başarıları yeni taramalı uç (probe) mikroskoplarının geliştirilmesini sağlamıştır. Bunlardan biri olan Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM), yüzey topografisini angstrom seviyesinden 100-150 mikrona kadar ölçebilen bir tekniktir. AFM 1986'da Binnig, Quate ve Gerber tarafından icat

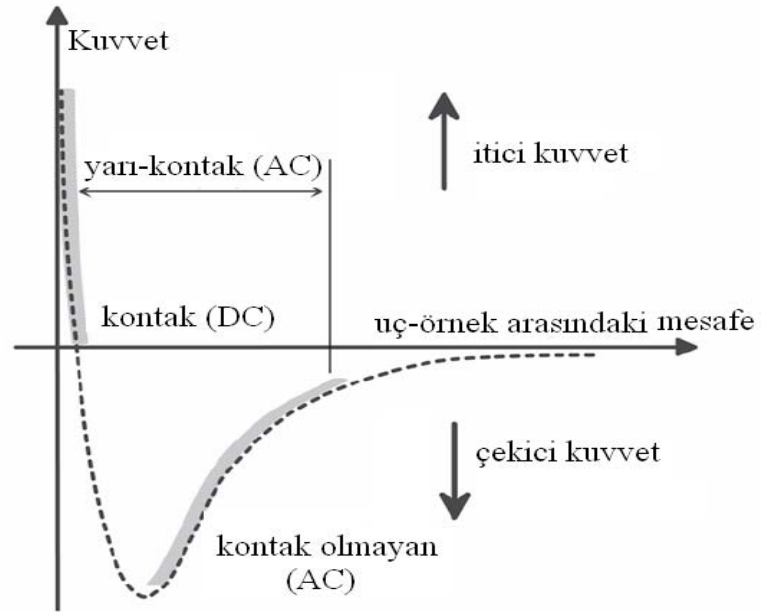
edilmiştir (Binnig ve ark., 1986). Teknik, uç-yüzey arasındaki atomlar arası etkileşimleri esas alır. Tipik bir AFM'nin çalışma prensibi oldukça basittir. Şekil 2.22'de görüldüğü üzere 'cantilever'in sonuna yerleştirilmiş birkaç mikron uzunluğunda atomik sivrilikte bir uç ile numune yüzeyi taranır. Tarama esnasında uç-yüzey arasındaki atomlar arası kuvvetler (10^{-11} - 10^{-6} N) elastik tutucu 'cantilever'in sapmasına sebep olur. Bu sapma bir sensörle ölçülerek numune yüzeyinde taranan alanın yüzey topografisi elde edilir. AFM ile incelenen numunenin yüzey topografisinden büyüme modu, numunenin yüzey pürüzlülüğü, numune yüzeyindeki kusur tipleri ve kusur yoğunluğu hakkında bilgi edinilebilir. Tekniğin en büyük avantajı STM'in aksine incelenecek malzemenin elektriksel iletken olmasını gerektirmemesidir. AFM; benzer amaçlar için kullanılan diğer teknikler (SEM, TEM, STM) gibi vakum gerektirmez, hava ve sıvı içerisinde çalışabilir. Ayrıca kaplama vb. numune hazırlığı gerektirmediğinden yüzeye zarar vermez. Bu nedenle çok yönlü, hızlı ve düşük maliyetli bir tekniktir. AFM'nin çözünürlüğü Taramalı Elektron Mikroskopundan (SEM) daha iyidir, uygun şartlar sağlandığında STM ve Tünellemeli Elektron Mikroskobu (TEM) ile karşılaştırılabilecek düzeydedir. Görüntü boyutları (tarama alanı ve derinlik), görüntü kalitesinin ucun eğrilik yarıçapıyla sınırlı olması ve piezoelektrik malzemenin etkilenmesi AFM tekniğinin önemli dezavantajlarıdır.



Şekil 2.22. AFM'nin çalışma prensibi.

AFM ölçümleri *kontak* (*contact*), *yarı-kontak* (*semicontact veya tapping*) ve *kontak olmayan* (*non-contact*) olmak üzere üç farklı modda gerçekleştirilir. İşlemin modu uç-numune mesafesine göre belirlenir. Bunun için öncelikle uç ve numune yüzeyi arasındaki kuvvetlerin mesafeye bağlı değişiminin verildiği Şekil 2.23'ü göz önüne alalım. Uç numuneye yaklaştırıldığı ilk durumda uç, numune yüzeyi tarafından zayıf bir biçimde çekilir (eğrinin sol tarafı). Uç-numune mesafesinin azalmasıyla bu çekim, uç ve numune yüzeylerindeki atomların elektron bulutlarının birbirlerini elektrostatik olarak itmeye başladığı mesafeye kadar artar. Mesafenin biraz daha azalması durumunda itici kuvvet artar ve net kuvvet kimyasal bağ uzunluğu mertebesinde (birkaç Å) bir mesafede sıfır olur. Bu noktada uç ile numune yüzeyi arasında fiziksel kontak başlar. Bundan sonraki daha yakın mesafelerde ise itici kuvvet baskındır (eğrinin sağ tarafı). Kontak modda uç-numune

mesafesi birkaç Å mertebesindedir. Bu yüzden uç numune yüzeyi ile hafif fiziksel temas halindedir ve itici kuvvetlere (10^{-9} N) tabiidir. Bu modda yüzey topografisi, sabit yükseklikte tarama sonucu cantilever sapmasından veya cantilever sapması sabit tutularak yüzey yükseklik değişiminden olmak üzere iki değişik şekilde elde edilebilir. Kontak olmayan modda ise uç-numune mesafesi yaklaşık 50–150 Å mertebesindedir. Bu durumda uç zayıf çekici kuvvetlere tabiidir. Bu çekici kuvvet kontak moddaki kuvvetlerden daha zayıftır ve kuvvet-mesafe eğrisinden de görüleceği üzere yüzey yükseklik değişimine daha az duyarlıdır. Bu yüzden bu modda yüzey topografisini elde etmek için kontak moddakinden farklı bir mekanizma kullanılır. Cantilever, rezonans frekansına yakın bir frekansta titreştirilir. Uç numuneye yaklaştırıldığında frekans veya genlikteki değişimler saptanır. Kontak olmayan ölçümler dış titreşimlerden, uç ve cantilever kalitesinden çok etkilenir. Yarı-kontak mod, kontak olmayan modun biraz değişik şeklidir. Bu modda cantilever kendi rezonans frekansında titreştirilir. Uç her bir salınımında numune yüzeyi ile anlık fiziksel temas sağlar. Numuneye yaklaşma durumunda salınımın şiddetinde meydana gelen değişim esas alınır. Ancak bu modda kuvvetler kontak olmayan moddakinden daha yüksek olduğundan ölçüm ucun kalitesine veya dış titreşimlere karşı duyarsızdır (Binnig ve ark., 1986).



Şekil 2.23. Uç-numune arasındaki Van der Waals kuvvetinin mesafe ile değişimi.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1 Alt Tabakaların Hazırlanması

3.1.1 Cam alt tabaka yüzeyinin temizlenmesi

TiO₂ ince filmlerin kaplanacağı 1 mm×26 mm×76 mm boyutlu mikroskop camları sırasıyla 30'ar dakika ultrasonik banyoda 18 MΩ'luk deiyonize su (H₂O) ve asetonda (C₃H₆O, Merck) bekletilmiştir. Son olarak camların üzerindeki yağ tabakasının yok olması için 200 °C fırında 10 dakika kurumaya bırakılmıştır.

3.1.2 Quartz alt tabaka yüzeyinin temizlenmesi

TiO₂ ince filmlerin kaplanacağı 1 mm×25 mm×25 mm boyutlu quartz camlara, aşağıdaki belirtilen temizleme işlemi uygulanmıştır. İlk olarak, 1:20 oranında sırasıyla hidroflorik asit (HF, Merck) ve 18 MΩ'luk deiyonize su temiz bir plastik kaptaki karıştırılarak içerisine quartz camlar konulmuş ve 2 dakika ultrasonik banyoda bekletilmiştir. Daha sonra 1:10 oranında sırasıyla amonyum floride (NH₃HF) ve 18 MΩ'luk deiyonize su temiz bir beherde karıştırılarak içerisine quartz camlar konulmuş ve 10 dakika ultrasonik banyoda bırakılarak temizlenmiştir.

3.1.3 Silisyum alt tabaka yüzeylerinin temizlenmesi

TiO₂ ince filmlerin ara tavlama sıcaklıklarının farklı alttaş üzerindeki etkisini incelemek için p-tipi, 5 Ω-cm öz dirençli ve <100>düzleminde kesilmiş ve tek bir yüzeyi parlatılmış silisyum tek kristalleri kullanılmıştır. Yaklaşık 15×25 mm²'lik parçalar halinde kesilmiş kristaller kaplama öncesinde RCA (Radio Corporation of America) kimyasal yöntemiyle temizlenmiştir (Kern, 1993). Bu aşamalar;

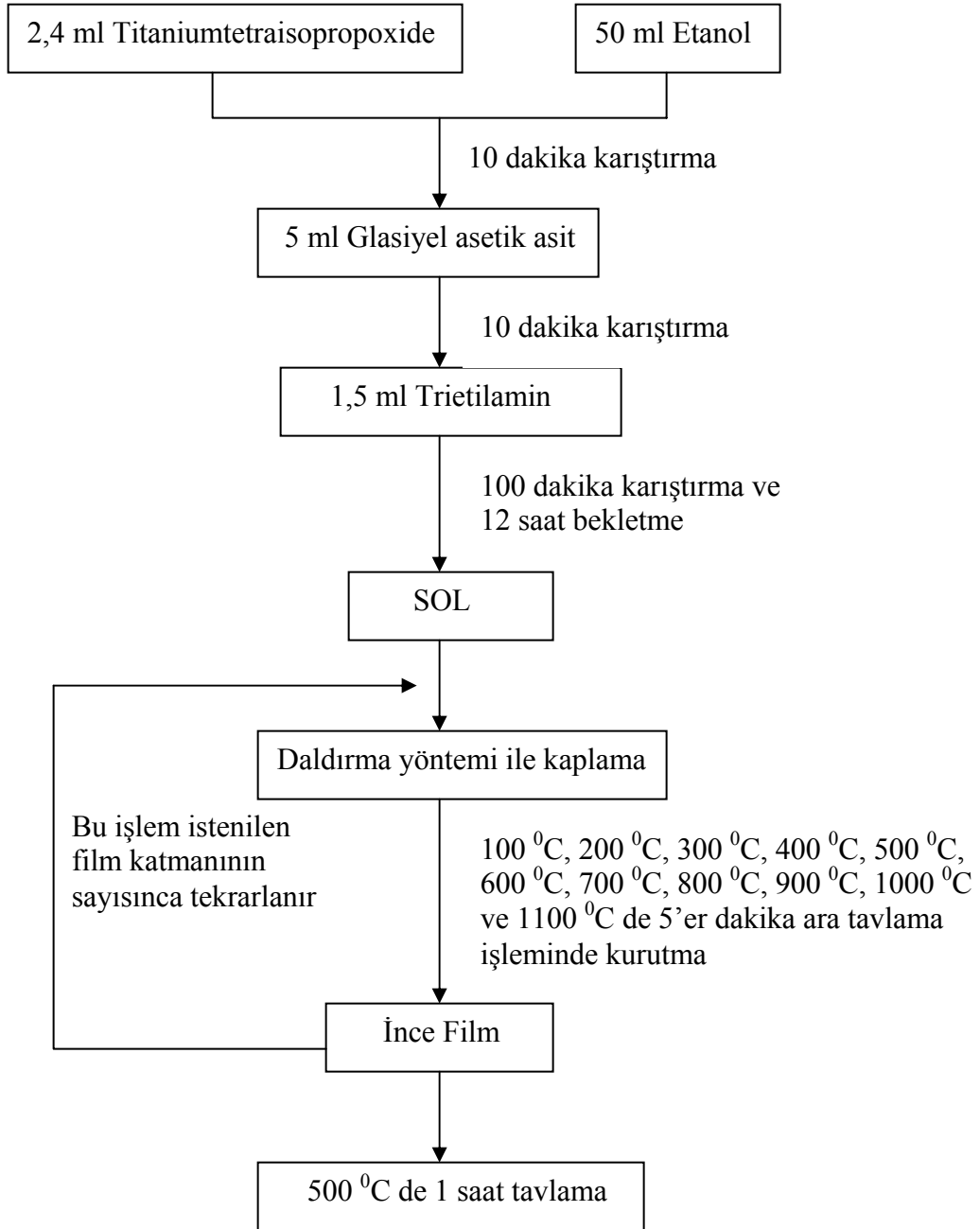
(i) *Organik Temizleme*: 1:1:5 oranında sırasıyla amonyum hidroksit (NH₄OH, Merck), hidrojen peroksit (H₂O₂, Merck) ve 18 MΩ'luk deiyonize su temiz bir beherde karıştırılarak içerisine silisyum kristalleri konması ve 10 dakika 60~70°C'de kaynatılması,

(ii) *Oksit Temizleme*: 1:10 oranında sırasıyla hidroflorik asit (HF, Merck) ve 18 MΩ'luk deiyonize su temiz bir plastik kaptaki karıştırılarak içerisine silisyum kristalleri konması ve 30 saniye ultrasonik banyoda bırakılması,

(iii) *İyonik Temizleme*: 1:1:6 oranında sırasıyla hidroklorik asit (HCl, Merck), hidrojen peroksit (H₂O₂, Merck) ve 18 MΩ'luk deiyonize su temiz bir beherde karıştırılarak içerisine silisyum kristalleri konması ve 10 dakika 60~70°C'de kaynatılmasından oluşmaktadır. Her bir işlem sonrasında silisyum kristalleri 18 MΩ'luk deiyonize su ile iyice çalkalanmıştır. Daha sonra kristal oksitlenmeye karşın azot gazı (N₂) ortamında kurumaya bırakılmıştır.

3.2 Sol-Jel Çözeltisinin Hazırlanması

Çözeltiyi hazırlamak için ilk önce 25ml etanol (C₂H₆O, Merck) içerisine 2.4 ml titanium tetraispropoxide (Ti(OC₃H₇)₄, Merck) eklenmiş ve eriyik 1 saat manyetik karıştırıcıda bırakılmıştır. Daha sonra çözeltiye 5 ml glasiyel asetik asit (C₂H₄O₂, Merck) ve 25 ml etanol eklenmiştir. Son olarak çözeltiye 1.5 ml trietilamin ((C₂H₅)₃N, Merck) eklenmiş ve 1 saat manyetik karıştırıcı da bırakılmıştır. Çözelti hazırlama ve film kaplama aşamaları Şekil 3.1'de gösterilmiştir.



Şekil 3.1. Çözelti hazırlama ve ince film kaplama aşamaları.

3.3 İnce Filmlerin Kaplanması

3.3.1 Cam, quartz ve silisyum alt tabakalarına film kaplanması

Temizlenmiş olan cam, quartz ve silisyum yüzeyler motorlu sistem yardımıyla çözelti içerisine 3.3 mm/sn hızla daldırılmıştır. Bu işlemler sonrasında kaplanmış yüzeyler belirli sıcaklıklarda difüzyon fırını içerisine konularak 5'er dakika tutulmuştur. Belirli sayıda tabaka kaplanmış olan filmler son olarak 500 °C'de 1 saat tavlammıştır. Filmlerin hazırlama işlemleri Çizelge 3.1'de verilmiştir.

Çizelge 3.1. Cam, quartz ve silisyum yüzeylere kaplanmış TiO₂ filmlerin hazırlama işlemleri.

Numune Numarası	Daldırma Sayısı	Ara tavlama sıcaklığı, bekleme süresi	Son tavlama sıcaklığı, bekleme süresi
C1	5	200 °C 5 dk	500 °C 1 saat
C2	5	300 °C 5 dk	500 °C 1 saat
C3	5	400 °C 5 dk	500 °C 1 saat
C4	5	500 °C 5 dk	500 °C 1 saat
C5	5	600 °C 5 dk	500 °C 1 saat
C6	5	700 °C 5 dk	500 °C 1 saat
Q1	5	200 °C 5 dk	500 °C 1 saat
Q2	5	300 °C 5 dk	500 °C 1 saat
Q3	5	400 °C 5 dk	500 °C 1 saat
Q4	5	500 °C 5 dk	500 °C 1 saat
Q5	5	600 °C 5 dk	500 °C 1 saat
Q6	5	700 °C 5 dk	500 °C 1 saat
Q7	5	800 °C 5 dk	500 °C 1 saat
Q8	5	900 °C 5 dk	500 °C 1 saat
Q9	5	1000 °C 5 dk	500 °C 1 saat
Q10	5	1100 °C 5 dk	500 °C 1 saat
S1	5	200 °C 5 dk	500 °C 1 saat
S2	5	300 °C 5 dk	500 °C 1 saat
S3	5	400 °C 5 dk	500 °C 1 saat
S4	5	500 °C 5 dk	500 °C 1 saat
S5	5	600 °C 5 dk	500 °C 1 saat
S6	5	700 °C 5 dk	500 °C 1 saat

3.4 Deneylerde Kullanılan Cihaz ve D zenekler

Temizleme iřlemlerinde kullanılan 18 M Ω 'luk deiyonize su iin Human Zeneer Power marka cihazdan yararlanılmıřtır. Ultrasonik banyoda Bransonic 12 marka cihaz ve ozeltinin karıřtırılmasında Clifton Cerastir marka manyetik karıřtırıcı kullanılmıřtır. Film kaplamaları iin ev yapımı dc 0-24 V red kt r motorlu ve diřli sistemden oluřan bilgisayar ile kontrol edilebilen daldırma ile kaplama cihazı kullanılmıřtır. Isıl iřlem iin de Őekil 3.2'de g r ld ęi gibi 0-1200  C Vecstar VCTF-4 dif zyon fırını kullanılmıřtır. Bu iřlemler Ankara  niversitesi M hendislik Fak ltesi Fizik M hendislięi B l m  Yarıiletken Arařtırma Fizięi Laboratuvarında bulunan cihazlarla yapılmıřtır.



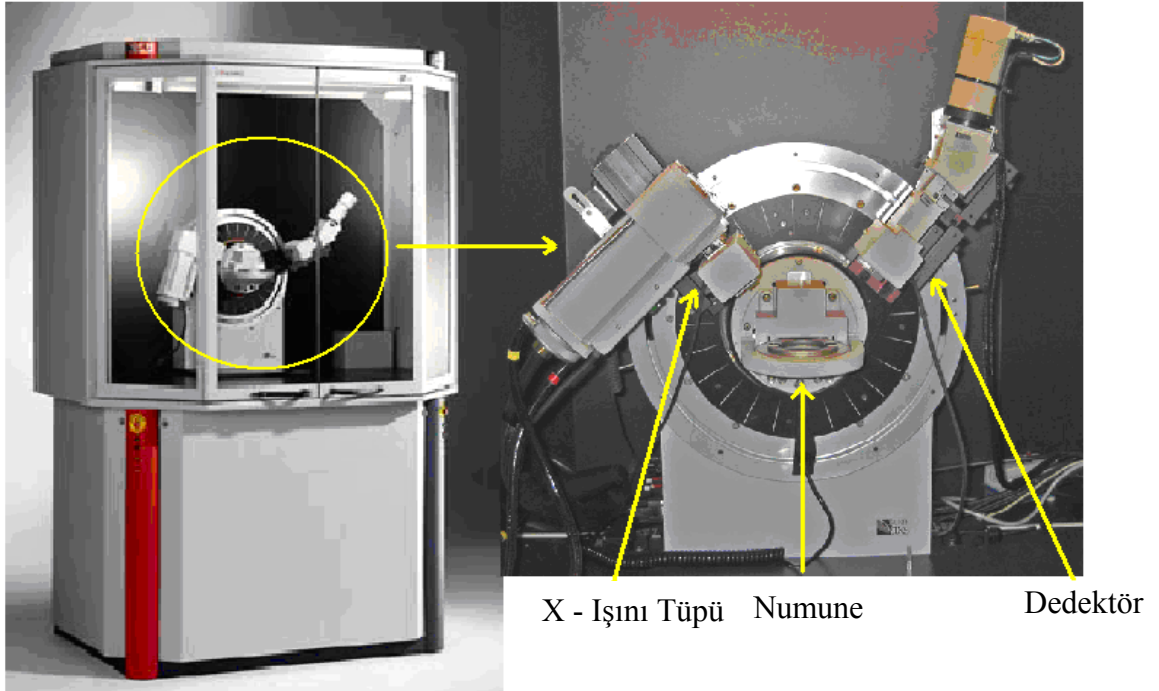
Őekil 3.2. Isıl iřlemlerde kullanılan 0-1200  C Vecstar VCTF-4 dif zyon fırını.

Cam, quartz ve silisyum alt tabakalara kaplanmış ince filmlerin, UV-VIS-NIR spektrum  l mleri, 300–1500 nm dalga boyları arasında Shimadzu UV-3600 spektrometresi ile Ankara  niversitesi M hendislik Fak ltesi Fizik M hendislięi B l m  Yarıiletken Arařtırma Fizięi Laboratuvarında yapılmıřtır (Őekil 3.3). Kristal  zerine kaplanmış TiO₂ filmlerin kalınlıkları geirgenlik spektrumları yardımıyla tayin edilmiřtir.



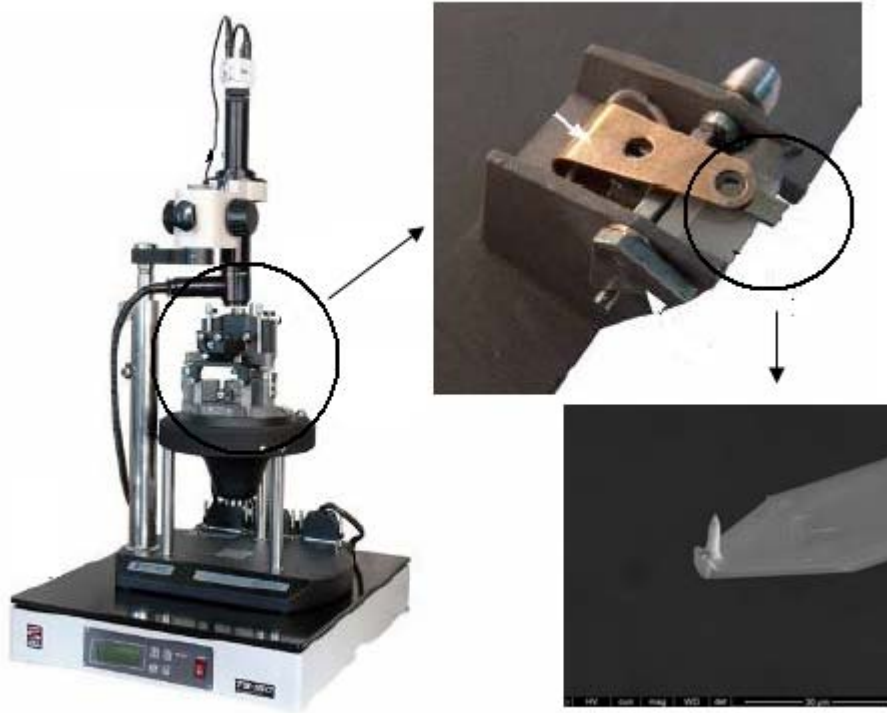
Şekil 3.3. UV-VIS-NIR spektrum ölçümleri için kullanılan Shimadzu UV-3600 spektrometre cihazının gösterimi.

Cam, quartz ve silisyum alt tabakalara kaplanmış ince filmlerin, X-ışını kırınım spektrumları oda sıcaklığında $1,5405 \text{ \AA}$ dalga boyulu $\text{CuK}\alpha$ dalga boyu radyasyon ışını $10^\circ \leq 2\theta \leq 60^\circ$ sınır değerlerinde Maden Tetkik Araştırma Laboratuvarında bulunan Bruker D8 Advanced cihazı ile incelenmiştir (Şekil 3.4).



Şekil 3.4. X-ışını kırınım spektrumlarının elde edilmesi için kullanılan Bruker D8 Advanced marka X-ışını kırınımı cihazının gösterimi.

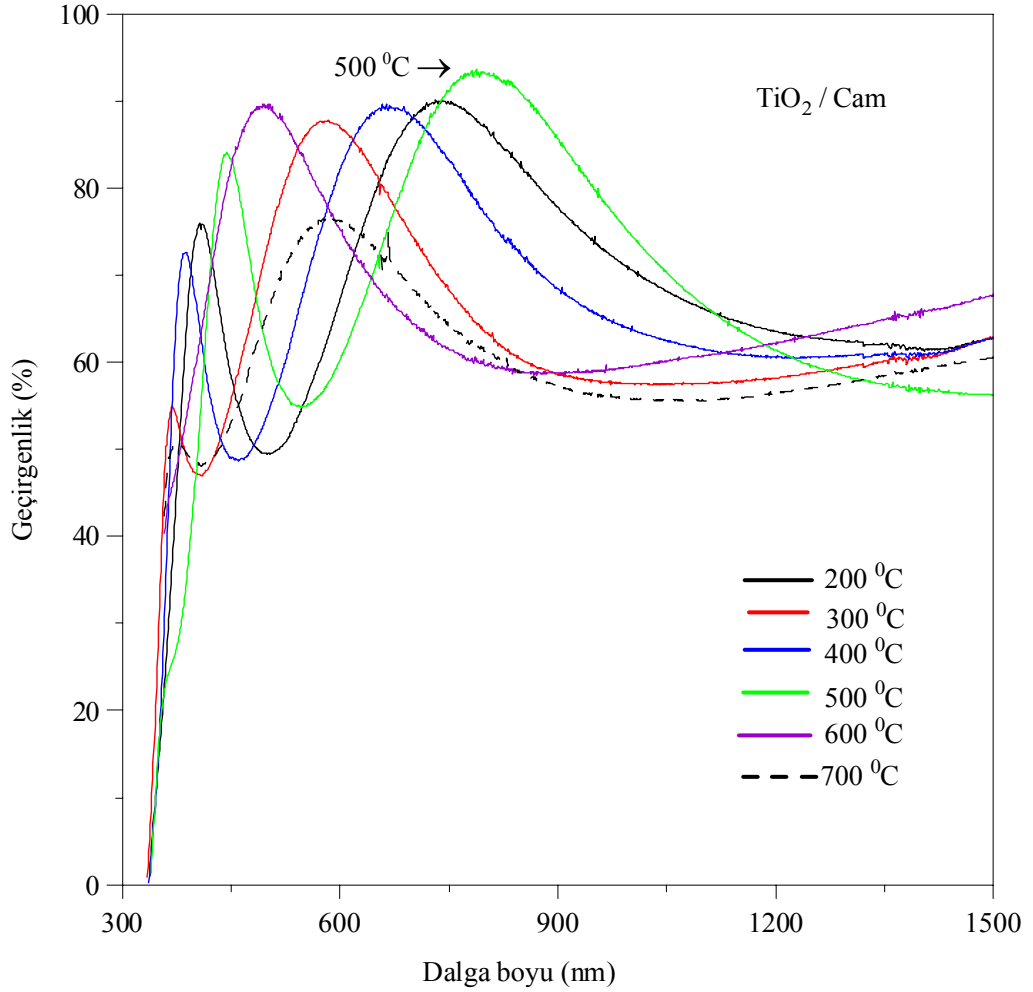
Filmlerin yüzey analizleri Ankara Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Fizik Mühendisliği Bölümü Manyetik Malzemeler Araştırma Laboratuvarında bulunan SPM Solver-PRO (NT-MDT) marka Atomik Kuvvet Mikroskobu yardımıyla $1 \times 1 (\mu\text{m})^2$ ölçekli alanlarda yapılmıştır (Şekil 3.5). Yüzey taraması için Veeco CON20 model, $1-10 \Omega\text{cm}$ öz dirence sahip fosfat katkılanmış n-tipi Si uç kullanılmıştır. Kullanılan destek çubuğu (cantilever) ise 19–23 kHz frekans aralığı ve 0,9 N/m yay sabiti özelliklerine sahiptir.



Şekil 3.5. Yüzey analizlerinde kullanılan SPM Solver-PRO (NT-MDT) marka atomik kuvvet mikroskobu, destek noktası (cantilever) ve n-tipi silisyum ucun gösterimi.

4. BULGULAR

4.1. TiO₂/Cam İnce Filmlerin UV-VIS-NIR Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular



Şekil 4.1. Cam alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin geçirgenlik-dalga boyu eğrileri.

Farklı ara tavlama sıcaklığının uygulandığı cam alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin 300 – 1500 nm dalga boyu aralığındaki UV-VIS-NIR spektrumları Şekil 4.1’de gösterilmiştir. 300 – 800 nm arası görünür ışık bölgesinde geçirgenlik değerinin yaklaşık %80’den büyük olduğu görülmüştür. En yüksek optik geçirgenlik (%93,61), 500 °C ara tavlama sıcaklığının uygulandığı numunede görülmüştür. Bu numunenin mikro yapısının

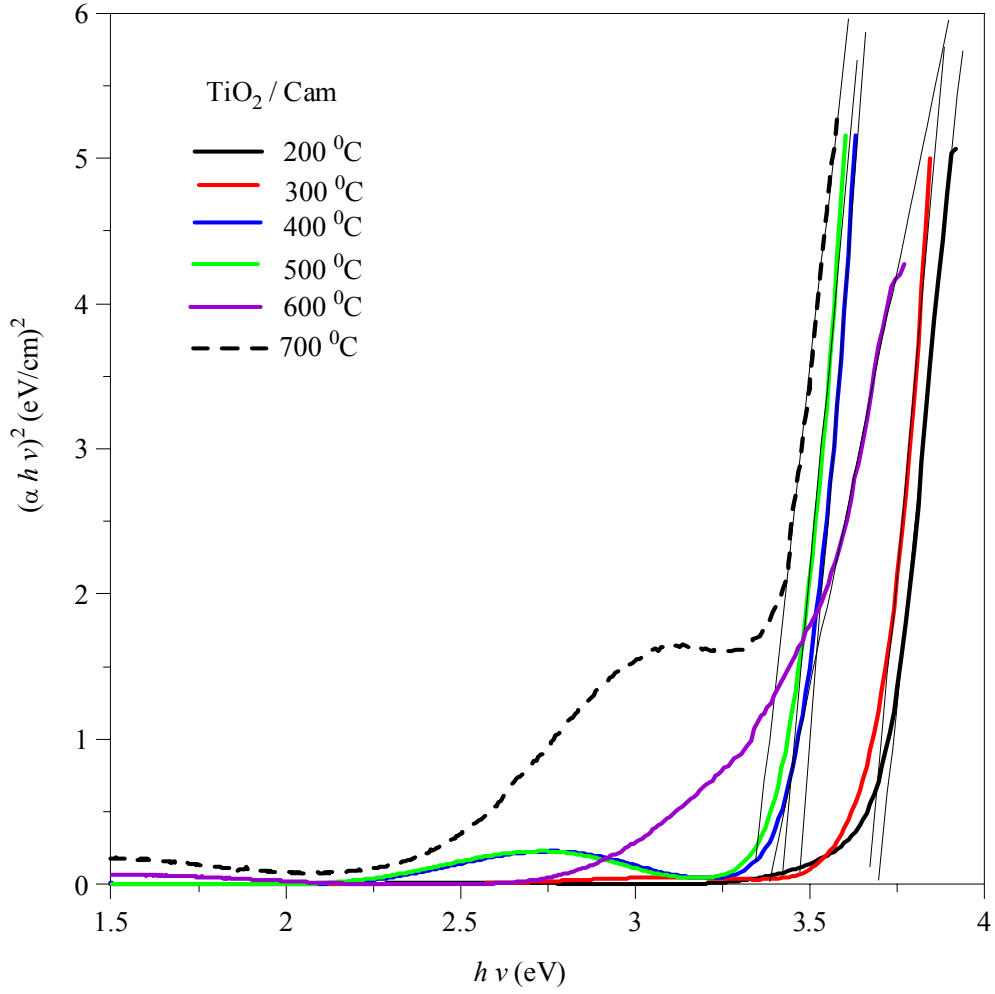
diğer numunelere göre daha iyi kaplanmış olduğundan yüksek optik geçirgenlik göstermiştir. Sonuç olarak, 500 °C'nin altında ara tavlama sıcaklığı arttıkça optik geçirgenliğin arttığı, 500 °C'nin üstünde ise ara tavlama sıcaklığı arttıkça optik geçirgenliğin azaldığı görülmüştür.

Şekil 4.1'deki spektrumdan iki komşu minimum veya iki komşu maksimum değere ait dalga boyları ve bu dalga boylarındaki kırılma indisleri, denklem (57)'de yerine konularak ince filmlerin kalınlıkları hesaplanmıştır. Hesaplanmış olan filmlerin kalınlık değerleri Çizelge 4.1'de verilmiştir. Ara tavlama sıcaklığı arttıkça kalınlığın azaldığı görülmüştür.

Çizelge 4.1. Cam alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin UV-VIS-NIR spektrumları yardımıyla hesaplanmış optiksel parametreleri

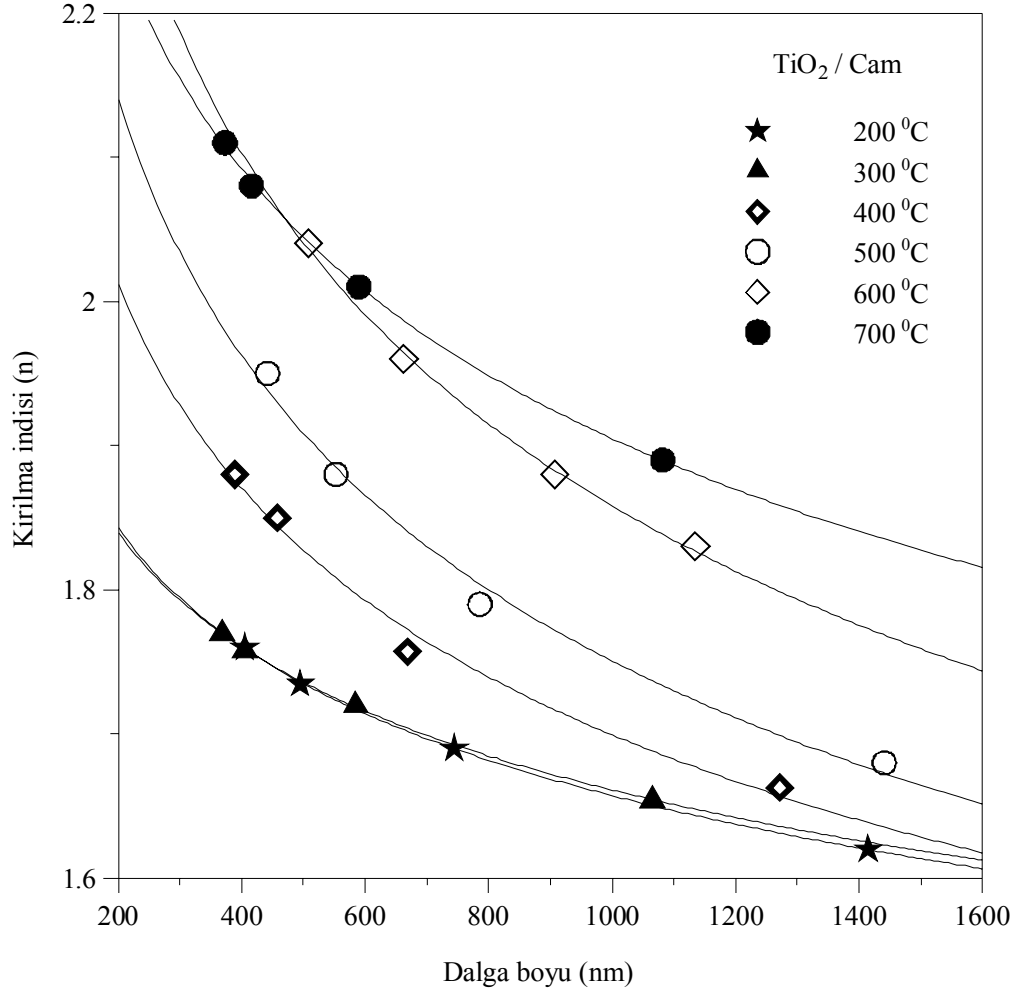
	200 °C	300 °C	400 °C	500 °C	600 °C	700 °C
Kalınlık, x, (nm)	249.14	208.63	176.49	103.01	82.74	54.25
Yasak Enerji Band Aralığı, (eV)	3.68	3.65	3.45	3.40	3.38	3.31
Yüksek Dielektrik Sabiti, ϵ_s	2.62	2.73	2.76	2.82	3.34	3.57
Kırılma İndisi, n	1.76	1.77	1.88	1.95	2.04	2.11

UV-VIS-NIR spektrumundaki geçirgenlik ve hesaplanan kalınlık değerleri, denklem (53)'te yerine konularak ince filmlerin soğurma katsayıları hesaplanmıştır. Hesaplanan bu soğurma katsayıları kullanılarak, Şekil 4.2'de görüldüğü gibi doğrudan izinli bir band geçişi için $(\alpha h\nu)^2$ 'nin $h\nu$ 'ye göre grafiği çizilmiş ve çizilen teğetler yardımıyla x-eksenini kestiği noktalardan ince filmlerin yasak enerji band aralıkları (E_g) bulunmuştur. Çizelge 4.1'de görüldüğü gibi, ara tavlama sıcaklığı arttıkça yasak enerji band aralıklarının azaldığı görülmüştür.



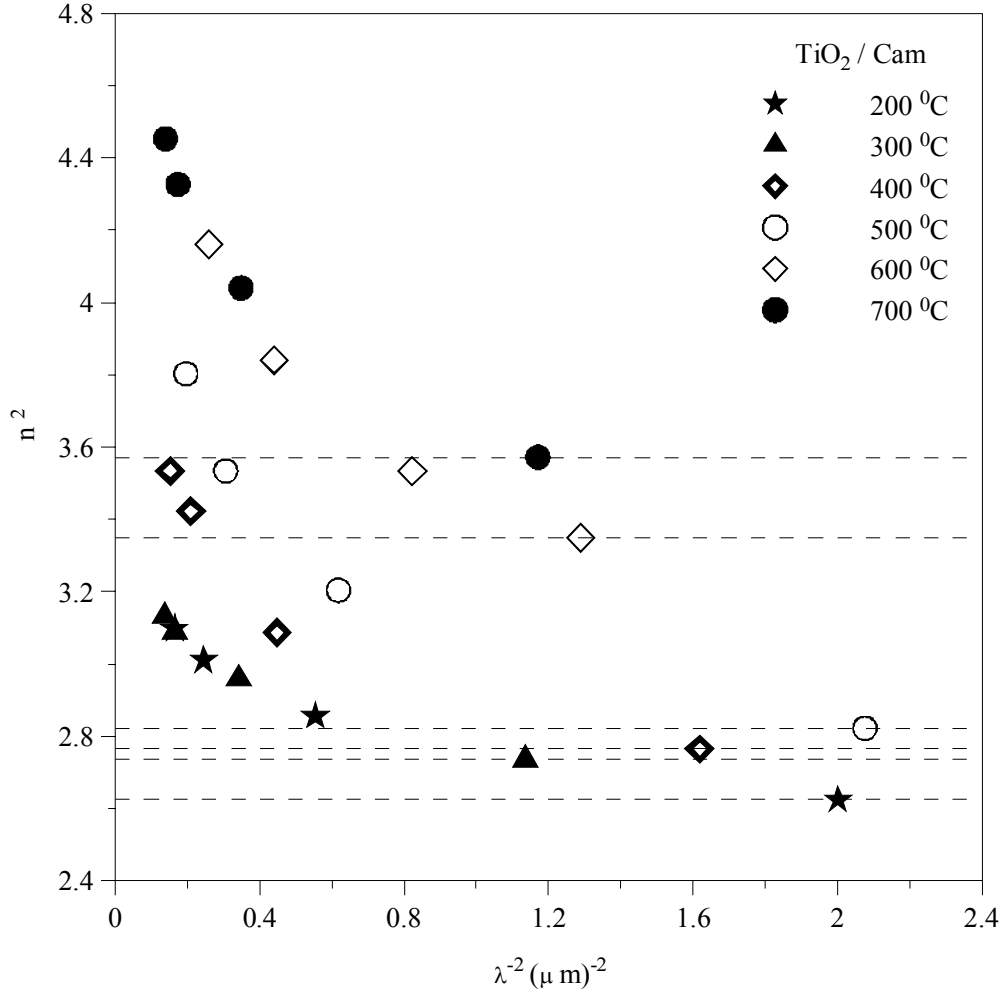
Şekil 4.2. Cam alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$ grafiği.

Ayrıca UV-VIS-NIR spektrumundaki minimum geçirgenlik değerleri ve denklem (58) kullanılarak ince filmlerin kırılma indisleri hesaplanmıştır. Ara tavlama sıcaklığı arttıkça kırılma indisinin de arttığı görülmüştür (Çizelge 4.1). Bu değerlerden yararlanılarak farklı ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin kırılma indisinin dalga boyuna bağlılığı Şekil 4.3'te gösterilmiştir. Kırılma indisi artan dalga boyu ile azalmakta yani normal dispersiyon özelliği sergilemektedir.



Şekil 4.3. Cam alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin kırılma indisi - dalga boyu grafiği.

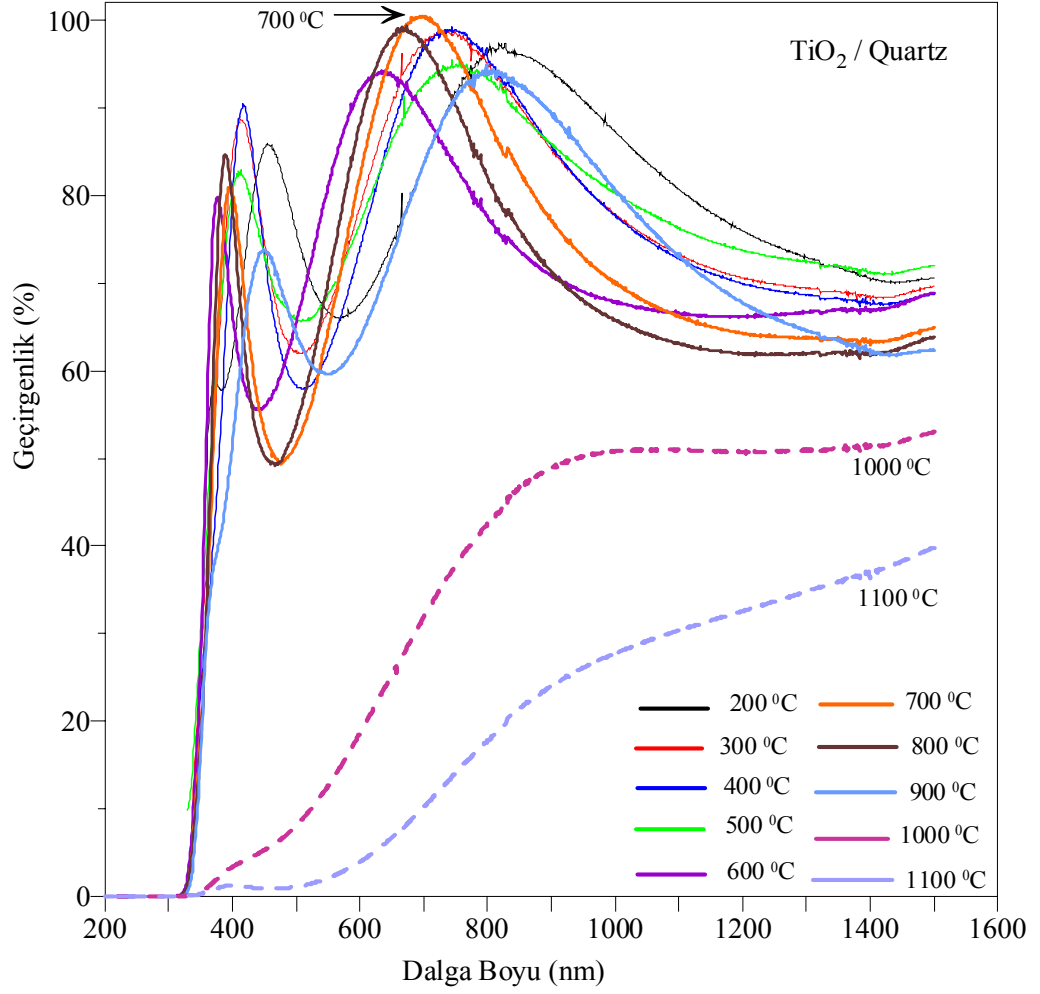
İnce filmlerin optiksel dielektrik özelliğini analiz etmek için n^2 'nin λ^{-2} 'ye göre grafiği çizilmiş ve çizilen teğetler yardımıyla y-eksenini kestiği noktalardan ince filmlerin optiksel yüksek dielektrik sabitleri (ϵ_s) bulunmuştur. Şekil 4.4 ve Çizelge 4.1'de optiksel yüksek dielektrik sabitinin ara tavlama sıcaklığı ile arttığı görülmektedir.



Şekil 4.4. Cam alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin $n^2 - \lambda^{-2}$ grafiği.

4.2. TiO₂/Quartz İnce Filmlerin UV-VIS-NIR Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular

Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin 300 – 1500 nm dalga boyu aralığındaki UV-VIS-NIR spektrumları Şekil 4.5’de gösterilmiştir. En yüksek optik geçirgenlik (%97,01), 700 °C ara tavlama sıcaklığının uygulandığı numunede görülmüştür. 900 °C’nin altında ara tavlama sıcaklığı arttıkça optik geçirgenliğin arttığı, 900 °C’nin üstünde ise ara tavlama sıcaklığı arttıkça optik geçirgenliğin aniden azaldığı görülmüştür. 1000 °C ve 1100 °C ara tavlama sıcaklığında hazırlanan ince filmlerin faz değiştirdiği görülmektedir.



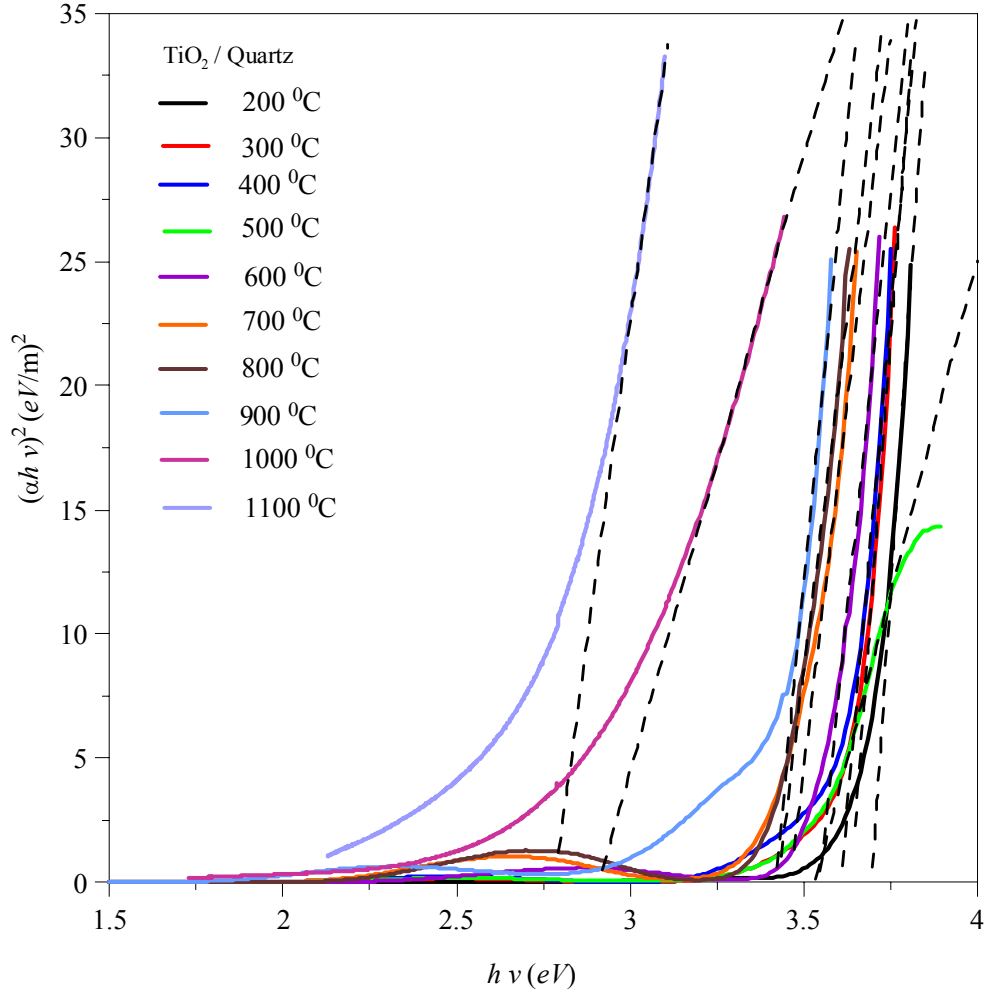
Şekil 4.5. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO_2 ince filmlerin geçirgenlik-dalga boyu eğrileri.

Şekil 4.5'teki spektrumdan iki komşu minimum veya iki komşu maksimum değere ait dalga boyları ve bu dalga boylarındaki kırılma indisleri, denklem (57)'de yerine konularak ince filmlerin kalınlıkları hesaplanmıştır. Hesaplanmış olan filmlerin kalınlık değerleri Çizelge 4.2'de verilmiştir. Ara tavlama sıcaklığı arttıkça kalınlığın azaldığı görülmüştür.

Çizelge 4.2. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin UV-VIS-NIR spektrumları yardımıyla hesaplanmış optiksel parametreleri

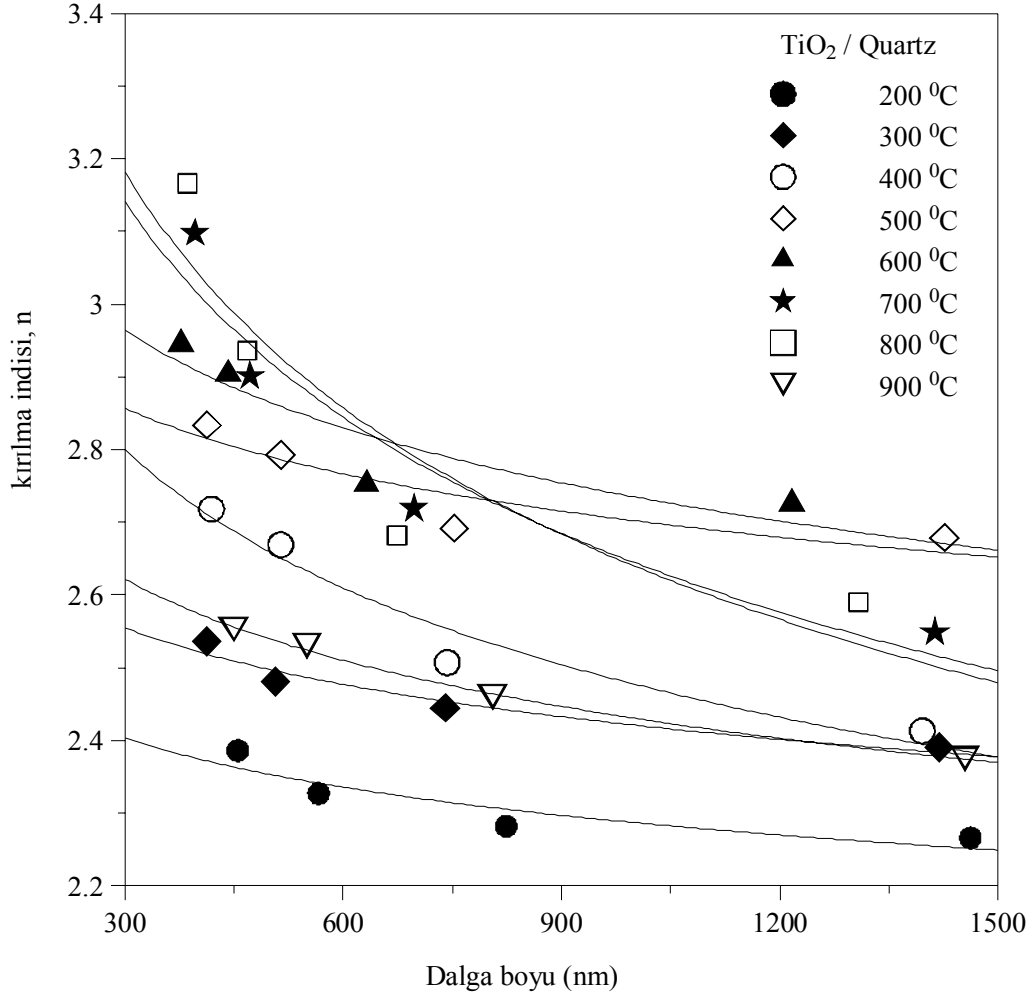
	200 °C	300 °C	400 °C	500 °C	600 °C	700 °C	800 °C	900 °C	1000 °C	1100 °C
Kalınlık, x, (nm)	444	295	272	251	218	179	168	148	-	-
Yasak Enerji Band Aralığı, (eV)	3,69	3,63	3,60	3,53	3,52	3,46	3,42	3,40	2,93	2,79
Yüksek Dielektrik Sabit, ϵ_s	5,13	5,71	5,82	7,17	7,43	6,49	6,70	5,64	-	-
Kırılma İndisi, n	2,38	2,53	2,71	2,83	2,94	3,09	3,16	2,46	-	-

UV-VIS-NIR spektrumundaki geçirgenlik ve hesaplanan kalınlık değerleri, denklem (53)'te yerine konularak ince filmlerin soğurma katsayıları hesaplanmıştır. Hesaplanan bu soğurma katsayıları kullanılarak, Şekil 4.6'de görüldüğü gibi doğrudan izinli bir band geçişi için $(\alpha hv)^2$ 'nin hv 'ye göre grafiği çizilmiş ve çizilen teğetler yardımıyla x-eksenini kestiği noktalardan ince filmlerin yasak enerji band aralıkları (E_g) bulunmuştur. Çizelge 4.2'de görüldüğü gibi, ara tavlama sıcaklığı arttıkça yasak enerji band aralıklarının azaldığı görülmüştür.



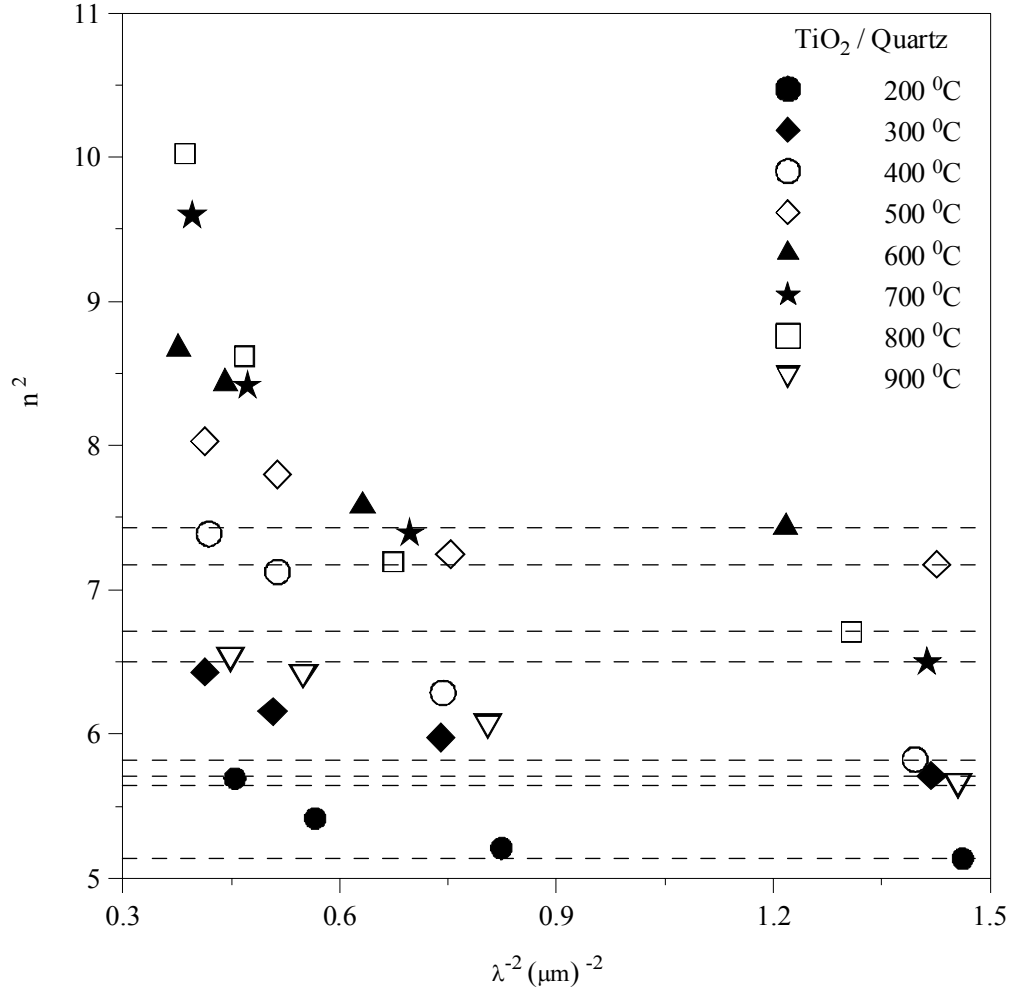
Şekil 4.6. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$ grafiği.

Ayrıca UV-VIS-NIR spektrumundaki minimum geçirgenlik değerleri ve denklem (58) kullanılarak ince filmlerin kırılma indisleri hesaplanmıştır. Bu değerlerden yararlanılarak farklı ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin kırılma indisinin dalga boyuna bağlılığı Şekil 4.7’de gösterilmiştir. Ara tavlama sıcaklığı arttıkça kırılma indisinin de arttığı görülmüştür (Çizelge 4.2). 1000 °C ve 1100 °C ara tavlama sıcaklığında hazırlanan ince filmlerin geçirgenlik eğrilerinde bir maksimum veya minimum tepe olmadığından dolayı kırılma indis değerleri hesaplanamamıştır. Ayrıca, kırılma indisi artan dalga boyu ile azalmakta yani normal dispersiyon özelliği sergilemektedir.



Şekil 4.7. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin kırılma indisi - dalga boyu grafiği.

Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin optiksel dielektrik özelliğini analiz etmek için tekrar n^2 'nin λ^{-2} 'ye göre grafiği çizilmiş ve çizilen teğetler yardımıyla y-eksenini kestiği noktalardan ince filmlerin optiksel yüksek dielektrik sabitleri (ϵ_s) bulunmuştur. Şekil 4.8 ve Çizelge 4.2'de görüldüğü gibi, ara tavlama sıcaklığı arttıkça optiksel yüksek dielektrik sabitinin de arttığı görülmektedir. 1000 °C ve 1100 °C ara tavlama sıcaklığında hazırlanan ince filmlerin kırılma indis değerleri belirlenemediğinden dolayı optiksel yüksek dielektrik sabitleri de hesaplanamamıştır.

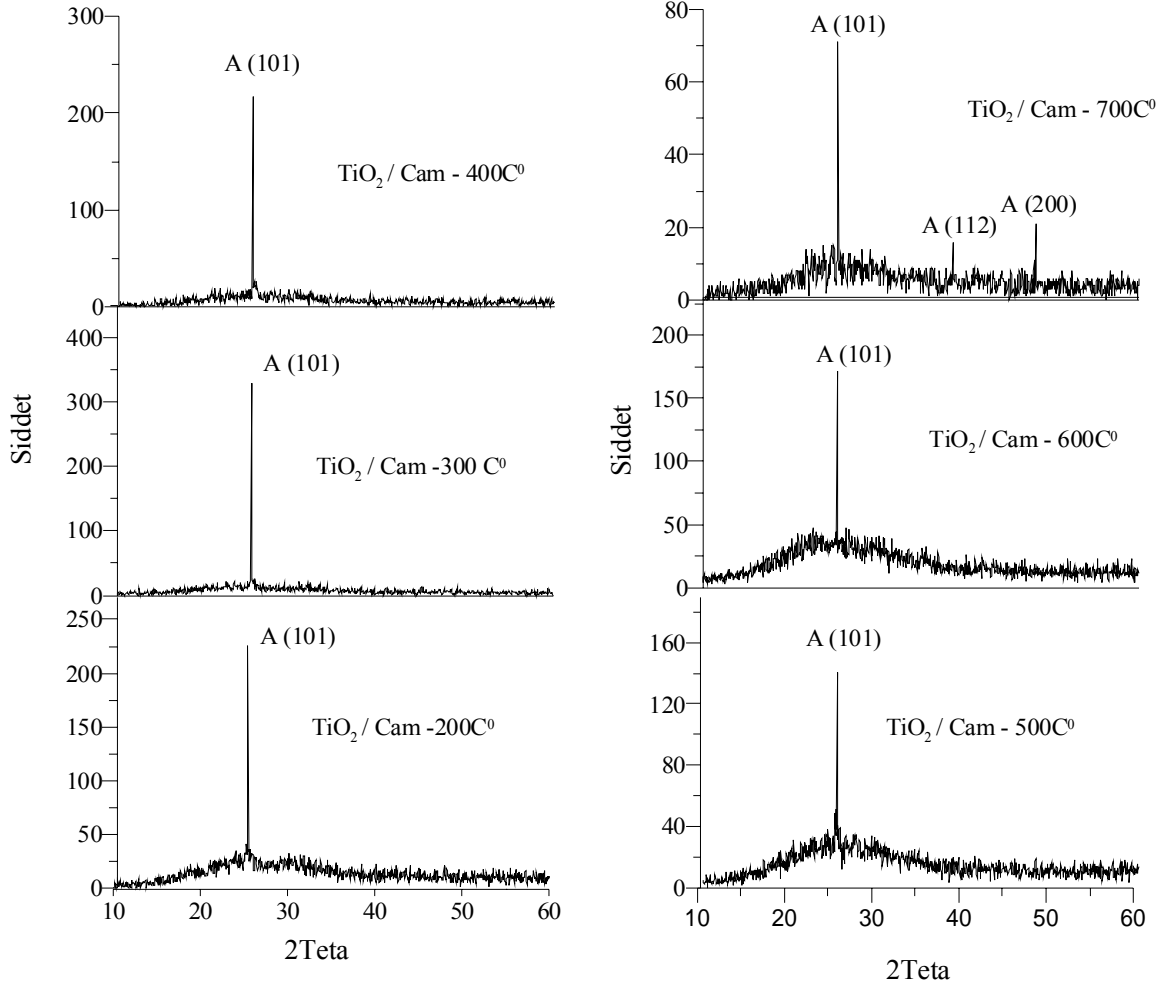


Şekil 4.8. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin $n^2 - \lambda^{-2}$ grafiği.

4.3. TiO₂/Cam İnce Filmlerin XRD Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular

Filmlerin kırınım desenleri incelendiğinde pik şiddetleri ve genişlikleri filmler arasında farklılıkları ortaya çıkarmaktadır. Şiddetleri büyük ve genişlikleri dar olan pikler kristalleşmenin iyi, şiddetleri küçük ve genişlikleri büyük olan pikler ise kristalleşmenin iyi olmadığı anlamına gelmektedir. Bu çalışmada, cam alt tabaka üzerinde elde edilen TiO₂ ince filmlerinin kırınım desenlerinde, piklerin üzerinde ilgili düzlemlerin miller indisleri belirtilmiştir.

Cam alt tabaka üzerindeki TiO_2 ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri Şekil 4.9'da gösterilmiştir.



Şekil 4.9. Cam alt tabaka üzerindeki TiO_2 ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri.

Isıl işlemin elde edilen ince filmlerin yapısını kristalleştirdiği görülmektedir. 200 °C, 300 °C, 400 °C, 500 °C ve 600 °C ara tavlama sıcaklığında $2\theta = 25.4^\circ$ de ortaya çıkan (101) indisli pik TiO_2 ince filme ait karakteristik piktir ve bu filmlerin tek kristal, anatase fazda ve tetragonal yapıda olduklarını göstermektedir. 700 °C ara tavlama sıcaklığındaki TiO_2 ince filmi X-ışını kırınım desenlerinde pikler incelendiğinde (101), (112) ve (200) indisli üç farklı yönelimde pike rastlanmaktadır. 700 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen TiO_2

ince filminin polikristal yapıda olduğu görülmektedir. Şekilde açıkça görüldüğü gibi, ara tavlama sıcaklığı artışı ile pik şiddetleri de değişmektedir. Bu durum, ısı işlem ile yapıda meydana gelen kristal boyutunun büyümesinin neden olduğu iç gerilmelerin artışından kaynaklanmaktadır.

X-ışını kırınım desenlerinden ve Scherrer formülünden yararlanarak kristal boyutlar hesaplanmıştır (Cullity, 1978);

$$D = \frac{0.9 \lambda}{\beta \cos \theta} \quad (70)$$

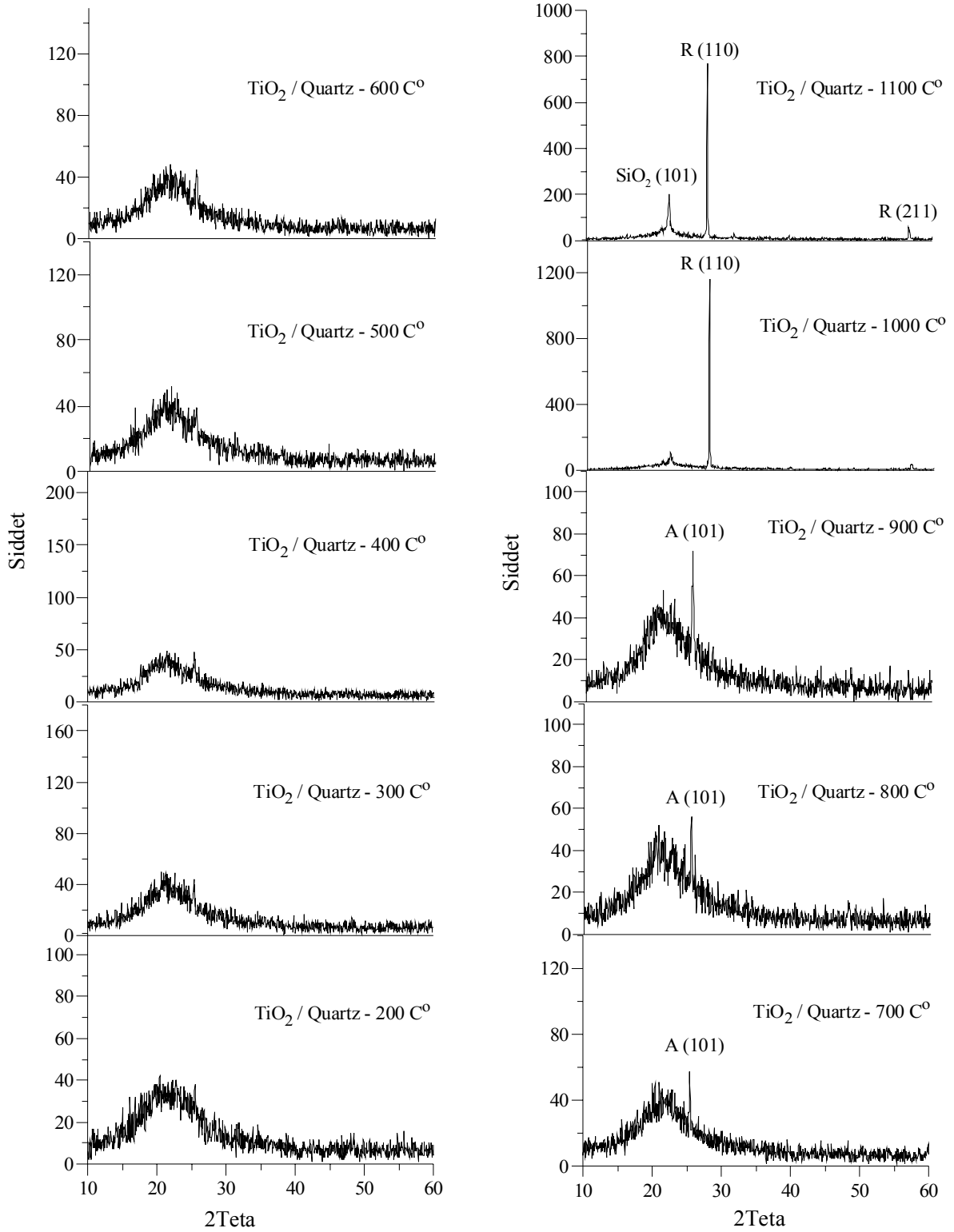
Buradaki λ , θ ve β sırasıyla X-ışını dalga boyu, Bragg açısı ve maksimum kırınım çizgisinin yarı genişliğidir. Hesaplanan kristal boyutları Çizelge 4.3'te verilmiştir.

Çizelge 4.3. Cam alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri yardımıyla hesaplanmış kristal boyutu değerleri.

	200 °C	300 °C	400 °C	500 °C	600 °C	700 °C
Kristal Boyutu, nm	85	126.8	289.2	361.3	172.3	65.7

4.4. TiO₂/Quartz İnce Filmlerin XRD Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular

Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri Şekil 4.10'da gösterilmiştir. 200 °C, 300 °C, 400 °C, 500 °C ve 600 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin kristalleşmediği ve henüz amorf yapıda olduğu görülmektedir. Amorf yapıda olduğundan dolayı, bu sıcaklıklarda yapılan TiO₂ ince filmine ait kristal boyutları hesaplanamamıştır. 700 °C ve üstünde uygulanan ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin yapısının kristalleştiği görülmektedir. 700 °C, 800 °C ve 900 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin $2\theta = 25.4^\circ$ de ortaya çıkan (101) indisli pik TiO₂ ince filme ait karakteristik piktir ve bu filmlerin polikristal, anatase fazda ve tetragonal yapıda olduklarını göstermektedir. 1000 °C ve 1100 °C ara tavlama sıcaklığındaki TiO₂ ince filmleri X-ışını kırınım desenlerinde pikler incelendiğinde (110) indisli pik yine TiO₂ ince filme ait karakteristik piktir ve bu filmlerin de polikristal ve tetragonal yapıda olduklarını ancak anatase fazdan rutile faza dönüştüklerini göstermektedir.



Şekil 4.10. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri.

X-ışını kırınım desenlerinden ve Scherrer formülünden yararlanarak kristal boyutlar hesaplanmıştır. (Cullity, 1978) Hesaplanan kristal boyutları Çizelge 4.4'te verilmiştir. Ara tavlama sıcaklığı arttıkça ince filmlerin kristal boyutlarının da attığı görülmektedir.

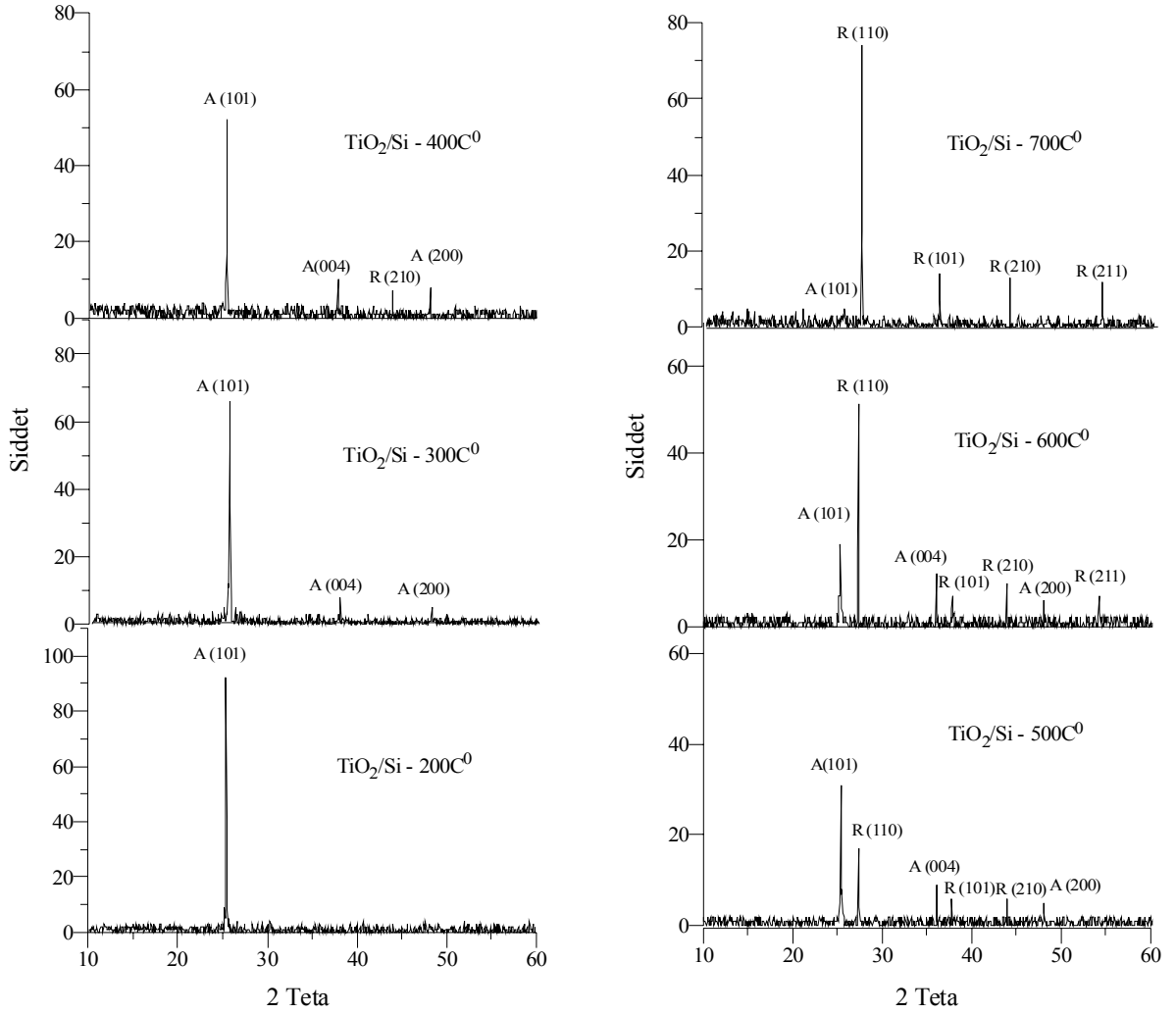
Çizelge 4.4. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri yardımıyla hesaplanmış kristal boyutu değerleri.

	200 °C	300 °C	400 °C	500 °C	600 °C	700 °C	800 °C	900 °C	1000 °C	1100 °C
Kristal Boyutu, nm	-	-	-	-	-	21.42	25.61	28.91	30.13	37.95

4.5. TiO₂/Si İnce Filmlerin XRD Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular

Silisyum alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri Şekil 4.11'da gösterilmiştir. 200 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmin anatase fazda (101) yöneliminde ve polikristal bir yapıya sahip olduğu görülmektedir. 300 °C ve 400 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin yine anatase fazda olduğu ama (101) piki dışında (004) ve (200) gibi farklı yönelimlere sahip piklere de rastlanmaktadır. 500 °C, 600 °C ve 700 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin ise anatase fazdan rutile faza dönüştüğü açıkça görülmektedir. Yani, silisyum alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin 500 °C ve üstündeki ara tavlama sıcaklıklarında faz değiştirdiği görülmektedir. Bu ince filmlerin polikristal, rutile fazda ve tetragonal yapıda oldukları görülmektedir.

Ayrıca, X-ışını kırınım desenlerinden ve Scherrer formülünden yararlanarak kristal boyutlar hesaplanmıştır. (Cullity, 1978) Hesaplanan kristal boyutları Çizelge 4.5'te verilmiştir. Anatase fazdaki ince filmlerde, ara tavlama sıcaklığı arttıkça ince filmlerin kristal boyutlarının da attığı, ancak rutile fazdaki ince filmlerin kristal boyutlarının azaldığı görülmektedir. Bu durum rutile fazda kristallerin iğneli yapıda olmasından kaynaklanmaktadır.

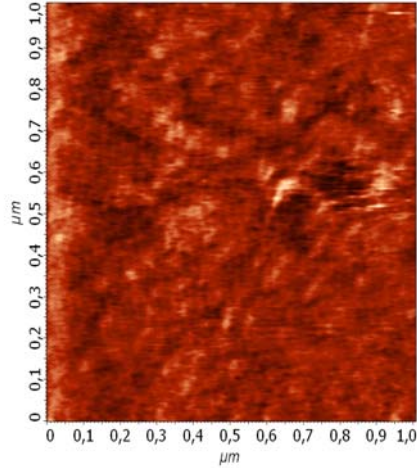


Şekil 4.11. Silisyum alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri.

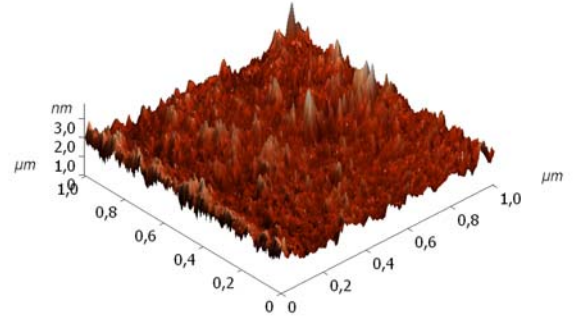
Çizelge 4.5. Silisyum alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri yardımıyla hesaplanmış kristal boyutu değerleri.

	200 °C	300 °C	400 °C	500 °C	600 °C	700 °C
Kristal Boyutu, nm	17.32	73.2	86.1	69.4	26.14	12.30

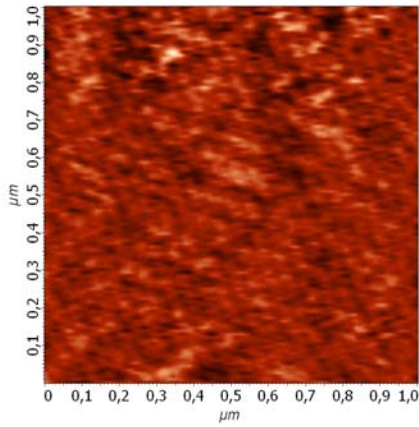
4.6. TiO₂/Cam İnce Filmlerin AFM Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular



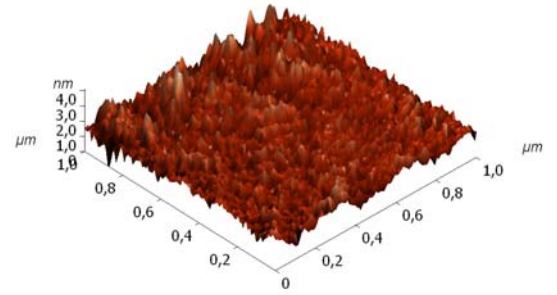
2-Boyutlu, 200 C⁰ TiO₂/Cam



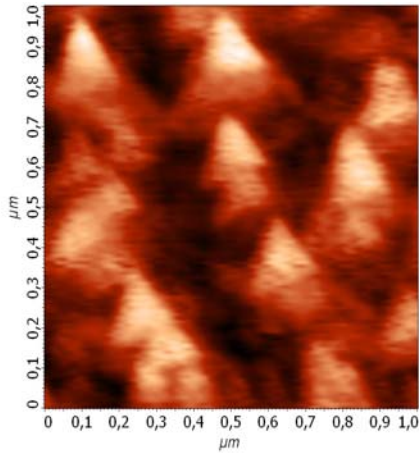
(a) 3-Boyutlu, 200 C⁰ TiO₂/Cam



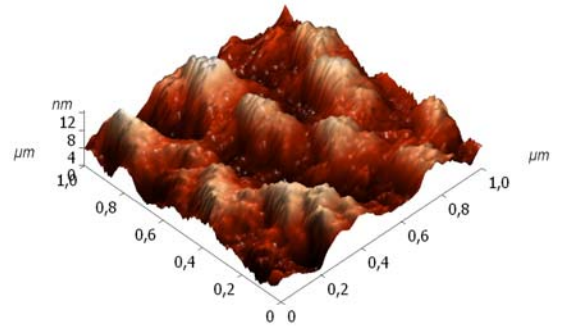
2-Boyutlu, 300 C⁰ TiO₂/Cam



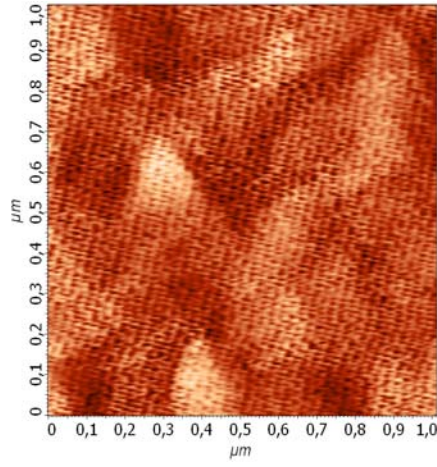
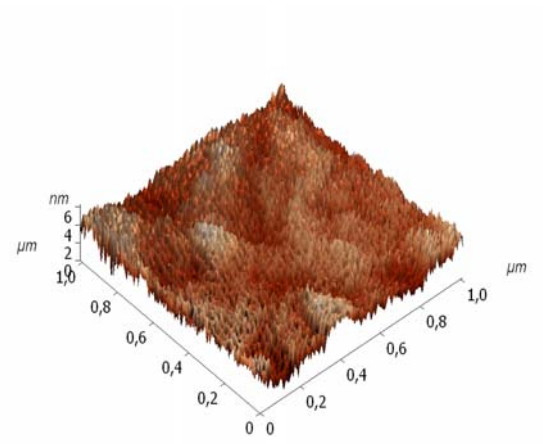
(b) 3-Boyutlu, 300 C⁰ TiO₂/Cam



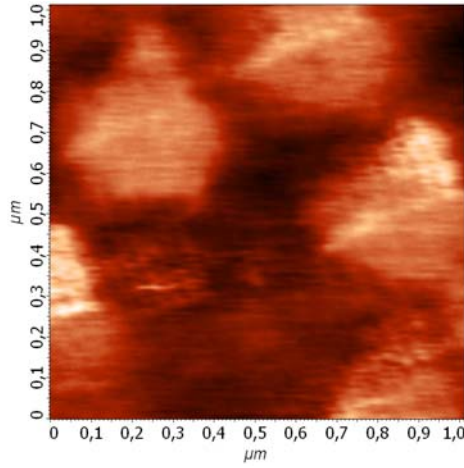
2-Boyutlu, 400 C⁰ TiO₂/Cam



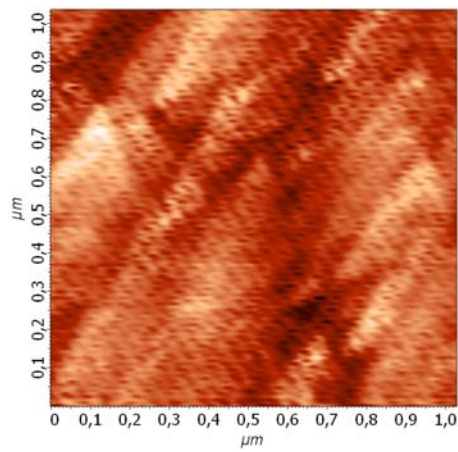
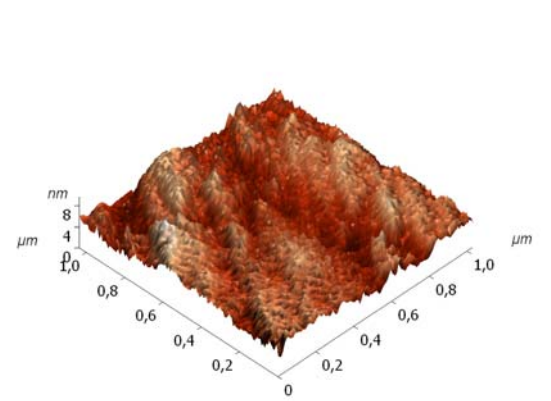
(c) 3-Boyutlu, 400 C⁰ TiO₂/Cam

2-Boyutlu, 500 C⁰ TiO₂/Cam

(d)

3-Boyutlu, 500 C⁰ TiO₂/Cam2-Boyutlu, 600 C⁰ TiO₂/Cam

(e)

3-Boyutlu, 600 C⁰ TiO₂/Cam2-Boyutlu, 700 C⁰ TiO₂/Cam

(f)

3-Boyutlu, 700 C⁰ TiO₂/Cam

Şekil 4.12 Cam alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin iki ve üç boyutlu AFM görüntüleri

(a) C1, (b) C2, (c) C3, (d) C4, (e) C5 ve (f) C6

Cam üzerindeki TiO₂ ince filmlerin 1 x 1 (μm)² alanlı 2- ve 3 – boyutlu AFM görüntüleri Şekil 4.12’de gösterilmiştir. Bilgisayar programı ile yapılan analizlerde yapıların ortalama tanecik boyutları ve pürüzlülükleri saptanmış ve sonuçlar Çizelge 4. 6’da verilmiştir. Tavlama sıcaklığı arttıkça tane boyutlarının da büyüdüğü görülmüştür.

Çizelge 4.6. Cam alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin AFM yardımıyla hesaplanmış ortalama tanecik ve pürüzlülük parametreleri.

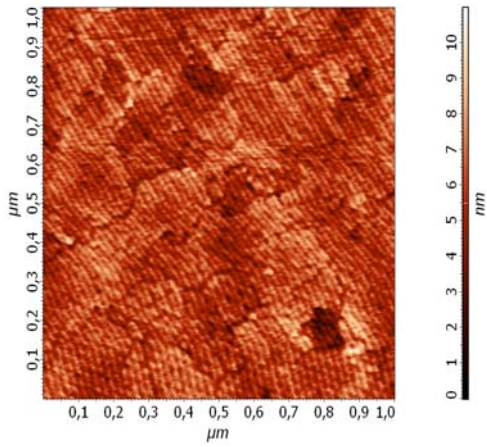
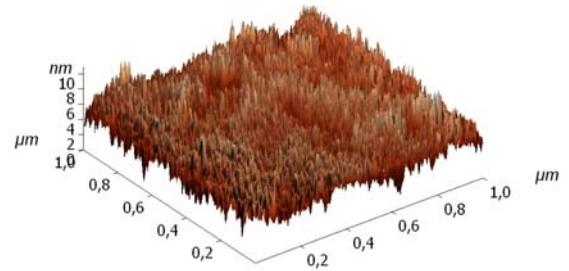
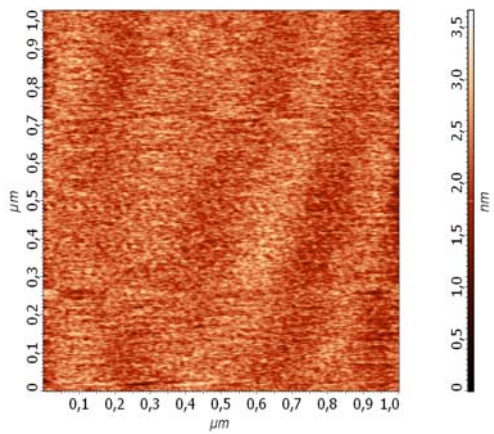
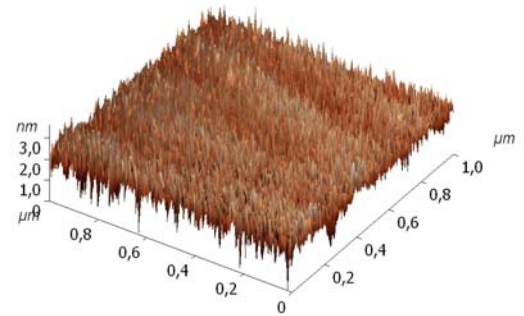
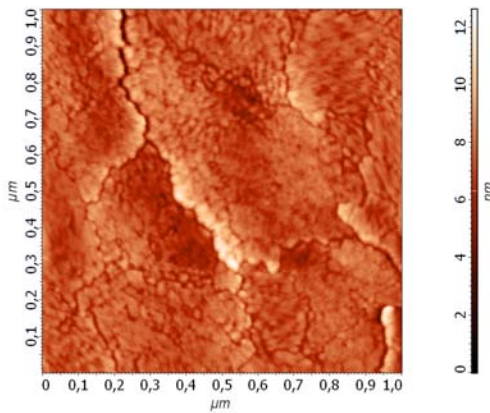
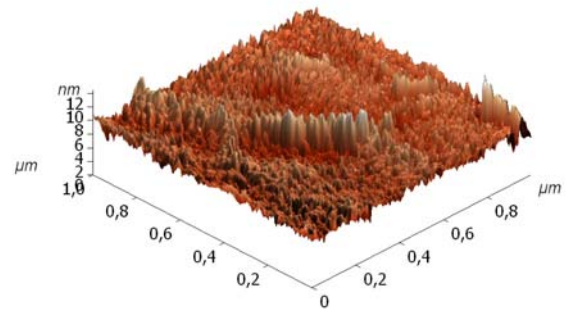
		200 °C	300 °C	400 °C	500 °C	600 °C	700 °C
Cam	Pürüzlülük (nm)	0.501	0.503	0.508	0.769	0.635	0.488
	Ortalama Tanecik Boyutu (nm)	382	411	464	498	513	598

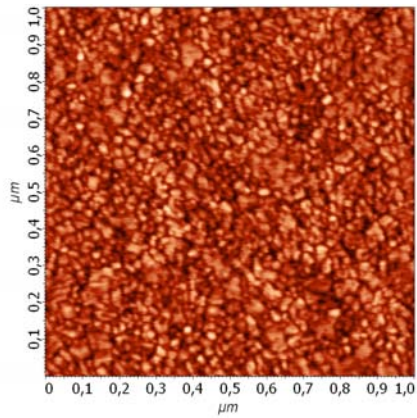
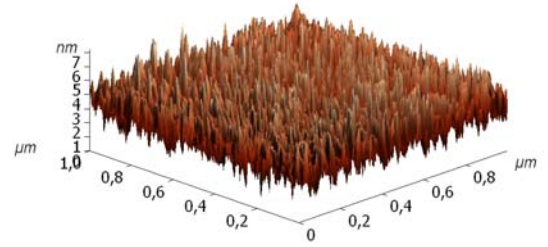
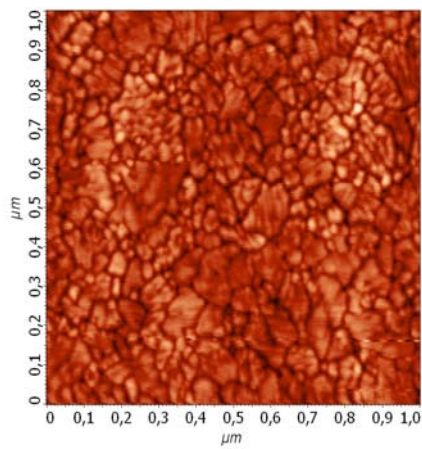
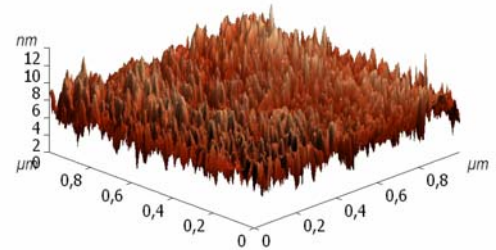
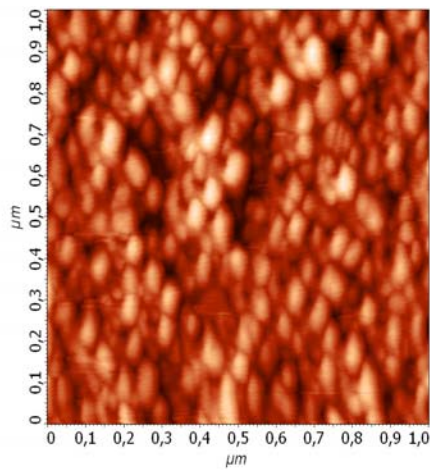
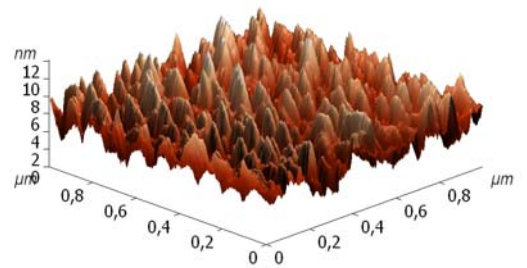
4.7. TiO₂/Quartz İnce Filmlerin AFM Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular

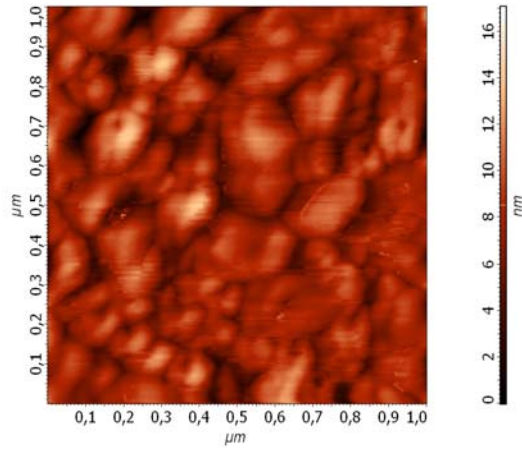
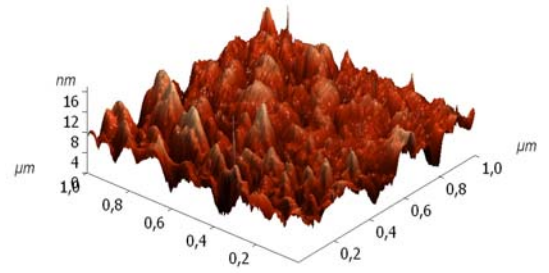
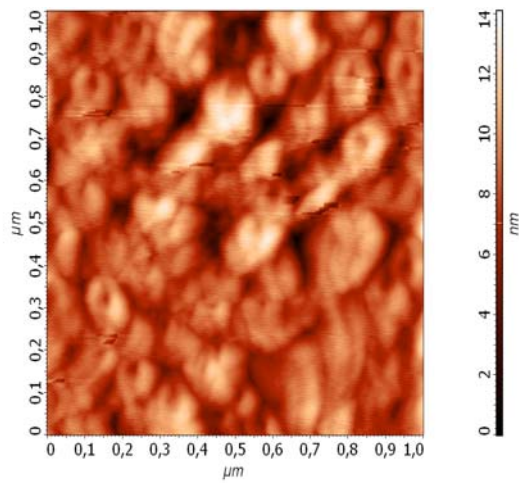
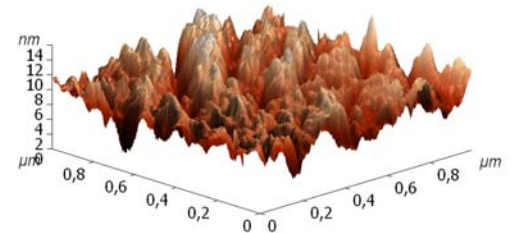
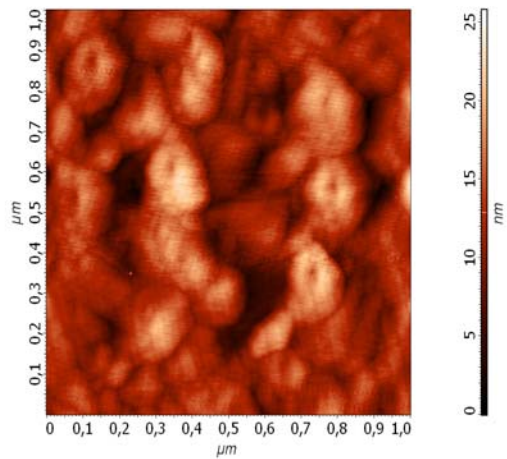
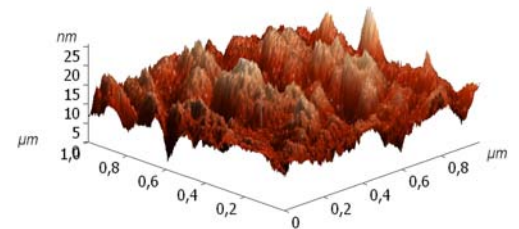
Quartz üzerindeki TiO₂ ince filmlerin 1 x 1 (μm)² alanlı 2- ve 3 – boyutlu AFM görüntüleri Şekil 4.13’de gösterilmiştir. Bilgisayar programı ile yapılan analizlerde yapıların ortalama tanecik boyutları ve pürüzlülükleri saptanmış ve sonuçlar Çizelge 4.7’de verilmiştir. Tavlama sıcaklığı arttıkça tane boyutlarının ve pürüzlülüğün büyüdüğü görülmüştür.

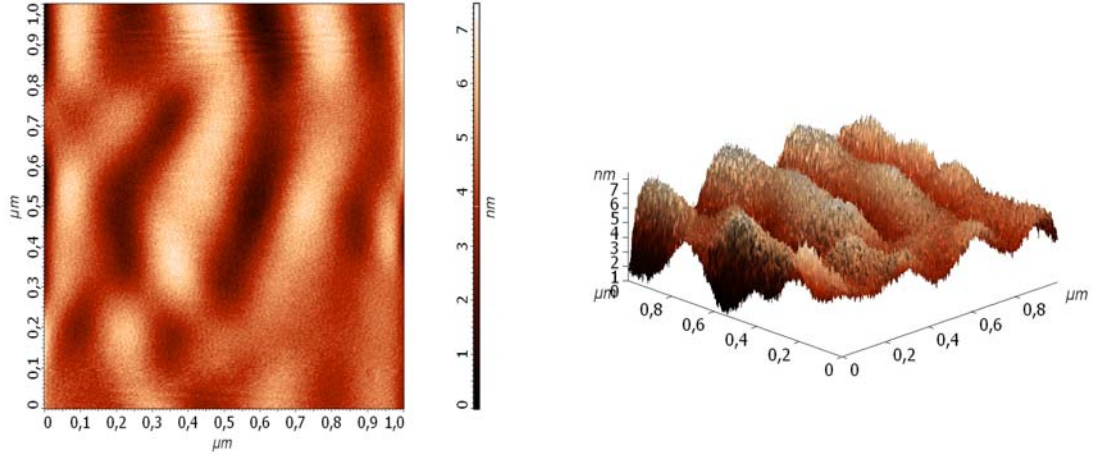
Çizelge 4.7. Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin AFM yardımıyla hesaplanmış ortalama tanecik ve pürüzlülük parametreleri.

	200 °C	300 °C	400 °C	500 °C	600 °C	700 °C	800 °C	900 °C	1000 °C	1100 °C
Pürüzlülük (nm)	1.82	2.06	2.24	3.58	3.78	3.88	3.97	4.18	4.64	5.20
Ortalama Tanecik Boyutu (nm))	39	43	49	55	59	70	118	153	195	313

2-Boyutlu, 200 C⁰ TiO₂/Quartz(a) 3-Boyutlu, 200 C⁰ TiO₂/Quartz2-Boyutlu, 300 C⁰ TiO₂/Quartz(b) 3-Boyutlu, 300 C⁰ TiO₂/Quartz2-Boyutlu, 400 C⁰ TiO₂/Quartz(c) 3-Boyutlu, 400 C⁰ TiO₂/Quartz

2-Boyutlu, 500 C⁰ TiO₂/Quartz(d) 3-Boyutlu, 500 C⁰ TiO₂/Quartz2-Boyutlu, 600 C⁰ TiO₂/Quartz(e) 3-Boyutlu, 600 C⁰ TiO₂/Quartz2-Boyutlu, 700 C⁰ TiO₂/Quartz(f) 3-Boyutlu, 700 C⁰ TiO₂/Quartz

2-Boyutlu, 800 C⁰ TiO₂/Quartz(g) 3-Boyutlu, 800 C⁰ TiO₂/Quartz2-Boyutlu, 900 C⁰ TiO₂/Quartz(h) 3-Boyutlu, 900 C⁰ TiO₂/Quartz2-Boyutlu, 1000 C⁰ TiO₂/Quartz(i) 3-Boyutlu, 1000 C⁰ TiO₂/Quartz

2-Boyutlu, 1100 C⁰ TiO₂/Quartz(j) 3-Boyutlu, 1100 C⁰ TiO₂/Quartz

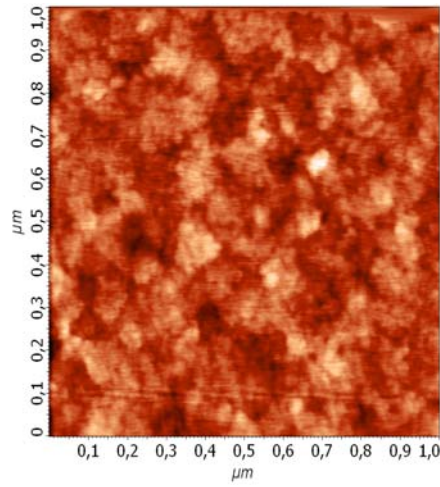
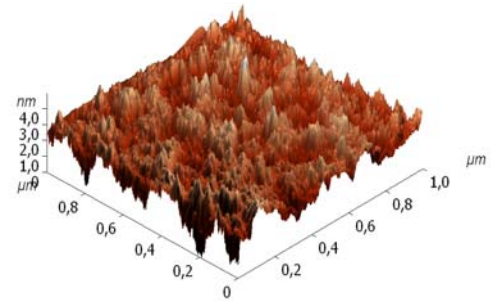
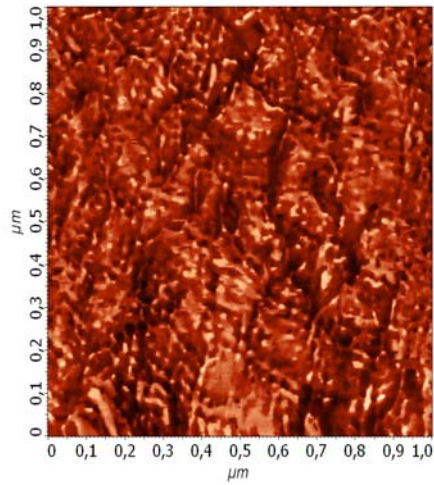
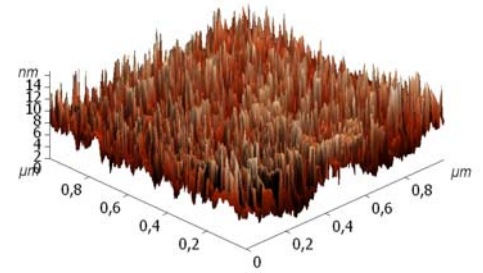
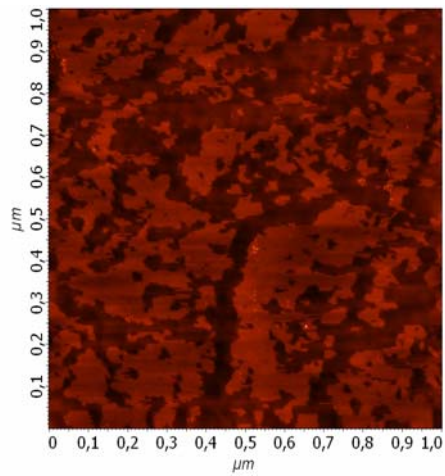
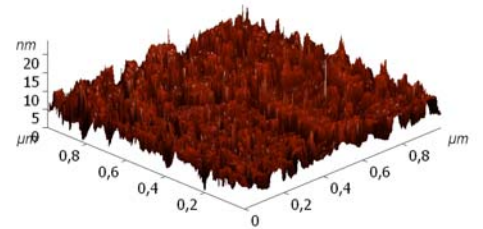
Şekil 4.13 Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin iki ve üç boyutlu AFM görüntüleri (a) Q1, (b) Q2, (c) Q3, (d) Q4, (e) Q5, (f) Q6, (g) Q7, (h) Q8, (i) Q9 ve (j) Q10

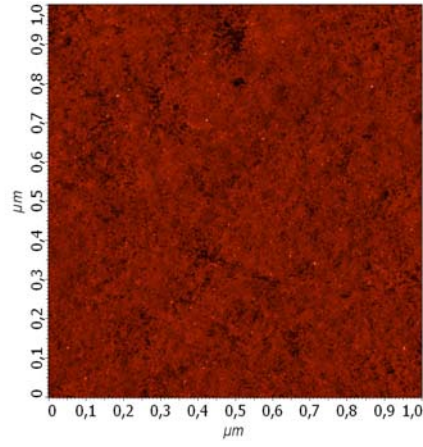
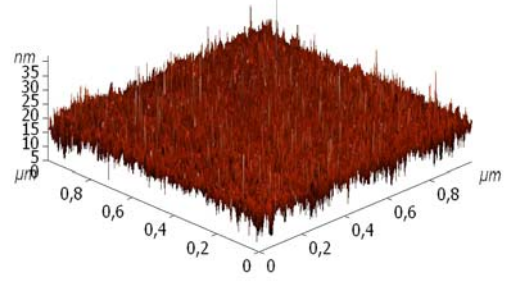
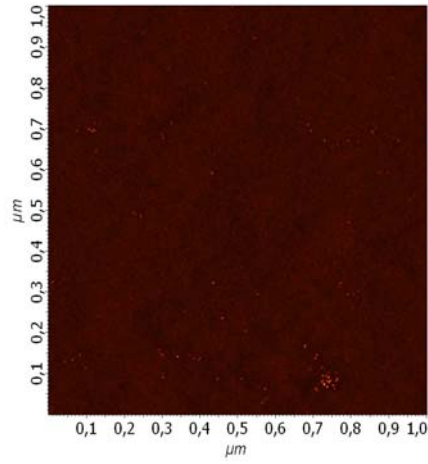
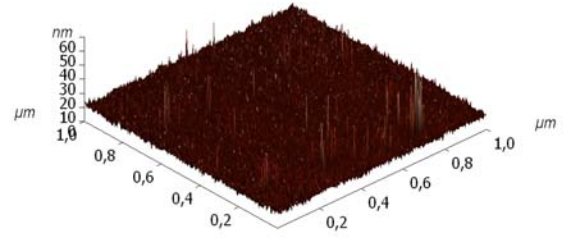
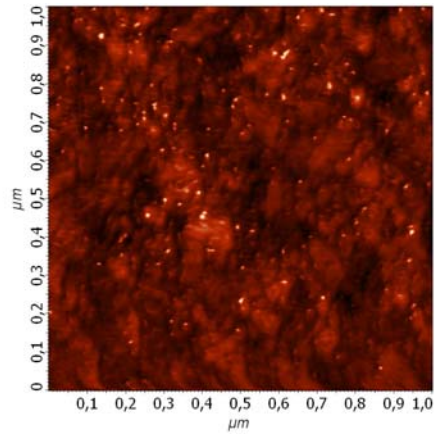
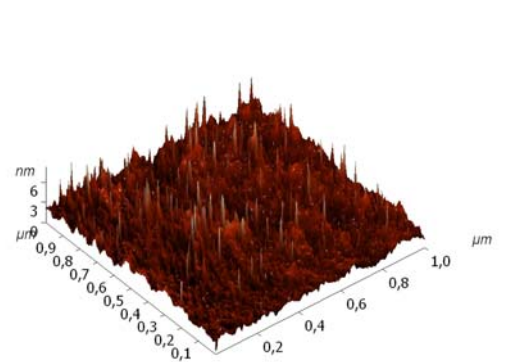
4.8. TiO₂/Si İnce Filmlerin AFM Spektrum Analizlerinden Elde Edilen Bulgular

Silisyum üzerindeki TiO₂ ince filmlerin 1 x 1 (μm)² alanlı 2- ve 3 – boyutlu AFM görüntüleri Şekil 4.14’de gösterilmiştir. Bilgisayar programı ile yapılan analizlerde yapıların ortalama tanecik boyutları ve pürüzlülükleri saptanmış ve sonuçlar Çizelge 4.8’de verilmiştir. Anatase fazda tavlama sıcaklığı arttıkça tane boyutlarının da büyüdüğü fakat 500 °C - 700 °C ara tavlama sıcaklıkları arasında rutile fazda iğneli yapıda olduğundan dolayı azaldığı görülmüştür.

Çizelge 4.8. Silisyum alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin AFM yardımıyla hesaplanmış ortalama tanecik ve pürüzlülük parametreleri.

		200 °C	300 °C	400 °C	500 °C	600 °C	700 °C
Cam	Pürüzlülük (nm)	1.001	1.993	2.248	2.649	2.751	2.424
	Ortalama Tanecik Boyutu (nm)	37	109	239	182	43	21

2-Boyutlu, 200 C⁰ TiO₂/Si(a) 3-Boyutlu, 200 C⁰ TiO₂/Si2-Boyutlu, 300 C⁰ TiO₂/Si(b) 3-Boyutlu, 300 C⁰ TiO₂/Si2-Boyutlu, 400 C⁰ TiO₂/Si(c) 3-Boyutlu, 400 C⁰ TiO₂/Si

2-Boyutlu, 500 C⁰ TiO₂/Si(d) 3-Boyutlu, 500 C⁰ TiO₂/Si2-Boyutlu, 600 C⁰ TiO₂/Si(e) 3-Boyutlu, 600 C⁰ TiO₂/Si2-Boyutlu, 700 C⁰ TiO₂/Si(f) 3-Boyutlu, 700 C⁰ TiO₂/Si

Şekil 4.14 Silisyum alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin iki ve üç boyutlu AFM görüntüleri (a) S1, (b) S2, (c) S3, (d) S4, (e) S5 ve (f) S6

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tez çalışmasında, sol-jel daldırma ile kaplama yöntemi kullanılarak farklı tavlama sıcaklıklarında ve farklı alttaşlar (soda camı, quartz ve silisyum kristali) üzerinde büyütülen nano tanecikli titanyum dioksit (TiO_2) ince filmlerinin yapısal, morfolojik ve optiksel özellikleri incelenmiştir.

UV-VIS-NIR spektrumlarından cam ve quartz alt tabaka üzerindeki filmlerin film kalınlıkları, enerji bant aralıkları, kırılma indisleri ve optiksel yüksek dielektrik sabitleri hesaplanmıştır. Cam üzerinde büyütülen TiO_2 ince filmlerde, $500\text{ }^\circ\text{C}$ 'nin altında ara tavlama sıcaklığı arttıkça optik geçirgenliğin arttığı, $500\text{ }^\circ\text{C}$ 'nin üstünde ise ara tavlama sıcaklığı arttıkça optik geçirgenliğin azaldığı görülmüştür. Bu durum, ince filmlerin ısı işlem sırasında kristal yapılarında oluşan bozulmalardan ve yüzey morfolojilerindeki yani yüzey pürüzlüklerindeki değişimlerden dolayı kayıp saçılmanın (loss scattering) artması veya azalmasından kaynaklanabilmektedir (Yang ve ark., 2008; Saini ve ark., 2007; Mardare ve Rusu, 2002; Mardare ve ark., 2000). Ayrıca, TiO_2 ve diğer oksit ince filmlerle ilgili yapılan bazı çalışmalarda, ara tavlama sıcaklığı arttıkça optik geçirgenliğin azalmasının, tane sınırları arasına yerleşmiş oksijen boşluklarından kaynaklanan ara yüzey kusurlarının çok fazla soğurma kayıplarına neden olabileceğinden dolayı kaynaklandığı ileri sürülmüştür (Rath ve ark., 2009; Tian ve ark., 2006; Linsbod ve ark., 2003; Ahn ve ark., 2003; Aarik ve ark., 1999). Film kalınlıkları 249 ile 54 nm arasında hesaplanmış ve ara tavlama sıcaklığı arttıkça film kalınlıklarının azaldığı belirlenmiştir. Bunun sebebi, kalınlık arttıkça yüzeye tutunan atomlar ile alttaş arasındaki çekim kuvvetinin azalmasından dolayı, yüzeyden uzak olan atomların ve yüzeye tam olarak tutunamamış atomların kopmasından ileri gelmektedir (Vishwas ve ark., 2010; Yang ve ark., 2008; Bach ve Krause, 1997; Klein, 1988). TiO_2 ince filmlerin enerji band aralıkları 3.68 – 3.31 eV aralığında hesaplanmış ve ara tavlama sıcaklığı arttıkça yasak enerji band aralıklarının azaldığı tespit edilmiştir. Bu durum, atomların kendi denge konumları etrafındaki salınım genliklerinin azalmasıyla ilgili olan atomlar arası boşlukların azalmasından kaynaklanmaktadır (Sreemany ve Sen, 2007; Tian ve ark., 2006; Rao, 1989). Kırılma indisi 1.76 – 2.11 ve optiksel yüksek dielektrik sabiti ise 2.62 – 3.57 aralığında bulunmuştur. Ara

tavlama sıcaklığı arttıkça kırılma indisi ve optiksel yüksek dielektrik sabitinin arttığı görülmüştür. Ara tavlama sıcaklığı ile birlikte kırılma indisi ve optiksel dielektrik sabitinin artması, ince filmlerin toplam yoğunluğunun (packing density) yüksek ve kristalliğinin biraz artmış olmasından, sıcaklığın artması ile ince filmde oluşan büzülmelemlerden ve ince filmlerde gözenekli yapının oluşmamasından kaynaklanmaktadır (Vishwas ve ark., 2010; Hasan ve ark., 2010; Vishwas ve ark., 2009; Sharma ve ark., 2009; Saini ve ark., 2007; Rantala ve Kärkkäinen, 2003; Rao, 2003; Wang ve ark., 2002)

Quartz üzerinde büyütülen TiO_2 ince filmlerde, $900\text{ }^\circ\text{C}$ 'nin altında ara tavlama sıcaklığı arttıkça optik geçirgenliğin arttığı, $900\text{ }^\circ\text{C}$ 'nin üstünde ise ara tavlama sıcaklığı arttıkça optik geçirgenliğin aniden azaldığı görülmüştür. $1000\text{ }^\circ\text{C}$ ve $1100\text{ }^\circ\text{C}$ ara tavlama sıcaklığında hazırlanan ince filmlerin, anatase fazdan rutile faza doğru faz dönüşümü sonucu oluşan soğurmadan dolayı optik geçirgenlik aniden azalmıştır (Kim ve ark., 2002; Tian ve ark., 2006; Negishi ve Takeuchi, 1999). Film kalınlıkları 444 ile 74 nm arasında hesaplanmıştır. Ara tavlama sıcaklığı arttıkça film kalınlıklarının azaldığı belirlenmiştir. TiO_2 ince filmlerin enerji band aralıkları $3.69 - 2.79\text{ eV}$ aralığında hesaplanmış ve ara tavlama sıcaklığı arttıkça yasak enerji band aralıklarının azaldığı tespit edilmiştir. $1000\text{ }^\circ\text{C}$ ve $1100\text{ }^\circ\text{C}$ ara tavlama sıcaklığında hazırlanan ince filmlerin yasak enerji band aralıkları değerlerinin rutile fazdaki yapı ile uyum içinde olduğu görülmüştür. Kırılma indisi $2.38 - 3.16$ ve yüksek dielektrik sabiti ise $5.13 - 7.43$ aralığında bulunmuştur. Bulunan tüm veriler TiO_2 ile ilgili literatürdeki diğer verilerle karşılaştırıldığında yakın değerler olduğu görülmüştür (Vishwas ve ark., 2010; Yarmand ve Sadrnezhaad, 2010; Mathews ve ark., 2009; Gonzalez ve Santiago, 2007; Tian ve ark., 2006; Kim ve ark., 2002;). Aynı tavlama sıcaklıklarında yapılan ince filmlere ait optik parametrelerin ve geçirgenliklerinin alttaş ile değiştiği görülmüştür. Kullanılan alttaşa göre farklı optiksel özelliklere sahip malzemelerin üretilebileceği görülmüştür.

Cam alt tabaka üzerindeki TiO_2 ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri incelenmiş ve $200\text{ }^\circ\text{C}$, $300\text{ }^\circ\text{C}$, $400\text{ }^\circ\text{C}$, $500\text{ }^\circ\text{C}$ ve $600\text{ }^\circ\text{C}$ ara tavlama sıcaklığında $2\theta=25.4^\circ$ de ortaya çıkan (101) indisli TiO_2 ince filme ait karakteristik pik görülmüştür (Orendorz ve ark., 2006). Bu filmlerin polikristal, anatase fazda ve tetragonal yapıda oldukları tespit

edilmiştir. 700 °C ara tavlama sıcaklığındaki TiO₂ ince filmi X-ışını kırınım desenlerinde pikler incelendiğinde (101), (112) ve (200) indisli üç farklı yönelimde pike rastlanmıştır. Ara tavlama sıcaklığının artışı ile pik şiddetleri ve kristal boyutlarının (85 – 361 nm aralığında) da değiştiği görülmektedir. Bu durum, ısı işlem ile yapıda meydana gelen tane büyümesinin neden olduğu iç gerilmelerin artışından kaynaklanmaktadır (Vishwas ve ark., 2010; Saini ve ark., 2007; Tian ve ark., 2006; Orendorz ve ark., 2006; Katsumata ve ark., 2005; Wang ve ark., 2002; Mardare ve ark., 2000; Uhlmann ve Kreidl, 1984) .

Quartz alt tabaka üzerindeki 200 °C, 300 °C, 400 °C, 500 °C ve 600 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen TiO₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenlerinden henüz kristalleşmediği ve amorf yapıda oldukları görülmüştür. 700 °C ve üstünde uygulanan ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin yapısının kristalleştiği görülmüştür. 700 °C, 800 °C ve 900 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin $2\theta=25.4^\circ$ de ortaya çıkan (101) indisli pik TiO₂ ince filme ait karakteristik piktir ve bu filmlerin polikristal, anatase fazda ve tetragonal yapıda olduklarını göstermektedir. 1000 °C ve 1100 °C ara tavlama sıcaklığındaki TiO₂ ince filmleri X-ışını kırınım desenlerinde pikler incelendiğinde (110) indisli pik yine TiO₂ ince filme ait karakteristik piktir ve bu filmlerin de polikristal ve tetragonal yapıda olduklarını ancak anatase fazdan rutile faza dönüştükleri görülmektedir. Literatürde TiO₂ ince filmler üzerine yapılan diğer çalışmalarda, anatase – rutile faz dönüşümünün 600 – 1100 °C ara tavlama sıcaklıklarında olduğu görülmektedir (Vishwas ve ark., 2010; Mai ve ark, 2009; Kim ve ark., 2002; Negishi ve Takeuchi, 1999; Eastman, 1994). Bizim çalışmamızda ise faz dönüşümü 1000 °C’de olmuştur. Bu farklılık, TiO₂ ince filminin kristal yapı ve kristal boyutundaki farklılıktan olabilir. Ayrıca, kristal faz dönüşümü sol hazırlamak için kullanılan başlangıç maddesine ve katalizöre de bağlı olarak değişmektedir (Legrand-Buscema ve ark., 2002; Sberveglieri ve ark, 2000; Hoshimoto ve ark., 1994;). Kristal boyutlarının 37 ile 11 nm arasında değiştiği ve ara tavlama sıcaklığı arttıkça ince filmlerin kristal boyutlarının da attığı görülmektedir.

Silisyum alt tabaka üzerindeki 200 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen TiO₂ ince filmlerin X-ışını kırınım desenleri incelenmiş ve anatase fazda (101) yöneliminde ve tek kristal bir yapıya sahip olduğu görülmüştür. 300 °C ve 400 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin yine anatase fazda olduğu ama (101) piki dışında (004) ve (200) gibi

farklı yönelimlere sahip piklere de rastlandığından dolayı polikristal bir yapıya sahip olduğu görülmüştür. 500 °C, 600 °C ve 700 °C ara tavlama sıcaklığında elde edilen ince filmlerin ise anatase fazdan rutile faza dönüştüğü açıkça görülmektedir. Yani, silisyum alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin 500 °C ve üstündeki ara tavlama sıcaklıklarında faz değiştirdiği görülmektedir. Bu ince filmlerin polikristal, rutile fazda ve tetragonal yapıda oldukları görülmektedir. Kristal boyutlarının 12 ile 86 nm arasında değiştiği ve anatase fazdaki ince filmlerde, ara tavlama sıcaklığı arttıkça ince filmlerin kristal boyutlarının da arttığı, ancak rutile fazdaki ince filmlerin kristal boyutlarının azaldığı görülmektedir. Bu durum rutile fazda kristallerin iğneli yapıda olmasından kaynaklanmaktadır (Hu ve ark., 2003; Kholmanov ve ark., 2003; Legrand-Buscema ve ark., 2002; Gouma ve Mills, 2001).

Cam alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin AFM görüntülerinden ara tavlama sıcaklığı arttıkça tanecik boyutlarının arttığı görülmüştür. Bunun sebebi, taneciklerin gözenekli yapısından ve pürüzlülüğünün artmasından kaynaklanmaktadır (Suciu ve ark., 2009; Legrand-Buscema ve ark., 2002). Bilgisayar yardımı ile yapılan analizler neticesinde yapıların ortalama tanecik boyutlarının 382 ile 598 nm arasında değiştiği bulunmuştur. Ayrıca, ince filmlerin 3-boyutlu AFM görüntüleri bilgisayar programı ile analiz edildiğinde ise ortalama pürüzlülük parametrelerinin 0.488 ile 0.769 nm arasında değiştiği görülmüştür. Ortalama pürüzlülük parametrelerinin ara tavlama sıcaklığı arttıkça arttığı tespit edilmiştir.

Quartz alt tabaka üzerindeki TiO₂ ince filmlerin AFM görüntülerinden ara tavlama sıcaklığı arttıkça tanecik boyutlarının arttığı görülmüştür. Bilgisayar yardımı ile yapılan analizler neticesinde yapıların ortalama tanecik boyutlarının 39 ile 313 nm arasında değiştiği bulunmuştur. Literatürdeki diğer çalışmalar incelendiğinde quartz alt tabaka üzerinde büyütülen TiO₂ ince filmlerin ortalama tanecik boyutlarının en küçük 82 nm olduğu görülmüştür. Bu tezde ortalama tanecik boyutu 39 nm olan nano parçacıklı TiO₂ ince filmi üretilmiştir. Ayrıca, ince filmlerin 3-boyutlu AFM görüntüleri bilgisayar programı ile analiz edildiğinde ise ortalama pürüzlülük parametrelerinin 1.82 ile 5.20 nm arasında değiştiği görülmüştür. Ortalama pürüzlülük parametrelerinin ara tavlama sıcaklığı arttıkça arttığı tespit edilmiştir.

Silisyum alt tabaka üzerindeki TiO_2 ince filmlerin AFM görüntülerinden anatase fazda tavlama sıcaklığı arttıkça tane boyutlarının da büyüdüğü fakat rutile fazda iğne yapıda olduğundan dolayı azaldığı görülmüştür. Bu sonuç TiO_2 ile ilgili benzer çalışmalarda yayınlarında TiO_2 yapısının anatase fazdan rutile faza doğru kaydığı belirtilmektedir (Kumar ve ark., 2010; Yang ve ark., 2006; Hu ve ark., 2003; Kholmanov ve ark., 2003;). Bilgisayar yardımı ile yapılan analizler neticesinde yapıların ortalama tanecik boyutlarının 21 ile 239 nm arasında değiştiği bulunmuştur. Literatürdeki diğer çalışmalar incelendiğinde silisyum alt tabaka üzerinde büyütülen TiO_2 ince filmlerin ortalama tanecik boyutlarının en küçük 37 nm olduğu tespit edilmiş ve bu tezde ortalama tanecik boyutu 21 nm olan nano parçacıklı TiO_2 ince filmi üretilmesi başarılmıştır. Ayrıca, ince filmlerin 3-boyutlu AFM görüntüleri bilgisayar programı ile analiz edildiğinde ise ortalama pürüzlülük parametrelerinin 1.001 ile 2.424 nm arasında değiştiği görülmüştür.

6. KAYNAKLAR

- Aarik, J., Aidla, A., Kiisler, A. -A., Uustare, T., Sammelseg, V., 1999. Influence of Substrate Temperature on Atomic Layer Growth and Properties of HfO₂ Thin Films, *Thin Solid Films*, 340, 110 – 116.
- Ahn, Y.U., Kim, E. J., Kim, H. T. and Hahn, S. H., 2003. Variation of Structural and Optical Properties of Sol-Gel TiO₂ Thin Films with Catalyst Concentration and Calcination Temperature, *Materials Letters*, 57, 4660 – 4666.
- Alain, C. P., 1998. *Introduction to Sol-Gel Processing*, Norwell, Massachusetts:Kluwer Academic Publishers.
- Albertin, K.F., Valle, M.A. and Pereyra, I., 2007. Study of MOS Capacitors with TiO₂ and SiO₂/TiO₂ Gate Dielectric, *Journal Integrated Circuits and Systems*, 2(2), 89 – 93.
- Bach, H. and Krause, D., 1997. *Thin Films on Glass*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.
- Bacon, G. E. 1966. *X-Ray and Neutron Diffraction*, Pergamon, New York.
- Barrett,C.S., 1984. *Advances in X-Ray Analysis*, New York, London: Plenum Press.
- Binnig, G., Quate, C. F., Gerber, Ch.,. 1986. Atomic Force Microscope, *Phys. Rev. Lett.*, 56, 930 – 933.
- Bockmeyer, M., Herbig, B., Löbmann, P., 2009. Microstructure of Sol-Gel Derived TiO₂ Thin Films Characterized by Atmospheric Ellipsometric Porosimetry, *Thin Solid Films*, 517, 1596 – 1600.
- Brinker, C.J. and Scherer, G.W., 1990. *Sol-Gel Science: The Physics and Chemistry of Sol-Gel Processing*, Academic Press, San Diego, p.2656.
- Burns, A., Hayes, G. Lia, W., Hirvonen, J., Demareed, J. D., Shah, S. I., 2004. Neodymium Ion Dopant Effects on the Phase Transformation in Sol-Gel Derived Titania Nanostructures, *Materials Science and Engineering B*, 111, 150 – 155.
- Cho, M. H., Lee, G. H., 2008. Growth of High Quality Rutile TiO₂ Thin Film using ZnO Buffer Layer on Si (100) Sustrate, *Thin Solid Films*, 516, 5877 – 5880.
- Cohen, J. B. 1966. *Diffraction Methods in Materials Science*, Macmillan, New York.
- Cullity, B.D., 1960. *Elements of X-Ray Diffraction*, Addison-Wesley.

- Daude, N., Gout, C., Jouanin, C., 1977. Electronic Band Structure of Titanium Dioxide, *Physical Review B*, 15(6), 3229 – 3235.
- Di Claudio, D., Phani, A. R., Santucci, S., 2007. Enhanced Optical Properties of Sol-Gel Derived TiO₂ Films using Microwave Irradiation, *Optical Materials*, 30, 279 – 284.
- Diebold, U., 2003. The Surface Science of Titanium Dioxide, *Surface Science Reports*, 48, 53 – 229.
- Djaoued, Y., Ozga, K., Wojciechowski, A., Reshak, A. H., Robichaud, J., Kityk, I. V., 2010. Photoinduced Effects in TiO₂ Nanocrystalline Films with Different Morphology, *Journal of Alloys and Compounds*, 508, 599 – 605.
- Eastman, J. A., 1994; Microstructural Development in Nanophase TiO₂ during Annealing, *Journal of Applied Physics*, 75, 770 – 780.
- Fahmi, A., Minot, C., Silvi, B. Causa, M., 1993. Theoretical Analysis of the Structures of Titanium Dioxide Crystals, *Physical Review B*, 47, 11717 – 11724.
- Frank, S.N. and Bard, A.J., 1977. Heterogeneous Photocatalytic Oxidation of Cyanide Ion in Aqueous Solution at TiO₂ Powder. *Journal of American Chemical Society*, 99(1), 303 – 304.
- Fujishima, A. And Honda, K., 1972. Electrochemical Photolysis of Water at a Semiconductor Electrode, *Nature*, 238, 37 – 38..
- Fujishima, A., Rao, T.N. ve Tryk, D.A., 2000. Titanium Dioxide Photocatalysis, *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews*, 1, 1 – 21..
- Galatsis, K., Li, Y. X., Wlodarski, W., Comini, E., Sberveglieri, G., Cantalini, C., Santucci, S., Passacantando, M., 2002. Comparison of Single and Binary Oxide MoO₃ Sol-Gel Gas Sensors, 83, 276 – 280.
- George, J., 1992. *Preparation of Thin Films*, Marcel Dekker, Inc., New York.
- Ginley, D.S. and Bright, C., 2000. Transparent conducting oxides, *MRS Bulletin*, 25, 15 – 18.
- Goldstain, A., 1997. *Handbook of Nanophase Materials*, Marcel Dekker Inc, New York.
- Gonzalez, A.E.J. and Santiago, S.G., 2007. Structural and Optoelectronic Characterization of TiO₂ Films Prepared Using the Sol-Gel Technique. *Semiconductor Science and Technology*, 22, 709 – 716.
- Gouma, P. I. and Mills, M. J., 2001. Anatase to Rutile Transformation in Titania Powders, *Journal of the American Ceramics Society*, 84(3), 619 – 622.

- Ha, H.K., Yoshimoto, M., Koinuma, H., Moon, B. K. And Ishiwara, H. 1996. Open Air Plasma Chemical Vapor Deposition of Highly Dielectric Amorphous TiO₂ Films, *Applied Physics Letters*, 68, 2965 – 2967.
- Hashimoto, T., Yoko, T. and Saka, S., 1994. Sol–Gel Preparation and Third-Order Nonlinear Optical Properties of TiO₂ Thin Films, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 67, 653 – 660.
- Hasan, M. M., Haseeb, A. S. M. A., Saidur, R., Masjuki, H. H., Hamdi, M., 2010. Influence of Substrate and Annealing Temperatures on Optical Properties of RF-Sputtered TiO₂ Thin Films, *Optical Materials*, 32, 690 – 695.
- Heller, A., 1995. Chemistry and Applications of Photocatalytic Oxidation of Thin Organic Films, *Accounts of Chemical Research*, 28, 503 – 508.
- Hu, Y., Tsai, H. L. and Huang, C. L., 2003. Phase Transformation of Precipitated TiO₂ Nanoparticles. *Materials Science and Engineering A*, 344, 209 – 214.
- Katsumata, K., Nakajima, A., Yoshikawa, H., Shiota, T., Yoshida, N., Watanabe, T., Kameshima, Y. and Okada, K., 2005. Effect of Microstructure on Photoinduced Hydrophilicity of Transparent Anatase Thin Films, *Surface Science*, 579, 123–130.
- Kholmanov, I. N., Barborini, E., Vinati, S., Piseri, P., Podest, A., Ducati, C., Lenardi, C. and Milani, P., 2003. The Influence of the Precursor Clusters on the Structural and Morphological Evolution of Nanostructured TiO₂ under Thermal Annealing, *Nanotechnology*, 14, 1168–1173.
- Kim, D. J., Hahn, S. H., Oh, S. H., Kim, E. J., 2002. Influence of Calcination Temperature on Structural and Optical Properties of TiO₂ Thin Films Prepared by Sol-Gel Dip Coating, *Materials Letters*, 57, 355 – 360.
- Kim, J. H., Fujita, S., Shiratori, S., 2006. Fabrication and Characterization of TiO₂ Thin Film Prepared by a layer-by-layer Self-assembly Method, *Thin Solid Films*, 499, 83 – 89.
- Kim, N. J., La, Y. H., Im, S. H., Ryu, B. K., 2010. Optical and Structural Properties of Fe-TiO₂ Thin Films Prepared by Sol-Gel Dip Coating, *Thin Solid Films*, 518, e156 – e160.
- Klein, L.C., 1988. *Sol-Gel Technology for Thin Films, Fibers, Preforms, Electronics, and Specialty Shapes*, p.55, Noyes Publications.
- Kumar, M., Kumar, M., Kumar, D., 2010. The Deposition of Nanocrystalline TiO₂ Thin Film on Silicon using Sol-Gel Technique and Its Characterization, *Microelectronic Engineering*, 87, 447 – 450.

- Landau, L., Levich. B., 1942. Dragging of a Liquid by a Moving Plate. *Acta Physicochimica (USSR)*, 17, 42 – 54.
- Lee, H.Y., Park, Y.H. and Ko, K.H., 2000. Correlation between Surface Morphology and Hydrophilic/Hydrophobic Conversion of MOCVD-TiO₂ Films, *Langmuir*, 16, 7289 – 7293.
- Legrand-Buscema, C., Malibert, C. and Bach, S., 2002. Elaboration and Characterization of Thin Films of TiO₂ Prepared by Sol–Gel Process, *Thin Solid Films*, 418, 79 – 84.
- Liang, W.Y., 1970. Excitons. *Physical Education*, 5, 226 – 228.
- Lim S.D., Park, H.C., Hwang, I.K., Kim, B.Y., 2008. Combined Effects of Optical and Acoustic Birefringence on Acousto-optic Mode Coupling in Photonic Crystal Fiber. *Optics Express*, 16(9), 6125 – 6133.
- Lin, S. S., Hung, Y. H., Chen, S. C., 2009. Optical Properties of TiO₂ Thin Films Deposited on Polycarbonate by Ion Beam Assisted Evaporation, *Thin Solid Films*, 517, 4621 – 4625.
- Linsbod, R., Ritter, E., Leitner, K., 2003. Evaluation of the Oxidation of TiO₂ Films during Reactive Evaporation of Ti₃O₅ and during Exposure of the Films to the Atmosphere, *Applied Optics*, 42 (22), 4580 – 4583. .
- Linsebigler, A.L., Lu, G., Yates, J.T., 1995. Photocatalysis in TiO₂ Surfaces: Principles, Mechanism, and Selected Results, *Chemical Reviews*, 95(3), 735 – 758.
- Liveri, V. T., 2006. *Controlled Synthesis of Nanoparticles in Microheterogeneous Systems*, Springer Science, Business Media, Inc., New York.
- Mai, L., Huang, C., Wang, D., Zhang, Z., Wang, Y., 2009. Effect of C Doping on the Structural and Optical Properties of Sol-Gel TiO₂ Thin Films, *Applied Surface Science*, 255, 9285 – 9289.
- Mardare, D., Rusu, G. I., 2002. The Influence of Heat Treatment on the Optical Properties of Titanium Oxide Thin Films, *Materials Letters*, 56, 210 – 214.
- Mardare, D., Tasca, M., Delibas, M., Rusu, G. I., 2000. On the Structural Properties and Optical Transmittance of TiO₂ R.F. Sputtered Thin Films, *Applied Surface Science*, 156, 200 – 206.
- Matthews, R.W., 1986. Photocatalytic Oxidation of Chlorobenzene in Aqueous Suspensions of Titanium Dioxide, *Journal of Catalysis*, 97(2), 565 – 568.
- Matthews, R.W., 1987. Photooxidation of Organic Impurities in Water Using Thin Films of Titanium Dioxide, *Journal of Physical Chemistry*, 91(12), 3328 – 3333.

- Matthews, R.W., 1988. Kinetics of Photocatalytic Oxidation of Organic Solutes over Titanium Dioxide, *Journal of Catalysis*, 111(2), 264 – 272.
- Mathews, N. R., Morales, E. R., Cortes-Jacome, M. A. and Antonia, J. A. T., 2009. TiO₂ Thin Films – Influence of Annealing Temperature on Structural, Optical and Photocatalytic Properties, *Solar Energy*, 83(9), 1499 – 1508.
- Mattox, D.M., 1998. Handbook of Physical Vapor Deposition (PVD) Processing, Noyes Publication, New Jersey.
- Miller, J. C., Serrato, R., Represas-Cardenas, J. M. and Kundahl, G., 2004. The Handbook of Nanotechnology, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey.
- Negeshi, N. and Takeuchi, K., 1999. Structural Changes of Transparent TiO₂ Thin Films with Heat Treatment. *Materials Letters*, 38, 150 – 153.
- Nuffield, E.W., 1966. X-Ray Diffraction Methods, Wiley.
- Oh, Y.C., Li, X., Cubbage, J.W., Jenks, W.S., 2004. Mechanisms of Catalyst Action in the TiO₂-mediated Photocatalytic Degradation and *cis-trans* Isomerization of Maleic and Fumaric Acid, *Applied Catalysis B: Environmental*, 54, 105 – 114.
- Ohya T., Nakayama A., Shibata Y., Ban T., Ohya Y., Takahashi Y., 2003. Preparation and Characterization of Titania Thin Films from Aqueous Solutions, *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 26, 799 – 802.
- Ollis D.F. and Al-Ekabi, H., 1993. Photocatalytic Purification and Treatment of Water and Air, Elsevier, Amsterdam.
- Orendorz, A., Brodyanski, A., Lösch, L., Bai, L. H., Chen, Z. H., Le, Y. K., Ziegler, Z. and Gnaser, H., 2006. Structural Transformations in Nanocrystalline Anatase TiO₂ Films upon Annealing in Air, *Surface Science*, 600, 4375 – 4351.
- Pankove I. J., 1971. Optical Processes in Semiconductors, Prentice-Hall, Inc. New Jersey.
- Phadke, S., Sorge, J. D., Hachtmann, S., Birnie, D. P., 2010. Broad Band Optical Characterization of Sol-Gel TiO₂ Thin Film Microstructure Evolution with Temperature, *Thin Solid Films*, 518, 5467 – 5470.
- Que, W., Uddin, A., Hu, X., 2006. Thin Film TiO₂ Electrodes Derived by Sol-Gel Process for Photovoltaic Applications, *Journal of Power Sources*, 159, 353 – 356.
- Rath, C., Mohanty, P., Pandey, A. C. and Mishra, N. C., 2009. Oxygen Vacancy Induced Structural Phase Transformation in TiO₂ Nanoparticles, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 42, 205101 – 205107.

- Rantala, J. and Kärkkäinen, A. H. O., 2003. Optical Properties of Spin-on Deposited Low Temperature Titanium Oxide Thin Films, *Optics Express*, 11 (12), 1406 – 1410.
- Rao, C. N. R., Müller, A., Cheetham, A. K., 2005. *The Chemistry of Nanomaterials*, vol.1, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA, Weinheim.
- Rao, K. N., 2003. Studies on Thin Film Materials on Acrylics for Optical Applications, *Bulletin of Materials Science*, 26, 239 – 245.
- Rao, K. N., Murthy, M. A. and Mohan, S., 1989. Optical Properties of Electron-Beam-Evaporated TiO₂ Films, *Thin Solid Films*, 176(2), 181 – 186.
- Sakai, N., Wang, R., Fujishima, A., Watanabe, T., Hashimoto, K., 1998. Effect of Ultrasonic Treatment on Highly Hydrophilic TiO₂ Surfaces, *Langmuir*, 14, 5918 – 5920.
- Saini, K. K., Sharma, S. D., Kar, C. M., Singh, D., Sharma, C. P., 2007. Structural and Optical Properties of TiO₂ Thin Films Derived by Sol-Gel Dip Coating Process, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 353, 2469 – 2473.
- Sberveglieri, G., Comini, E., Faglia, G., Atashbar, M.Z., Wlodarski, W., 2000. Titanium dioxide Thin Films Prepared for Alcohol Microsensor Applications, *Sensors and Actuators B*, 66, 139 – 141.
- Sharma, S.K., Vishwas, M., Rao, K. N., Mohan, S., Reddy, D. S., Gowda, K. V. A., 2009. Structural and Optical Investigations of TiO₂ Films Deposited on Transparent Substrates by Sol-Gel Technique, *Journal of Alloys and Compounds*, 471, 244 – 247.
- Sheveglien, G., 1992. *Gas Sensors*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
- Shinguu, H., Bhuiyan, M. M. H., Ikegami, T., Ebihara, K., 2006. Preparation of TiO₂/WO₃ Multilayer Thin Film by PLD Method and Its Catalytic Response to Visible Light, *Thin Solid Films*, 506-507, 111 – 114.
- Sreemany, M., Sen, S., 2007. Influence of Calcination Ambient and Film Thickness on the Optical and Structural Properties of Sol-Gel TiO₂ Thin Films, *Materials Research Bulletin*, 42 (1), 177 – 189
- Suciu, R. C., Indrea, E., Silipas, T. D., Dreve, S., Rosu, M. C., Popescu, V., Popescu, G. And Nascu, H. I., 2009. TiO₂ Thin Films Prepared by Sol-Gel Method, *Journal of Physics:Conference Series*, 182, 012080 – 012084.
- Swanepoel, R., 1983. Determination of the Thickness and Optical Constants of Amorphous Silicon. *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, 16, 1214 – 1222.

- Tang, H., Berger, H., Schmid, P. E., Levy, F., 1993. Photoluminescence in TiO₂ Anatase Single Crystals, *Solid State Communications*, 87 847 – 850.
- Tanguay, J.F., Suib, S.L. and Coughlin, R.W., 1989. Dichloromethane Photodegradation Using Titanium Catalysts, *Journal of Catalysis*, 117(2), 335 – 347.
- Taraba, K., Haraba, K. ve Murata, S., 1986. Photocatalytic Deposition of Metal Ions onto TiO₂ Powder, *Solar Energy*, 36(2), 159 – 161.
- Tian, G., Dong, L., Wei, C., Huang, J., He, H., Shao, J., 2006. Investigation on Microstructure and Optical Properties of Titanium Dioxide Coatings Annealed at Various Temperature, *Optical Materials*, 28, 1058 – 1063.
- Uhlmann D. R. and Kreidl N. J., 1984. *Glass: Science and Technology*, Academic Press Inc., New York.
- Vishwas, M., Sharma, S. K., Rao, K. N., Mohan, S., Gowda, K.V.A., Chakradhar, R.P.S., 2010. Influence of Surfactant and Annealing Temperature on Optical Properties of Sol–Gel Derived Nano-Crystalline TiO₂ Thin Films, *Spectrochimica Acta Part A*, 75, 1073 – 1077.
- Vishwas, M., Sharma, S. K., Rao, K. N., Mohan, S., Gowda, K.V.A., Chakradhar, R.P.S., 2009. Optical, dielectric and morphological studies of sol–gel derived nanocrystalline TiO₂ films, *Spectrochimica Acta Part A*, 74, 839 – 842.
- Vossen, J. V. and Kerner, W., 1991. *Thin Film Processes II*, Academic Press, Boston.
- Wang, R., Hashimoto, K., Fujishima, A., Chikuni, M., Kojima, E., Kitamura, A., Shimohigoshi, M. and Watanabe, T., 1997. Light-Induced Amphiphilic Surfaces, *Nature*, 388, 431 – 432.
- Wang, R., Sakai, N., Fujishima, A., Watanabe, T. Ve Hashimoto, K., 1999. Studies of Surface Wettability Conversion on TiO₂ Single-Crystal Surfaces, *Journal of Physical Chemistry B*, 103, 2188 – 2194.
- Wang, Z., Helmersson, U., Käll, P. O., 2002. Optical Properties of Anatase TiO₂ Thin Films Prepared by Aqueous Sol–Gel Process at Low Temperature, *Thin Solid Films*, 405, 50 – 54.
- Wang, Z.L. and Kang, Z.C., 1998. *Functional and Smart Materials-Structural Evolution and Structure Analysis*, Plenum Press, New York.
- Wang, Z.L., 2003. Nanobelts, Nanowires, and Nanodiskettes of Semiconducting Oxides from Materials to Nanodevices, *Advanced Materials*, 15(5), 432 – 436.
- Watanabe, T., Nakajima, A., Wang, R., Minabe, M., Koizumi, S., Fujishima, A. and Hashimoto, K., 1999. Photocatalytic Activity and Photoinduced Hydrophilicity of Titanium Dioxide Coated Glass, *Thin Solid Films*, 351(1-2), 260 – 263.

- Yang, C., Fan, H., Xi, Y., Chen, J., Li, Z., 2008. Effects of Depositing Temperatures on Structure and Optical Properties of TiO₂ Film Deposited by Ion Beam Assisted Electron Beam Evaporation, *Applied Surface Science*, 254 (9), 2685 – 2689.
- Yang, M., Marino, J., Monson, A. and Wolden, C. A., 2006. An Investigation of Annealing on the Dielectric Performance of TiO₂ Thin Films. *Semiconductor Science and Technology*, 21, 1573 – 1579.
- Yarmand, B. and Sadrnezhad, S. K., 2010. Influence of Annealing Temperature on Structural and Optical Properties of Mesoporous TiO₂ Thin Films Prepared by Sol-Gel Templating Technique, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 12, 1490 – 1497.
- Zhao, J., Wang, X., Chen, R., Li, L., 2005. Fabrication of Titanium Oxide Nanotube Arrays by Anodic Oxidation, 134(10), 705 – 710.

ÖZGEÇMİŞ

1. GENEL

DÜZENLEME TARİHİ	: 10 – 12 – 2010
ADI SOYADI	: Savaş SÖNMEZOĞLU
YAZIŞMA ADRESİ	: Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fizik Bölümü, 60250, Tokat/TÜRKİYE
DOĞUM TARİHİ ve YERİ	: 03 – 03 – 1980 / Göksun-KAHRAMANMARAŞ
TEL : 0 (356) 252 16 16 (dahili: 3344)	GSM : 0 (543) 746 56 16
E-POSTA : svssonmezoglu@gop.edu.tr	FAKS : 0 (356) 252 15 85

2. EĞİTİM

ÖĞRENİM DÖNEMİ	DERECE (*)	ÜNİVERSİTE	ÖĞRENİM ALANI
2006–2010	Doktora	Gaziosmanpaşa Üniversitesi	Fizik
2003–2006	Yüksek Lisans	Gaziosmanpaşa Üniversitesi	Fizik
1998–2003	Lisans	Karadeniz Teknik Üniversitesi	Fizik Öğretmenliği

(*) Diploma Türü (Lisans, Y.Lisans, vb.)

Yüksek Lisans Tez Başlığı ve Tez Danışmanı: “ Bazı Deforme Hafif Çekirdeklerin (A ~ 60) Enerji Seviye Yoğunluk Parametrelerinin Belirlenmesinde Kollektif Band Analizi.”, Doç. Dr. Şeref OKUDUCU

Doktora Tez Başlığı ve Tez Danışmanları: “ Nano Tanecikli TiO₂ İnce Filmlerinin Yapısal, Optiksel ve Morfolojik Özelliklerinin İncelenmesi.”, Doç. Dr. Güven ÇANKAYA ve Prof. Dr. Necmi SERİN

3. AKADEMİK ve MESLEKİ DENEYİM

GÖREV DÖNEMİ	ÜNVAN	ÜNİVERSİTE	BÖLÜM
2004 – 2010	Araş. Gör.	Gaziosmanpaşa Üniversitesi	Fizik
2010 -	Dr.	Gaziosmanpaşa Üniversitesi	Fizik

4. BİLİMSEL YAYINLAR ve FAALİYETLER

A. Makaleler

A.1. SCI, SCI-Expanded, SSCI ve AHCI tarafından taranan dergilerde yayımlanan tam makale

1. S. Sönmezoğlu, Ş. Okuducu, E. Eser, “*Investigation of the Symmetry Properties and Level Density Parameters of Some Superdeformed Light Even-Even Nuclei.*” **Annals of Nuclear Energy**, **37**, 1735-1741 (2010)
2. N. Şanlı Aşık, R. Taş, S. Sönmezoğlu, M. Can and G. Çankaya, “*Monomer effect on stability, electrical conductivity and combination of aniline-indole copolymer synthesized with H_5IO_6* ” **Journal of Non-Crystalline Solids**, **356**, 1848-1853 (2010)
3. S. Sönmezoğlu, Ö. Ateş Sönmezoğlu, G. Çankaya, A. Yıldırım and N. Serin, “*Electrical characteristics of DNA-based metal-insulator-semiconductor structures.*” **Journal of Applied Physics**, **107**, 124518 (2010)
4. S. Sönmezoğlu, S. Şenkul, R. Taş, G. Çankaya and M. Can, “*Electrical characteristics of an organic thin copolymer/p-Si Schottky barrier diode.*” **Thin Solid Films**, **518**, 4375–4379 (2010).
5. S. Sönmezoğlu, S. Şenkul, R. Taş, G. Çankaya and M. Can, “*Electrical and interface state density properties of polyaniline--poly-3-methyl-thiophene blend/p-Si Schottky barrier diode.*” **Solid State Sciences**, **12**, 706–711 (2010).
6. S. Sönmezoğlu, F. Bayansal and G. Çankaya, “*Hydrostatic Pressure Dependence of Interface State Density of Cd/n-type GaAs Schottky Barrier Diodes.*” **Physica B**, **405**, 287 – 290 (2010).
7. S. Sönmezoğlu,” *Investigation of the Entropy and Specific Heat Capacity of GaN Using Incomplete Gamma Functions.*” **International Journal of Modern Physics B**, **22 (30)**, 5349 - 5355 (2008).

8. Ş. Okuducu, S.Sönmezoğlu and E.Eser, “*Calculation of Nuclear Level Density Parameters of Some Deformed Light Nuclei Using Collective Excitation Modes*” **Physical Review C**, **74**, 034317 (2006).
9. Ş. Okuducu, E.Eser and S.Sönmezoğlu, “*Analysis of the Nuclear Level Density Parameters of Some Large Deformed Odd-A and Odd-Odd Nuclei in the Region of Rare-Earth Elements*”, **Nuclear Science and Engineering**, **154(3)**, 374-381 (2006).

A.2. SCI, SCI-Expanded, SSCI ve AHCI dışındaki uluslararası indeksler tarafından taranan dergilerde yayımlanan tam makale

1. S.Sönmezoğlu, Ş. Okuducu and E.Eser, “*Investigation of Symmetry Properties in Deformed Light Even-Even Nuclei*” **International Journal of Natural and Engineering Sciences**, **2 (2)**, 01-04 (2008).
2. S.Sönmezoğlu, Ş. Okuducu and E.Eser, “*Symmetry Properties of Ground State Rotational Band for Some Even-Even Superdeformed Light Nuclei.*” **Journal of Physics Students**, **1**, 1 L1 (2007).

A.3. Ulusal hakemli dergilerde yayınlanmış tam makale (Türkçe ve Yabancı dilde)

1. S.Sönmezoğlu, E.Eser ve Ş. Okuducu, “*On the Level Density Parameters of Some Superdeformed Light Nuclei in the Mass Region of $40 \leq A \leq 70$* ”, **Anadolu Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Dergisi**, **8(1)**, 241–246 (2007).
2. E.Eser, Ş. Okuducu ve S.Sönmezoğlu, “*Deforme Ağır Hf-İzotopik Çekirdeklerin Kollektif Band Analizi*”, **Dumlupınar Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi**, **11**, 49–56 (2006).
3. Ş. Okuducu, E.Eser, S.Sönmezoğlu. “*Deforme Yb-İzotopik Nadir Toprak Çekirdekleri İçin Enerji Seviye Yoğunluk Parametrelerinin İncelenmesi*” **Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi**, **10(2)**, 149–152 (2006).

4. **S.Sönmezoğlu**, E.Eser ve Ş. Okuducu, “*Deforme Hafif Se-İzotopik Çekirdeklerin Enerji Spektrumlarından Yararlanarak Yoğunluk Parametrelerinin Belirlenmesi*”, **Sakarya Üniversitesi Fen Edebiyat Dergisi**, 7 (2), 1–7 (2005).

B. Bildiriler

B.1 Uluslararası kongre, sempozyum, panel, çalıştay gibi bilimsel, sanatsal toplantılarda sözlü olarak sunulan ve tam metin olarak yayımlanan bildiri

1. **S. Sönmezoğlu**, G. Çankaya, N. Serin and T. Serin “*Optical Constants of Titanium oxide thin films derived from Sol-Gel Process*” **Solar Future 2010**, 11-11 February 2010, Istanbul-Turkey.

B.2 Uluslararası kongre, sempozyum, panel, çalıştay gibi bilimsel, sanatsal toplantılarda sözlü olarak sunulan ve özet metin olarak yayımlanan bildiri

1. **S. Sönmezoğlu**, G. Çankaya and N. Uçar, “*On the Native Oxide Thickness Estimation from Current-Voltage Characteristics of Cd/n-type GaAs Schottky Barrier Diodes under Hydrostatic Pressure*” **Turkish Physical Society 26. International Physics Congress**, 24-27 September 2009, Bodrum-Turkey. (Sözlü)
2. **S.Sönmezoğlu**, S. Fiat, S.Saygi, G. Çankaya, “*Analysis Dependence of Hydrostatic Pressure of Basic Electrical Parameters on Cd/n-GaAs/AuGe Schottky diodes.*” **Turkish Physical Society 24. International Physics Congress**, 28-31 August 2007, Malatya-Turkey. (Sözlü)

B.3 Uluslararası kongre, sempozyum, panel, çalıştay gibi bilimsel, sanatsal toplantılarda poster olarak sunulan ve tam metin olarak yayımlanan bildiri

1. Derya Bahar, Göknül Babür, Sinan Diken, Tuğba Ayşe Termeli, Banu Erdoğan, **Savaş Sönmezoğlu** ve Güven Çankaya, “*Influence of Annealing Conditions on Optical Properties of ZnO Thin Films*”, **6th Nanoscience and Nanotechnology Conference**, 15-18 Haziran 2010, İzmir-Türkiye. (Poster)

2. Banu Erdoğan, Derya Bahar, Göknil Babür, Sinan Diken, Ayşe Tuğba Termeli, **Savaş Sönmezoğlu** ve Güven Çankaya, “*The Effect of Film Thickness on the Optical Properties of ZnO Thin Films*”, **6th Nanoscience and Nanotechnology Conference**, 15-18 Haziran 2010, İzmir-Türkiye. (Poster)
3. Göknil Babür, Sinan Diken, Tuğba Ayşe Termeli, Banu Erdoğan, Derya Bahar, **Savaş Sönmezoğlu** ve Güven Çankaya , “*The Effect of Different Spinning Times on Optical Properties of ZnO Thin Films*”, **6th Nanoscience and Nanotechnology Conference**, 15-18 Haziran 2010, İzmir-Türkiye. (Poster)
4. Sinan Diken, Tuğba Ayşe Termeli, Banu Erdoğan, Derya Bahar, Göknil Babür, **Savaş Sönmezoğlu** ve Güven Çankaya, “*Optical Properties of ZnO Thin Films Derived by Sol-Gel Process at Different Spinning Speeds*“, **6th Nanoscience and Nanotechnology Conference**, 15-18 Haziran 2010, İzmir-Türkiye. (Poster)
5. Tuğba Ayşe Termeli, Banu Erdoğan, Derya Bahar, Göknil Babür, Sinan Diken, **Savaş Sönmezoğlu** ve Güven Çankaya, “*The Coating Layers Dependence of Optical Properties of ZnO Thin Films*”, **6th Nanoscience and Nanotechnology Conference**, 15-18 Haziran 2010, İzmir-Türkiye. (Poster)
6. **S. Sönmezoğlu**, A. Arslan, G. Çankaya, N. Serin and T. Serin “*The Effect of Film Thickness on the Optical Properties of TiO₂/SnO₂ Composite Thin Films*” **NANOMAT 2009: International Conference on Nanomaterials and Nanosystems**, 10-13 August 2009, ITU Ayazaga Campus, Istanbul-Turkey. (Poster)
7. **S. Sönmezoğlu**, G. Çankaya, N. Serin and T. Serin “*Optical Properties of TiO₂ Thin Films Deposited by Sol-Gel Process*” **NANOMAT 2009: International Conference on Nanomaterials and Nanosystems**, 10-13 August 2009, ITU Ayazaga Campus, Istanbul-Turkey. (Poster)

B.4. Uluslararası kongre, sempozyum, panel, çalıştay gibi bilimsel, sanatsal toplantılarda poster olarak sunulan ve özet metin olarak yayımlanan bildiri

1. **S. Sönmezoğlu**, G. Çankaya ve N. Serin, “*Effect of Annealing on the Structural, Morphological and Optical Properties of Nanostructured TiO₂ Thin Films*”, **SolarTR-1**, 29-30 Nisan 2010, ODTÜ, Ankara-Türkiye. (Poster)
2. **S. Sönmezoğlu**, S. Şenkul, R. Taş, G. Çankaya and M. Can “*Electrical and Interface State Density Properties of Aniline-Thiophene Blend/p-Si/Al Schottky Barrier Diode.*” **7th BPU General Conference**, 9-13 September 2009, Alexandroupolis, Greece. (Poster)
3. **S. Sönmezoğlu**, S. Şenkul, R. Taş, G. Çankaya and M.Can “*Fabrication and Electrical Properties of Aniline-Thiophene Copolymer/p-Si/Al Schottky Barrier Diode.*” **7th BPU General Conference**, 9-13 September 2009, Alexandroupolis, Greece. (Poster)
3. **S. Sönmezoğlu**, N. Şanlı Aşık, R. Taş, G. Çankaya and M. Can, “*AC Conduction in Conducting Indole-Aniline Copolymer.*” **Turkish Physical Society 26. International Physics Congress**, 24-27 September 2009, Bodrum-Turkey. (Poster)
4. **S. Sönmezoğlu**, S. Şenkul, R. Taş, G. Çankaya and M.Can “*AC Conductivity Behaviour of (Aniline-Tiophene) Copolymer*” **Turkish Physical Society 26. International Physics Congress**, 24-27 September 2009, Bodrum-Turkey. (Poster)
5. N. Şanlı Aşık, R. Taş, **S. Sönmezoğlu**, M. Can and G. Çankaya, “*Synthesis of aniline-indole copolymer with redox reaction.*” **8. International Electrochemistry Meeting in Turkey**, 08-11 October 2009, Antalya-Turkey. (Poster)
6. **S.Sönmezoğlu**, “*Capacitance-Voltage Characteristics and Excess Capacitance in Cd/n-type GaAs Schottky Barrier Diodes under Hydrostatic Pressure.*” **NANOMAT 2008: Workshop on Advanced Materials and Devices for Photovoltaic Applications**, April 24-25, 2008, METU, Ankara-Turkey (Poster)

7. **S.Sönmezoğlu**, F. Bayansal, G. Çankaya, “*Determination of the hydrostatic pressure dependence of the electrical parameters of Cd/n-GaAs Schottky-barrier diodes.*” **NANOMAT 2008: Workshop on Advanced Materials and Devices for Photovoltaic Applications**, April 24-25, 2008, METU, Ankara-Turkey (Poster)
8. **S.Sönmezoğlu**, S. Fiat, S.Saygi, G. Çankaya, “*The Determination of the Interface State Density of Cd/n-GaAs/AuGe Schottky diode.*” **Turkish Physical Society 24. International Physics Congress**, 28-31 August 2007, Malatya-Turkey. (Poster)
9. S. Fiat, **S.Sönmezoğlu**, E. Eser, S.Saygi, G. Çankaya, “*C-V Characteristics and Interface State Density of Cd/n-GaAs Schottky Diodes under Hydrostatic Pressure.*” **Turkish Physical Society 24. International Physics Congress**, 28-31 August 2007, Malatya-Turkey. (Poster)
10. E.Eser, Ş. Okuducu and **S.Sönmezoğlu**, “*Investigation of the Level Densities of Some A=55 Isobars Nuclei.*” **Turkish Physical Society 24. International Physics Congress**, 28-31 August 2007, Malatya-Turkey. (Poster)
11. **S.Sönmezoğlu**, “*Evaluated the Heat Capacity of ³He Thin Films in the Low Temperature*” **III. International Physics Congress-Symposium III: Confined Systems, Nanoparticles, Nanostructured and Disordered Materials**, 28-30 October 2007, Hermosillo-Sonora-Mexico. (Poster)
12. **S.Sönmezoğlu**, Ş. Okuducu, E.Eser, “*On the Determination of Symmetry Features of Spherical Superheavy Nuclei from Experimental Data*” **6-th International Conference Nuclear and Radiation Physics**, 4-7 June 2007, Almaty-Kazakhstan. (Poster)
13. **S.Sönmezoğlu**, Ş. Okuducu, E.Eser, “*Symmetry Properties of Energy Bands for Some Deformed Light Nuclei*” **In-situ Nuclear Metrology as a tool of Radioecology**, 6-8 September 2006, Kuşadası-Turkey. (Poster)

14. **S.Sönmezoğlu**, Ş. Okuducu, E.Eser, “*Symmetry Properties of Energy Bands for Some Even-Even Superdeformed Light Nuclei*” **6th International Conference of the Balkan Physical Union**, 22-26 August 2006, Istanbul-Turkey. (Poster)
15. E.Eser, Ş. Okuducu and **S.Sönmezoğlu**, “*The Study of Excitation Energy Levels for Some Be-Isotopes*” **The 6th International Conference of the Balkan Physical Union**, 22-26 August 2006, Istanbul-Turkey. (Poster)
16. Ş. Okuducu, **S.Sönmezoğlu**, E.Eser, “*On the Study of Level Density Parameters for Some Deformed Light Nuclei*”, **Turkish Physical Society 23. International Physics Congress**, 13-16 September 2005, Muğla-Turkey. (Poster)

B.5. Ulusal kongre, sempozyum, panel, çalıştay gibi bilimsel, sanatsal toplantılarda sözlü olarak sunulan ve özet metin olarak yayımlanan bildiri

1. **S. Sönmezoğlu**, E.Eser ve Ş. Okuducu, “*Simple Formula for $E(4^+) - E(2^+)$ Correlations in Rotational Energies*”, **IV. Nükleer Yapı Özellikleri Çalıştayı**, 30-31 Ekim 2007, Ankara-Türkiye. (Sözlü)
2. E.Eser, Ş. Okuducu ve **S. Sönmezoğlu**, “*Calculation of Level Densities of $^{58-60}Co$ Nuclei*”, **IV. Nükleer Yapı Özellikleri Çalıştayı**, 30-31 Ekim 2007, Ankara-Türkiye. (Sözlü)
3. **S. Sönmezoğlu**, E.Eser ve Ş. Okuducu, “*On The Level Density Parameters of Some Superdeformed Light Nuclei in the Mass Region of $40 \leq A \leq 70$* ”, **II.Nükleer Yapı Özellikleri Çalıştayı**, 07-09 Kasım 2005, Eskişehir-Türkiye. (Sözlü)

B.6. Ulusal kongre, sempozyum, panel, çalıştay gibi bilimsel, sanatsal toplantılarda poster olarak sunulan ve özet metin olarak yayımlanan bildiri

1. **S. Sönmezoğlu**, F. Bayansal ve G. Çankaya, “*Missous Yöntemiyle Hidrostatik Basınç Altında Cd/n-GaAs Schottky Diyot Parametrelerinin Belirlenmesi*”, **15. Yoğun Madde Fiziği**, 07 Ekim 2008, Ankara-Türkiye. (Poster)

2. **S. Sönmezoğlu**, E.Eser ve Ş. Okuducu, “*Deforme Hafif Se-İzotopik Çekirdeklerin Enerji Spektrumlarından Yararlanarak Yoğunluk Parametrelerinin Belirlenmesi*”, **IX. Ulusal Nükleer Bilimler ve Teknolojileri Kongresi**, 14-16 Eylül 2005, İzmir-Türkiye. (Poster)
3. E.Eser, Ş. Okuducu ve **S. Sönmezoğlu**, “*Deforme Ağır Hf-İzotopik Çekirdeklerin Kollektif Band Analizi*”, **IX. Ulusal Nükleer Bilimler ve Teknolojileri Kongresi**, 14-16 Eylül 2005, İzmir-Türkiye. (Poster)

C. Sonuçlandırılmış Araştırma Projeleri *

C.1. Ulusal kuruluşlarca desteklenen projede görev almak

1. “*Metal-Si Diyotların C-V karakteristiklerini Kullanarak Ara Yüzey Hal Yoğunluğunun Hesaplanması ve Çeşitli Gazlara Göre Diyot Davranışlarının İncelenmesi.*”, Gaziosmanpaşa Üniversitesi BAP Projesi, Proje No: 2007/35, **Araştırmacı**, (Eylül 2007 – Nisan 2009), Tamamlandı.
2. “*Katkılı-Katkısız Bakır Oksit İnce Filmlerin Gaz Algılama Özelliklerinin İncelenmesi.*”, Gaziosmanpaşa Üniversitesi BAP Projesi, Proje No: 2008/30, **Araştırmacı**, (Eylül 2008 – Eylül 2009), Tamamlandı.
3. “*Yük-Pompa Spektroskopisi ile MOS Yapıların Arayüzey Hallerinin İncelenmesi.*”, Gaziosmanpaşa Üniversitesi BAP Projesi, Proje No: 2008/40, **Araştırmacı**, (Eylül 2008 – Eylül 2009), Tamamlandı.
4. “*Güneş Pili Yapımında Kullanılan İnce Filmlerin Üretimi ve Yapısal Karakterizasyonu.*”, Gaziosmanpaşa Üniversitesi BAP Projesi, Proje No: 2009/29, **Araştırmacı**, (Eylül 2009 – Ekim 2010), Tamamlandı.

D. Ödüller

D. 1. Alanında ulusal bilimsel nitelikli ödül almak

1. TÜBİTAK, Bilim İnsanı Destekleme Daire Başkanlığı (BİDEB) 2211 - Yurt İçi Doktora Bursu (2006 - 2010)

E. Diğer Etkinlikler

E.1. Ulusal sempozyum, kongre, çalıştay, festival, yaz okulu, bienal, trienal gibi bilimsel, sanatsal ve tasarıma yönelik etkinliklerde görev almak

1. TÜBİTAK-BİDEB Eğitimde Bilim Danışmanlığı Projesi: *“Tokat İlindeki Fen Bilimleri ve Matematik Öğretmenlerini Bilim Danışmanlığı ve Eğitimi Yönünden Destekleme Çalıştayı”* TÜBİTAK Bilimsel Etkinlikleri Destekleme Programı, **Sekretarya**, 08–14 Kasım 2008, Tokat-TÜRKİYE.

2. TÜBİTAK-BİDEB Eğitimde Bilim Danışmanlığı Projesi: *“Bilgisayar, Biyoloji, Fizik, Kimya ve Matematik Öğretmenlerini Bilim Danışmanlığı ve Eğitimi Yönünden Destekleme Çalıştayı”* TÜBİTAK Bilimsel Etkinlikleri Destekleme Programı, **Yardımcı Eleman**, 21–25 Ocak 2008, Tokat-TÜRKİYE.