

## T.C. DÜZCE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

## TEKLİ RF PLAZMA METODU İLE ÜRETİLMİŞ AMORF HİDROJENLENMİŞ KARBON İNCE FİLMLERİN OPTİK BANT ARALIKLARININ PLAZMA AKIŞ HIZINA BAĞLI İNCELENMESİ

TAMER ŞİMŞEK

YÜKSEK LİSANS TEZİ FİZİK ANABİLİM DALI

## DANIŞMAN DOÇ. DR. KADİR GÖKŞEN

DÜZCE, 2017

## T.C. DÜZCE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

## TEKLİ RF PLAZMA METODU İLE ÜRETİLMİŞ AMORF HİDROJENLENMİŞ KARBON İNCE FİLMLERİN OPTİK BANT ARALIKLARININ PLAZMA AKIŞ HIZINA BAĞLI İNCELENMESİ

Tamer Şimşek tarafından hazırlanan tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından Düzce Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

#### Tez Danışmanı

Doç. Dr. Kadir GÖKŞEN

Düzce Üniversitesi

## Jüri Üyeleri

Doç. Dr. Kadir GÖKŞEN Düzce Üniversitesi

Doç. Dr. Mustafa ANUTGAN Karabük Üniversitesi

Doç. Dr. Özge TÜZÜN ÖZMEN Düzce Üniversitesi

Tez Savunma Tarihi: 06/07/2017

### BEYAN

Bu tez çalışmasının kendi çalışmam olduğunu, tezin planlanmasından yazımına kadar bütün aşamalarda etik dışı davranışımın olmadığını, bu tezdeki bütün bilgileri akademik ve etik kurallar içinde elde ettiğimi, bu tez çalışmasıyla elde edilmeyen bütün bilgi ve yorumlara kaynak gösterdiğimi ve bu kaynakları da kaynaklar listesine aldığımı, yine bu tezin çalışılması ve yazımı sırasında patent ve telif haklarını ihlal edici bir davranışımın olmadığını beyan ederim.

6 Temmuz 2017

Tamer Şimşek

# TEŞEKKÜR

Yüksek lisans öğrenimimde ve bu tezin hazırlanmasında gösterdiği her türlü destek ve yardımdan dolayı çok değerli tez danışmanım Doç. Dr. Kadir Gökşen'e en içten dileklerimle teşekkür ederim.

Bu çalışma boyunca yardımlarını ve desteklerini esirgemeyen sevgili eşime, zamanlarından çaldığım çocuklarıma ve ayrıca çalışma arkadaşlarıma sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışma Düzce Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri tarafından desteklenmiştir (Proje no: 2013.05.02.195).

6 Temmuz 2017

Tamer Şimşek



# İÇİNDEKİLER

<u>Sayfa No</u>
ŞEKİL LİSTESİVII
ÇİZELGE LİSTESİVIII
SİMGELER IX
ÖZETX
ABSTRACT
1 GIRIS 1
11 AMAC VE KAPSAM 1
1.2. TEORİK YAKLASIM
1.2.1. Katılarda Enerii Bantları Teorisi
1.2.1.1. <i>Bir Boyutta</i> Schrödinger Denklemi
1.2.1.2. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi
1.2.1.3. Bir kristalin Enerji Bantları14
1.2.1.4. Kronig-Penney Modeli 14
1.2.1.5. Valans Bandı ve İletkenlik Bandı17
1.2.2. Elektromanyetik Dalgaların Enerji Bantları İle Etkileşimi
1.2.2.1. Vakumda Elektromanyetik Dalgalar19
1.2.2.2. Normal Gelişte Yansıma ve Geçme
1.2.2.3. İletkenlerde Elektromagnetik Dalgalar ve Soğurma
1.2.2.4. Optik Geçirgenlik Deneyleri İle Enerji Bantlarının İncelenmesi
2. MATERYAL VE YÖNTEM
2.1. RF PLAZMA FİLM ÜRETİM SİSTEMİ33
2.2. MORÖTESİ-GÖRÜNÜR SPEKTROMETRE DENEY SİSTEMİ
3. BULGULAR VE TARTIŞMA
3.1. GEÇİRGENLİK ÖLÇÜMLERİ35
3.2. OPTİK BANT ARALIKLARININ HESAPLANMASI
3.3. TEORİK ANALİZ47
4. SONUÇLAR VE ÖNERİLER50
5. KAYNAKLAR

ÖZGEÇMİŞ......54

# ŞEKİL LİSTESİ

## <u>Sayfa No</u>

Şekil 1.1. İlerleyen dalga	3
Şekil 1.2. Kararlı dalga	5
Şekil 1.3. Serbest bir elektron için E-k değişimi.	11
Şekil 1.4. Sonsuz potansiyel kuyusu	12
Şekil 1.5. Sonsuz potansiyel kuyusundaki elektronun dalga fonksiyonu ve o	olasılık
yoğunluğu	13
Şekil 1.6. Sonsuz potansiyel kuyusundaki elektronun enerji seviyeleri	13
Şekil 1.7. Bir boyutlu kristalde peryodik potansiyel	15
Şekil 1.8. Kronig Penney modelinin periyodik potansiyeli	16
Şekil 1.9. Elektronun bir enerji düzeyinde bulunma olasılığı r(E)'nin elektron	
enerjisine göre değişimi.	16
Şekil 1.10. İletken, yarıiletken ve yalıtkan için valans ve iletkenlik bantları	17
Şekil 1.11. Direkt ve indirekt yasak enerji aralıklı yarı iletkenler	19
Şekil 1.12. Düzlem ve küresel dalgalarda dalga cephelerinin gösterimi	21
Şekil 1.13. Elekromanyetik dalgaların ilerleme yönü	22
Şekil 1.14. Arayüze normal geliş durumunda gelen (Ei, Hi, ki), geçen (Et, Ht	, k <sub>t</sub> ) ve
yansıyan (E <sub>r</sub> , H <sub>r</sub> , k <sub>r</sub> ) elektromanyetik dalgalar	23
Şekil 1.15. İletkende ilerleyen elektromanyetik dalgalar	28
Şekil 2.1. a-C:H ince film üretiminde kullanılan plazma kazanı	33
Şekil 2.2. Geçirgenlik deneylerinde kullanılan spektrometrenin şematik gösteri	mi34
Şekil 3.1. PG instrumentsLtd/T70+UV/VIS optik spektrometre cihazının ışık	şiddeti
kalibrasyonu için çizilen grafik.	35
Şekil 3.2. PG instrumentsLtd/T70+UV/VIS optik spektrometre cihazının dala	gaboyu
kalibrasyonu için çizilen grafik	36
Şekil 3.3. 2 cm <sup>3</sup> /dakika akış hızında üretilen filmlerin optik geçirgenlik spektru	ımu. 37
Şekil 3.4. 3 cm <sup>3</sup> /dakika akış hızında üretilen filmlerin optik geçirgenlik spektru	ımu. 38
Şekil 3.5. 4 cm <sup>3</sup> /dakika akış hızında üretilen filmlerin optik geçirgenlik spektru	ımu. 39
Şekil 3.6. 2 cm <sup>3</sup> /dakika akış hızında üretilen filmlerin soğurma katsayılarının	ı, gelen
ışığın enerjisine göre grafiği	41
Şekil 3.7. 3 cm <sup>3</sup> /dakika akış hızında üretilen filmlerin soğurma katsayılarının	ı, gelen
ışığın enerjisine göre grafiği	42
Şekil 3.8. 4 cm <sup>3</sup> /dakika akış hızında üretilen filmlerin soğurma katsayılarının	ı, gelen
ışığın enerjisine göre grafiği	42
Şekil 3.9. 2 cm <sup>3</sup> /dakika akış hızında üretilen filmler için $(\alpha h\nu)^{1/2}$ değerlerinin	n gelen
ışığın enerjisine göre değişim grafiği.	44
Şekil 3.10. 3 cm <sup>3</sup> /dakika akış hızında üretilen filmler için $(\alpha h\nu)^{1/2}$ değerlerinin	n gelen
ışığın enerjisine göre değişim grafiği	45
Şekil 3.11. 4 cm <sup>3</sup> /dakika akış hızında üretilen filmler için $(\alpha h\nu)^{1/2}$ değerlerinin	n gelen
ışığın enerjisine göre değişim grafiği	45
Şekil 3.12. Tüm ince filmler için optik bant aralığı değerlerinin, CH4 gaz akış	s hızına
göre değişim grafiği	47

# ÇİZELGE LİSTESİ

## <u>Sayfa No</u>

Çizelge 1.1.Yarıiletken teknolojisinde kullanılan asıl elementler	18
Çizelge 1.2. Işığın bir elektromanyetik dalga olarak belirli renklere karşılık gele	en
dalga boyu değerleri	20
Çizelge 3.1. 2, 3, 4 ve 5 [18] cm <sup>3</sup> /dak akış hızlarında üretilen a-C:H ince filmler iç	in
hesaplanan $E_{\rm g}$ değerleri	46
Çizelge 3.2. Bazı kızılötesi dalgaboyu değerlerinde verimli çalışabilecek a-C:H inc	ce
film üretimi asamasında kullanılması öngörülen CH4 akış hı	<b>Z</b> 1
min uretinin aşamasında kunanınnası öngörülen eriş m	

# SİMGELER

a	İvme
Å	Angström
α	Soğurma Katsayısı
$\vec{B}$	Manyetik Alan
С	Karbon
с	Işık Hızı
d	Deri Kalınlığı
E	Toplam Enerji
Ē	Elektrik Alan
$E_g$	Yasak Bant Aralığı Enerjisi
З	Elektrik Geçirgenlik
F	Kuvvet
Н	Hidrojen
h	Planck Sabiti
I	Işık Şiddeti
Ĵ	Akım Yoğunluğu
k	Dalga Vektörü
K	Kinetik Enerji
λ	Dalgaboyu
m	Kütle
μ	Manyetik Geçirgenlik
n	Temel Kuantum sayısı
U	Klasik Potansiyel Enerji
ρ	Yük Yoğunluğu
Т	Geçirgenlik Katsayısı
σ	Öziletkenlik
τ	Zaman Sabiti
R	Yansıtma Katsayısı
ω	Açısal Frekans
ν	Frekans
Ψ	Dalga Fonksiyonu
V	Hız
V	Potansiyel Enerji
Z	Kalınlık

Z Atom Numarası

## ÖZET

### TEKLİ RF PLAZMA METODU İLE ÜRETİLMİŞ AMORF HİDROJENLENMİŞ KARBON İNCE FİLMLERİN OPTİK BANT ARALIKLARININ PLAZMA AKIŞ HIZINA BAĞLI İNCELENMESİ

Tamer ŞİMŞEK Düzce Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Tezi Danışman: Doç. Dr. Kadir GÖKŞEN Temmuz 2017, 54 sayfa

Bu çalışmada, 0,2 torr plazma kazanı basıncı altında 15 dakika süresince 100 W elektrik gücü kullanılarak 40 MHz frekans altında oluşturulan plazmaya maruz bırakılarak plazma depozisyon tekniği ile üretilen a-C:H ince filmlerin optik bant aralıklarının, kazanda uygulan gaz akış hızı parametresine bağlı değişimi incelenmiştir. Üretilen ince filmlerin kalınlıkları, 2 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen ince film için 585 Å, 3 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen ince film icin 758 Å ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen ince film icin ise 684 Å olarak bulunmuştur. Plazma frekansının ince film kalınlığı üzerinde herhangi önemli bir etkisi olmadığı ve benzer şekilde plazma akış hızı ile film kalınlığı arasında doğrudan bir bağlantı kurmanın mümkün olmadığı açığa çıkmıştır. 2, 3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızlarında üretilen ince filmler optik geçirgenlik deneylerine tabi tutulmuştur. Kullanılan ışığın dalgaboyuna ve enerjisine bağlı soğurma katsayıları, her bir akış hızı parametresinde üretilmiş ince film için optik geçirgenlik deneyleri sonucu elde edilen veriler kullanılarak hesaplanmıştır. Soğurma katsayıları kullanılarak yapılan analizler sonucu 2, 3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızlarında üretilen ince filmlerin optik bant aralıkları sırasıyla 1,41 eV, 1,48 eV ve 1,42 eV olarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar, yine literatürde benzer şartlarda üretilen ince filmler için elde edilen sonuçlar ile kıyaslanmıştır. Üretilen ince filmlerin optik bant aralıklarının gaz akış hızı parametresine nasıl bir bağlılık gösterdiğini acıklayan matematiksel bir eğri denklemi olusturulmustur. Bu denklem kullanılarak, günümüz kızılötesi iletişim teknolojisinde kullanılan elektromanyetik dalgalara ait bazı dalgaboyu ve enerji değerlerinde, yüksek verimle calısması olası olacak cihazlarda kullanılabilecek ince filmlerin hangi üretim sartlarında üretilebileceği öngörülmüştür. Çalışmanın sonunda, ince filmlerin gerçek yaşam uygulamalarında kullanılabilirliğini artırma amaçlı bir çalışma önerisi sunulmuştur.

Anahtar sözcükler: Amorf hidrojenlenmiş karbon, İnce film, Optik karakterizasyon, Plazma akış hızı, Plazma depozisyonu

#### ABSTRACT

#### INVESTIGATION OF THE DEPENDENCE OF OPTICAL BAND GAP ENERGY OF AMORPH HYDROGENATED CARBON THIN FILMS PRODUCED BY SINGLE RF PLASMA METHOD ON PLASMA FLOW RATE

Tamer ŞİMŞEK

Düzce University Graduate School of Natural and Applied Sciences, Department of Physics Master's Thesis Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Kadir GÖKŞEN July 2017, 54 pages

In this study, the optical band gap energies of the a-C:H thin films produced by the plasma deposition technique was investigated. The plasma was produced under a frequency of 40 MHz using a 100 W electric power for 15 minutes under 0.2 torr plasma pressure. The thicknesses of the produced thin films were found to be 585 Å for a thin film produced at a flow rate of 2 cm<sup>3</sup>/minute, 758 Å for a thin film produced at a flow rate of 3 cm<sup>3</sup>/minute, and 684 Å for a thin film produced at a flow rate of 4 cm<sup>3</sup>/minute. It has become clear that there is no significant effect of the plasma frequency on the thin film thickness, and similarly it is not possible to establish a direct connection between the plasma flow rate and the film thickness. Films produced at flow rates of 2, 3 and 4 cm<sup>3</sup>/minute were subjected to optical transmission tests. The absorption coefficients depending on the wavelength and energy of the light used are calculated using the data obtained from the optical transmittance experiments for the thin films produced with each flow rate parameter. Using absorbance coefficients, the optical band gap energies of the produced thin films at the flow rates of 2, 3 and 4 cm<sup>3</sup>/minute were calculated to be 1.41 eV, 1.48 eV and 1.42 eV, respectively. The results obtained were also compared with the results obtained for thin films produced on similar conditions in the literature. A mathematical curve equation describing how the optical band gaps of the produced thin films depend on the gas flow rate parameter has been established. Using this equation, the production parameters for thin films that are likely to work with high efficiency in some wavelengths and energy values of the electromagnetic waves used in today's infrared communication technology were predicted. At the end of the study, a study proposal was presented to increase the usability of thin films in real life applications.

**Keywords:** Amorph hydrogenated carbon, Optical characterization, Plasma deposition, Plasma flow rate, Thin film

## 1.GİRİŞ

#### 1.1. AMAÇ VE KAPSAM

Plazma depozisyonu yöntemi, geçmişten günümüze kadar gelişmiş özelliklere sahip ince filmlerin üretiminde etkin olarak kullanılan bir yöntemdir [1]–[3]. Bu metotta, bir plazma çemberine yerleştirilen alttaş, plazma haline getirilmiş gaz tarafından kaplanmaktadır. İşlem sonrasında ortaya çıkan ince film, diğer kaplama metodları ile üretilen ince filmlerden, aynı monomer kullanıldığı halde, farklı yapısal özelliklere sahip olmaktadır. Bu nedenle, plazma ile depozisyon yöntemi kullanılarak üretilen ince filmler incelenmesi, araştırmacılar tarafından ilgi duyulan bir konu olmuştur. Araştırmacılar, bu metod aracığıyla ince film üretimi konusuna özellikle 1960'lı yılların başından itibaren ilgi duymaya başlamışlardır [4]. Plazma ile ince film depozisyon metodu cihaz fabrikasyonu gibi teknolojik olarak önem ihtiva eden uygulamalarda da önemli bir rol oynamaktadır.

Plazma depozisyonu ile üretilen amorf hidrojenlenmiş karbon (a-C:H) ince filmlerin üzerinde araştırma yapılan malzemeler olmasının birçok nedeni vardır. Bu nedenlerden bazıları; hem asit hem bazlar için kimyasal olarak etkin olmayan malzeme oluşları, yüksek yoğunluk ve dayanıklılığa sahip oluşları, sıra dışı ısısal dayanıklılığa sahip olmaları ve bunlar gibi birçok sıra dışı fiziksel ve kimyasal özelliklerinin bulunmasıdır [5]–[8]. Buna ek olarak, kızılötesi ışınlarını büyük oranda geçirdikleri ve küçük oranda yansıttıkları için fotodiyot uygulamalarında kaplama malzemeleri olarak kullanılabilecek malzemeler oldukları da saptanmıştır [9]. Bunların dışında, karbon ince filmlerin manyetik kaydetme cihazlarında kullanılan ince film ortamlarını koruma amaçlı kaplama malzemeleri olarak kullanıma da uygun oldukları, bu konuda yapılan bir çalışma ile gösterilmiştir [10]. A-C:H ince filmler, yukarıda bahsedilen özelliklerinden dolayı araştırmacılar tarafından cazip hale gelen malzemeler olmuşlardır.

Bu çalışmada belirlenen ana amaç, a-C:H ince filmlerin en önemli özelliklerinden olan yasak enerji bant aralığı değerlerinin ortaya çıkarılmasıdır. Bu amaç doğrultusunda, plazma depozisyonu tekniği ile 0,2 torr basınç altında 100 W elektrik gücü altında 15 dakika süre ile 2, 3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızları altında üretilen a-C:H ince filmlerin yasak

enerji bant aralıklarının optik geçirgenlik deneyleri aracılığıyla incelenmesi planlanmıştır. Deney sonuçları ele alınarak, ince filmlerin dalga boyuna bağlı soğurma katsayıları ve yasak enerji bant aralıkları hesaplanması mümkün olacaktır. Yapılan deneylerden elde edilen veriler kullanılarak hesaplanan değerler ile daha önce yapılan çalışmalardan elde edilen değerler de kullanılarak,ince filmlerin yasak enerji bant aralıklarının plazma çemberine gaz akış hızına bağlı değişimi matematiksel olarak modellenebilecektir. Sonuçta ortaya çıkacak matematiksel model, henüz deneysel olarak çalışılmamış bazı özel yasak enerji bant aralığı değerlerine sahip ince filmlerin hangi özel koşullarda üretilebileceğinin öngörülmesinde kullanılabilecektir.

#### **1.2.TEORİK YAKLAŞIM**

Elektronun katı yapı üzerinde alabileceği enerji değerlerine enerji bandı denir. Bu bölümde katılarda enerji bantlarının oluşumu teorik olarak incelenecektir. Ayrıca, katı malzemelerin elektromanyetik dalgalarla etkileşimi aracılığı ile bu enerji bantlarından valans ve iletim bantları arasında oluşan yasak enerji bant aralığının nasıl analiz edilebileceği de teorik olarak bu incelemeye dahil edilecektir.

#### 1.2.1. Katılarda Enerji Bantları Teorisi

#### 1.2.1.1.Bir Boyutta Schrödinger Denklemi

Klasik mekanikte bir parçacığın hareket durumu, parçacığın konum ve hızı ile belirlenir. Kuantum mekaniğinde ise parçacığın hareket durumu dalga fonksiyonu ile belirlenir. Her iki mekanikte de temel sorun parçacığın durumunun zaman içinde nasıl değişeceğini öngörmektir. Her iki mekanikte de cevap bir hareket denklemi ile verilir. Klasik hareket denklemi Newton'un ikinci yasası,

$$\vec{F} = m\vec{a} \tag{1.1}$$

olarak verilir. t=0 anında parçacığın konum ve hızı biliniyorsa daha sonraki zamanlardaki konum ve hızı Newton yasasıyla bulunur. Kuantum mekaniğinde hareket denklemi zamana bağlı Schrödinger denklemidir. Parçacığın dalga fonksiyonu t=0 anında biliniyorsa, zamana bağlı Schrödinger denklemi çözülerek diğer zamanlardaki dalga fonksiyonu bulunur.

Zamana bağlı Schrödinger denklemi bir kısmi diferansiyel denklemidir. Kuantum sistemleri arasındaki en ilginç olan toplam enerjisi sabit olan sistemlerdir. Bu sistemlerin dalga fonksiyonu kararlı yapıda olur. İki ucu sabit bir teldeki dalgalar bu şekildeki kararlı yapılara örnek verilebilir. Zamana bağlı Schrödinger denklemi bu kararlı dalgalara uygulandığında daha basit bir denkleme, zamandan bağımsız Schrödinger denklemine dönüşür.

Klasik kararlı dalgaların özelliklerinden yola çıkılarak basit bir kuantum sistemi olan kuyudaki parçacık sisteminin kuantalanmış enerjilerininin nasıl bulunduğunu bulabiliriz. Gerçek sistemlerin üç boyutlu olduğunu biliyoruz. Ancak hesaplamalarımızda sadece bir boyutta hareket eden parçacığın hareketinden faydalanmak daha uygun olacaktır. Bu metod kullanılarak hesaplamalar daha kolay anlaşılabilir. Daha sonra üç boyutlu denklemlere geçiş yapılabilir.

Gerili bir teldeki enine yer değiştirme y(x,t)veya boru içindeki ses dalgalarının oluşturduğu basınç değişimi p(x,t) ile gösterilebilir. Bunlar bir boyutlu klasik dalgalara örnektir. Dalga fonksiyonunu $\Psi(x,t)$ ile gösterebiliriz.



Şekil. 1.1. İlerleyen dalga.

x - doğrultusunda iki sinüssel dalga göz önüne alırsak, birinci dalga +x yönünde ilerleyen

$$\Psi_1(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = B\sin(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega\mathbf{t}) \tag{1.2}$$

olarak, diğer dalga ise aynı genlikle – x yönünde ilerleyen

$$\Psi_2(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = B\sin(\mathbf{k}\mathbf{x} + \omega\mathbf{t}) \tag{1.3}$$

olarak ifade edilebilir. Bu dalgaların süperpozisyonu,

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \Psi_1(\mathbf{x}, \mathbf{t}) + \Psi_2(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = B\sin(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega\mathbf{t}) + B\sin(\mathbf{k}\mathbf{x} + \omega\mathbf{t})$$
(1.4)

olur. Trigonometrik özdeşlik,

$$\operatorname{Sina} + \operatorname{sinb} = 2\operatorname{sin} \frac{a+b}{2} \operatorname{sin} \frac{a-b}{2}$$
(1.5)

kullanılarak, dalga

$$\Psi_{(x,t)} = 2Bsin(kx)cos(\omega t)$$
(1.6)

(1.7)

$$\Psi_{(x,t)} = Asinkxcos\omega t$$

şeklinde yazılabilir. Burada 2*B*=*A* olarak kabul edilmiştir.

Telin durgun olduğu düğüm noktaları arasındaki uzaklık  $\lambda/2$  olur. Burada önemli olan ve hemen göze çarpan özellik dalganın sağa veya sola ilerlemediğidir. Düğüm noktası denilen ve sinkx = 0 olan sabit noktalarla  $\omega(x, t)$  her zaman sıfır ve tel durgun olmaktadır. Diğer noktalarda tel yukarı-aşağı yönlerde  $cos\omega t$  şeklinde titreşim hareketi yapmakta olup, genliği her x noktasında *A. sinkx* olmaktadır. Böylece ilerleyen iki dalganın toplamını alarak kararlı bir dalga oluşturmuş oluruz.



Şekil 1.2. Kararlı dalga.

Burada önemli olan nokta, dalga boylarının kuantalanmış olmasının telin iki ucunda dalganın sıfır olması koşulundan kaynaklanmasıdır. Sistemin sınırlarında belirtilen bu tür koşullara sınır koşulu denir. Kararlı dalga,

$$\Psi_{(\mathbf{x},\mathbf{t})} = \operatorname{Asinkxcos\omegat} \tag{1.8}$$

olduğundan, bu ifadeyi sadece x'e ve sadece t'ye bağlı iki fonksiyonun çarpımı şeklinde

$$\Psi_{(\mathbf{x},\mathbf{t})} = \Psi_{\mathbf{x}} \cos \Psi_{\mathbf{t}} \tag{1.9}$$

olarak yazabiliriz. Burada dalga fonksiyonunun uzay kısmını  $\Psi_x$  ile gösteriyoruz. Uzay fonksiyonu  $\Psi_x$  tüm dalga fonksiyonu  $\Psi(x,t)$  nin t = 0 anındaki değeri olarak görülebilir(t = 0 *için cos*  $\Psi$ t = 1 *olur*). O halde, herhangi bir t anındaki  $\Psi(x,t)$  tüm dalga fonksiyonu,  $\Psi_x$  ile harmonik bir cos  $\Psi_t$  nin çarpımına eşittir.Buradaki tel örneğinde  $\Psi_x$  uzay fonksiyonu bir sinüs fonksiyonudur.

$$\Psi(\mathbf{x}) = \operatorname{Asin} \mathbf{k}\mathbf{x} \tag{1.10}$$

Fakat en genel durumda (örneğin, yoğunluğu değişken bir telde)  $\Psi(x)$  çok daha karmaşık

bir fonksiyon olabilir. Ama bu karmaşık durumlarda dahi zamana bağımlılık yine sinüsel kalır, yani  $\cos \Psi t$  veya  $\sin \Psi t$  olur. Sin veya kosinüsün ikisi de olabileceğinden, en genel sinüsel kararlı dalga ifadesi şu şekilde yazılabilir:

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \Psi(\mathbf{x})(\operatorname{acos}\omega \mathbf{t} + \operatorname{bsin}\omega \mathbf{t})$$
(1.11)

Yapı olarak sinüs ya da *cosin*üs aynı fonksiyondur. Yalnızca, a ve b katsayıları oranı farklı alındığında, zaman orjini farklı seçilmiş demektir.

Bir kuantum simgesinin kararlı dalgası ile klasik dalgalar arasındaki önemli fark,klasik dalgalarda  $\Psi(x,t)$  fonksiyonunun reel olmasıdır. Bir teldeki yer değiştirme yada ses dalgasındaki basınç değişiminin kompleks olması anlamsız olur. Bu nedenle klasik bir dalga fonksiyonunda  $\Psi(x)$  ve *a*, *b* katsayıları daima reeldir. Fakat kuantum mekaniğinde dalga fonksiyonu kompleks olabilir. Yani zamana bağlı kısmı  $cos\omega t - isin\omega t$  şeklinde olabilir. Burada  $i = \sqrt{-1}$  sanal sayısıdır. Buna göre, kuantum parçacığının kararlı dalgası şöyle olur,

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \Psi(\mathbf{x})(\cos\omega \mathbf{t} - i\sin\omega \mathbf{t})$$
(1.12)

Bu kompleks yapıdan Schöredinger denklemi elde edilir. Kompleks sayılar teorisinden

$$\cos\theta + i\sin\theta = e^{i\theta} \tag{1.13}$$

özelliği kullanılarak dalga fonksiyonu,

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \Psi(\mathbf{x})e^{-i\omega \mathbf{t}} \tag{1.14}$$

şeklinde yazılabilir. x-ekseni üzerinde sonlu bir aralığın dışına çıkamayan parçacığın taban durum enerjisi ise,

$$E = \frac{h^2}{2ma^2} \tag{1.15}$$

olarak bulunur. Kuyudaki parçacığın en küçük enerjisi bu alt limitten  $\pi^2$ 'nin çarpanı kadar fazladır. Taban durum enerjisi cinsinden n.durum enerjisini yazarsak,

$$E_n = n^2 E_1 \tag{1.16}$$

olur (n=2,3,4..). Hidrojen atomundan farklı olarak, n arttıkça enerji düzeyi artar. Bu durum, teldeki kararlı dalgalara benzeyip, enerji arttıkça dalga fonksiyonundaki düğüm noktaları sayıları da artmaktadır. Düğüm sayısının çokluğu dalga boyunun daha kısa ve dolayısı ile momentum ve kinetik enerjinin daha büyük olduğunu göstergesidir.

Bu kararlı dalgaların her biri için dalga fonksiyonu

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \Psi(\mathbf{x})e^{-i\omega \mathbf{t}} = Asinkxe^{-i\omega \mathbf{t}}$$
(1.17)

Olarak ifade edilebilir. Kompleks özdeşlik,

$$\sin\theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i} \tag{1.18}$$

kullanılarak,

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \frac{A}{2i} (e^{i(kx - wt)} - e^{-i(kx + wt)}$$
(1.19)

elde edilir. Buna göre, tıpkı klasik kararlı dalga gibi kararlı kuantum dalgası da karşıt yönlerde ilerleyen iki dalganın toplamı olarak yazılabilir. +x yönünde ilerleyen bir dalga momentumu +hk olan bir parçacığı, -x yönünde ilerleyen dalga da momentumu -hk olan bir parçacığı temsil eder. Başka bir deyişle kuyudaki parçacığın momentumunun büyüklüğü hk olur. Klasik olarak düşünecek olursak, bir kuyudaki parçacık ortalama olarak sağa sola eşit oranlarda gider gelir.

#### 1.2.1.2. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi

Kuyudaki parçacığın incelenmesinde  $\Psi(x)$  dalga fonksiyonunun çözümünü incelemişti. Her  $\Psi(x)$  fonksiyonu duruma özgü bir denklem kullanılarak bulunur. Bu zamandan bağımsız Schrödinger denklemidir. Bir çok fizik yasası gibi Schrödinger denklemi de ispat edilemez; Newton'un ikinci yasası gibi bir aksiyom olup doğruluğu deneysel gözlemlerle kanıtlanır. Burada niçin Schrödinger denklemini kullandığımız ile ilgili bazı bilgileri açıklamakta fayda vardır. Fizik yasalarının büyük çoğunluğu diferansiyel denklemler şeklinde olup, bu diferansiyel denklemlerde fiziksel büyüklüğün türevleri yer alır. En bilinen örnek Newton'un ikinci yasasıdır.

Burada m kütleli parçacığın x konumuyla ilişkisi

$$m.\frac{dx^2}{dt^2} = \sum F \tag{1.20}$$

Kuyudaki bir parçacığın dalga fonksiyonu

$$\Psi(\mathbf{x}) = \mathbf{A}.\,\mathrm{sinkx} \tag{1.21}$$

olur. Bu fonksiyonun sağladığı diferansiyel denklem için bir kez türev aldığımızda

$$\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x} = \mathrm{k.}\,\mathrm{Acoskx}\tag{1.22}$$

Buradaki coskx ile sinkx arasındaki ilişki değişik şekillerde ifade edilebilir. En kolay olanı bir kez daha türev almaktır.

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = kAcoskx$$
(1.23)

$$\frac{d^2\Psi}{dt^2} = -k^2 A. \cos kx \tag{1.24}$$

Eşitlik (1.22) ile (1.23) karşılaştırılırsa,

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -k^2\Psi \tag{1.25}$$

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2 k^2}{2m}$$
(1.26)

$$k^{2} = \frac{2mK}{h^{2}}$$
(1.27)

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2mK}{h^2}\Psi \tag{1.28}$$

olur.

Bu kuyudaki bir parçacığın dalga fonksiyonunun sağladığı diferansiyel denklem olur. Kuyudaki parçacık problemi potansiyelin kuyu içinde sıfır olduğu bir sistemdir. Potansiyelin sıfırdan farklı ve  $U_x$  şeklinde konuma bağlı olduğu durumlar için, K kinetik enerjisi, E toplam enerjisi ile  $U_x$  potansiyel enerjisi arasındaki farka eşittir.

$$K = E - U_{\chi} \tag{1.29}$$

Bu durumda yeni denklem,

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -\frac{2mK}{h^2} [U_x - E]\Psi$$
(1.30)

şeklinde ifade edilir.

Burada bir elektronun davranışının nasıl olduğunu inceleyelim. Burada elektronun sadece ayrık enerji değerlerine sahip olduğu gösterilecek ve enerji bantları kavramı üzerinde durulacaktır. Bu kavram, yarı iletkenlerin elektriksel özelliklerinin incelenmesi için gerekli bir unsurdur.

Bir elektron boşlukta, bir atomda veya bir kristalde olup olmamasına göre farklı tarzda davranır. Bir yarıiletken kristalde bir elektronun hareketini kavramak için ilk olarak bir elektronun daha basit bir ortamda nasıl davrandığını anlamak bizim için önemlidir. Bu sebeple elektronun hareketini kavramak için ilk olarak bir elektronun boşlukta (serbest elektron) ve bir kutu şeklindeki potansiyel kuyusundaki (bir kutudaki parçacık) klasik durumlarını inceleyelim.

Serbest elektron modeli çevresi ile etkileşmeyen bir elektrona uygulanabilir. Diğer bir deyişle elektron kristaldeki atomların çekimlerine maruz kalmaz, potansiyelin sabit olduğu bir ortamda hareket eder. Bu tür bir elektronlar serbest elektron olarak tanımlanır. Bir boyutlu kristal için ( bu hayal edeceğimiz en basit yapı) zamandan bağımsız Schrödinger denklemi V sabit potansiyeli için yazılabilir. Önce 3 boyutlu denklem yazılıp sonra tek boyutluya indirgenirse,

$$-\frac{h^2 d^2}{2m dx^2} \Psi(x) = E.\Psi(x)$$
(1.31)

şeklinde olur. Burada,

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{h^2}} \tag{1.32}$$

veya

$$E = \frac{h^2 k^2}{2m} \tag{1.33}$$

ile verilir. Böylece dalga sayısı olarak adlandırılan k sayısının, içinde h çarpım faktörü bulunan elektronun momentumuna eşit olduğu sonucunu elde edebilir. Klasik mekanikte elektronun hızı,

$$\nu = \frac{p}{m} \tag{1.34}$$

ifadesi ile verildiğinden momentumu dikkate alacak olursa,

$$\nu = \frac{hk}{2m} \tag{1.35}$$

yazabilir. Buradan,

$$E = \frac{h^2 k^2}{2m} = \frac{1}{2}m\nu^2 \tag{1.36}$$

olur. Serbest elektronun enerjisi Şekil 1.3'de görüldüğü gibi elektronun k momentumunun parabolik bir fonksiyonudur. Bu sonuç serbest elektronun herhangi bir enerji değeri alacağı klasik mekanik düşüncedeki beklenen duruma benzerdir. Aynı enerjiye sahip elektronlar aynı momentumlara sahiptir. Ancak zıt yönlerde hareket ederler.



Şekil 1.3. Serbest bir elektron için E-k değişimi.

Bir serbest elektron çalışmasından sonra elektronun uzayın en küçük bölgesine hapsedildiği durumu dikkate almak faydalı olacaktır. Bu hapsedilme durumu elektronunun, içinden kurtulamayacağı sonsuz bir derin potansiyel kuyusunda düşünülerek açıklanabilir. Bu şekilde elektron duvarları sonsuz yüksekliğe sahip bir kuyu veya kutu içerisinde yerleştirilmiş gibi düşünülebilir. Bir kutudaki parçacık problemi, pozitif yüklü çekirdeğin çekim kuvveti ile elektronları tuzaklayan bir potansiyel kuyusu oluşturduğu bir atomdaki elektronların durumuna benzer. Aslında elektron potansiyel kuyusu içerisinde hapsedilir ve böylece dalga fonksiyonları kuyunun sınırlarında yok olur. Bu yüzden bizim problemimizde sınır şartları;

$$\Psi(x \le 0) = \Psi(x \ge a) = 0 \tag{1.37}$$

alınarak hesaplamalar yapılır. Potansiyel kuyusunda  $(0 \le x \le a)$  V=0'dır.



Şekil 1.4. Sonsuz potansiyel kuyusu.

Zamandan bağımsız Schrödinger denklemi genel haliyle şu şekilde yazılır,

$$-\frac{h^2 d^2}{2m dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x)$$
(1.38)  
Bu denklem yeniden düzenlenirse,

$$\frac{d^2\Psi(x)}{d^2(x)} + k^2\Psi(x) = 0$$
(1.39)

olur. Burada,

$$k = \sqrt{2mE/h^2} \tag{1.40}$$

$$E = \frac{h^2 k^2}{2m} \tag{1.41}$$

olarak ifade edilir. İkinci dereceden diferansiyel denklemin çözümü,

$$k = \frac{n\pi}{a} (n = 1, 2, 3...) \tag{1.42}$$

olacaktır. Bu sonuçlara göre dalga fonksiyonu,

$$\Psi_{n(x)} = A.\sin(\frac{n\pi x}{a}) \tag{1.43}$$

olur. Şekil 1.5'de belirli durumlar için dalga fonksiyonları ve buna bağlı olasılık yoğunlukları verilmiştir.



Şekil 1.5. Sonsuz potansiyel kuyusundaki elektronun dalga fonksiyonu ve olasılık yoğunluğu.

Buna göre elektronun enerjisi ise,

$$E_{n=}\frac{n^2h2\pi^2}{2ma^2}$$
(1.44)

olarak bulunur. Şekil 1.6'da bu enerji seviyeleri gösterilmiştir.



Şekil 1.6. Sonsuz potansiyel kuyusundaki elektronun enerji seviyeleri.

#### 1.2.1.3. Bir kristalin Enerji Bantları

Bir tek atomda elektronlar ayrık enerji seviyelerini işgal ederler. Bir kristali oluşturmak için örneğin Lityum (Z = 3) gibi basit bir atomu örnek alalım. Zıt spinli iki tane elektron aynı enerji seviyesini (2s seviyesini) işgal ederler ve kalan üçüncü elektron ikinci enerji seviyesini (2s seviyesini) işgal eder. Bu yüzden elektronik konfigürasyon  $1s^22s^1$ şeklindedir. Tüm lityum atomları tamamen aynı enerji seviyelerine sahip aynı elektronik konfigürasyona sahiptir. Eğer iki tane lityum atomu bir molekül oluşursa, bu durumda 1s seviyesine eşit olan, aynı seviyedeki bir enerjiye sahip olmak isteyen dört tane elektronun bulunduğu bir sistemin varlığı söz konusudur. Ancak 'zıt spinli iki tane elektronun aynı enerji seviyesini işgal edebileceğini' ifade eden Pauli dışarlama prensibinden dolayı 1s elektronlarının dördünün sadece iki tanesi 1s seviyesini işgal edebilir. Bu durum molekül için açık bir probleme sebep olur. Bu problem ancak 1s seviyesinin, enerjileri birbirine çok yakın yinede farklı olan iki seviyeye bölünmesi ile çözülebilir.

#### 1.2.1.4. Kronig-Penney Modeli

Günlük hayatta malzemelerin çoğu polikristal olmalarına rağmen, elektronik endüstrisinde kullanılan malzemeler 'tek kristaldirler'. Tek kristaller mükemmeldirler ve kusur içermezler. Bir kristalde kristalin her atomu elektronları çeken yerel bir potansiyel kuyusu oluşturur. Elektronun potansiyel enerjisi kendisinin bulunduğu noktanın atom çekirdeğine olan uzaklığına bağlıdır. Elektrostatik ,-q yükü taşıyan bir elektron ile +qZyükü potansiyel enerji elde etmemizi sağlar. Burada Z atomun atom numarası ve çekirdekteki protonların sayılarına eşittir. Bu potansiyel enerji;

$$V_x = \frac{-Zq^2}{4\pi\varepsilon[x]} \tag{1.45}$$

ile verilir. Bu eşitlikte x elektronla çekirdek arasındaki mesafe, V(x) potansiyel enerji E dikkate alınan malzemenin elektriksel geçirgenliğidir. Bu elektronlar çekirdek ile daha yüksek enerjili elektronlar arasında, çekimi azaltan daha dış elektronlar arasındaki çekimi azaltan daha dıştaki elektronlar arasında bir perdeleme etkisi yapar. Elektron enerjisinin, çekirdeğe olan uzaklığın fonksiyonu olarak değişimi Şekil 1.7'de çizilmiştir. Bir kristalde elektronun nasıl davrandığını anlayabilmek için, bu kristali atomların bir boyutlu zincir biçiminde dizildiği sonsuz bir yapı olarak kabul ederiz. Bu kabullenme abartılı gibi gözükse de kristalin anahtar özelliği olan kristalde atomların konumlarının periyodik tarzda dizilmesini muhafaza eder. Atomun oluşturduğu potansiyel kuyusunun periyodik tabiatının ifadesi matematiksel olarak,

$$V(x + a + b) = V(x)$$
 (1.46)

şeklinde ifade edilir.Burada a + b, x-doğrultusundaki iki atom arasındaki mesafedir. x= $\infty$  olduğu durumda ise V=0 olur.



Şekil 1.7. Bir boyutlu kristalde periyodik potansiyel.

Potansiyelin periyodik tabiatının elektronun dalga fonksiyonu üzerine büyük etkisi vardır. Özellikle  $\Psi_x'e$  etkiyen operatörlerde x yerine x + a + b yazıldığında, elektronun dalga fonksiyonunun zamandan bağımsız schödinger denklemine uyması gerekir. Dalga fonksiyonu aşağıda yazılan Bloch teoremine uyarsa bu şart elde edilir. V(x) potansiyeli

$$V(x + a + b) = V(x)$$
 (1.47)

şeklinde periyodikse o zaman,

$$\Psi(x+a+b) = \Psi(x)e^{ik(a+b)}$$
(1.48)

olur. Kristaldeki V(x) potansiyeli x'in daha karmaşık bir fonksiyonudur, burada 1931 yılında Kronig ve Penney tarafından yapılan yaklaşımı kullanacağız [11]. Bu yaklaşımda V(x) potansiyelinin yerini dikdörtgen şeklindeki potansiyel kuyusunun periyodik dizilişi alır.Birinci bölgede (0 < x < a), potansiyel enerji  $V_x = V_1'$  dir ve zamandan bağımsız Schödinger denklemi şu şekilde yazılabilir;

$$\frac{h^2 d^2}{2mdx^2} \Psi(\mathbf{x}) + [\mathbf{E} - \mathbf{V}_1] \Psi(\mathbf{x}) = 0$$
(1.49)

İkinci bölgede (-b<x<0), potansiyel enerji  $V_{x=}V_0$ 'dır ve zamandan bağımsız Schödinger denklemi;

$$\frac{h^2 d^2}{2m dx^2} \Psi(\mathbf{x}) + [\mathbf{E} - \mathbf{V}_0] \Psi(\mathbf{x}) = 0$$
(1.50)

olur.



Şekil 1.8. Kronig Penney modelinin periyodik potansiyeli.

Eşitlik (1.48), (1.49) ve (1.50) kullanılarak sınır koşulları uygulandığında, elde edilen denklemin grafiksel çözümü izin verilen ve yasak enerji bantlarının varlığını ortaya koymaktadır. Bu durum Şekil 1.9'da gösterilmiştir.



Şekil 1.9.Elektronun bir enerji düzeyinde bulunma olasılığı r(E)'nin elektron enerjisine göre değişimi.

#### 1.2.1.5. Valans Bandı ve İletkenlik Bandı

Kimyasal reaksiyonların en dış kabuklarındaki elektron alış verişinden kaynaklanır. En içteki elektronlar çekirdekle olan büyük elektrostatik çekimden dolayı kimyasal reaksiyonlara katılmazlar. Benzer şekilde bir kristaldeki elektriksel iletim olayındaki gibi, atomlar arasındaki bağlar en dıştaki kabuktaki elektronlardan kaynaklanmaktadır. Enerji bantları açısından atomlar arasındaki bağları oluşturmaktan sorumlu olan elektronlar dolu olan en son bantta bulunurlar. Bu elektronlar, temel hal atomları için en yüksek enerji seviyelerine sahiptirler, ancak çok fazla sayıda enerji bandı vardır. İlk (en düşük) bantlar atomlara sıkı bağlı olan 1s elektronları gibi iç elektronları içerir. En yüksek bantlar elektron içermezler. Elektron içeren temel hal bandı valans bandı yani değerlik bandıdır. Bu bant atomlar arasında kovalent bağ oluşturan elektronları içerir.

Valans bandın hemen üstünde yer alan band müsaadeli enerji (iletkenlik bandı) olarak adlandırılır. Bir yarıiletkende bu bant düşük sıcaklıklarda boştur yani elektron içermez. Biraz yüksek sıcaklıklarda bazı elektronlar, atomlar arasındaki bağ yapma fonksiyonlarını kaybedecek ve kristalde dolaşacak kadar yeterli termal enerjiye sahip olurlar. Bu elektronlar valans bandından hareket etmek için serbest oldukları iletkenlik bandına atlarlar. İletkenlik bandının tabanı ile valans bandının tepesi arasındaki enerji farkı yasak aralık veya band aralığı olarak adlandırılır ve  $E_q$  ile gösterilir.



Şekil 1.10. İletken, yarıiletken ve yalıtkan için valans ve iletkenlik bantları.

İletken malzemelerde en yüksek enerjiye sahip olan elektronlar çok küçük bir enerji alırlar ve birazcık yüksek enerji seviyesine atlarlar ve bu sırada kristal boyunca hareket ederler. Yani elektronlar bir atomu terk edebilir ve herhangi bir enerji almadan kristalde hareket ederler. Yariiletken ve yalıtkan malzemelerde ise enerjinin büyük bir bölümü bir elektronun valans bandından iletkenlik bandının müsaadeli bir enerji seviyesine geçmesi için o elektrona transfer edilmesi gerektiğini görüyoruz. Bu durumda elektronun atomu terk etmeden ve kristalde serbestçe hareket etmeden önce enerjinin büyük bir kısmını alması gerekir.Yalıtkan malzemeler ile yarı iletken malzemeler arasındaki farkın sadece enerji aralığındaki fark olduğunu görüyoruz. Bir yarıiletkende  $E_g = 2 eV'dan$  daha küçük ve oda sıcaklığı termal enerjisi ve görünür ışık fotonları ile uyarılması, elektronlara valans bandından iletkenlik bandına atlaması için yeterli miktarda enerjiyi verebildiğini görmekteyiz. Yalıtkanlar ise daha büyük yasak enerji aralığına sahiptirler.

Periyodik tablonun dördüncü grubundaki (SiC ve SiGe) veya periyodik tablonun üçüncü ve beşinci grubundaki (GaAs, GaN, InP, AlSb,GaP, AIP, AlAs gibi) elementlerinin birleştirilmesi ile bileşik haldeki yarıiletkenler sentezlenebilir.

Çizelge 1.1. Yariiletken teknolojisinde kullanılan bazi elementler
--

III	IV	V
В	С	N
Al	Si	Р
Ga	Ge	As
In		Sb

Kristal olmayan malzemeler de yarıiletken özellik gösterebilirler. Amorf silisyum gibi, atomlar arası mesafenin rastgele tarzda değiştiği bazı malzemeler yarıiletken gibi davranabilirler.

Enerji bantlarının momentum (k) uzayında çizilmesi bazı açılardan analizlerde fayda sağlayabilir.Bu durumda E(k) asıl kristal doğrultuları boyunca çizilebilir ve tek bir grafikte gösterilebilir. Asıl kristal doğrultuları boyunca çizilmiş enerji bant diyagramları bize yarıiletkenlerin bazı özelliklerini analiz etme olanağı sağlar. Örneğin Şekil 1.11'de iletkenlik bandındaki minimum enerji ve valans bandındaki maksimum enerji aynı kdeğerlerinde (k=0) oluşur. Bu tür özellik gösteren bir yarıiletkene direkt yasak enerji aralıklı yarıiletken denir. Bu tür yarıiletkenlerin özellikleri daha çok GaAs gibi birleşik haldeki elementleri içerir.Bu tür bir yarıiletkende bir elektron momentum korunumunu bozmadan iletkenlik bandından valans bandına atlayabilir. Yani bir elektron momentumunda değişme olmadan iletkenlik bandından valans bandına atlayabilir. Bu olay yüksek bir oluşma ihtimaline sahiptir ve bu atlamadaki enerji kaybı  $E_g$  enerjisine sahip bir foton formunda yayınlanabilir. Yine Şekil 1.11'de iletkenlik bandındaki minimum enerji ve valans bandındaki maksimum enerji farklı *k* değerlerinde oluştuğunu görüyoruz. Bu tür özellik gösteren bir yarıiletken indirekt yasak enerji aralıklı yarıiletken olarak adlandırılmaktadır. Örneğin silisyum ve germanyum direkt olmayan yasak enerji aralıklı yarıiletkenlerdir.



Şekil 1.11. Direkt ve indirekt yasak enerji aralıklı yarıiletkenler.

Elektriksel ve optik olaylar göz önüne alındığında sadece valans bandının maksimumu ile iletkenlik bandının minimumu civarına yerleşmiş elektronlar önem taşır. Bu alanlar elektronların serbestçe hareket ettiği veya valans elektronlarının kaybedildiği enerji seviyeleridirler.

#### 1.2.2. Elektromanyetik Dalgaların Enerji Bantları İle Etkileşimi

#### 1.2.2.1. Vakumda Elektromanyetik Dalgalar

Bu bölümde hiçbir yükün olmadığı veya akımın olmadığı uzay bölgelerinde elektromanyetik dalgalar incelenecektir. Bu nedenle, Maxwell denklemlerini,

$$\vec{\nabla}.\vec{E} = 0 \tag{1.53}$$

$$\vec{\nabla}.\vec{B} = 0 \tag{1.54}$$

$$\vec{\nabla} X \vec{E} = -\frac{\partial B}{\partial t} \tag{1.55}$$

$$\vec{\nabla}.\vec{B} = \mu_0 \mathcal{E}_0 \,\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \tag{1.56}$$

olarak yazabiliriz. Bunlar E ve B için birinci dereceden kısmı türevli bir diferansiyel denklem takımı oluştururlar Eşitlik (1.55) ve (1.56)'ya rotasyonel uygulanarak  $\vec{\nabla}$ .  $\vec{E}$ =0 ve  $\vec{\nabla}$ .  $\vec{B}$ =0 olduğundan dolayı,

$$\nabla^2 \vec{E} = \mathcal{E}_0 \,\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \tag{1.57}$$

elde edilir. E ve B' nin her Kartezyen bileşeninin üç boyutlu dalga denklemi olan,

$$\nabla^2 f = \frac{1}{\nu^2} \frac{\partial^2}{dt^2} f \tag{1.58}$$

denklemine uyduğu görülür. Böylece Maxwell denklemleri, boş uzayın

$$\nu = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}_0 \cdot \mu_0}} = 3,00x10^8 m/s \tag{1.59}$$

hızıyla yayılan elektromanyetik dalgaları ifade ettiği görülür. Bu sonuçtan ışığın bir elektromanyetik dalga olduğu ortaya çıkar [12].

Çizelge 1.2. Işığın bir elektromanyetik dalga olarak belirli renklere karşılık gelen dalga

1	1 - 1	
boynt	dagar	Dr1
17(7)(1)	UUSUI	UII.
00,0		

Renk	Dalgaboyu
Kırmızı	700630 nm
Sarı	600570 nm
Yeşil	570520 nm
Mavi	480430 nm
Mor	430400 nm

Burada tek renkli sinüssel dalgalara yoğunlaşırsak görünür bölgelerdeki değişik frekanslar farklı renkli ışıklara karşılık gelir. Böyle dalgalara tek renkli dalgalar denir.Bundan başka, dalgaların z yönünde ilerlediğini ve bir x-y bağımlılığının olmadığını varsayarsak yayılma yönüne dik her düzlem üzerinde alanların olmasından dolayı bunlara düzlem dalgalar denir. Bunun yanısıra daha karmaşık formdaki küresel dalgalar da benzer metotlarla incelenebilir [13]. Şekil 1.12'de düzlem ve küresel dalga formları iki boyutta gösterilmiştir. Biz buradaki analizi yaparken daha basit formdaki düzlem dalgaları kullanacağız.



Şekil 1.12. Düzlem ve küresel dalgalarda dalga cephelerinin gösterimi.

İlk olarak z-yönünde ilerleyen E ve B düzlem dalgaları,

$$\vec{E}(z,t) = \vec{E}_{0} \cdot e^{i(\vec{k}z - \omega t)}$$
(1.60)
$$\vec{B}(z,t) = \vec{B}_{0} \cdot e^{i(\vec{k}z - \omega t)}$$
(1.61)

şeklinde ifade edilebilir. Burada dalga denklemi E ve B için Maxwell denklemlerinden türetilmiştir.  $\vec{E}_0$  ve  $\vec{B}_0$  üzerine fazladan sınırlamalar getirilebilir. Özellikle  $\vec{\nabla}.\vec{E} = 0$  ve  $\vec{\nabla}.\vec{B} = 0$  olduğundan dolayı elektromanyetik dalgaların enine dalgalar olduğu ve elektrik ve manyetik alanların birbirine dik olduğu görülür. Ayrıca Faraday yasası,

$$\vec{\nabla} x \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{1.62}$$

kullanılırsa, elektrik ve manyetik dalgaların genlikleri arasında,

$$\vec{E}(r,t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}r - \omega t)n}$$
(1.63)

$$\vec{B}(r,t) = \frac{1}{c}\vec{E}_0 e^{i(\vec{k}r - \omega t)n}(\vec{k}xn) = \frac{1}{c}\vec{k}x\vec{E}$$
(1.64)

Şeklinde bir bağlantı olduğu görülür. Burada n kutuplanma, k ise dalga vektörüdür. E enine olduğundan,

$$n.\vec{k} = 0 \tag{1.65}$$

olacaktır. B' nin enine oluşundan direkt olarak,

$$\vec{E}(r,t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}r - \omega t)n}$$
(1.66)

$$\vec{B}(r,t) = \frac{1}{c}\vec{E}_0 e^{i(\vec{k}r - \omega t)n}(\vec{k}xn) = \frac{1}{c}\vec{k}x\vec{E}$$
(1.67)

denklemlerini buluruz. Yayılma vektörü k ve kutuplanması n olan tek renkli bir düzlem dalgada asıl (gerçel) elektrik ve manyetik alanlar,

$$\vec{E}(r,t) = \vec{E}_0 \cdot \cos(\vec{k} \cdot r - \omega t + \delta) n \tag{1.68}$$

$$\vec{B}(r,t) = \frac{1}{c}\vec{E}_0 \cdot \cos(\vec{k}\cdot r - \omega t + \delta)(\vec{k}\cdot n)$$
(1.69)

olarak yazılabilir.



Şekil 1.13. Elektromanyetik dalgaların ilerleme yönü.

#### 1.2.2.2. Normal Gelişte Yansıma ve Geçme

x ve y düzlemlerinin iki doğrusal ortam arasında sınır oluşturduğunu varsayalım. ω

frekanslı bir elektromanyetik dalganın z yönünde hareket ederek ve x yönünde kutuplaşarak yüzeye sol taraftan yaklaştığı durum Şekil 1.14'de gösterilmiştir.



Şekil 1.14. Ara yüze normal geliş durumunda gelen (E<sub>i</sub>, H<sub>i</sub>, k<sub>i</sub>), geçen (E<sub>t</sub>, H<sub>t</sub>, k<sub>t</sub>) ve yansıyan (E<sub>r</sub>, H<sub>r</sub>, k<sub>r</sub>) elektromanyetik dalgalar.

Burada  $E_I$  ve  $B_I$  gelen,  $E_R$  ve  $B_R$  yansıyan ve  $E_T$  ve  $B_T$  geçen dalgaların sahip olduğu alanları temsil etmektedir. Burada B ve H birbiri ile ortamın manyetik geçirgenliği oranında farklı olduklarından, eşitliklerin daha basit ifadesi için H yerine B kullanılabilir. Bu durumda, gelen dalga için,

$$\vec{E}_{1}(z,t) = \vec{E}_{0_{k}} e^{i(\vec{k}_{1}\vec{z} - wt)} \hat{x}, \qquad (1.70)$$

$$\vec{B}_{l}(z,t) = \frac{1}{\nu_{1}} \vec{E}_{0l} e^{i(\vec{k}_{1}\vec{z} - wt)} \hat{y}$$
(1.71)

ifadesi yazılabilir. Benzer şekilde yansıyan dalga için,

$$\vec{E}_{R}(z,t) = \vec{E}_{0_{R}} e^{i(-\vec{k}_{1}\vec{z} - wt)}\hat{x}, \qquad (1.72)$$

$$\vec{B}_{R}(z,t) = -\frac{1}{v_{1}}\vec{E}_{0_{R}}e^{i(-\vec{k}_{1}\vec{z}-wt)}\hat{y}, \qquad (1.73)$$

geçen dalga için ise

$$\vec{E}_T(z,t) = \vec{E}_{0_T} e^{i(\vec{k}_2 z - wt)} \hat{x}, \tag{1.74}$$

$$\vec{B}_T(z,t) = \frac{1}{v_2} \vec{E}_{0_T} e^{i(\vec{k}_2 z - wt)} \hat{y}.$$
(1.75)

ifadeleri yazılabilir. Bu aşamada z=0 noktasında sınır koşulları uygulanarak dalgaların çözümü elde edilebilir. Normal gelişte yüzeye dik olan hiçbir eleman yoktur, bu yüzden paralel bileşenler için sınır koşulları,

$$\vec{E}_{0_1} + \vec{E}_{0_R} = \vec{E}_{0_T} \tag{1.76}$$

$$\frac{1}{\mu_1} \left( \frac{1}{\nu_1} \vec{E}_{0_1} - \frac{1}{\nu_1} \vec{E}_{0_R} \right) = \frac{1}{\mu_2} \left( \frac{1}{\nu_2} \vec{E}_{0_T} \right). \tag{1.77}$$

olarak yazılabilir. Burada yeni bir değişken,

$$\beta \equiv \frac{\mu_1 v_1}{\mu_2 v_2} = \frac{\mu_1 n_2}{\mu_2 n_1}.$$
(1.78)

olarak tanımlanırsa, sınır koşulu,

$$\vec{E}_{0_1} - \vec{E}_{0_R} = \beta \vec{E}_{0_T} \tag{1.79}$$

şeklini alır. Eşitlik (1.76) ve (1.79) kullanılarak yansıyan ve geçen dalga genlikleri, gelen dalga genliği cinsinden,

$$\vec{E}_{0_R} = \left(\frac{1-\beta}{1+\beta}\right) \vec{E}_{0_1}, \qquad \vec{E}_{0_T} = \left(\frac{2}{1+\beta}\right) \vec{E}_{0_1}$$
(1.80)

olarak bulunur.  $v_2 > v_1$  ise yansıyan dalga aynı evreli (yönelimi doğru) ve  $v_2 < v_1$ durumunda ise evre dışıdır (ters dönmüş). Yansıyan dalga için,

$$\vec{E}_{0R} = \left| \frac{v_{2-}v_1}{v_2 + v_1} \right| \vec{E}_{01}$$
(1.81)

$$\vec{E}_{0R} = \left(\frac{2\nu_2}{\nu_2 + \nu_1}\right) \vec{E}_{01} \tag{1.82}$$

$$\vec{E}_{0R} = \left(\frac{2n_1}{n_2 + n_1}\right) \tag{1.83}$$

olur. Gelen ışının birim başına ortalama gücü,

$$I = \frac{1}{2}\epsilon_0 \nu E^2 \tag{1.84}$$

ile verilir.  $\mu_1 = \mu_2 = \mu_0$  durumu geçerli olursa o zaman yansıyan ışının şiddetinin gelen şiddete oranı,

$$R \equiv \frac{I_R}{I_1} = \left(\frac{E_{OR}}{E_{O1}}\right)^2 = \left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}\right)^2 \tag{1.85}$$

olur. Diğer taraftan geçen şiddetin gelen şiddete oranı ise,

$$T \equiv \frac{I_{\rm T}}{I_1} = \frac{\epsilon_2 \nu_2}{\epsilon_1 \nu_1} (\frac{E_{OR}}{E_{O1}})^2 = \frac{4n_1 n_2}{(n_1 + n_2)^2}$$
(1.86)

olur. Burada, R yansıtma katsayısı adını ve *T* ise geçirme katsayısı adını alır. Bu katsayılar yansıyan enerjinin oranı ile geçen enerjinin oranını gösterir. Soğurma faktörünün olmadığı durumlarda enerji korunumundan dolayı R + T = 1 olması gerekir. Örnek verecek olursak, ışık havadan  $(n_1 = 1)$  cama  $(n_2 = 1,5)$  geçtiğinde, R=0,04 ve T=0,96'dır. Bu durum doğal olarak ışığın enerjisinin büyük bir oranının geçtiği anlamına gelir.

#### 1.2.2.3. İletkenlerde Elektromagnetik Dalgalar ve Soğurma

Daha önce serbest yük yoğunluğu  $\rho f$  ve serbest akım yoğunluğu  $j_f$ 'nin sıfır olduğunu kabul ederek ondan sonraki her şeyi buna dayandırmıştık. Bir vakumda, cam veya su gibi yalıtkan bir malzeme içinde dalga yayılmasından bahsediyorsa böyle bir kısıtlamanın makul olduğunu söyleyebilir. Ancak iletkenler halinde yükün akışını bağımsız şekilde kontrol edilemez ve genelde  $\vec{J}f$  sıfır değildir. Ohm yasasına göre bir iletkendeki akım yoğunluğu elektrik alanla orantılıdır.

$$\vec{I}_f = \sigma \vec{E}.$$

Burada doğrusal ortamlar için Maxwell denklemleri,

$$\vec{\nabla}. \ \vec{E} = \frac{1}{\epsilon} \vec{\rho}_f, \tag{1.88}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial B}{\partial t},\tag{1.89}$$

$$\vec{\nabla} x \vec{B} = \mu \sigma E + \mu \in \frac{\partial E}{\partial t} \tag{1.90}$$

şeklini alır. Şimdi serbest yük için süreklilik denklemi,

$$\vec{\nabla}X\vec{J}_f = -\frac{\partial\rho f}{\partial t} \tag{1.91}$$

ve onunla birlikte Ohm yasası ve Gauss yasası türdeş doğrusal bir ortam için

$$\frac{\partial \rho f}{\partial t} = -\sigma \left( \vec{\nabla} . \vec{E} \right) = -\frac{\sigma}{\epsilon} \rho f \tag{1.92}$$

bağlantısını ortaya çıkarır. Buradan da,

$$\rho f(t) = e^{-\left(\frac{\sigma}{\epsilon}\right)t} \rho f(0). \tag{1.93}$$

sonucuna ulaşılır. Bu sonuçlara baktığımızda bir başlangıç  $\rho f$  (0) serbest yükü bir  $\tau \equiv \epsilon/\sigma$  belirtken zamanı içinde kaybolduğunu görürürüz. Bu ise bir iletken üzerine koyduğunuz bir miktar serbest yükün kenarlara akacağı şeklinde bilinen gerçeği yansıtmaktadır. $\tau$  zaman sabiti bir iletkenin ne kadar iyi olduğunun bir ölçüsünü vermektedir. Mükemmel bir iletken için  $\sigma = \infty$  ve  $\tau = 0$ 'dır.İyi bir iletken için  $\tau$  problemdeki diğer ilgili zamanlardan çok daha az olduğunu görmekteyiz. Kötü bir iletken için  $\tau$  problemdeki belirtgen zamanlardan daha büyüktür ( $\tau >> 1/\omega$ )<sup>11</sup>. Şu an için biz bu geçici davranışları ele almayacağız ve birikmiş herhangi bir yükün yok olmasını bekleyeceğiz. Buna göre  $\rho_f=0$ 'dır ve şunlar yazılabilir:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0, \tag{1.94}$$

$$\vec{\nabla}.\vec{B}=0, \tag{1.95}$$

$$\vec{\nabla} x \vec{E} = -\frac{\partial B}{\partial t},\tag{1.96}$$

$$\vec{\nabla} x \vec{B} = \mu \in \frac{\partial E}{\partial t} + \mu \sigma E \tag{1.97}$$

Önceden olduğu gibi (1.96) ve (1.97)'e rotasyoneli uygulayarak E ve B için değiştirilmiş dalga denklemlerini elde ettiğimizi görüyoruz:

$$\nabla^{2}E = \mu \in \frac{\partial^{2}E}{\partial t^{2}} + \mu\sigma\frac{\partial E}{\partial t}, \nabla^{2}B = \mu\sigma\frac{\partial^{2}B}{\partial t^{2}} + \mu\sigma\frac{\partial B}{\partial t}.$$
(1.98)

Görüldüğü gibi bu denklemler hala düzlem dalga çözümleri kabul ederler

$$\vec{E}(z,t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}z - \omega t)},$$
(1.99)

$$\vec{B}(z,t) = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k}z - \omega t)},$$
 (1.100)

Ancak bu sefer dalga sayısı k karmaşıktır ve

$$k^2 = \mu \epsilon \omega^2 + i\mu \sigma \omega \tag{1.101}$$

olarak ifade edilir. Karekök alınarak,

$$\vec{k} = \vec{k} + iK,\tag{1.102}$$

bulunur. Burada,

$$k \equiv \omega \sqrt{\frac{\epsilon \mu}{2}} \left[ \sqrt{1 + \left(\frac{\sigma}{\epsilon \omega}\right)^2 + 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$
(1.103)

$$K \equiv \omega \sqrt{\frac{\epsilon \mu}{2}} \left[ \sqrt{1 + \left(\frac{\sigma}{\epsilon \omega}\right)^2 - 1} \right]^{\frac{1}{2}}$$
(1.104)

olarak ifade edilir.  $\tilde{k}$ 'nın sanal kısmı dalganın sönümüne yol açacaktır, yani artan z ile genlik azalacaktır. Bu durumda,

$$\vec{E}(z,t) = \vec{E}_0 e^{-kz} \cdot e^{i(kz - \omega t)}$$
(1.105)

$$\vec{B}(z,t) = \vec{B}_0 e^{-\vec{k}z} \cdot e^{i(\vec{k}z - \omega t)}$$
(1.106)

olur.



Şekil 1.15. İletkende ilerleyen elektromanyetik dalgalar.

Genliği 1/e 'ye eşit (yaklaşık1/3) bir çarpan kadar azaltmak için gerekli uzaklığa deri kalınlığı adı verilir ve

$$d \equiv \frac{1}{K} \tag{1.107}$$

olarak ifade edilir. Deri kalınlığı, dalganın iletken içine ne kadar girdiğinin ölçüsüdür. Buna ek olarak malzemenin soğurma katsayısı ise

$$\alpha = \frac{2}{d} \tag{1.108}$$

olarak ifade edilir.  $\tilde{k}$ ' nıngerçel kısmı ise alışılmış şekilde dalga boyunu, yayılma hızını ve kırılma indisini belirler. Yani,

$$\lambda = \frac{2\Pi}{k}$$
(1.109)  
$$\nu = \frac{\omega}{k}$$
(1.110)

$$n = \frac{ck}{\omega} \tag{1.111}$$

olur. Zayıflatılmış düzlem dalgalar her  $\tilde{E}_0$  ve  $\tilde{B}_0$  için değiştirilmiş dalga denklemini sağlar. Eksenlerimizi E'nin kutuplanması x yönünde olacak şekilde yöneltirsek,

$$\vec{E}(z,t) = \vec{E}_0 e^{-\vec{k}z} \cdot e^{i(\vec{k}z - \omega t)} \cdot \hat{x}$$
 (1.112)

$$\vec{B}(z,t) = \vec{B}_0 e^{-\vec{k}z} \cdot e^{i(\vec{k}z - \omega t)} \cdot \hat{y}$$
(1.113)

yazılabilir. Her karmaşık sayı gibi,  $\vec{k}$ 'da kutupsal formda,

$$\vec{k} = K. e^{i\Phi} \tag{1.114}$$

olarak ifade edilebilir. Bu durumda,

$$K \equiv |k| = \sqrt{k^2 + K^2} = \omega \sqrt{\epsilon \mu \sqrt{1 + (\frac{\sigma}{\epsilon \omega})^2}}$$
(1.115)

ve

$$\Phi = \tan^{-1}\left(\frac{K}{k}\right) \tag{1.116}$$

olacaktır. Karmaşık genlikler  $\tilde{E}_0 = E_0 e^{i\delta\epsilon}$  ve  $\tilde{B}_0 = B_0 e^{i\delta\epsilon}$  birbirine,

$$B_0 e^{i\delta B} = \frac{K e^{i\delta\epsilon}}{\omega} \cdot E_0 e^{i\delta\epsilon}$$
(1.117)

olacak şekilde bağlıdır. Burada elektrik ve manyetik alanların artık aynı evrede olamadığı görülmektedir. Aralarındaki faz farkı,

$$\delta_B - \delta_E = \Phi \tag{1.118}$$

Olarak ifade edilebilir. Gerçekte manyetik alan elektrik alanın gerisinde kalır. Aynı zamanda E ve B'nin gerçel genlikleri

$$\frac{B_0}{E_0} = \frac{K}{\omega} = \sqrt{\epsilon \mu \sqrt{1 + (\frac{\sigma}{\epsilon \omega})^2}}$$
(1.119)

Şeklinde birbirine bağlıdır. Son olarak (gerçel) elektrik ve manyetik alanlar,

$$\vec{E}_{(z,t)} = \vec{E}_0 e^{-\vec{k}z} \cos(kz - \omega t + \delta_E) \,.\, \hat{x}$$
(1.120)

$$\vec{B}_{(z,t)} = \vec{B}_0 e^{-\vec{k}z} \cos(kz - \omega t + \delta_E + \Phi) \cdot \hat{y}$$
(1.121)

#### 1.2.2.4. Optik Geçirgenlik Deneyleri İle Enerji Bantlarının İncelenmesi

İnce filmlerin yasak enerji bant aralıklarının optik geçirgenlik deneylerinden elde edilen geçirgenlik spektrumları kullanılarak hesaplanması mümkündür. Optik bant aralıklarının hesaplanabilmesi için, iyi bilinen Beer Lambert Yasası kullanılabiliriz. Beer Lambert Yasasında, bir malzeme içinde ilerleyen ışığın şiddetinin ilerlediği yolun uzunluğuna göre azalma miktarını görebiliriz. Burada, ışık şiddetinin azalma nedeni ışığın malzeme tarafından ilerledikçe soğurulmasıdır. Beer Lambert Yasası [14],

$$I = \frac{I_0}{e^{\alpha z}} \tag{1.122}$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada  $\alpha$  parametresince filmin soğurma katsayısını,  $I_0$  parametresi filme düşen ışık şiddetini, I parametresi filmin içinden karşıya geçen ışık şiddetini gösterir. Eşitlik (1.122)'de z parametresi ise ışığın film içerisinde z-ekseninde aldığı toplam yolu temsil eder. Uyguladığımız deneylerde, malzeme içinden geçen ışık tüm malzemeyi tamamen geçerek dedektöre ulaştığından dolayı, z parametresi aynı zamanda malzemenin kalınlığını da ifade etmektedir. Beer Lambert Yasası kullanılarak, soğurma katsayısı  $\alpha$  denklemden çekilebilir. Bu durumda,

$$e^{\alpha z} = \frac{I_0}{I} \tag{1.123}$$

olur. Her iki tarafın doğal logaritması hesaplanacak olursa,

$$\ln(e^{\alpha z}) = \ln\left(\frac{I_0}{I}\right) \tag{1.124}$$

olur. Buradan,

$$\alpha z = \ln \left( \frac{I_0}{I} \right) \tag{1.125}$$

olur. Buradan  $\alpha$  alınırsa,

$$\alpha = \frac{1}{z} ln \left(\frac{l_0}{l}\right) \tag{1.126}$$

olduğu görülür. Burada I<sub>0</sub>/I parametresi, malzemeye gönderilen ışık şiddetinin malzemeden karşıya geçirilen ışık şiddetine oranını gösterir. Bu oranın aynı zamanda geçirgenlik deneyleri sonucu kaydedilen yüzde geçirgenlik oranlarını ifade ettiği de görülmektedir. Bu durumda, Eşitlik (1.109),

$$\alpha = \frac{1}{z} ln \left( \frac{100}{\%T} \right) \tag{1.127}$$

şeklini alır. Formülde kullanılan %T, geçirgenlik deneyleri sonucunda elde edilen geçirgenliğin yüzde olarak değeridir. *z* ise ışığın numune içerisinde aldığı yoldur.

Bu aşamada, numunelerin optik yasak bant enerjilerinin direkt veya indirekt olarak sınıflandırılması ve daha sonra da değerlerin hesaplanması gerektiği görülmektedir. Hesaplamalar için iyi bilinen Tauc yasasını [15] uygulamak mümkündür. Bu yasa,

$$\left(h\nu - E_g\right)^p = C(\alpha h\nu) \tag{1.128}$$

şeklinde gösterilir. Burada *C* birimsiz bir sabit, *hv* gelen ışığın enerjisi,  $E_g$  optik bant aralığı,  $\alpha$  ise soğurma katsayısı şeklindedir. Formüldeki *p* parametresi ise numunenin optik yasak bant enerjisinin direkt veya indirekt olduğunu gösterir. Bu parametrenin değeri direkt geçişler için <sup>1</sup>/<sub>2</sub> iken, indirekt geçişler için 2 olur. Denklemi indirekt geçişler için ele alırsak, p nin değerini yerine koyarak yazdığımızda,

$$\left(h\nu - E_g\right)^2 = C(\alpha h\nu) \tag{1.129}$$

olarak görülecektir. Bu durumda soğurma katsayısı α'nın gelen ışığın enerjisine göre grafiği çizildiğinde, parabolik bir davranış gözlemlenmesi beklenir.

## 2. MATERYAL VE YÖNTEM

### 2.1. RF PLAZMA FİLM ÜRETİM SİSTEMİ

Çalışmamızda kullanılan tüm a-C:H ince filmlerin üretiminde bir plazma kazanı kullanılmıştır. Plazma oluşturmak için iki çelik silindirik elektrota 40 MHz frekansta (Radyo Frekansı) elektriksel güç uygulanmıştır. Şekil 2.1'de çalışmamızda kullanılan plazma kazanının fotoğrafi verilmiştir [16]. İçerisinde plazma oluşturulan kazana yerleştirilen 1 mm kalınlıktaki cam lamellerin üzerine a-C:H ince filmler kaplanmıştır. Cam lamellerin geçirgenlik ölçümlerinde avantaj sağlaması nedeniyle 1 mm kalınlıklara sahip olmaları tercih edilmiştir. Bu çalışmada kullanılan tüm ince filmler 0,2 Torr çember basıncı altında15 dakika süre ile plazmaya maruz bırakılarak kaplanmıştır. Filmler üretilirken, kazana 2, 3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika olarak farklı gaz akış hızları uygulanarak, gaz akış hızı parametresinin film kalınlığı ve optik özelliklere etkisi incelenmeye çalışılmıştır.



Şekil 2.1. a-C:H ince film üretiminde kullanılan plazma kazanı [16].

### 2.2. MORÖTESİ-GÖRÜNÜR SPEKTROMETRE DENEY SİSTEMİ

Üretilen a-C:H ince filmlerin optik bant aralıklarının incelenmesi için optik geçirgenlik deney düzeneği kullanılmıştır. Deney düzeneği olarak bir PG instruments Ltd marka T70+ morötesi-görünür bölge spektrometrecihazı kullanılmıştır. Cihaz temel çalışma prensibi olarak, geçirgenlik spektrumu incelenecek numunelere 300nm dalgaboyundan 1100nm dalgaboyuna uzanan bir bölgede ışık göndererekışığın hangi dalgaboyunda malzeme tarafından hangi oranlarda karşıya geçirildiğini ölçmektedir. Bu ölçümler sonucu yapılan hesaplamalarla malzemenin direkt veya indirekt optik bant aralığına sahip olduğu ve bu bant aralığının enerji değeri ortaya çıkarılmıştır. Tüm geçirgenlik ölçümleri, cihaz kaynağından gelen ışık, numuneler üzerine dik olarak düşecek geometride gönderilerek tamamlanmıştır.



Şekil 2.2. Geçirgenlik deneylerinde kullanılan spektrometrenin şematik gösterimi.

### **3. BULGULAR VE TARTIŞMA**

Bu bölümde, çalışmamız süresince yapılan deneylerin sonuçları ve elde edilen verilerin analizlerinden çıkarılan sonuçlar üzerinde durulacaktır.

### 3.1. GEÇİRGENLİK ÖLÇÜMLERİ

PG instrumentsLtd/T70+UV/VIS optik spektrometre cihazını geçirgenlik optik geçirgenlik deneylerinde kullanmadan önce cihazın kalibrasyonu yapılmalı ve böylece yapılan ölçümlerin güvenilir olması sağlanmalıdır. Kalibrasyon işleminde ana amaç cihazın ışık dedektörünün ışık şiddetlerini doğru algılamasının sağlanmasıdır. Bunu gerçekleştirmek için, öncelikle cihaza hiç bir numune yerleştirilmeden arka plan ölçümü alınması gerekir. Daha sonra yine numune yerleştirilmeden tekrar ölçüm alınarak optik dedektörün sağlıklı çalışıp çalışmadığı test edilmiş olur. Bu test sonucu elde edilen sonuç Şekil 3.1'de gösterilmiştir. Bunun sonucunda ışık şiddetinin optik dedektör tarafından bütün dalgaboylarında doğru olarak algılamasında bir problem olmadığı saptanmıştır.



Şekil 3.1. PG instrumentsLtd/T70+UV/VIS optik spektrometre cihazının ışık şiddeti kalibrasyonu için çizilen grafik.

Numunelerin kaplanmasında altlık olarak kullanılan cam lamelin optik geçirgenlik

spektrumu, optik spektrometre cihazının ışık şiddeti kalibrasyonu aşamasından sonra kaydedilmiştir. Şekil 3.2'de bu cam lamelin optik geçirgenlik spektrumu gösterilmiştir. İnce filmler cam lameller üzerine kaplanarak üretildiğinden dolayı, numunelerin optik geçirgenliklerinin doğrudan cam üzerinde ölçülmesi hatalı olacağını görüyoruz. Bunun nedeni, bu durumda ölçüm sonuçlarının aynı anda hem cama hem de numuneye ait olacak olması olarak açıklanabilir. Bu sonuçlardan cama ait olan geçirgenlik verilerinin yok edilmesi gerekmektedir. Bu nedenle ölçüm sonucunda elde edilen verilerin numunelerin optik geçirgenlikleri incelenirken kullanılması şarttır. Bunu yapmak için cama ve numuneye ait geçirgenlik spektrumu verileri, sadece camın geçirgenlik spektrumu verilerine bölünmesi gerekmektedir. Böylece, ortaya çıkacak geçirgenlik verileri, cam ve numuneye değil, sadece numuneye ait olacağını saptayabiliriz. Bu çalışma çerçevesinde yapılan tüm ölçümlerde, bu ayırma işlemi uygulanarak numunelere ait sonuçlar verilmiştir.



Şekil 3.2. PG instrumentsLtd/T70+UV/VIS optik spektrometre cihazının dalgaboyu kalibrasyonu için çizilen grafik.

Deneylerde ilk olarak 2 cm<sup>3</sup>/dakika, 3 cm<sup>3</sup>/dakika ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızları uygulanarak üretilen a-C:H incefilmlerin optik geçirgenlik spektrumları optik spektrometre ile kaydedilmiştir. Daha sonra bu veriler üzerinden kaplamasız yalıncam lamellerin spektrumu için düzeltmesi yapılmıştır. Düzeltme işlemi yapıldıktan sonra elde edilen spektrumlar Şekil 3.3'te ifade edilmiştir.



Şekil 3.3. 2 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen filmlerin optik geçirgenlik spektrumu.

Şekiller incelendiğinde, 3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızlarında üretilen ince filmlerin nispeten daha dar bir dalga boyu aralığında gerçeklesen bir soğurma karakteristiğine sahip olduğu görülmektedir. Öte yandan 2 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen ince film daha geniş bir dalga boyu aralığında gerçeklesen bir soğurma karakteristiğine sahiptir. Dar dalga boyu aralığında gerçekleşen soğurma karakteristiğine sahip numunelerde ışık geçirgenliğinin azalmaya başladığı ve tamamen sıfırlandığı dalga boyu aralığı ve buna bağlı olarak bu dalga boyu aralığının karşılığındaki enerji aralığı da çok geniş olmamaktadır. Geniş dalga boyu aralığında gerçekleşen soğurma karakteristiğine sahip numunelerde ise bu dalga boyu aralığı diğerlerine nispeten daha geniştir. Buradan nicel bir analiz yapmamız gerekirse, dar karakteristiğe sahip olan ince filmlerin geniş karakteristiğe sahip olan ince filmlere göre nispeten daha düzensiz olan amorf bir yapıya sahip olduğunu söyleyebiliriz. Bu durumda, 3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızları ile üretilen numunelerin, 2 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızı ile üretilenlerden daha düzenli yapılara sahip oldukları sonucu çıkarılabilir. Daha önce yapılan bir çalışmada aynı parametrelerle ancak 13,56 MHz RF frekansı altında üretilen ince filmler incelenmiştir [17]. Bu çalışma sonucunda elde edilen geçirgenlik spektrumları incelendiğinde, 40 MHz frekans altında ve2 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızı ile üretilen numunenin geçirgenlik spektrumunun 13,56 MHz frekans altında ve aynı akış hızı ile üretilen numunenin geçirgenlik spektrumundan farklı olduğu görülmektedir. Ancak 3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızları ile üretilen numunelerinin spektrumlarında bu fark görülmemektedir. Buradan, 2 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızı ile üretilen numuneler için plazma frekansının filmlerin elektriksel ve optiksel özelliklerini etkileyen önemli bir parametre olduğu çıkarılabilir. Tabi ilerleyen bölümlerde yapılacak detaylı analizler bu sonucun doğru olup olmadığını daha derinlemesine ortaya koyacaktır.



Şekil 3.4. 3 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen filmlerin optik geçirgenlik spektrumu.



Şekil 3.5.4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen filmlerin optik geçirgenlik spektrumu.

İnce filmlerin yapısı hakkında daha detaylı ve nicel bir analiz için X-ışını saçılma deneylerine başvurmak gerekmektedir. Bu aşamada elimizde bir X-ışını saçılma deney sistemi olmadığından, çalışmamız kapsamında böyle bir analizi gerçekleştirmemiz mümkün olmamıştır.

#### 3.2. OPTİK BANT ARALIKLARININ HESAPLANMASI

İnce filmlerin optik geçirgenlik spektrumu kaydedildikten sonraki aşama, bu veriler kullanılarak optik bant aralıklarının hesaplanması işlemidir. Optik bant aralıklarının hesabında, daha önceki bölümlerde Eşitlik (1.105)'te bahsedilen Beer Lambert Yasası kullanılabilir. Bu yasada, bir malzeme içerisinde ilerleyen ışığın şiddetinin, ilerleme ekseni doğrultusunda mesafenin değişmesine göre kaybetiği şiddet görülmektedir. Bu şiddet kaybının sebebi, ışığın içerisinden ilerlediği yapı tarafından çeşitli nedenlerle soğurulmasıdır. Yapılan tüm deneylerde, ışık tüm malzemeyi geçerek optik dedektöre ulaştığından, ışığın aldığı toplam yol, deney yapılan örneğin z-ekseni doğrultusundaki kalınlığı olarak da alınabilir.

Beer Lambert Yasası'nın modifiye edilmesi sonucu,  $\alpha$  parametresi denklemden çekilerek elde edilen Eşitlik (1.109) kullanılarak, malzemenin ışığın farklı dalga boylarına denk gelen soğurma katsayıları rahatça hesaplanabilir. Eşitlik (1.109)'daki  $I_0/I$  parametresi, malzemeye gönderilen ışık şiddetinin, malzemeyi geçerek optik dedektöre ulaşabilen ışık şiddetine oranının tersini göstermektedir. Başka bir deyişle bu oran, 100 rakamının geçirgenlik deneyleri sonucu elde edilen orana bölünmüş halidir. Bu durum Eşitlik (1.110)'da daha açık bir şekilde ifade edilmiştir.

Yukarıda bahsedildiği gibi, üretilen ince filmlerin optik bant aralıklarının hesaplanması için, z değerinin, yani örneklerin kalınlıklarının bilinmesi gerekmektedir. İnce filmlerin kalınlıkları elipsometre cihazı kullanılarak ölçülmüştür. Ölçümler sonucu 40 MHz plazma frekansı altında ve 2 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen ince filmin kalınlığı 585 Å, 3 cm<sup>3</sup>/dakika akıs hızında üretilen ince filmin kalınlığı 758 Å ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akıs hızında üretilen ince filmin kalınlığı ise 684 Å olarak bulunmuştur. Bu değerler daha önce 13,56 MHz üretim frekansı altında üretilen ince filmler üzerine yapılan çalışmada elde edilen sonuclardan bazı farklılıklar göstermektedir [17]. Bahsedilen calısmada, 2, 3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen numuneler için kalınlık değerleri sırasıyla 580, 610 ve 670 Å olarak ölçülmüştür. Bu değerlerle kıyaslandığında, deneysel belirsizlikler dahilinde birbirlerine yakın oldukları görülmektedir. Bu da bize plazma frekansının ince film kalınlığı üzerinde herhangi önemli bir etkisi olmadığını göstermektedir. Bunun yanısıra, 13,56 MHz frekans altında üretilen numunelerde, akış hızı arttıkça film kalınlığının arttığı gözlemlenmektedir [17]. Plazma akış hızının artırılmasının, plazma içerisindeki elektronların ve iyonların yoğunluğu, elektronları kinetik enerjisi ve iyon enerjilerinin kimyasal etkileri gibi birçok plazma özelliğinin değişmesine neden olduğu öne sürülmüştür. Aynı zamanda, plazma akış hızının, plazma çemberi içinde bulunan gaz miktarını belirleyerek çözünme derecesini etkileyeceği düşünülmektedir [19]. Yine 13,56 MHz altında yapılan çalışmada, plazma akış hızının artırılmasına rağmen, plazma gücü belirli bir doygunluk değerine ulaştığı zaman, film kalınlığı değerlerinin de doygunluğa ulaştığı ve bu değerden sonra artmadığı gözlemlenmiştir [17]. Bu durum elektronların kinetik enerjilerinin ve yoğunluklarının da bir doygunluk noktasına ulaşması sonucu çarpışma ve difüzyon oranlarında bir azalma gerçekleşmesi ile açıklanmıştır [20]. Ancak, bu çalışmada incelenen 40 MHz plazma frekansı altında üretilen ince filmlerde böyle düzenli bir değişim görülmemektedir. Buradan plazma akış hızı ile film kalınlığı arasında doğrudan bir bağlantı kurmak mümkün olmamıştır. Bundan, 40 MHz plazma frekansı altında üretilen ince filmler için, plazma gücü doygunluk değerinin çok düşük değerlerde gerçekleştiği ve bu nedenle gaz akış hızının film kalınlığına bu nedenle doğrudan görülebilir bir etkisi olmadığı çıkarılabilir. Bunların yanı sıra, çalışmalar sonucu, yüzey pürüzlülüğü miktarı arttıkça cama gerçekleşen yapışma oranlarının plazma bileşenlerinin camdan ayrılma oranlarındaki artıştan dolayı düştüğü de gözlemlenmiştir [21].

Bu kalınlık değerleri kullanılarak bulunan soğurma katsayılarının, ince filmlere gönderilen ışığın enerjisine bağlı grafikleri sırasıyla 2,3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızlarında üretilmiş ince filmler için Şekiller 3.6, 3.7 ve 3.8'de verilmiştir.



Şekil 3.6. 2 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen filmlerin soğurma katsayılarının, gelen ışığın enerjisine göre grafiği.



Şekil 3.7. 3 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen filmlerin soğurma katsayılarının, gelen ışığın enerjisine göre grafiği.



Şekil 3.8. 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen filmlerin soğurma katsayılarının, gelen ışığın enerjisine göre grafiği.

Şekillerden de görüldüğü gibi, analizlerin yapılması için ışığın yüksek soğurulmasının gözlemlendiği bölge seçilmiştir. Bunun nedeni, soğurma katsayısı ile ilgili denklemlerin yüksek soğurma bölgesinde geçerli olmasıdır.

Daha önceki bölümlerde bahsedildiği gibi, optik bant aralıklarının değerlerinin hesaplayabilmek, bu bant geçişlerini direkt veya indirekt olarak sınıflandırmadan mümkün olamamaktadır. Bu sınıflandırmayı yapabilmek için, daha önce Eşitlik (1.111)'de verilen Tauc Yasası'nı kullanmak mümkündür. Tauc Yasası'nda geçen pparametresi, ince filmlerdeki optik bant aralığının türünü belirleyen kritik parametredir. Bu parametrenin değeri direkt geçişler için  $\frac{1}{2}$  iken, indirekt geçişler için 2 olur. Bu durumda optik bant aralıklarının türünün belirlenmesi için  $\alpha$  soğurma katsayısının hvgelen ışığın enerjisine göre grafiklerinden, her bir ince film için p parametresinin değeri, grafiğin davranışına göre gözlemlenebilir. Şekilller 3.6, 3.7 ve 3.8 incelendiğinde, tüm şartlarda üretilen ince filmler için çizilen grafiklerin parabolik bir doğaya sahip olduğu görülmektedir. Bu davranış ancak p parametresinin değerinin 2 olması ile sağlanabilir. p parametresinin değerinin 2 olması ise tüm ince filmlerdeki optik bant aralıklarının kristal yapılarda görülen indirekt bant aralığına benzer bir yapıya sahip olduğu anlamına gelmektedir.

Analizleri daha anlaşılır hale getirmek için Eşitlik (1.112)'nin her iki tarafının karekökü alınabilir. Bu durumda,

$$(h\nu - E_q) = (C(\alpha h\nu))^{1/2}$$
(3.1)

elde edilir. Eşitlik (3.1)'den de görüldüğü gibi, gelen ışığın enerji değeri ile  $(\alpha h\nu)^{1/2}$  değeri arasında doğrusal bir ilişki vardır. Bu durumda,  $(\alpha h\nu)^{1/2}$  değerinin  $h\nu$  değerine göre grafiği çizildiğinde, bu grafikte

$$(\alpha h v)^{1/2} = 0 \tag{3.2}$$

olduğu durumda,

$$\left(h\nu - E_g\right) = 0\tag{3.3}$$

olacaktır. Buradan,

$$h\nu = E_g \tag{3.4}$$

anlamına gelir. Bu yolla, optik bant aralığı değeri  $E_{\rm g}$  hesaplanmış olur.

Bu analizleri yapabilme amacıyla, tüm şartlarda üretilen ince filmler için  $(\alpha h\nu)^{1/2}$ -  $h\nu$ grafikleri şekiller 3.9, 3.10 ve 3.11'de gösterilmiştir. Şekiller incelendiğinde, beklendiği gibi doğrusal karakteristiğe sahip oldukları görülmektedir. Yukarıda bahsedildiği gibi,  $(\alpha h\nu)^{1/2} = 0$  olduğu noktadaki enerji değeri bize her bir ince film için optik bant aralığı enerji değerinin verecektir.



Şekil 3.9. 2 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen filmler için  $(\alpha h\nu)^{1/2}$  değerlerinin gelen ışığın enerjisine göre değişim grafiği.



Şekil 3.10. 3 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen filmler için  $(\alpha h\nu)^{1/2}$  değerlerinin gelen ışığın enerjisine göre değişim grafiği.



Şekil 3.11. 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen filmler için  $(\alpha h\nu)^{1/2}$  değerlerinin gelen ışığın enerjisine göre değişim grafiği.

Bu değeri hesaplayabilmek için, deneysel verilere en iyi uyan teorik doğruların denklemleri belirlenmiştir. Bu denklemler kullanılarak optik bant aralığı değerleri kolayca hesaplanmıştır. Belirlenen teorik doğru denklemleri ve bunlar kullanılarak hesaplanan optik bant aralığı değerleri Çizelge 3.1'de verilmiştir. Çizelgede aynı

zamanda, tamamlayıcı veri olarak daha önceden aynı şartlarda çalışılmış, ancak 5 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilmiş ince filme ait veri de gösterilmiştir [18]. Bu çalışma sonucu elde edilen optik bant aralığı değerlerinin, daha önce yapılan çeşitli çalışmalar sonucu elde edilen sonuçlar ile uyumlu olduğu görülmektedir [22]-[25].

_							
	Güç	CH4 Akış	Basınç	Kaplama	Kalınlık	Teorik	Eg
		Hızı		Süresi		Doğrunun	
_	(W)	$(cm^3/dak)$	(Torr)	(dak)	$(\AA)$	Denklemi	(eV)
	100	2	0,2	15	585	y = 320x - 450	1,41
	100	3	0,2	15	758	y = 364x - 537	1,48
	100	4	0,2	15	684	y = 376x - 534	1,42
	100	5	0,2	15	798	y = 182x - 157	0,86

Çizelge 3.1. 2, 3, 4 ve 5 [18] cm<sup>3</sup>/dak akış hızlarında üretilen a-C:H ince filmler için hesaplanan  $E_g$  değerleri.

Çizelge 3.1 incelendiğinde, üretilen ince filmlerin kalınlıklarının sistematik olarak gaz akış hızına belirgin bir bağımlılık göstermediği görülmektedir. Ölçülen kalınlık değerlerinin birbirine oldukça yakın olduğu ayrıca görülmüştür. Bunun nedeni, üretim sırasında uygulanan plazma gücünün sabit olması olarak açıklanabilir. Plazma gücünün sabit olması, plazma iyonlaşma hızının da sabit olması anlamına gelmektedir. Plazma iyonlarının ortamdaki varlıklarının film kalınlığını etkileyen en önemli faktör olması nedeniyle, sabit plazma gücü uygulanarak üretilen ince filmlerin akış hızında belirlenen değişikliklere rağmen kalınlıklarının çok büyük farklılık göstermemeleri doğal olarak beklenen bir sonuçtur. Aynı şartlarda, ancak 13,56 MHz plazma frekansı altında üretilen ince filmler icin elde edilen optik bant aralığı değerlerinin plazma akış hızına göre bir değişiklik göstermediği rapor edilmiştir [17]. Yapılan çalışmada, optik bant aralığı değerleri 2,3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika gaz akış hızları için sırasıyla 1,45, 1,55 ve 1,55 eV olarak hesaplanmıştır. Bu çalışmada, 40 MHz plazma frekansı altında üretilen ince filmler için ise durumun farklı olduğu, optik bant aralığı değerlerinin gaz akış hızına göre bir değişim gösterdiği görülmektedir. Burada, plazma frekansının optik bant aralığı değerleri için belirleyici bir etkisi olduğu çıkarılabilir.

Bunun yanısıra, ince filmlerin optik bant aralığı enerjilerinin üretim aşamasında seçilen CH<sub>4</sub> akış hızına nasıl bağlı olduğu çizelgeden doğrudan izlenememektedir. Bu bağımlılığın doğasını açığa çıkarmak için matematiksel bir analiz gerekli olacaktır.

### 3.3. TEORİK ANALİZ

Yukarıda bahsedildiği üzere, ince filmlerin optik bant aralığı enerjilerinin üretim aşamasında seçilen CH<sub>4</sub> akış hızına bağlılığını analiz etmek için, elde edilen veriler kullanılarak, optik bant aralığı – CH<sub>4</sub> akış hızı grafiği Şekil 3.12'de verilmiştir.



Şekil 3.12. Tüm ince filmler için optik bant aralığı değerlerinin, CH<sub>4</sub> gaz akış hızına göre değişim grafiği.

Şekil 3.12'de siyah yuvarlak sembollerle gösterilen değerler, deneysel olarak bulunan  $E_g$  değerleridir. Şekil incelendiğinde, bulunan optik bant aralığı değerlerinin gaz akış hızına açıkça görülebilecek şekilde (doğrusal, parabolik vs.) bağlı olmadığı görülmektedir. Bu durumda, optik bant aralığı değerlerinin gaz akış hızına bağlı değişimleri ancak basit bir matematiksel modelleme ile açığa çıkarılabilir. Bu amaçla, deneysel verilere en iyi uyan teorik eğrinin grafiği ve denklemi, veri analizi programı aracılığı ile hesaplanmıştır. Hesaplanan eğri denklemi ve grafiği Şekil 3.12'de verilmiştir.Burada, elimizdeki kısıtlı imkanlardan dolayı elde ettiğimiz nispeten sınırlı miktarda veriye sahip olmanın, teorik eğri oluştururken bize çok büyük bir dezavantaj sağladığını da belirtmek gerekir.

Mümkün olduğu durumda, veri sayısını artırarak teorik eğriyi oluşturmak mutlaka daha sağlıklı analizler yapılmasına olanak sağlayacaktır. Bu teorik eğri, üretim aşamasından önce, üretilmesi planlanan ince filmlerin optik bant aralığı değerlerini tahmin etmekte kullanılabilir.

Üretilen ince filmlerin çeşitli alanlarda uygulamaları olabilir. Bu alanlardan biri de oldukça güncel olan iletişim uygulamalarıdır. İletişim uygulamalarında elektromanyetik dalga üreteçleri ve algılayıcıları kullanılır. Bu çalışmada incelediğimiz ince filmlerin de bu şekilde kullanılması mümkündür. Elektromanyetik dalga üreteç veya algılayıcılarının çalışma dalgaboyları ise optik bant aralığı değerleri ile yakından ilintilidir. Bu tür araçlar daha çok optik bant aralığı enerji değerlerine karşılık gelen dalgaboyu değerlerinde yüksek verimlilikle çalışabilirler. Bu bilgiler ışığında, çalışmamızda üretilen ince filmlerin, daha çok kızılötesi spektrumun başlangıç bölgesinde verimli olarak çalışabileceği görülmektedir. Elde ettiğimiz teorik eğri denklemi kullanılarak, günümüz iletişim teknolojisinde sıklıkla kullanılan bazı kızılötesi üreteç ve algılayıcıların çalıştığı dalgaboyu değerleri ile bu dalgaboyu değerleri Çizelge 3.2'de gösterilmiştir. Çizelgede aynı zamanda bu özelliklere sahip ince filmlerin üretimi aşamasında kullanılması öngörülen ve teorik eğri kullanılarak hesaplanan gaz akış hızı değerleri de verilmiştir.

İletişim Teknolojisinde	Dalgaboyu	$E_g$	Numunenin Üretilmesi Gereken
Kullanılan Bantlar	<i>(nm)</i>	(eV)	Akış Hızı ( <i>cm<sup>3</sup>/dak</i> )
O bandı başlangıcı	1260	0,98	4,85
E bandı başlangıcı	1360	0,91	4,90
S bandı başlangıcı	1460	0,85	4,93
C bandı başlangıcı	1530	0,81	4,95
L bandı başlangıcı	1565	0,79	4,96
U bandı başlangıcı	1625	0,76	4,98

Çizelge 3.2. Bazı kızılötesi dalgaboyu değerlerinde verimli çalışabilecek a-C:H ince film üretimi aşamasında kullanılması öngörülen CH<sub>4</sub> akış hızı değerleri.

Çalışmamız sonucunda, ürettiğimiz a-C:H ince filmlerin günümüz kızılötesi iletişim teknolojisinde kullanılan uygulamalar için oldukça uygun optik bant aralığı değerlerine sahip oldukları görülmüştür. Elde edilen teorik eğri ve denklem sayesinde, üretilmesi planlanan ince filmlerin sahip olacakları optik bant aralığı değerlerinin öngörülebilmesi mümkün olmuştur. Bu sayede, çalışmaların öngörülen bölgeye yoğunlaştırılması sayesinde işgücü ve zaman kaybının önüne geçilmiş olacaktır. Alınacak önlemler ile, maddi kayıplar da engellenebilecektir.

Çalışmamızda fiziksel imkanların kısıtlılığından dolayı gerçekleştiremediğimiz, ancak bu çalışmanın ileri aşamalarında gerçekleştirilebilecek bazı çalışmalar planlanabilir. Özellikle optik bant aralığı değerlerindeki değişimin fazla olduğu 4 ile 5cm<sup>3</sup>/dakika akış hızı değerlerinde üretilen ince film çeşidi olanaklar dahilinde artırılarak, bu bölgenin daha detaylı taranması planlanabilir. Bu sayede bu aralıkta elde edilecek teorik eğri, daha detaylı, kesin ve gerçekçi sonuçlara ulaşılmasını sağlayacaktır. Ayrıca, yine imkanlar dahilinde, üretilen ince filmlerin elektroışıma özellikleri elektriksel ve optik deneylerle test edilerek, optik verimlerinin ortaya çıkarılması planlanabilir. Bu sayede ince filmlerin gerçek yaşam uygulamaları için uygunluğu tam olarak test edilebilir.

## 4. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, 0,2 torr plazma kazanı basıncı altında 15 dakika süresince 100 W elektrik gücü kullanılarak 40 MHz frekans altında oluşturulan plazmaya maruz bırakılarak plazma depozisyon tekniği ile üretilen a-C:H ince filmlerin optik bant aralıklarının, kazanda uvgulan gaz akıs hızı parametresine bağlı değisimi incelenmistir. Üretilen ince filmlerin kalınlıkları, 2 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen ince film için 585 Å, 3 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen ince film için 758 Å ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızında üretilen ince film için ise 684 Å olarak bulunmustur. Bu sonuclar, daha önceden benzer sartlarda üretilen ince filmler üzerinde yapılan çalışmalarla kıyaslanmıştır. Kıyaslama sonucunda plazma frekansının ince film kalınlığı üzerinde herhangi önemli bir etkisi olmadığı ve benzer şekilde plazma akış hızı ile film kalınlığı arasında doğrudan bir bağlantı kurmak mümkün olmadığı açığa çıkmıştır. Plazma akış hızının artırılmasına rağmen, plazma gücü belirli bir doygunluk değerine ulaştığı zaman, film kalınlığı değerlerinin de doygunluğa ulaştığı ve bu değerden sonra artmadığının literatürdeki çalışmalarda gözlemlenmesinden ötürü, bu çalışma için plazma gücünün doygunluk değerinin çok düşük güç değerlerinde gerçekleştiği ve bu nedenle gaz akış hızının film kalınlığına doğrudan görülebilir bir etkisi olmadığı sonucuna varılmıştır. Bu incelemede, 2, 3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızlarında üretilen ince filmlerin optik bant aralıkları, optik geçirgenlik deneylerine tabi tutulmuştur. Kullanılan ışığın dalgaboyuna ve enerjisine bağlı soğurma katsayıları, her bir akış hızı parametresinde üretilmiş ince film için optik geçirgenlik deneyleri sonucu elde edilen veriler kullanılarak hesaplanmıştır. Soğurma katsayıları kullanılarak yapılan analizler sonucu 2, 3 ve 4 cm<sup>3</sup>/dakika akış hızlarında üretilen ince filmlerin optik bant aralıkları sırasıyla 1,41 eV, 1,48 eV ve 1,42 eV olarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar, yine literatürde benzer şartlarda üretilen ince filmler içi elde edilen sonuçlar ile kıyaslanmış ve bu kıyaslama sonucu plazma frekansının optik bant aralığı değerleri için belirleyici bir etkisi olduğu çıkarılmıştır. Bu çalışmada elde edilen optik bant aralığı değerleri ve literatürdeki değerler kullanılarak, üretilen ince filmlerin optik bant aralıklarının gaz akış hızı parametresine nasıl bir bağlılık gösterdiğini açıklayan matematiksel bir eğri denklemi elde edilmiştir. Bu denklem kullanılarak, günümüz kızılötesi iletişim teknolojisinde kullanılan elektromanyetik dalgalara ait bazı dalgaboyu ve enerji değerlerinde, yüksek verimle çalışması olası olan cihazlarda kullanılabilecek ince filmlerin hangi üretim şartlarında üretileceği öngörülmüştür. Aynı zamanda, fiziksel imkanların kısıtlılığından dolayı gerçekleştirilemeyen, elektriksel ve optik deneyler yardımıyla, ince filmlerin gerçek yaşam uygulamalarında kullanılabilirliğini artırma amaçlı bir çalışma önerisi de sunulmuştur.

## **5. KAYNAKLAR**

- [1] X. Gillon and L. Houssiau, "Plasma polymerization chemistry of unsaturated hydrocarbons: neutral species identification by mass spectrometry", *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 23, pp. 045010, 2014.
- [2] M. V. Jacob, C. D. Easton and G. S. Woods, "Fabrication of a novel organic polymer thin film," *Thin Solid Films*, vol. 516, pp. 3884, 2008.
- [3] F. F. Shi.," Recent advances in polymer thin films prepared by plasma polymerization Synthesis, structural characterization, properties and applications," Surf. *Coatings Technol.*, vol. 82, pp. 1, 1996
- [4] A. C. Grimsdale and K. Müllen," Polyphenylene-type Emissive Materials: Poly(paraphenylene)s, Polyfluorenes, and Ladder Polymers," *Adv. Polym.* vol. 199, pp.1. 2006
- [5] D. Green, D. McKenzie and P. Lukins," The Microstructure of Carbon Thin Films," *Mater. Sci. Forum*, vol. 52-53, pp. 103 1990.
- [6] J. Robertson, "Properties of diamond-like carbon," *Surf. Coat. Technol.*, vol. 50, pp. 185, 1992.
- [7] J. Robertson," Diamond-like amorphous carbon", *Mater. Sci. Eng. R Reports*, vol. 37, pp. 129, 2002.
- [8] M. Geis and M. Tamor, *Encyclopedia of Applied Physics.*, New York, USA: VCH, 1993.
- [9] H. T. Kim and S. H. Sohn, "Effects of applied power on hydrogenated amorphous carbon (a-C:H) film deposition by low frequency (60 Hz) plasma-enhanced chemical vapor deposition (PECVD)," *Vacuum*, vol. 86, pp. 2148, 2012.
- [10] H. Tsai, "Structure and Physical Properties of Amorphous Hydrogenated Carbon (a-C:H) Films," *Mater. Sci. Forum*, vol. 52-53, pp 71. 1990
- [11] R. de L. Kronig and W. G. Penney, "Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices," Proc. Roy. Soc. (London), vol. A 130, pp. 499, 1931.
- [12] I. Tolstoy, James Clark Maxwell, ABiography, 1<sup>st</sup> ed., Chicago, USA:University of Chicago Press, 1983.
- [13] J. R. Reitz, F. J. Milford and R. W. Chirsty, *Foundations of Electomagnetic Theory*, 4<sup>th</sup> ed., London, England: Addison-Wesley Pub. Co., Reading, Mass., 1960.
- [14] C.Temirci., M.,Gülcan, K.Goksen and M.Sönmez, "Ohmic and rectifier properties of Al/Ligand(N-APTH) and Al/Cu(II)Complex contacts," *Microelectron. Eng.*, vol. 87, pp. 2282, 2010.
- [15] K. Goksen and M. Gasanly, "Refractive index, oscillator parameters and temperature-tuned energy band gap of Tl4In3GaS8-layered single crystals," *Journal*

of Phys. And Chem. Of Solids, vol. 69, pp. 2385, 2008.

- [16] D. Mansuroğlu, "Synthesis and Characterization of Fluorene-Type and Hydrogenated Amorphous Carbon Thin Films in RF and DC Glow Discharges," Ph. D. Dissertation, Physics Department, Middle East Technical University, Ankara, Turkey, pp. 49, 2015.
- [17] D. Mansuroglu, K. Goksen and S. Bilikmen, "Optical Characterization of Amorphous Hydrogenated Carbon (a-C:H) Thin Films Prepared by Single RF Plasma Method," *Plasma Science and Technology*, vol. 17, pp. 488, 2015.
- [18] H. Kızılçaoğlu, K.Gökşen and Y.Köysal, "Amorf Hidrojenlenmiş Karbon İnce Filmlerin Yasak Enerji Bant Aralıklarının Optiksel İncelenmesi," *Düzce Üniv. Bil. Ve Teknol. Dergisi*, ss. 317, 2016.
- [19] M.Weiler, R. Kleber and K. Jung, "Structure of amorphous hydrogenated carbon: experiment and computer simulation", *Diam. Relat. Mater.*, vol. 3, pp. 245, 1994.
- [20] S. Huang, Y. Xin and Z. Ning, "A Study on Optical Emission of CF4+CH4 Plasma and Deposition Mechanisms of a-C:F, H Films," *Plasma Sci. Technol.*, vol. 7 pp. 2669, 2005.
- [21] R .Krechetnikov and G. M. Homsy, "Experimental study of substrate roughness and surfactant effects on the Landau-Levich law," *Phys. Fluids*, vol. 17, pp. 102108, 2005.
- [22] B. Dischler, A.Bubenzer and P. Koidl, "Bonding in hydrogenated hard carbon studied by optical spectroscopy," *Solid State Commun., vol.* 65, pp. 105, 1983.
- [23] P. Couderc and Y. Catherine, "Structure and physical properties of plasma-grown amorphous hydrogenated carbon films," *Thin Solid Films*, vol. 146, pp. 93, 1987.
- [24] B. Meyerson and F. Smith, "Electrical and optical properties of hydrogenated amorphous carbon films," J. Non. Cryst. Solids, vol. 35-36, pp. 435, 1980.
- [25] A. Bubenzer, B. Dischler and G. Brandt, "RF- plasma deposited amorphous hydrogenated hard carbon thin films: Preparation, properties, and applications," J. *Appl. Phys.*, vol.54, pp. 4590, 1983.

# ÖZGEÇMİŞ

# KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı	: Tamer ŞİMŞEK
Doğum Tarihi ve Yeri	: 25.11.1975, Ermenek
Yabancı Dili	: İngilizce
E-posta	: tmrsmsk81@gmail.com

# ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Alan	Okul/Üniversite	Mezuniyet Yılı
Y. Lisans	Fizik Bölümü	Düzce Üniversitesi	2017
Lisans	Fizik Bölümü	18 Mart Üniversitesi	1999
Lise		Konya Gazi Lisesi	1993