

T.C. GİRESUN ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI YÜKSEK LİSANS TEZİ

SPİN KAPLAMA YÖNTEMİYLE RUBRENE İNCE FİLMLERİNİN HAZIRLANMASI VE OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

HATİCE GÜREL ÖZDEMİR

ARALIK 2013

Fen Bilimleri Enstitü Müdürünün onayı.

..../..../.....

Doç. Dr. Kültiğin ÇAVUŞOĞLU

.....

Müdür

Bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak Fizik Anabilim Dalı standartlarına uygun olduğunu onaylarım.

Doç. Dr. Birol ERTUĞRAL

.....

AnabilimDalı Başkanı

Bu tezi okuduğumuzu ve Yüksek Lisans tezi olarak bütün gerekliliklerini yerine getirdiğini onaylarız.

Doç. Dr. Nihat TUĞLUOĞLU

Yrd. Doç. Dr. Behzad BARIŞ

Ortak Danışman

Danışman

Jüri Üyeleri

Doç. Dr. Serdar KARADENİZ Doç. Dr. Birol ERTUĞRAL Yrd. Doç. Dr. Behzad BARIŞ

ÖZET

SPİN KAPLAMA YÖNTEMİYLE RUBRENE İNCE FİLMLERİNİN HAZIRLANMASI VE OPTİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

GÜREL ÖZDEMİR, Hatice

Giresun Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı, Yüksek Lisans Tezi

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Behzad BARIŞ

Ortak Danışman: Doç. Dr. Nihat TUĞLUOĞLU

ARALIK 2013, 84 sayfa

Bu tez çalışmasında, Rubrene organik yarıiletken ince filmlerin döndürme ile kaplama tekniği ile hazırlanması ve optik karakterizasyonu amaçlanmıştır. Rubrene ince filmin optik özellikleri 200-700 nm dalga boyu aralığında ışığın normal durumunda, geçirgenlik ve yansıma spektrofotometrik ölçümler kullanılarak incelenmiştir. Filmin görünür bölgede optiksel geçirgenliği %90-96 aralığında elde edilmiştir. Optik soğurma ölçümlerinden bant aralığı kenarı civarında optiksel geçiş tipinin dolaylı izinli geçiş olduğu bulunmuştur. Başlangıç optik ve nakil enerji aralıkları sırasıyla 2.31 ve 2.93 eV olduğu tespit edildi. Wemple-DiDomenico tek osilatör modeli ve tek terim Sellmeier dağılım ilişkisi optiksel dağılım için kullanıldı. Optik dielektrik parametrelerini analiz etmek sabitlerin analizlerinden, kayıp tanjant, elektrik modülü, optik iletkenlik, hacim ve yüzey enerji kayıp fonksiyonları ve durulma zamanı ayrıca tartışılmıştır. Üçüncü mertebeden doğrusal olmayan kutuplanma parametresi 10⁻¹² akb olarak bulunmuştur. Ayrıca, taramalı elektron mikroskobu (SEM) hazırlanan rubrene ince filmin yüzey morfolojisini görüntülemek için kullanılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Organik yarıiletkenler, rubrene ince film, geçirgenlik, soğurma, yansıma spektrumu, soğurma katsayısı, dağılım parametreleri, dielektrik özellikler

I

ABSTRACT

OPTICAL CHARACTERIZATION OF RUBRENE PREPARATION THIN FILMS WITH SPIN COATING METHOD

GÜREL ÖZDEMİR, Hatice

Giresun University

Graduate School Of Natural and Applied Sciences Deparment of Physics, M. Sc. Thesis Supervisor: Asst. Prof. Dr. Behzad BARIŞ

Co-Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Nihat TUĞLUOĞLU

DECEMBER 2013, 84 pages

In this thesis study, rubrene organic semiconductor thin films preparation by spin coating technique and optical characterization were aimed. The optical properties of rubrene thin film were investigated using a spectrophotometric measurement of transmittance and reflectance at normal incidence of light in the wavelength range 200–700 nm. The optical transmittance of the film was obtained ranging of 90–96% in the visible region. The type of optical transition near the edge of the band gap from optical absorption measurements is found to be indirect allowed transition. The onset optical and transport energy gaps were found to be 2.31 and 2.93 eV, respectively. Wemple-DiDomenico single oscillator model and single term Sellmeier dispersion relation were used to analyze the optical dispersion parameters. From the optical dielectric constants analysis, the loss tangent, the electric modulus, the optical conductivity, the volume and surface energy loss functions, and the relaxation time were also discussed. The third order of nonlinear polarizability parameter is found to be of the order 10⁻¹² esu. Scanning electron microscopy (SEM) was also used to image the surface morphology of the prepared rubrene thin film.

Key Words: Organic Semiconductors, Rubrene Thin Film, Transmittance, Absorption, Reflection Spectrum, Absorption Coefficient, Dipersion Parameters, Dielectric Properties.

TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın tüm aşamalarında her türlü bilimsel desteği sağlayan değerli danışman hocam Yrd. Doç. Dr. Behzad BARIŞ'a, bilgi birikimleri, değerli bilimsel destek ve görüşleriyle katkı sağlayan değerli ortak danışman hocam Doç. Dr. Nihat TUĞLUOĞLU'na, bu çalışmanın deneysel aşamalarında bilgilerini ve deneyimlerini bizimle paylaşan Selçuk Üniversitesindeki değerli hocam Yrd. Doç. Dr. Ömer Faruk YÜKSEL'e ve deneysel ölçümlerde katkılarını ve yardımlarını esirgemeyen, göstermiş olduğu ilgi, anlayış ve güler yüzünden ötürü Arş. Gör. Zeynep KİŞNİŞCİ'ye, Selçuk Üniversitesi İleri Teknoloji Ve Uygulama Merkezinde numunenin hazırlanmasında katkılarından dolayı ve Selçuk Üniversitesi Kimya Mühendisliği Bölümü öğretim üyesi Doç. Dr. Mahmut KUŞ'a, bu projenin maddi olarak desteklenmesini sağlayan Giresun Üniversitesi BAP ofisine (BAP, Proje No: FEN-BAP-A-160512-26) teşekkürü bir borç bilirim.

Ayrıca tez çalışmam sırasında maddi ve manevi yardımlarını esirgemeyen aileme de teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	I
ABSTRACT	II
TEŞEKKÜR	III
İÇİNDEKİLER	IV
TABLOLAR DİZİNİ	VII
ŞEKİLLER DİZİNİ	VIII
SİMGELER VE KISALTMALAR	XI
1. GİRİŞ	1
1.1. Organik Yarıiletkenler	1
1.1.1. Organik yarıiletken çeşitleri	2
1.1.2. Organik yarıiletkenlerin özellikleri	5
1.1.3. Organik yarıiletkenlerin uygulamaları	
1.2. Rubrene Organik Yarıiletken	
1.2.1. Genel özellikler	
1.2.2. Kristal yapısı	
1.3. Optiksel Temel Kavramlar	
1.3.1. Elektromanyetik radyasyon	
1.3.2. Işığın katılar ile etkileşimi	
1.3.3. Atomik ve elektronik düzeydeki etkileşimler	
1.3.4. Metallerin optiksel özellikleri	
1.3.5. Metal olmayan malzemelerin optik özellikleri	
1.3.6. Kırılma	
1.3.7. Yansıma	
1.3.8. Soğurma	
1.3.9. Geçirgenlik	
1.3.10. Renk	
1.4. Yarıiletkenlerin Optik Özellikleri	
1.4.1. Temel soğurma olayı	
1.4.2. Direkt bant geçişi	
1.4.3. İndirekt bant geçişi	

1.4.4. Yarıiletkenlerin yasak enerji aralıklarının belirlenmesi	34
2. MATERYAL VE METOT	36
2.1. Cam Alt Tabakaların Temizlenmesi	36
2.2. Rubrene İnce Filmin Hazırlanması	36
2.3. Numune Hazırlanmasında Kullanılan Cihazlar	36
2.3.1. Numune tartım cihazı	36
2.3.2. Manyetik karıştırıcı	37
2.3.3. Su banyosu (ultrasonik temizleyici)	37
2.3.4. Mikro pipet	38
2.3.5. Cam malzeme temizleme cihazı	38
2.3.6. Glovebox sistemi	39
2.3.7. Döndürme ile kaplama (spin coater) sistemi	39
2.4. Ölçümlerde Kullanılan Cihazlar	40
2.4.1. UV-Vis spektrofotometresi	40
2.4.2. Taramalı elektron mikroskobu (SEM)	41
2.5. Döndürme ile Kaplama (spin coater) Yöntemi	43
2.6. Spektroskopik Ölçümler	45
3. ARAȘTIRMA BULGULARI	46
3.1. Rubrene İnce Filmin Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) Analizi	46
3.2. Soğurma (A), Geçirgenlik (T) ve Yansıma (R) Spektrumları	47
3.2.1. Soğurma spektrumları	47
3.2.2. Geçirgenlik spektrumları	47
3.2.3. Yansıma spektrumları	48
3.3. Soğurma Katsayısı (α), Sönüm Katsayısı (k) ve Kırılma İndisi Spektrum	ıları
	49
3.4. Enerji bant aralığı ve geçişinin belirlenmesi	52
3.4.1. <i>m</i> 'nin belirlenmesi	53
3.4.2. Optik bant aralığı (E_g)'nin belirlenmesi	53
3.4.3. Urbach enerjisi (E_U) 'nun belirlenmesi	54
3.5. Kırılma indisi (n) optik dağılım parametreleri	59
3.5.1. Wemple ve DiDomenico tek osilatör modeli	59
3.5.2. Tek terimli Sellmeier dağılım ilişkisi	61

3.5.3. Rubrene filminin üçüncü mertebeden doğrusal olmayan kutuplanma	
parametresi ($\chi^{(3)}$)	62
3.6. Dielektrik karakteristikler	66
3.6.1. Dielektrik fonksiyonun gerçek (ε') ve sanal (ε'')kısımları	66
3.6.2. Kayıp tanjant (tan δ)	68
3.6.3. Elektrik modülünün gerçek (M') ve sanal (M'') kısımları	68
3.6.4. Hacim enerji (V_{EL}) ve yüzey enerji (S_{EL}) kayıpları	69
3.6.5. Optik iletkenliğin gerçek (σ') ve sanal (σ'') kısımları	71
3.6.6. Dielektrik durulma zamanı ($ au$)	72
4. TARTIŞMA VE SONUÇLAR	73
KAYNAKLAR	75
ÖZGEÇMİŞ	84

TABLOLAR DİZİNİ

TABLO

Tablo 1.1 Bazı geçirgen malzemeler için kırılma indisi	23
Tablo 3.1 Rubrene organik yarıiletken ince film ve karşılaştıma açısından diğer	
organik bileşikler için nakil (transport) aralığı (E_g^{trans}), optik aralık (R_g	E_g^{opt})
ve bağlanma enerjisi (E_B) değerleri	58
Tablo 3.2 Rubrene organik yarıiletken ince film ve karşılaştırma açısından diğer	ſ
organik bileşikler için optik bant aralığı (E_g),Urbach sabiti(α_0),	
Urbach enerji (E_U) ve diklik parametresi (β) değerleri	58
Tablo 3.3 Rubrene organik yarıiletken ince film ve karşılaştırma açısından diğer	r
organik bileşikler için dağılım parametreleri	65

ŞEKİLLER DİZİNİ

	•
ODI	
NHI	K 11
1 2 1 2 1	NIL
~	

Şekil 1.1 Küçük moleküllere dayalı organik yarıiletkenlerin yapısı
Şekil 1.2 (a) ve (b) σ ve π bağlarında elektron dağılımı ve (c) ve (d) ise anti-bağ σ
ve π orbitallerinin yük-yoğunluğu dağılımı4
Şekil 1.3 Elektronik geçişler
Şekil 1.4 Enerji seviyelerinin bant oluşturması
Şekil 1.5 Yalıtkan, yarıiletken ve iletken için enerji bant yapısı
Şekil 1.6 HOMO, LUMO molekül diyagramı7
Şekil 1.7 N konjugasyonlu polimerlerde bant oluşumu
Şekil 1.8 OLED Yapısı9
Şekil 1.9 Geçit, Savak ve Kaynak kontakların altta olduğu OTFT şeması 10
Şekil 1.10 P3HT:PCBM güneş hücresi11
Şekil 1.11 Rubrene tozu12
Şekil 1.12 Rubrene molekülünün (a) yapısal formülü $(C_{42}H_{28})$ (b) üç boyutlu
resmi
Şekil 1.13 (a) Fiziksel buhar taşıma yöntemiyle büyütülen rubrene ortorombik
kristalin optik mikroskop fotoğrafı. Açık yüzey (100) yüzeyidir.
(b) ve (c) b ve c eksenleri boyunca gözlenen ortorombik rubrene
birim hücresi13
Şekil 1.14 Elektrik alan E, manyetik alan H ve dalga boyu λ bileşenleri ile bir
elektromanyetik dalganın gösterimi14
Şekil 1.15 Görünür spektrum çeşitli renkler için dalga boyu aralıkları dahil olmak
üzere elektromanyetik radyasyon spektrumu15
Şekil 1.16 İzole bir atom için, bir enerji durumundan diğerine bir elektronun
uyarılması ile foton soğurulmasının şematik gösterimi
Şekil 1.17 (a) Bir elektron daha yüksek bir enerjideki boş duruma uyarılmış
olduğu metalik malzemeler için foton soğurulmasının şematik
gösterimi (b) düşük enerji seviyesindeki elektronun daha yüksek
enerjili bir seviyeye çıktıktan sonra kararsız durumda bir süre kalıp
tekrar kararlı hale dönüp ışığı yayılım yapmasının şematik gösterimi. 20

Şekil 1.18 Prizmadan geçen ışığın renklere ayrılması
Şekil 1.19 (a) Metal olmayan materyaller için yasak enerji aralığı boyunca uyarılan
bir elektronun soğurma spektroskopisi,(b) Yasak enerji aralığı
boyunca doğrudan elektron geçişi ile fotonun yayılımı
Şekil 1.20 Geçirgen bir madde boyunca ışığın geçişi
Şekil 1.21 Bir yeşil cam boyunca gelen ışığın iletilme, absorbe ve yansıma
kesirlerinin dalga boyuna göre değişimleri 28
Şekil 1.22 Yarıiletkende temel soğurma spektrumu
Şekil 1.23 Bir yarıiletkende direkt bant geçişi
Şekil 1.24 Direkt bant geçişinde enerji durumlarının gösterimi
Şekil 1.25 İndirekt bant geçişi
Şekil 1.26 Yasak enerji aralığının soğurma yöntemi ile belirlenmesi
Şekil 2.1 Kern marka tartım cihazı
Şekil 2.2 Velp marka manyetik karıştırıcı
Şekil 2.3 WiseClean marka manyetik karıştırıcı
Şekil 2.4 Isolab marka mikropipet
Şekil 2.5 UVO marka (Cleaner model no 42-220) ozonla temizleme cihazı
Şekil 2.6 MBraun marka glovebox sistemi
Şekil 2.7 Laurell marka döndürme ile kaplama sistemi
Şekil 2.8 Jasco Model V-670 UV/VIS/NIR Spektrofotometre cihazı 40
Şekil 2.9 Spektrofotometre sisteminin şematik gösterimi
Şekil 2.10 Zeiss Evo [®] LS-10 model taramalı elektron mikroskobu (SEM)
Şekil 2.11 Taramalı elektron mikroskobu (SEM)'nun temel kısımları 42
Şekil 2.12 Spin kaplama yönteminin şeması
Şekil 2.13 Döndürme ile kaplamanın dört aşaması 44
Şekil 3.1 Rubrene ince filmin SEM görüntüsü
Şekil 3.2 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında soğurmanın
dalgaboyu ile değişimi
Şekil 3.3 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında geçirgenliğinin
dalga boyu ile değişimi
Şekil 3.4 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında yansımanın
dalgaboyu ile değişimi

Şekil 3.5 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında soğurma
katsayısının dalga boyu ile değişimi51
Şekil 3.6 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında sönüm
katsayısının dalgaboyu ile değişimi
Şekil 3.7 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında kırılma indisinin
dalga boyu ile değişimi
Şekil 3.8 (a) Geçirgenliğin dalga boyuna göre birinci türevinin ($dT/d\lambda$) ve (b)
yansımanın dalga boyuna göre birinci türevinin ($dR/d\lambda$) dalga
boyu ile değişimi55
Şekil 3.9 Rubrene ince filmin (a) $d[\ln(\alpha h\nu)]/d(h\nu)$ 'nin foton enerji ($h\nu$) değişimi
ve (b) $\ln(\alpha h v) - \ln(hv - E_g)$ değişimi
Şekil 3.10 Rubrene ince filmin $(\alpha h v)^{1/2}$ 'nin foton enerji (hv) değişimi
Şekil 3.11 Rubrene ince filmin Urbach eğrisi
Şekil 3.12 Rubrene ince filmin $(n^2 - 1)^{-1} - (h\nu)^2$ grafiği
Şekil 3.13 Rubrene ince filmin $n^2 - \lambda^2$ değişimi
Şekil 3.14 Rubrene ince filmin $(n^2 - 1)^{-1} - \lambda^{-2}$ değişimi
Şekil 3.15 Rubrene ince filmin $\chi^{(3)}$ - foton enerji (<i>hv</i>) değişimi
Şekil 3.16 Rubrene ince filmin ε' - $h\upsilon$ değişimi
Şekil 3.17 Rubrene ince filmin $\varepsilon'' - h\upsilon$ değişimi
Şekil 3.18 Rubrene ince filmin tan δ - hv değişimi
Şekil 3.19 Rubrene ince filmin M' ve $M'' - hv$ değişimi
Şekil 3.20 Rubrene ince filmin hacim enerjisi (V_{EL}) ve yüzey enerji (S_{EL})
kayıplarının foton enerjisi ile değişimi
Şekil 3.21 Rubrene ince filmin σ' ve σ'' optik iletkenliklerin foton enerjisi ile
değişimi71
Şekil 3.22 Rubrene ince filmin durulma zamanı (τ)'nun foton enerjisi ile değişimi.

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

σ	: Sigma
π	: Pi
Å	: Angstrom
⁰ C	: Selsius derece
Т	: Geçirgenlik katsayısı
E	: Enerji
E _e	: Elektronun enerjisi
E _h	: Hollerin enerjisi
E_{v}	: Valans bantının enerjisi
E_B	: Bağlanma enerjisi
E_U	: Urbach enerjisi
E_0	: Tek osilatörün enerjisi
E_d	: Dağılım enerjisi
E_g	: Yasak enerji aralığı
E_g^{opt}	: Optik bant aralığı
E_g^{trans}	: Nakil transport aralığı
μ	: Manyetik geçirgenlik sabiti
Ι	: Işığın şiddeti
v	: Işığın vakumdaki hızı
ω	: Açısal frekans
3	: Yarıiletkenin dielektrik sabiti
€ ₀	: Boşluğun elektriksel geçirgenliği
1	: Malzemenin kalınlığı

f	: Osilatör kuvveti
α	: Soğurma katsayısı
λ	: Dalga boyu
k	: Sönüm katsayısı
φ	: Faz değişimi
n	: Kırılma indisi
ε'	: Dielektrik sabitinin reel kısmı
ε''	: Dielektrik sabitinin sanal kısmı
\mathcal{E}_{∞}	: Optiksel dielektrik sabiti
h	: Planck sabiti
c	: Işık hızı
ν	: Fotonun frekansı
m^*	: Etkin kütle
n^*	: Kompleks kırılma indisi
<i>ɛ</i> *	: Kompleks dielektrik sabiti
Ν	: Serbest taşıyıcı yoğunluğu
S_0	: Ortalama osilatör kuvvet
$\chi^{(3)}$: Rubrene ince filminin 3.mertebeden doğrusal olmayan alınganlık
χ'	: Lineer optik alınganlık
σ'	: Optik iletkenliğin gerçek kısmı
$\sigma^{\prime\prime}$: Optik iletkenliğin sanal kısmı
σ^{*}	: Kompleks optik iletkenlik
M'	: Elektrik modülünün gerçek kısmı
$M^{\prime\prime}$: Elektrik modülünün sanal kısmı
M^*	: Kompleks elektrik modülü
τ	: Dielektrik durulma zamanı

Kısaltmalar

Al	: Alüminyum
BaO	: Baryum oksit
PbO	: Kurşun oksit
Ca	: Kalsiyum
DC	: Doğru akım
Eg	: Yasak enerji aralığı
Eo	: Elektronik geçişler için ortalama sönüm enerjisi
E _d	: Dispersiyon enerjisi
eV	: Elektron volt
GaAs	: Galyum arsenik
Ge	: Germanyum
НОМО	:En yüksek enerjili dolu orbital
LUMO	: En düşük enerjili boş orbital
Ι	: Akım
Id	: Savak (drain) akımı
I ₀	: Malzemeye gelen ışığın şiddeti
Id	: Malzemeden geçen ışığın şiddeti
IR	: Kızılötesi
ITO	: İndiyum kalay oksit
İB	: İletim bantı
j	: Akım yoğunluğu
kHz	: Kilohertz
LAD	: Lazer ablasyon biriktirme
Mg	: Magnezyum
MHz	: Megahertz

initial according to the second secon	M_{-1}, M_{-3}	: Moment i	integral	değerler
--	------------------	------------	----------	----------

- μ : Mobilite
- nm : Nanometre
- OFET : Organik alan etkili transistör
- OLED : Organik ışık yayan diyot
- OTFT :Organik ince film transistörler
- OPVC : Organik fotovoltaik hücre
- PLD : Atımlı lazerle biriktirme
- PLED : Polimer ışık yayan diyot

PMOLED : Pasif matrix oled

- PVD : Fiziksel buhar biriktirme
- R : Yansıma
- RF : Radyo frekans
- S : Siemens
- Si : Silisyum
- SiO₂ : Silisyum dioksit
- S_{EL} : Yüzey enerji kaybı
- T : Transmitans
- T : Sıcaklık
- tan δ : Kayıp tanjant
- UV : Morötesi
- VB : Valans bantı
- VIS/NIR : Görünür bölge/yakın kırmızı ötesi
- V : Uygulanan potansiyel farkı
- V_d : Savak (drain) voltajı
- V_g : Kapı (gate) voltajı

- V_t : Eşik gerilimi
- V_{EL} : Hacim enerji kaybı

1. GİRİŞ

1.1. Organik Yarıiletkenler

Organik yarıiletken, yarıiletkenlik özelliği gösteren organik bir malzemedir. Organik yarıiletkenler düşük alt yapı maliyeti, geniş ve esnek yüzeylere uygulanabilme, kolay ve hızlı üretim yöntemleri bakımından son yıllarda büyük ilgi çekmektedir. Organik yarıiletkenler iki gruba ayrılmaktadır. Bunlar düşük molekül ağırlığına sahip küçük moleküller ve daha yüksek molekül ağırlığına sahip polimerlerdir. Organik yarıiletkenler; fotodiyotlar, organik ışık yayan diyotlar (OLED) (1), organik güneş pilleri ve organik ince film transistörler (OTFT) gibi aygıtların uygulamasının yapıldığı malzemelerdir.

Organik materyallerin iletim mekanizması inorganik yarıiletkenlerden farklılık gösterir. Moleküller zayıf Van der Walls etkileşimleri ile birbirine bağlıdırlar (2). Taşıyıcılar genellikle malzeme içerisinde bant iletimi yerine enerji seviyelerinde atlama mekanizması (hopping) ile hareket ederler.

Organik yarıiletkenlerden bahsedilmesi yeni değildir ancak 21. yüzyılın başlarında organik yarıiletkenler endüstride bir yer bulabilmiştir. Organik yarıiletkenlere ilk örnek olan Antrasen kristallerinin karanlık ve fotoiletkenlik ile ilgili çalışmaları 20. yüzyılın başlarına uzanır (3). 1930 yılında ilk defa Lilienfeld tarafından alan etkili transistör bulunmuştur (4).

Bernanose ve arkadaşları 1950'li yılların başlarında Nancy Üniversitesinde organik bir malzemeye yüksek gerilimli bir alternatif akım uygulayarak ilk kez organik malzemelerde elektrolüminesans olayını gözlemişlerdir. Bu gözlem organik maddelerde elektrolüminesansa ilişkin ilk keşif olarak tarihe geçmiştir (5).

1960'lı yılların başlarında Martin Pope ve arkadaşları organik kristallere elektrot kontaklar yaparak bu kontaklardan elektron ve deşik akımı elde edilmesine ilişkin gerekli şartları tanımlamışlardır (6,7). Bu çalışmalar organik LED'lerin başarılı bir şekilde gerçekleştirilmesi için öncü çalışmalar arasında yer almaktadır. Bunu izleyen yıllarda Martin Pope ve arkadaşları vakum altında saf ve tek kristal organik malzemelerde doğru akım (DC) elektrolüminesans olayını gözlemişlerdir (8).

1975 yılında, ilk inorganik elektrolüminesans bir polimer polivingyl carbasole kullanılarak yapılmıştır. Bir diğer organik yarıiletken tipi olan konjuge polimerler 1977 yılında Alan J Heeger, Alan G MacDiarmid ve Hideki Shirakawa tarafından keşfedilmiştir ve konularındaki başarılarından dolayı 2000 yılında Nobel Kimya Ödülü'ne layık görülmüşlerdir (9).

En başarılı organik güneş pilleri, yük iletiminin iki farklı organik yarıiletken ara yüzeyinde oluştuğu yapılardır (organik heteroeklemler). 1984 yılında Harima ve arkadaşları tarafından bir organik heteroeklemde etkin bir yük foto üretimi gerçekleştirildiği rapor edilmiştir (10).

1987 yılında tanımlanan organik alan etkili transistörler (OFET), modern mikro elektronik sektörünün en önemli bölümlerinden biri olmuştur (11). Organik Alan Etkili Transistörlerin bilinen silikon tabanlı transistörlere göre birçok avantajları vardır.

Organik alan etkili transistörler, tek kristal inorganik yarı iletken tabanlı alan etkili transistörlerle (silisyum ve germanyum) karşılaştırıldığında, elde edilen yük taşıyıcı mobilite değeri çok düşüktür. Ancak son yıllarda yapılan çalışmalar sonucu rubrene tek kristal tabanlı organik alan etkili transistörlerde 15.4 cm^2 . $V^{-1}s^{-1}$ mobilite değeri elde edilmiş olup, bu mobilite değeri ile amorf silikon tabanlı transistörlerin mobilite değerlerine ulaşılmıştır (12).

1.1.1. Organik yarıiletken çeşitleri

Organik yarıiletkenler iki gruba ayrılmaktadır. İlk grup olan küçük moleküller; tekrarlanamayan bir yapıya sahiptirler yani monomerdirler. Küçük organik moleküller düşük molekül ağırlığına sahiptir. Şekil 1.1'de bazı küçük moleküller gösterilmektedir.

Benzen halkalarının birbirleriyle bağlanmasıyla lineer acene molekülleri Bu moleküller yüksek kaliteli variiletken olusturulmaktadır. kristaller oluşturmaktadır. Acene moleküllerinde karbonlar s p^2 hibritleşmesine sahiptirler ve karbonun σ bağları tarafından komşu atomlara bağlanmaktadırlar. 2s, $2p_x$ ve $2p_y$ karbon atomunun orbitalleri hibritleşe bilmektedir ve üç σ bağdan oluşturulmaktadır. Kalan $2p_z$ orbitali bir π bağ oluşumuna katkıda bulunmaktadır. Elektronların delokalizasyonu, bir molekül içindeki moleküler zincirleri boyunca π orbitalleri arasındaki örtüşme yoluyla gerçekleşmektedir. Şekil 1.1'de listelenen organik yarıiletkenler karbon atomlarının π orbitalleri, π bağ ile birbirine tutulan bir konjuge π -elektron sistemine sahiptir.



Şekil 1.1 Küçük moleküllere dayalı organik yarıiletkenlerin yapısı (2)

İkinci grup olan polimerler ise tek monomerlerin bağlı zincirlerinden (basit polimer) veya iki ya da daha fazla monomerin (kopolimer) birleşiminden oluşmaktadır. Polimerler çözelti içinde kolayca çözünebilmektedir. Düşük molekül ağırlığına sahip organik yarıiletkenler polimerlerden daha iyi bir kristal olma özelliğine sahiptir.

Tüm elektronik malzemeler (monomer veya polimer) konjuge bağlardan ana zincir içermektedir. Bu yapı moleküllerdeki iletkenliğin sağlanması için önemlidir (13). Küçük moleküller de polimerlerde moleküllerdeki sp^2 hibritleşmiş karbon atomlarının P_z orbitallerinden oluşan ortak bir konjuge π elektron sistemine sahiptir. π bantları σ bantlarına kıyasla daha zayıftır. Bu yüzden konjuge polimerlerin en düşük elektronik uygulamaları görünür spektral bölgede ışık soğurulması ve yayılmasına neden olan, enerji bant aralığı 1.5-3 eV arasında olan $\pi - \pi^*$ geçişleridir.



Şekil 1.2 (a) ve (b) σ ve π bağlarında elektron dağılımı ve (c) ve (d) ise anti-bağ σ ve π orbitallerinin yük-yoğunluğu dağılımını göstermektedir

 $\pi - \pi^*$ geçişleri soğurma spektroskopisinin organik bileşiklere uygulanmasında yararlanılan elektronik geçişlerin hemen hepsi π elektronlarının π^* uyarılmış duruma geçirilmesi temeline dayanmaktadır; bu işlemler için gerekli enerjiler soğurma piklerinin uygun spektral bölgede (200-700 nm) bulunmasını sağlamaktadır. Şekil 1.3'te dört elektronik geçiş görülmektedir; bunlar $\sigma \to \sigma^*, n \to \sigma^*, n \to \pi^*$ ve $\pi \to \pi^*$ 'dır (14).



Şekil 1.3 Elektronik geçişler

1.1.2. Organik yarıiletkenlerin özellikleri

Bir elektronlu iki atomdan oluşan en basit molekülde, elektronun bulunduğu bağ enerji seviyesi ile boş olan anti bağ seviyesi olmak üzere iki enerji seviyesi oluşmaktadır. İnorganik malzemelerde bu bağ orbitallerinin oluşturduğu yüksek enerjili dolu banta değerlik bantı (valans bantı) denilmektedir. Anti bağ orbitallerinin oluşturduğu düşük enerjili boş banta iletim bantı denilmektedir (1). Bu bantlar arasındaki enerji farkına da yasak enerji aralığı (E_g) denilmektedir. Şekil 1. 4'de enerji seviyelerinin iletim ve valans bantı oluşturması verilmiştir. Yalıtkan, yarıiletken ve iletkenlerin bant aralıkları ise Şekil 1.5'te gösterilmiştir. Yalıtkanlarda valans ve iletim bantları birbirinden çok uzaktır ($E_g \approx 6$ eV). Bu yüzden elektrik iletimi olmaz. Yarıiletkenlerde yasak enerji aralığı 0.1 eV'dan 5 eV'a kadar değişmektedir. Metallerde ise valans ve iletim bantları hemen hemen üst üste gelecek kadar birbirine yakındır. İletken malzemelerde bu fark çok az olduğu için iletim kolayca olur.



Şekil 1.4 Enerji seviyelerinin bant oluşturması (1)





Polimer gibi organik malzemelerde ise düşük enerji ve yüksek enerji bantlarına sırasıyla; dolu olan en yüksek enerji orbitali (Highest Occupied Molecular Orbital) HOMO ve boş olan en düşük enerji orbitali (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) LUMO adı verilmektedir. Şekil 1.6'da HOMO ve LUMO molekül diyagramı gösterilmektedir (16).

Yalıtkan polimerlerde HOMO ve LUMO arasında geniş bir yasak enerji aralığı vardır. Ancak iletken polimerler konjuge bağlardan oluşmaktadır. Polimer zinciri üzerinde birbirini takip eden tek ve çift bağlara sahip olan konjuge polimerlerde bant yapısı delokalize olan π bağlarının tekrarlanması ile oluşmaktadır. Konjugasyon arttıkça HOMO ve LUMO enerji seviyeleri arasındaki fark gittikçe azalmaktadır (Şekil 1.7). Böylece bantlar arası mesafe azaldığı için bu tür konjuge polimerler yarıiletken gibi davranarak düşük voltaj uygulandığında elektrik akımını iletmektedir.



Şekil 1.6 HOMO, LUMO molekül diyagramı

Konjugasyon arttıkça polimer yalıtkan durumdan yarıiletken hale getirilebilir. Fakat iletken hale getirilebilmesi için konjugasyonun yanı sıra doplama işlemi gerekmektedir. Yarıiletkenlerde ve konjuge polimerlerde iletkenliği sağlayan sadece elektronlar değildir. Elektronlar atomlardan ayrılıp bir üst enerji bantına geçtiğinde geride pozitif yüklü boşluklar bırakmaktadır. Bu boşluklar da başka bir elektron tarafından hemen doldurulmaktadır. Pozitif yüklü bu boşluklar malzeme içinde elektronun tersi yönünde hareket ederek elektrik akımının iletilmesine yardımcı olmaktadır (1).



Şekil 1.7 N konjugasyonlu polimerlerde bant oluşumu (1)

1.1.3. Organik yarıiletkenlerin uygulamaları

Organik yarıiletkenler esneklikleri, malzemenin özelliklerinin istenilen şekilde ayarlanabilmesi, ucuz teknolojiyle üretilebilmesi, çevreci bir üretim sürecinin olması sebebiyle birçok avantaj sağlamaktadır. Organik yarıiletken malzemeler, organik ışık yayan diyotlar (OLED), organik alan etkili transistörler (OFET) ve fotodiyotlar gibi birçok elektronik aygıtlarda kullanılmaktadır.

Organik yarıiletken alanının en fazla araştırma ve yatırım yaptığı aygıtların başında organik ışık yayan diyot (Organic Light Emitting Diode, OLED) gelmektedir. Bu aygıtlarda yarıiletken malzeme olarak eğer küçük moleküller kullanılırsa bunlara OLED eğer organik polimer kullanılırsa bunlara polimer LED (PLED) denilmektedir. Küçük moleküllerde yüzey kaplamak için pahalı ve zor bir yöntem olan vakumla buharlaştırma işlemi yapılırken polimerler sıvı içinde yüzeye uygulanabildikleri için üretimleri küçük moleküllerden daha kolaydır (17).



Şekil 1.8 OLED Yapısı (18)

OLED' in yapısında; alttabaka OLED' i destekleyen yapıdır. Anot, cihazdan akım geçerken elektron boşlukları oluşturan şeffaf tabakadır. Katot cihaza gerilim uygulandığında elektronları veren tabakadır. Katot şeffaflığı OLED' in tipine göre değişmektedir. İletim katmanı, organik plastikten yapılmıştır ve anottan elektron boşlukları taşımaktadır. Yayıcı katman, organik plastikten yapılmaktadır. Katottan elektronları taşımaktadır ve ışık burada oluşmaktadır (18).

OLED'lerin çalışma mekanizması şu şekildedir: Anot ve katot arasına bir gerilim uygulandığında katottan anoda doğru elektron akışı olmaktadır. Elektronlar negatif yüklü katottan yayıcı tabakaya geçerler ve böylece yayıcı tabaka negatif yüklenmektedir. Pozitif yüklü anot da iletken tabakadaki elektronları çekmektedir. Böylece iletken tabakada pozitif yüklü boşluklar oluşacaktır. Zıt yükler birbirini çekeceğinden, iletken tabakadaki elektron boşlukları yayıcı tabakadaki elektronları çekmektedir. Böylece elektron ve boşluklar birbiriyle birleşerek yeni bir yapı oluşturmaktadır. Bu yeni yapı nedeniyle elektronların enerjisi azalır ve enerji farkına eşit enerjide ışık yaymaktadır (1). Organik ince film transistörler (Organic Thin Film Transistor, OTFT) en az LED'ler kadar popüler aygıtlardır. OTFT' ye son yıllarda endüstriyel ilginin doğmasını sağlayan gelişme yeni polimerlerin sentezlenmesiyle taşıyıcı hareket kabiliyetinin amorf silisyum transistorlerinin üzerine çıkması olmuştur. Üretim prensibi OLED'lerde olduğu gibi malzemeler ince filmler halinde plastik veya cam yüzeyde biriktirilmesi esasına dayanmaktadır. OTFT'lerin değişik yapıları vardır ancak en çok tercih edilen yapı Şekil 1.9'da görülmektedir (17). Bu yöntemin seçilmesindeki en büyük etken oldukça hassas olan yarıiletken polimerlerin yüzeye kaplanma işleminin üretim sürecinin en son adımında yapılmasıdır. Böylece üretimden doğabilecek riskler en aza indirilmektedir. Transistörlerin en yaygın tipi alan etkili transistörlerdir (OFET). Bunlar kaynak, savak ve geçit olmak üzere üç uçlu aygıtlardır (17).



Şekil 1.9 Geçit, Savak ve Kaynak kontakların altta olduğu OTFT şeması

OTFT'lerin tasarımında ve analizinde dikkat edilen en önemli performans kriterleri ise; taşıyıcı hareket kabiliyeti (mobilite), eşik ve beslenme gerilimleri, sızıntı akımı ve maksimum çalışma frekansıdır.

Organik yarıiletkenlerde önemli aygıtlardan biri de organik fotovoltaik hücreler (OPVC) veya organik güneş pilleridir. Organik güneş pili güneşten gelen ışığı, aktif polimer tabakası ile doğrudan elektrik enerjisine çeviren aygıttır. Organik güneş pilleri kolay üretimi, ucuz maliyeti, esneklikleri ve çok ince film yapabilme özellikleri nedeniyle silikon güneş pillerine alternatif olarak gösterilmektedir.

Organik güneş pilleri, iki elektrot arasına aktif tabaka (polimer) sıkıştırılarak oluşturulur. Şekil 1.10'da iki elektrot arasına P3HT:PCBM karışımının elde edilmesiyle meydana gelen bir polimer güneş pili gösterilmektedir (17). Genel olarak elektrot olarak ITO (İndiyum Kalay Oksit) kullanılmaktadır. ITO kaplı pet yüzey üzerine sırasıyla delik-taşıyıcı katman olarak bilinen PEDOT: PSS, aktif karışım P3HT:PCBM ve son olarak alüminyum kaplanarak güneş hücresinin üretimi gerçekleşmektedir.



Şekil 1.10 P3HT:PCBM güneş hücresi

Organik güneş pilleri şu şekilde çalışmaktadır (17): Güneşten gelen fotonlar PET, ITO, PEDOT: PSS katmanlarını geçerek P3HT:PCBM filmine ulaştıklarında sahip oldukları enerjiyi elektron ve deşik (boşluk) çiftleri olan eksitonları oluşturmak için kullanmaktadır. ITO ve alüminyum elektrotlarının iş fonksiyonları seviyeleri arasındaki farkın sebep olduğu elektrik alan etkisiyle, bu elektron-deşik çiftleri birbirinden ayrılmaktadır. Elektronlar alüminyum elektroduna, deşikler ise ITO elektroduna taşınarak devreden akım geçmesi sağlanmaktadır. Böylece foton enerjisi elektrik enerjisine dönüştürülmektedir.

1.2. Rubrene Organik Yarıiletken

1.2.1. Genel özellikler

Rubrene (5,6,11,12-tetraphenylnaphthacene) kırmızı renkli bir polycyclic aromatik hidrokarbondur (19) (Şekil 1.11) ve iki merkezi benzen (C₆H₆) halkasının her iki tarafına bağlı fenil (C₆H₅) halkalı bir tetracen temel (yani, dört yapışık benzen halkası)'inden oluşur. Şekil 1.12(a) ve (b)'de rubrene molekülünün yapısal formülü ve üç boyutlu resmi görülmektedir (20). Rubrene'in molar kütlesi 532.7 g/mol ve erime noktası 315 °C'dir (19). Rubrene, ışıklı çubuk içinde bir sarı ışık kaynağı ve kemilüminesans içinde bir duyarlaştırıcı olarak kullanılır. Bir organik yarıiletken olan rubrene'in en önemli uygulamaları organik ışık yayan diyotlar (OLED) (21), organik alan etkili transistörler (OFET) (22), fotovoltaik hücreler (23) ve organikinorganik hetero eklemlerdir (24). Rubrene, boşluklar (hole) için 40 cm²/(V-s.) yüksek taşıyıcı hareketliliğine (mobility) sahip olup bu sayede p tipi organik yarıiletken olma özelliğini taşımaktadır (19). Rubrene ayrıca oda sıcaklığında %100 fotolüminesans verime sahiptir (25). Rubrene molekülünün HOMO/LUMO bant aralığı yaklaşık 2.2 eV'dur (26).



Şekil 1.11 Rubrene tozu



Şekil 1.12 Rubrene molekülünün (a) yapısal formülü (C₄₂H₂₈) (b) üç boyutlu resmi. Sadelik açısından hidrojen atomları gösterilmemiştir

1.2.2. Kristal yapısı

Rubrene molekülü monoklinik, triklinik ve ortorombik fazda kristalleşmesine rağmen ortorombik fazda elde etmek daha kolaydır (20). Şekil 1.13 (a)'da fiziksel buhar taşıma yöntemiyle büyütülen ortorombik rubrene kristalin optik mikroskop fotoğrafı görülmektedir (20). Ortorombik kristalin oda sıcaklığında (293 K) toplanan birim hücre örgü sabitleri $\vec{a} = 26.86(1)$ Å, $\vec{b} = 7.193(3)$ Å ve $\vec{c} = 14.433(5)$ Å, hacim 2788.5(18), birim hücredeki molekül sayısı 4'dür. Ayrıca, birim hücre başına dört moleküllü *Cmca* uzay grubuna sahiptir (20). Şekil 1.13 (b) ve (c)'de **b** ve **c** eksenleri boyunca bakıldığında ortorombik kristalin birim hücreleri görülmektedir.



Şekil 1.13 (a) Fiziksel buhar taşıma yöntemiyle büyütülen rubrene ortorombik kristalin optik mikroskop fotoğrafı. Açık yüzey (100) yüzeyidir. (b) ve (c) b ve c eksenleri boyunca gözlenen ortorombik rubrene birim hücresi

1.3. Optiksel Temel Kavramlar

1.3.1. Elektromanyetik radyasyon

Klasik anlamda, elektromanyetik radyasyon birbirlerine ve yayılma yönüne dik olan elektrik ve manyetik alan bileşenden oluşan dalga olarak kabul edilmektedir (Şekil 1.14). Işık, ısı (ısı veya ışık yayan enerji), radar, radyo dalgaları ve x-ışınları elektromanyetik radyasyonun faklı türleridir. Bunların her biri sahip oldukları dalga boyuna göre karakterize edilmektedir. Radyasyon, elektromanyetik spektrumun

 γ -ışınlarında en geniş aralığı 10^{-12} m (10^{-3} nm) dalga boyunda, X-ışınları, morötesi (UV), görünür, kızılötesi ve radyo dalgaları yoluyla dalga boyu ise 10^5 m kadar uzundur (27). Bu spektrum, logaritmik bir ölçekte, Şekil 1.15'de gösterilmiştir (27).



Şekil 1.14 Elektrik alan E, manyetik alan H ve dalga boyu λ bileşenleri ile bir elektromanyetik dalganın gösterimi (27)

Görünür ışık, spektrumun çok dar bir bölge içinde yer alır ve dalga boyları yaklaşık $0.4 \,\mu$ m $(4x10^{-7} \text{ m})$ ve $0.7 \,\mu$ m arasında değişmektedir. Algılanan renk dalga boyu tarafından belirlenir; örneğin, $0.4 \,\mu$ m dalga boyuna sahip radyasyon mor görüntülenirken, $0.5 \,\mu$ m ve $0.65 \,\mu$ m dalga boyuna sahip radyasyon sırasıyla yeşil ve kırmızı renkte görüntülenmektedir. Farklı renkler için spektrum aralıkları Şekil 1.15'de verilmiştir. Beyaz ışık tüm renklerin karışımından oluşmaktadır. Devam eden görüşler öncelikle bu görünür radyasyon ile ilgilidir, tanımı gereği sadece görünür radyasyon göz için duyarlıdır.



Şekil 1.15 Görünür spektrum çeşitli renkler için dalga boyu aralıkları dahil olmak üzere elektromanyetik radyasyon spektrumu

Her elektromanyetik radyasyon boşluğu aynı hızla yani $3x10^8$ m/s (186.000 mil/s) hızla geçmektedir. Bu hız (c), boşluğun elektriksel geçirgenliği (ε_0) ve manyetik geçirgenliği (μ_0) ile aşağıdaki denklemdeki gibi ifade edilmektedir.

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \tag{1.1}$$

Dolayısıyla elektromanyetik sabit c ile elektriksel geçirgenlik ve manyetik geçirgenlik arasında bir ilişki vardır.

Ayrıca, elektromanyetik radyasyon frekans ve dalga boyuna göre hızın bir fonksiyonu olarak aşağıdaki denklemdeki gibi ifade edilmektedir.

$$c = \lambda \upsilon \tag{1.2}$$

Frekans hertz cinsinden ifade edilmektedir ve saniyede 1 devir olarak bilinmektedir. Elektromanyetik radyasyonun farklı formları için frekans aralıkları da Şekil 1.15'deki spektrumda dahildir.

Işık hem parçacık hem de dalga karakteristiğine sahiptir. Foton ışığın bir kuantum birimidir. Bir fotonun enerjisinin belirli bir dereceye kadar enerji içerdiği söylenmektedir, ya da sadece belirli değerler almaktadır. Enerji aşağıdaki denklem gibi ifade edilmektedir.

$$E = h\upsilon = \frac{hc}{\lambda} \tag{1.3}$$

Burada h: Planck sabitidir (6.62x10⁻³⁴J-s).

Denklem 1.3'de görüldüğü gibi foton enerjisi radyasyonun frekansına orantılı ve dalga boyu ile ters orantılıdır. Foton enerjileri de elektromanyetik spektruma dahildir (Şekil 1.15).

1.3.2. Işığın katılar ile etkileşimi

Herhangi bir ortamdan ışık geldiğinde, birkaç olay gerçekleşmektedir. Işık radyasyonu bazı ortamlarda iletilebilmektedir. Bazı ortamlarda ışık soğurulacak ve bazı ortamlarda iki ortam arasında ara yüzey olarak yansıyacaktır. Katı bir ortamın yüzeyine gönderilen ışının şiddeti I_0 , geçen, soğurulan ve yansıyan şiddetlerinin toplamına eşit olmalıdır. Geçen, soğurulan ve yansıyan ışının şiddetleri sırasıyla I_T, I_A, I_R ile gösterilmektedir ve aşağıdaki denklemdeki gibi ifade edilmektedir (27). $I_0 = I_T + I_A + I_R$ (1.4)

Radyasyon şiddeti metre kare başına watt olarak ifade edilmektedir, yayılma yönüne dik olan bir birim alan boyunca zaman birimi başına aktarılan enerji değerine karşılık gelmektedir.

Denklem 1.4'e alternatif olarak aşağıdaki gibi de gösterilmektedir (27).

$$T + A + R = 1 \tag{1.5}$$

T, *A* ve *R* sırasıyla geçirgenlik (I_T/I_0) , soğurma katsayısı (I_A/I_0) ve yansıma katsayısı (I_R/I_0) temsil etmektedir.

Işığın içerisinden kolaylıkla geçebildiği ya da çok az soğurulduğu ve saçıldığı maddelere geçirgen maddeler denir. Işığın içerisine nüfuz edebildiği ve orada saçılabildiği malzemelere yarıgeçirgen malzemeler denir. Işığı karşı tarafa geçirme özelliği olmayan malzemelere opak (mat) malzemeler denir.

Toplu metallerde tüm ışık radyasyonu soğurma veya yansıtma olan tüm görünür spektrum boyunca mattır. Diğer yandan elektriksel olarak yalıtkan malzeme geçirgen yapılabilmektedir.

1.3.3. Atomik ve elektronik düzeydeki etkileşimler

Katı maddeler içinde meydana gelen optik olaylar, elektromanyetik radyasyonların, atomların, iyonların veya elektronların etkileşimlerine yol açmaktadır. En önemli etkileşimlerin ikisi, elektronik polarizasyon ve elektron enerji geçişleridir (27).

1.3.3.1. Elektronik polarizasyon

Elektromanyetik dalganın bir bileşeni hızla değişen elektrik alandır (Şekil 1.14). Görünen dalga boylarında, malzeme içinde ilerleyen elektromanyetik dalganın (ışık) elektrik bileşeni ile her atomun etrafını saran elektron bulutu arasında bir etkileşme meydana gelmektedir. Bu etkileşme ile elektronların çekirdeğe göre ötelenmesi sonucunda bir elektronik polarizasyon (kutuplaşma) meydana gelmektedir. Bu kutuplaşmanın iki sonucu (27):

(1) Elektromanyetik radyasyon enerjisinin bir kısmını absorbe edilebilmesi

(2) Işık dalgası malzeme içinden geçerken hızı yavaşlamasıdır.

1.3.3.2. Elektron enerji geçişleri

Elektromanyetik radyasyonun soğurma veya yayılımı, uyarılmış bir enerji düzeyinden diğerine elektron geçişleri ile ilgilidir. İzole bir atomun elektron enerji diyagramı Şekil 1.16'daki gibi gösterilmektedir. Bir elektron mevcut bulunduğu E_2 enerji düzeyinden uyarılarak, boş ve daha yüksek bir E_4 enerji düzeyine foton enerjisini absorbe ederek yükselebilmektedir. Elektronun enerji değişimi ΔE , aşağıdaki radyasyon frekansına bağlıdır.

$$\Delta E = h\upsilon \tag{1.6}$$

Burada *h* Planck sabitidir.



Şekil 1.16 İzole bir atom için, bir enerji durumundan diğerine bir elektronun uyarılması ile foton soğurulmasının şematik gösterimi

Bu noktada birkaç kavramın iyi anlaşılması önemlidir. İlki, atom için enerji durumları ayrıdır, sadece belirli ΔE enerji seviyeleri arasında geçişler mevcuttur böylece atom için olası ΔE 'nin tekabül ettiği frekanslar yalnızca elektron geçişlerinden fotonlar tarafından soğurulmaktadır. Ayrıca, fotonun tüm enerjisi her uyarma sonucunda soğurulur.

İkinci önemli nokta ise uyarılmış enerji seviyesinden bir elektron karalı hale geri dönmek istemektedir. Kısa bir süre içinde, aldığı enerjiyi geri yayarak orijinal (ilk) enerji düzeyine geri dönmektedir. Bu geri dönüş farklı aşamalardadır. Ancak sonuçta, enerji soğurulması ve yayılması sırasında enerjinin korunumu yasası geçerlidir.

1.3.4. Metallerin optiksel özellikleri

Metaller için elektron enerji bant şemaları Şekil 1.17(a) ve (b)'de gösterilmektedir (27). Her iki durumda yüksek enerji seviyeleri kısmen elektronlar ile doludur. Metaller opak malzemelerdir, çünkü malzeme üzerine etki eden görünen dalga boylarındaki ışık dalgaları elektronları fermi enerji düzeyinin üzerindeki kısmen boş enerji seviyelerine yükseltir (Şekil 1.17(a)). Sonuç olarak gelen ışığın enerjisi denklem (1. 6)'ya göre soğurulmaktadır.

Tüm enerji emilimi metalin yüzeyinde, yaklaşık $0.1 \,\mu$ m bir kalınlık içinde gerçekleşmektedir. Dolayısıyla ancak $0.1 \,\mu$ m'den daha ince metal filmler ışığı geçirebilmektedir.

Görünür ışığın tüm frekanslarının metaller tarafından soğurulması nedeniyle sürekli kullanılabilir boş durumlar Şekil 1.17(a)'daki gibi izinlidir. Aslında metallerin, frekans spektrumunun düşük kısımlarında tüm elektromanyetik radyasyonlar yani radyo dalgalarından kızılötesi, görünür ve mor ötesi (UV) dalgaların ortası opaktır. Metaller yüksek frekans radyasyonunda (X ve γ ışını) saydamdır.

Bir atom tarafından soğurulan ışık ile düşük enerji seviyesindeki elektron daha yüksek enerjili bir seviyeye çıkmaktadır. Bir atom için bu durum kararsız bir haldir. Elektron burada belirli bir süre kalır ve ardından daha kararlı olan temel hale dönmesi yani foton yayılımı Şekil 1.17(b)'de gösterilmektedir. Çoğu metaller için yansıma 0.90 ve 0.95 arasındadır, enerjinin geri kalan kısmı ısı enerjisine dönüşmektedir.


Şekil 1.17 (a) Metalik malzemeler için bir elektronun fotonu soğurarak daha yüksek olan üst enerji seviyesine geçişinin şematik gösterimi (b) düşük enerji seviyesindeki elektronun daha yüksek enerjili bir seviyeye çıktıktan sonra kararsız durumda bir süre kalıp tekrar karalı hale döndüğünde ışık yayma olayının şematik gösterimi

Metaller opak malzemeler oldukları için yüksek yansıtma özelliğine sahiptir. Dolayısıyla metallerin renklerini, üzerlerinden yansıyan ışığın dalga boylarının dağılımı belirler. Metaller beyaz ışığa maruz kaldığında parlak bir görünüm göstermektedir yani metaller görünür spektrumun tüm aralığında yüksek yansıtıcı özelliğe sahiptir. Diğer bir değişle yansıyan bir ışın için, bu bileşimin yayılım olmadan önce soğurulmuş fotonları, frekans ve sayısı bakımından yaklaşık gelen ışın için aynıdır. Alüminyum ve gümüş yansıtıcı davranışı gösteren iki metaldir. Bakır ve altın sırasıyla kırmızı-turuncu ve sarı renkte görünür çünkü kısa dalga boyları olan ışık fotonları ile ilgili enerjinin bir kısmı görünür ışık olarak tekrar yayılmaktadırlar.

1.3.5. Metal olmayan malzemelerin optik özellikleri

Elektron bant yapılarına bağlı olarak metalik olmayan malzemeler görünen dalga boyundaki ışığı geçirebilmektedir. Bu yüzden yansıma ve soğurma yanında kırılma ve geçirme durumları da dikkate alınmalıdır.

1.3.6. Kırılma

Işık, saydam malzeme içine geldiğinde doğrultusunu değiştirmesi sonucunda hızında bir azalma yaşanır bu olaya ışığın kırılması denilmektedir. Bir malzemenin kırılma indisi (n), ışığın vakumdaki hızının (c) ışığın malzeme içindeki hızına (v) oranı olarak tanımlanmaktadır.

$$n = \frac{c}{\upsilon} \tag{1.7}$$

Kırılma indisinin büyüklüğü (ışığın ne kadar eğildiği) ışığın dalga boyuna bağlıdır. Prizmadan geçen beyaz ışığın renklere nasıl ayrıldığı Şekil 1.18'te gösterilmektedir (27). Her bir renk, cam prizma içinden geçerken farklı miktarlarda kırılmaya uğramaktadır. Kırılma indisi sadece ışığın optik rotasını etkilemez, aynı zamanda gelen ışığın yüzeyden yansıyan miktarını da etkilemektedir.



Şekil 1.18 Prizmadan geçen ışığın renklere ayrılması

c'nin büyüklüğü denklem 1. 1'deki gibi tanımlanmaktadır ve buna eşdeğer bir ifade olarak ışığın hızı (v) aşağıdaki gibi verilmektedir (27).

$$\upsilon = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon \mu}} \tag{1.8}$$

Burada ε , dielektrik sabiti, μ , manyetik geçirgenlik sabitidir.

Denklem (1. 7) kullanılarak aşağıdaki ifade elde edilmektedir (27).

$$n = \frac{c}{\upsilon} = \frac{\sqrt{\beta \mu}}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} = \sqrt{\varepsilon_r \mu_r}$$
(1.9)

Burada ε_r , relatif dielektrik sabiti, μ_r , relatif manyetik geçirgenlik sabitidir. Pek çok malzemenin çok az manyetik olduğu düşünüldüğünde $\mu_r \cong 1$ olmaktadır.

$$n \cong \sqrt{\varepsilon_r} \tag{1.10}$$

Sonuç olarak saydam malzeme için kırılma indisi ve dielektrik sabiti arasında bir ilişki olduğu görülmektedir. Daha önce belirtildiği gibi, kırılma olayı nispeten yüksek frekanslarda görünür ışık için elektronik polarizasyon ile ilgilidir. Böylece, dielektrik sabiti denklem 1.10'da kullanılan kırılma indisi ölçümlerinden belirlenebilmektedir.

Işığın malzeme içindeki geçiş hızına etki eden şey elektronik etkileşmeler olduğuna göre, atom veya iyonların boyutları da bu etkinin büyüklüğüne etki edecektir. Atom veya iyon boyutu büyüdükçe, elektronik kutuplaşma artacak, hız düşecek ve kırılma indisi artacaktır. Kırılma indisi tipik soda-kireç camı için yaklaşık olarak 1,5'tur. Büyük oranda bir cama baryum ve kurşun iyonları (BaO ve PbO gibi) eklendiğinde kırılma indisi (*n*) önemli ölçüde artacaktır. Örneğin %90 ağırlığında PbO içeren büyük ölçüde kurşunlanmış camlar yaklaşık olarak 2.1 kırılma indisine sahiptir.

Kübik yapıya sahip kristal seramiklerde ve camlarda kırılma indisinin değeri kristal doğrultusundan bağımsızdır yani izotropiktir. Ancak, kübik olmayan kristallerde kırılma indisi anizotropiktir. Kırılma indisi iyonların en yoğun dizildiği doğrultularda en büyüktür. Tablo 1.1'de birkaç cam, geçirgen seramik ve polimerler için kırılma indisleri verilmektedir. Ortalama kırılma indisi değerleri kristal yapıya sahip seramikler için bulunduğunda kırılma indisinin anizotropik olduğu görülmektedir.

 Tablo 1.1 Bazı geçirgen malzemeler için kırılma indisi

Malzeme	Ortalama Kırılma İndisi
Seramikler	
Silis Cam	1.46
Borosilikat Cam	1.47
Soda-Kireç Cam	1.51
Kuartz (SiO ₂)	1.55
Kurşunlu Cam	1.65
Magnezyum Alüminyum Oksit	1.72
$(\mathbf{Mg}Al_2O_4)$	
Magnezyum Oksit (MgO)	1.74
Alüminyum Oksit (Al ₂ O ₃)	1.76
Polimerler	
Politetrafloroetilen	1.35
Polimetil metakrilat	1.49
Polipropilen	1.49
Polietilen	1.51
Polistiren	1.60

1.3.7. Yansıma

Işık, tamamen geçirgen ve kırılma indisleri farklı bir ortamdan diğer bir ortama geçerken, ışığın bir kısmı iki malzemenin ara yüzeyinde saçılmaktadır. Yansıma (*R*), gelen ışığın ara yüzeydeki yansıtılan kısmını ifade etmektedir.

$$R = \frac{I_R}{I_0} \tag{1.11}$$

Burada I_0 , gelen ışığın şideti, I_R , yansıyan ışığın şiddetidir.

Eğer ışık yüzeye normal veya dik geliyorsa yansıma ifadesi;

$$R = \left(\frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1}\right)^2 \quad \text{şeklindedir.}$$
(1.12)

Burada n_1 ve n_2 iki ortamın kırılma indisini ifade etmektedir. Işık ara yüzeye normal gelmezse, *R* yansıma açısına bağlı olacaktır. Işık, vakum veya hava ortamından bir katı içine geçerse;

$$R = \left(\frac{n_s - 1}{n_s + 1}\right)^2 \tag{1.13}$$

Havanın kırılma indisi için bu ifade yaklaşık olarak uyumludur. Bu nedenle katının kırılma indisi büyürse yansıma da artmaktadır. Tipik silisyumlu camlar için, yansıma yaklaşık 0.05'tir. Bir katı maddenin kırılma indisinin büyüklüğü gelen ışığın dalga boyuna bağlı olduğu gibi, yansıma oranı da dalga boyu ile değişiklik göstermektedir. Lensler ve diğer optiksel aletler için yansıma kaybı, magnezyum florür gibi dielektrik malzemelerin çok ince katmanları yansıtıcı yüzey kaplama ile önemli ölçüde en aza indirilmektedir.

1.3.8. Soğurma

Metal olmayan malzemeler görünür ışığa karşı opak veya geçirgen özellikte olabilmektedir ve metal olmayan malzemeler geçirgenlik özelliğine sahipse renkli görülmektedir (27). Işık metalik olmayan malzemelerde iki temel mekanizma ile soğurulmaktadır. Bunlar bu tür malzemeler içinde ışığın geçiş karakteristiklerini etkilemektedir. Bunlardan biri elektronik kutuplaşmadır. Elektronik kutuplaşma da bu tür soğurma sadece, düşük frekanslı (maddeyi oluşturan atomların gevşeme frekanslarına yakın değerlerde) ışıklar için geçerlidir. Diğer mekanizma valans bantı-iletim bantı elektron geçişlerini içermektedir. Malzemenin elektron bant yapısına (yarıiletken ve yalıtkanların) bağlıdır.

Işığın soğurulması neredeyse dolu valans bantındaki bir elektronun uyarılması veya yükselmesi ile olabilmektedir. Yasak enerji aralığı (E_g) ve boş durumdaki iletim bantı Şekil 1.19(a)'da gösterilmektedir (27). Işığın soğurulması sonucunda valans bantında bir boşluk, iletim bantında ise bir serbest elektron oluşmuştur. Ayrıca, denklem 1.6'da gösterildiği gibi uyarılma enerjisi ΔE soğurulan fotonun frekansı ile ilişkilidir. Eğer fotonun enerjisi yasak enerji aralığı E_g 'den daha büyükse soğurma olayı gerçekleşmektedir.

$$h\nu > E_g \tag{1.14}$$



Şekil 1.19 (a) Metal olmayan materyaller için yasak enerji aralığı boyunca uyarılan bir elektronun soğurma spektroskopisi, (b) Yasak enerji aralığı boyunca doğrudan elektron geçişi ile fotonun yayılımı.

Denklem (1.14)'ü dalga boyu cinsinden ifade edersek;

$$\frac{hc}{\lambda} > E_g \tag{1.15}$$

Görünür ışığın minimum dalga boyu $\lambda_{\min} \cong 0.4 \,\mu$ m, $c = 3x 10^8$ m/s ve $h = 4.13x 10^{-15}$ eV-s, maksimum yasak enerji aralığı $E_{g(\max)}$;

$$E_{g(\text{max})} = \frac{hc}{\lambda_{\text{min}}}$$

$$= \frac{(4.13x10^{-15}eV - s)(3x10^8 m/s)}{4x10^{-7}m}$$
(1.16)
$$= 3.1 \text{ eV}$$

Sadece 3.1 eV'da maksimum yasak enerji aralığı için görünür ışığın soğurulması mümkündür.

Görünür bölgede yaklaşık 3.1 eV'dan daha büyük yasak enerji aralığına sahip metal olmayan malzemeler tarafından soğurulamamaktadır. Bu malzemeler yüksek saflığa sahipse saydam ve renksiz gözükmektedir.

Görünür ışığın maksimum dalga boyu $\lambda_{\max} \cong 0.7 \,\mu$ m olarak alındığında minimum yasak enerji aralığı $E_{g(\min)}$;

$$E_{g(\min)} = \frac{hc}{\lambda_{\max}}$$

= $\frac{(4.13x10^{-15}eV - s)(3x10^8 m/s)}{7x10^{-7}m}$ (1.17)
= 1.8eV

Sadece 1.8 eV'da minimum yasak enerji aralığı için görünür ışığın soğurulması mümkündür.

Sonuç olarak yasak enerji bant genişliği yaklaşık 1.8 eV değerinden daha düşük olan yarı iletkenlerde, görünen dalga boyundaki tüm ışık dalgaları, valans bantından iletim bantına elektron geçişleri ile soğurulur. Bu yüzden bu tür malzemeler ışığı geçirmez yani opak malzemelerdir. Görünür spektrumun bir kısmı 1.8 eV ve 3.1 eV arasındaki yasak enerji aralığına sahip olan malzemeler tarafından kısmi olarak soğurulmaktadır. Bu tür malzemeler renkli gözükmektedir.

Her metal olmayan malzeme E_g 'nin büyüklüğüne bağlı olarak bazı dalga boylarında opak olmaktadır. Örneğin 5.6 eV yasak enerji aralığına sahip olan elmas yaklaşık 0.22 μ m'den daha düşük dalga boylarına sahip olan radyasyonda opaktır.

1.3.9. Geçirgenlik

Işığın geçirgen bir katı boyunca iletilmesiyle meydana gelen soğurma, yansıma ve geçirgenlik olayı Şekil 1.20'de gösterilmektedir (27).

$$I_{T} = I_{0} (1 - R)^{2} e^{-\beta l}$$
(1.18)

Burada; I_0 : Gelen ışık şiddeti, l: Kalınlık

R: Yansıma katsayısı

β: Absorbsiyon katsayısı

 I_T : Geçen ışık şiddetini ifade etmektedir.

Bu ifade için yansıma katsayısı *R* hem ön hem de arka yüzey dışında aynı ortalama değere sahip olduğu varsayılmıştır.





Geçirgen bir malzeme boyunca iletilen gelen ışığın kesri soğurma ve yansımadan kaynaklanan kayıplara bağlıdır. Denklem (1.5)'deki gibi yansıma R, soğurma A ve geçirgenlik T'nin toplamı 1'dir. R, A ve T değerlerinin her biri ışığın

dalga boyuna bağlıdır. Bu Şekil 1.21'de spektrumun görünür bölgesinde yeşil bir cam için gösterilmektedir. Örneğin 0.4 μ m dalga boyuna sahip olan ışık için geçen, yansıyan ve soğurulan kesirler yaklaşık olarak sırasıyla 0.90, 0.05 ve 0.05'tir. Ancak 0.55 μ m dalga boyunda her bir kesir yaklaşık 0.50, 0.48 ve 0.02 olarak değişmiştir.



Dalga boyu (µm)

Şekil 1.21 Bir yeşil cam boyunca gelen ışığın iletilme, soğurma ve yansıma kesirlerinin dalga boyuna göre değişimleri

1.3.10. Renk

Geçirgen malzemeler, ışığın belirli dalga boyu aralıklarının bir sonucu olarak renkli gözükmektedir (27). Bu seçici soğurmadır. Fark edilen bu renk dalga boylarının birleşimin bir sonucudur. Eğer soğurma tüm dalga boyları için aynı ise malzeme renksiz gözükür. Yüksek saflık içeren inorganik camlar, yüksek saflıktaki tek kristal elmaslar ve safirler buna örnek olarak gösterilmektedir.

Genellikle, her bir seçici soğurma elektron uyarılması ile olmaktadır. Böyle bir durumda görünür ışık için foton enerji aralığı 1.8 eV'dan 3.1 eV'a kadar olan yarı iletken malzemeler için bant aralığını içermektedir. Böylece görünür ışığın kesri E_g 'den daha büyük enerjilere sahiptir ve seçici valans bantı-iletim bantı elektronların geçişleri ile soğurulmaktadır. Tabiki soğurulan radyasyonun bazıları daha düşük enerji durumlarında uyarılmış elektronların asıl kısmından geride kalarak tekrar yayılacaktır. Bu tekrar yayılan radyasyonun soğurulması ile aynı frekansta

meydana gelmesi gerekmemektedir. Sonuç olarak, renk frekans dağılımı ışık ışınlarının hem iletilmesine hem de geri yansımasına bağlıdır.

1.4. Yarıiletkenlerin Optik Özellikleri

Yariletkenlerin bant yapılarının belirlenmesinde en çok kullanılan yöntem optik soğurma yöntemidir. Bu yöntemle yariletkenin bant tipi ve yasak enerji aralığı hakkında bilgi edinilebilmektedir. Soğurma, bir malzemeye gelen elektromanyetik dalganın malzemede bulunan elektriksel yükler ile etkileşmesi sonucunda enerji kaybına uğraması olayıdır. Bu enerji kaybı materyalin atomları tarafından kullanılmaktadır. Soğurma olayında belli bir enerji seviyesinde bulunan foton bir elektronu düşük enerji seviyesinden yüksek bir enerji seviyesine uyarmaktadır (1).

Çeşitli dalga boylarında ışın içeren bir demet, yarı saydam bir ortamdan geçirilirse ışının soğurulması ile içindeki bazı dalga boyları kaybolmaktadır. Materyaldeki moleküllerin bu ışınları soğurmasından sonra materyali geçen ışın demeti bize materyal hakkında bilgi vermektedir.

1.4.1. Temel soğurma olayı

Bir elektronun bir foton soğurarak valans bantından iletim bantına geçmesiyle temel soğurma olayı oluşmaktadır. Bu geçişin gerçekleşmesi için materyal üzerine düşen foton enerjisinin yasak enerji aralığına eşit veya ondan daha büyük olması gerekmektedir. Gelen fotonun frekansı v ise

$$\upsilon \ge E_g / h \tag{1.19}$$

şeklinde yazılmaktadır. Gelen fotonun dalga boyu ise:

$$\lambda_g \le hc / E_g \tag{1.20}$$

şeklinde yazılmaktadır. Burada; E_g :Yasak enerji aralığı; *h*: Planck sabiti; λ_g : gelen foton dalga boyu ve *c*: ışık hızı 'dır.

Temel soğurma, yarıiletkenin enerji aralığının belirlenmesinde kullanılmaktadır. Şekil 1.22'de yarıiletken için temel soğurma spektrumu görülmektedir. Şekilde görüldüğü gibi yarıiletken temel soğurma spektrumunda λ_g dalga boyuna yakın dalga boylarından itibaren soğurulmada sürekli bir artış gözlenmektedir. λ_g değerinden sonra bir denge değerine ulaşmaktadır. Yarıiletken

materyal λ_g dalga boyundan büyük dalga boylarında geçirgenlik özelliği göstermektedir. λ_g dalga boyundan küçük dalga boylarında ise kuvvetli bir soğurucu olarak görülmektedir. Bir yarıiletkenin temel soğurma sınırında direkt bant geçişi ve indirekt bant geçişi olmak üzere iki tür geçiş vardır.



Şekil 1.22 Yarıiletkende temel soğurma spektrumu (28)

1.4.2. Direkt bant geçişi

Yariiletken materyalde iletim bantının minimumu ile valans bantının maksimumu enerji-momentum uzayında aynı k değerine sahip ise ($\Delta k = 0$) bu tür geçişlere direkt bant geçişi denilmektedir. k = 0'da momentum korunum ifadesi;

$$\hbar k_e + \hbar k_h = 0 \tag{1.21}$$

Burada ; $\hbar k_e$: elektronların kristal momentumları

 $\hbar k_h$: hollerin kristal momentumlarını vermektedir.

Direkt bant geçişi Şekil 1.23'de görülmektedir. Direkt bant geçişte frekansı v olan bir fotonun enerjisi:

$$h\upsilon = E_e - E_h \ge E_i - E_\upsilon \tag{1.22}$$

ifadesi ile verilmektedir.

Burada; E_e : elektronların, E_h : hollerin, E_i : iletim bantının ve E_v : valans bantının herhangi bir konumdaki enerjilerini vermektedir. Direkt bant geçişinde enerji korunmaktadır.



Şekil 1.23 Bir yarıiletkende direkt bant geçişi

Direkt bant geçişinde, gelen fotonun enerjisi yarıiletkenin enerji aralığına eşit olduğu zaman Şekil 1.24'de görülen 1 geçişi görülmektedir. Gelen fotonun enerjisinin yarı iletkenin enerji aralığından büyük olduğu durumlarda ise Şekil 1.24'deki 2 geçişi görülmektedir. Buna göre;

$$E_s = h\upsilon - |E_i| \tag{1.23}$$

ifade edilmektedir. E_i : ilk durum enerji seviyesi ve E_s : son durum enerji seviyesi' dir.

Parabolik bantlarda ise;

$$E_{s} - E_{g} = \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m_{e}^{*}}$$
(1.24)

$$E_{i} = \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m_{h}^{*}}$$
(1.25)

şeklinde gösterilmektedir.

Burada ; m_e^* : elektronun etkin kütlesi ve m_h^* : holün etkin kütlesidir.

1.24 ve 1.25 denklemleri 1.23 denkleminde yerine yazılırsa;

$$h\upsilon - E_g = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right)$$
(1.26)

elde edilmektedir.



Şekil 1.24 Direkt bant geçişinde enerji durumlarının gösterimi (28)

Direkt geçişlerde eksiton oluşumu veya elektron-boşluk etkileşimi göz önüne alınmazsa, soğurma katsayısı α gelen fotonun enerjisine;

$$\alpha(h\nu) = A^* (h\nu - E_g)^n \tag{1.27}$$

ifadesi ile bağlıdır.

Buradaki A^{*} değeri;

$$A^{*} \approx \frac{q^{2} \left(2 \frac{m_{h}^{*} m_{e}^{*}}{m_{h}^{*} + m_{e}^{*}}\right)^{3/2}}{nch^{2} m_{e}^{*}}$$
(1.28)

ifadesi ile verilen bir sabittir.

n değeri ise; izinli direkt geçişler için 1/2, izinsiz direkt geçişler için 3/2 değerlerini alan bir sabittir.

1.4.3. İndirekt bant geçişi

Yarıiletkende iletim bantının minimumu ile valans bantının maksimumu enerji-momentum uzayında aynı k değerine karşılık gelmiyorsa ($\Delta k \neq 0$) bu tür geçişlere indirekt bant geçişi denilmektedir. İndirekt bant geçişi Şekil 1.25'de gösterilmektedir.



Şekil 1.25 İndirekt bant geçişi

İndirekt bant geçişinde enerji korunur ama momentum korunumu için bir fononun yayılımı veya soğurulması gerekmektedir. Bu iki geçiş;

$$h\upsilon_e = E_s - E_i + E_f$$
 (Fonon yayılımı durumunda) (1.29)

$$hv_a = E_s - E_i - E_f$$
 (Fonon soğurulması durumunda) (1.30)

ile verilmektedir. Burada E_f , fonon enerjisidir.

Fonon soğurulması geçişi için soğurma katsayısı,

 $h\upsilon \ge E_g - E_f$ durumu için;

$$\alpha_{abs}(h\upsilon) = \frac{A(h\upsilon - E_g - E_f)^n}{\exp\left(\frac{E_f}{kT}\right) - 1}$$
(1.31)

ile verilmektedir. Fononun yayılımlı geçişleri için soğurma katsayısı,

hυ≥ $E_g + E_f$ durumu için;

$$\alpha_{em}(h\nu) = \frac{A(h\nu - E_g + E_f)^n}{\exp\left(-\frac{E_f}{kT}\right) - 1}$$
(1.32)

ile verilmektedir. Burada *n* izinli geçişler için 2, izinsiz geçişler için 3 değerini alan bir sabittir. Hem fonon yayılımı hem de fonon soğurulması olması durumunda soğurma katsayısı (α) ile frekans (v) arasındaki bağıntı;

$$n_0 \alpha h \upsilon \approx \frac{\left(h \upsilon - E_g - E_f\right)^n}{\exp\left(\frac{E_f}{kT}\right) - 1} + \frac{\left(h \upsilon - E_g + E_f\right)^n}{\exp\left(-\frac{E_f}{kT}\right) - 1}$$
(1.33)

ile verilmektedir (1).

1.4.4. Yarıiletkenlerin yasak enerji aralıklarının belirlenmesi

Yasak enerji aralığının belirlenmesinde en çok kullanılan yöntem temel soğurma spektrumudur. Soğurma katsayısı ile yasak enerji arasındaki bağıntı denklem 1.34'de verilmektedir. Yaklaşık olarak bu denklem

$$\alpha(h\nu) \approx \left(h\nu - E_g\right)^n \tag{1.34}$$

şeklinde ifade edilebilmektedir.

Bu yöntemde $(\alpha h \upsilon)^{\frac{1}{n}}$, nin $h\upsilon$ 'ye göre grafiği Şekil 1.26'deki gibi çizilmektedir. Grafiğin lineer olduğu kısma karşılık gelen doğrunun $h\upsilon$ eksenini kestiği noktanın enerji değeri o materyalin yasak enerji aralığını vermektedir $((\alpha h \upsilon)^{\frac{1}{n}} = 0'da).$



Şekil 1.26 Yasak enerji aralığının soğurma yöntemi ile belirlenmesi

 $(\alpha h \upsilon)^{\frac{1}{n}} = h \upsilon - E_g$ denkleminde;

- n = 1/2 değerinde materyal izinli direkt bant aralığına
- n = 3/2 değerinde materyal izinsiz direkt bant aralığına
- n = 2 değerinde materyal izinli indirekt bant aralığına
- n = 3 değerinde materyal izinsiz indirekt bant aralığına sahiptir.

2. MATERYAL VE METOT

2.1. Cam Alt Tabakaların Temizlenmesi

Bu çalışmada kullanılan rubrene (5, 6, 11, 12 -Tetraphenylnaphthacene) tozu Sigma- Aldrich firmasından satın alınmıştır. Optiksel ölçümler için alttabaka olarak 1 mm x 20 mm x 20 mm boyutlarında Corning 1737 cam kullanılmıştır. Cam alttabakalar, ultrasonik su banyosu (Wise Clean Wisd. Laboratuary Instruments) kullanarak sırasıyla trikloretilen, methanol ve aseton'da 5'er dakika temizlenmiştir. Her bir temizleme işlemi arasında ayrıca 5 dakika 18 M Ω özdirence sahip deiyonize su ile yıkanmıştır. Bu aşamalardan sonra camlarda su lekesi ve toz kalmaması için camlar azot gazıyla kurutulmuştur. Son olarak kurutulan camlar ozonla (UVO Cleaner model no 42-220) temizlenerek kaplamaya hazır hale getirilmiştir.

2.2. Rubrene İnce Filmin Hazırlanması

Cam alt tabaka üzerinde rubrene ince film hazırlama işlemleri MBraun marka glove box içinde yapılmıştır. Çözelti konsantrasyonu 10mg/ml olacak şekilde rubrene tozu toluene içinde çözdürülmüştür. Cam alt tabaka ilk olarak Laurell marka döndürme ile kaplama (spin coater) cihazına yerleştirilir ve alt tabakanın üzerine mikro pipet yardımı ile yaklaşık 10 μ l rubrene çözeltisi damlatıldı. Kaplama cihazı önce 500 devir/dakika'da 30 saniye daha sonra 1200 devir/dakika'da 60 saniye çalıştırıldı. Bu işlem kalın film elde etmek için 5 kez tekrarlandı ve toplamda 50 μ l çözelti kullanıldı. Rubrene film kaplı cam alt tabaka cihazdan alınıp oda sıcaklığında glovebox içinde bekletildi. Toluene oda sıcaklığında uçtuktan sonra cam üzerinde rubrene ince film birikmiş oldu.

2.3. Numune Hazırlanmasında Kullanılan Cihazlar

2.3.1. Numune tartım cihazı

Rubrene tozunun tartımı için Kern marka tartım cihazı kullanılmıştır. 1 ml toluen başına 10 mg rubrene tartılmıştır.



Şekil 2.1 Kern marka tartım cihazı

2.3.2. Manyetik karıştırıcı

Rubrene tozu toluende çözüldükten sonra çözünmenin daha iyi olabilmesi için çözelti Velp marka manyetik karıştırıcıda 30 dakika karıştırıldı.



Şekil 2.2 Velp marka manyetik karıştırıcı

2.3.3. Su banyosu (ultrasonik temizleyici)

Cam alttabakaların deterjan, kimyasal temizleme ve deiyonize su (18 M Ω) işlemi sırasında WiseClean marka su banyosu kullanılmıştır.



Ultrasonic Cleaner (WUC-A06H)



2.3.4. Mikro pipet

Rubrene çözeltisinin oluşturulmasında çözücü toluene miktarının belirlenmesinde ve hazırlanan çözeltinin cam üzerine istenilen miktarda damlatılmasında kullanılmıştır.



Şekil 2.4 Isolab marka mikropipet

2.3.5. Cam malzeme temizleme cihazı

Ozonla cam malzemeleri steril etmek için kullanılmıştır.



Şekil 2.5 UVO marka (Cleaner model no 42-220) ozonla temizleme cihazı

2.3.6. Glovebox sistemi

Rubrene çözeltisinin hazırlanması, döndürme ile kaplama (spin coater) yöntemiyle cam alttabakalara rubrene filminin hazırlanması ve filmlerin saklanması için kullanılan MBraun marka glovebox sistemi. Bu sistem Selçuk Üniversitesi İleri Teknoloji Araştırma ve Uygulama Merkezinde bulunmaktadır.



Şekil 2.6 MBraun marka glovebox sistemi

2.3.7. Döndürme ile kaplama (spin coater) sistemi

Cam alttabakalara rubrene ince filmi kaplamak için kullanılan Laurell marka döndürme ile kaplama (spin coater) sistemi kullanılmıştır.



Şekil 2.7 Laurell marka döndürme ile kaplama sistemi

2.4. Ölçümlerde Kullanılan Cihazlar

2.4.1. UV-Vis spektrofotometresi

Döndürme ile kaplama (spin coater) yöntemi kullanılarak hazırlanan rubrene organik yarıiletken ince filmin optik ölçümleri (soğurma, geçirgenlik ve yansıma) Selçuk Üniversitesi Fizik Bölümünde bulunan Jasco Model V-670 UV/VIS/NIR Spektrofotometre kullanılarak incelenmiştir. Bu spektrofotometre ile 190-2700 nm dalgaboyu aralığındaki elektromagnetik dalganın madde ile etkileşmesi incelenebilmektedir. Cihaz, ışık kaynağı olarak UV (morötesi) bölge için (187-350 nm) bir döteryum lamba, VIS/NIR (görünür bölge/yakın kırmızıötesi) bölge için (330-2700 nm) bir halojen lamba içermektedir. Cihazda, ışık kaynağından çıkan ışık, bir monokromatördeki kırınım ağı ile tek dalgaboylu hale getirilir ve bir ayırıcı (sektör) aynaya gönderilir. Bu ışık demeti ayırıcı ayna sayesinde iki kısma ayrılır ve biri ölçülecek numune üzerine, diğeri referans numunesine gönderilir. Numune ve referanstan ayrılan ışık, fotoçoğaltıcı tüp veya PbS fotoiletken pilden oluşan bir detektörde algılanarak numunenin optik uyarıma verdiği tepki ölçülür. Soğurma ve yansıma ölçümlerinde farklı modüller kullanılır (1).



Şekil 2.8 Jasco Model V-670 UV/VIS/NIR Spektrofotometre cihazı



Şekil 2.9 Spektrofotometre sisteminin şematik gösterimi (29)

2.4.2. Taramalı elektron mikroskobu (SEM)

Döndürme ile kaplama (spin coater) yöntemi kullanılarak hazırlanan rubrene organik yarıiletken ince filmin yüzey morfolojisi Selçuk Üniversitesi İleri Teknoloji Araştırma ve Uygulama Merkezinde bulunan Zeiss Evo[®] LS-10 model taramalı elektron mikroskobu (SEM) (Şekil 2.10.) kullanılarak incelenmiştir.

Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) Optik Kolon, Numune Hücresi ve Görüntüleme Sistemi olmak üzere üç temel kısımdan oluşmaktadır (Şekil 2.11.). Optik kolon kısmında; elektron demetinin kaynağı olan elektron tabancası, elektronları numuneye doğru hızlandırmak için yüksek gerilimin uygulandığı anot plakası, ince elektron demeti elde etmek için yoğunlaştırıcı mercekler, demeti numune üzerinde odaklamak için objektif merceği, bu merceğe bağlı çeşitli çapta apatürler ve elektron demetinin numune yüzeyini taraması için tarama bobinleri yer almaktadır. Mercek sistemleri elektromanyetik alan ile elektron demetini inceltmekte veya numune üzerine odaklamaktadır. Tüm optik kolon ve numune 10⁻⁴ Pa gibi bir vakumda tutulmaktadır. Görüntü sisteminde, elektron demeti ile numune girişimi sonucunda oluşan çeşitli elektron ve ışımaları toplayan dedektörler, bunların sinyal çoğaltıcıları ve numune yüzeyinde elektron demetini görüntü ekranıyla senkronize tarayan manyetik bobinler bulunmaktadır (30).



Şekil 2.10 Zeiss Evo[®] LS-10 model taramalı elektron mikroskobu (SEM)



Şekil 2.11 Taramalı elektron mikroskobu (SEM)'nun temel kısımları

Yanal kesit SEM görüntülerinden büyütülen rubrene filmin kalınlığı yaklaşık 19 nm olduğu tespit edilmiştir.

2.5. Döndürme ile Kaplama (spin coater) Yöntemi

Döndürme ile kaplama, çözeltinin belli bir hızla döndürülen yüzey üzerine merkezkaç kuvvetinin etkisi ile eşit ve düzenli bir şekilde yayılması işlemidir. Döndürme ile kaplama yöntemi mikroelektronik endüstride ince film oluşturmak için kullanılan en önemli yöntemlerdendir. Şekil 2.7'de döndürme ile kaplama cihazı gösterilmektedir.

Şekil 2.12'de spin kaplama düzeneğinin şematik şekli gösterilmektedir (1). Şekilde görüldüğü gibi alt tabaka vakum pompası ile tutturulmaktadır. Bu vakum pompası alt tabakanın üzerine vakum uygulayarak dönme anında alt tabaka üzerine konulan malzemenin savrulmadan sabit kalmasını sağlamaktadır. Sistemde kaplamanın yapılacağı bölüm bir kapakla ortamdan yalıtılmıştır. Bu filmlerin tozdan arındırılmış bir alanda kaplanmasını sağlamaktadır. Düzgün bir film kalınlığına ulaşmak çözelti özelliklerine (viskozite, kuruma hızı, katı oranı ve yüzey gerilimleri) ve işlem şartlarına (döndürme hızı, kaplama sayısı ve damlatılan çözelti sayısı) bağlıdır. Kaplama kalınlığının aralığı 1nm ile 10 μ m arasında değişmektedir



Şekil 2.12 Spin kaplama yönteminin şeması

Şekil 2.13'de spin kaplama yönteminin dört aşaması verilmektedir (31). Birinci adımda; çözelti sabit hızla dönmekte olan alt tabaka üzerine uygulanmaktadır. Bu adımda önemli olan çözeltinin büyük parçacıklardan arındırılmış olması ve yüzeye yapışabilir bir özellik göstermesidir.

İkinci adımda; Durmakta olan taşıyıcı yüksek hızla döndürülmektedir. Dönme sırasında alt tabaka üzerine damlatılmış çözelti merkezkaç kuvvetinin etkisiyle alt tabaka üzerine ince film şeklinde yayılmaktadır. Eğer çözelti fazla miktarda damlatılmışsa fazlalık yüzeyden savrulmaktadır. Dönme esnasında film kalınlığı azalmaktadır.

Üçüncü adımda; Açısal hız sabit tutulur ve bu adımda filmin kalınlığı azaldıkça fazla sıvının savrulması azalmaktadır. İşlem sırasında sıvının dışa yönelimini sağlayan merkezkaç kuvveti ve içe doğru radyal hareketi sağlayan viskoz kuvveti arasındaki dengenin sağlanmasıyla filmin homojen yapısı oluşmaktadır.

Dördüncü adımda; çözelti filmden buharlaştırılarak istenilen inceliğe ulaştırılmıştır.



Şekil 2.13 Döndürme ile kaplamanın dört aşaması (32)

Döndürme ile kaplama yönteminde çözelti alt tabaka üzerine uygulanırken hava kabarcığı ve boşluk olmamasına dikkat edilmelidir. Hava kabarcığı veya boşluk olursa çözelti düzgün bir şekilde dağılmamaktadır. Çözelti alt tabakanın tam merkezine veya merkeze yakın bölgeye damlatılmalıdır (1). Döndürme ile kaplama, katı yüzeyler üzerine polimer kaplama, mikro devre üretiminde, düz ekran gösterge kaplamalarda, televizyon tüplerinde, DVD ve CD-ROM 'larda kullanılmaktadır (1).

2.6. Spektroskopik Ölçümler

Spektrometrede soğurma ölçümü yaparken referans numune yuvasına referans cam konulup, cihazın kalibrasyonu yapıldıktan sonra numune yuvasına rubrene ince film yerleştirilerek, ölçüm bölgesi ve ölçüm aralığı ayarlandıktan sonra ölçüm gerçekleştirilmiştir. Tüm ölçümler Jasco Model V-670 UV/VIS/NIR Spektrofotometre kullanılarak 5 nm adımlarla, 200-700 nm dalga boyu aralığında yapılmıştır.

Yansıma ölçümlerinde, spektrofotometre 'nin soğurma ölçümünde kullanılan modülü yerine yansıma modülü (JASCO, Model ISN-723, 60 mm dia. Integrating sphere, UV-Vis-NIR) takılmış ve cihazın kalibrasyonu yapılmıştır. Yansıma ölçümünde numune yuvasına rubrene ince film konarak soğurma ölçümünde olduğu gibi 5 nm adımlarla ve 200-700 nm dalga boyu aralığında ölçüm gerçekleştirilmiştir.

3. ARAŞTIRMA BULGULARI

3.1. Rubrene İnce Filmin Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) Analizi

Taramalı elektron mikroskobu (SEM), küçük ve büyük mikro yapılara sahip malzemeleri görüntülemek için kullanılır. SEM, ince film yüzey morfolojisi incelenerek doğrudan iki boyutlu yüzey görüntüleme yanı sıra mümkün olan ortalama parçacık boyutunun da belirlenmesinden dolayı önemli bir cihaz olarak bilinir. SEM ile ince filmler yüksek çözünürlükte görüntülenebildiği gibi ayrıca film kalınlığının küçük veya büyük olmasının da bir önemi yoktur.

Şekil 3.1.'de rubrene ince filmin 20000X büyütmeli SEM görüntüsü görülmektedir. Filmin SEM görüntüsü incelendiğinde, filmin tüm yüzeyi tam olarak homojen bir dağılıma sahiptir ve 50-100 nm aralığında tane büyüklüğünde yapıların oluştuğu görülmektedir. Filmin mikro yapısı küçük ve büyük taneler içerir.



Şekil 3.1 Rubrene ince filmin SEM görüntüsü

3.2. Soğurma (A), Geçirgenlik (T) ve Yansıma (R) Spektrumları

Spin (döndürme) kaplama yöntemiyle cam alt tabaka üzerinde rubrene organik yarıiletken ince film hazırlanmıştır.

3.2.1. Soğurma spektrumları

Soğurma (A) metodu, UV-Vis bölgesinde organik ve inorganik malzemelerin optik geçişlerini ve bant yapılarını incelemek için faydalı bir yöntemdir. Şekil 3.2.'de rubrene ince film için 200-700 nm dalga boyu aralığında soğurma (A) spektrumu verilmiştir. Şekil 3.2.'yi incelediğimizde rubrene filmi için 250 nm ve 300 nm dalga boyunda 2 adet karakteristik soğurma piki elde edilmiştir. Bu dalga boylarında oluşan pikler, dolu olan en yüksek enerjili yörüngeden (HOMO) boş olan en düşük enerjili yörüngeye $\pi \rightarrow \pi^*$ geçişlerinin bir sonucudur.



Şekil 3.2 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında soğurmanın dalga boyu ile değişimi

3.2.2. Geçirgenlik spektrumları

Filmin optik geçirgenlik (*T*) spektrumu oda sıcaklığında 200-700 nm dalgaboyu aralığında 5 nm adımlarla alınmış ve Şekil 3.3.'de verilmektedir. Şekilden görüldüğü gibi Rubrene'nin düşük dalga boylarında ($225 < \lambda < 250$ nm) geçirgenlik özelliğinin azaldığını ve yüksek dalga boylarına gidildikçe geçirgenlik özelliğinin arttığı görülmektedir. Rubrene ince filmin görünür bölgede (400-700 nm) %90 ile %96 arasında bir geçirgenliğe sahip olduğu belirlenmiştir.





3.2.3. Yansıma spektrumları

Şekil 3.4.'de rubrene ince film için 200-700 nm dalga boyu aralığında yansıma (*R*) spektrumu verilmiştir. Rubrene ince filmin görünür bölgede (400-700 nm) %14 ile %10 arasında bir yansımaya sahip olduğu belirlenmiştir. Şekil 3.3. ve 3.4.'de geçirgenlik (T) ve yansıma (R) dağılımlarından rubrene ince filmin yüksek dalga boylarında (λ >390 nm) saydam (*R*+*T*=1) olduğu yani soğurucu olmayan bu bölgede ışık soğurulmamakta veya saçılmamaktadır. Bununla birlikte, kısa dalga boylarındaki (λ < 390 nm) soğurma bölgesi olarak bilinen eşitsizlik (*R*+*T*<1) soğurmanın varlığından dolayıdır.



Şekil 3.4 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında yansımanın dalga boyu ile değişimi

3.3. Soğurma Katsayısı (α), Sönüm Katsayısı (k) ve Kırılma İndisi Spektrumları

Işığın yansıma teorisi, kırılma indisi (n), sönüm katsayısı (k) değerlerini hesaplamak için kullanılmaktadır (33). Bu teoride k ve n değerlerini hesaplamak için

$$k = \frac{\alpha\lambda}{4\pi} \tag{3.1}$$

ve

$$n = \left(\frac{1+R}{1-R}\right) + \sqrt{\frac{4R}{(1-R)^2} - k^2}$$
(3.2)

denklemlerinden yararlanılır. Burada λ , dalga boyu ve α ise soğurma katsayısı olup

$$\alpha = \text{Soğurma}(A) / \text{Kalınlık}(d)$$
(3.3)

ile ifade edilir (34). Buradaki α belli film kalınlığı için optik yoğunluk olarakta adlandırılır. Optik yoğunluk sayısal olarak soğurmaya eşdeğerdir(34). Film kalınlığı bilindiğinde soğurma (*A*) ve yansıma (*R*) karakteristiklerinden optiksel sabitler

hesaplanabilir. Rubrene ince filmin kalınlığı SEM ölçümlerinden 19 nm olarak belirlenmiştir. Şekil 3.2 ve denklem (3.3)'den yararlanarak soğurma katsayısının dalga boyuna ($\alpha - \lambda$) göre değişimi hesaplanmış ve Şekil 3.5'de verilmiştir. Şekil 3.5'i incelediğimizde, soğurma katsayı spektrumunun 2 tane pike sahip olduğu görülmektedir. Yüksek dalga boylu pik, düşük dalga boylu pikten daha düşük şiddete sahiptir. Rubrene'nin soğurma katsayısı (α)'nın 250 nm dalga boyundaki piki 2.81 x 10⁴ cm⁻¹ değere sahipken 300 nm dalga boyundaki piki 1.46 x 10⁴ cm⁻¹ değere sahiptir. Soğurma katsayısı, 300 nm dalga boyundan sonra artan dalga boyu ile azalmakta ve 700 nm dalga boyunda 0.77 x 10³ cm⁻¹ lik en düşük değerine sahip olmaktadır.

Şekil 3.5 ve denklem (3.1)'den yararlanarak sönüm katsayısının dalgaboyuna $(k - \lambda)$ göre değişimi hesaplanmış ve Şekil 3.6'da verilmiştir. Şekil 3.6'yı incelediğimizde, denklem (3.1)'e göre, sönüm katsayısı soğurma katsayısı ile doğru orantılı olduğundan doğal olarak Şekil 3.5 ile benzer bir spektrum değişimi gözlenmiştir. Rubrene'nin sönüm katsayısı (k)'nın 250 nm dalga boyundaki piki 0.056 değere sahipken 300 nm dalga boyundaki piki 0.035 değere sahiptir. Sönüm katsayısı, 300 nm dalga boyundan sonra artan dalga boyu ile azalmakta ve 700 nm dalga boyunda 4.31 x 10⁻³ 'lik en düşük değerine sahip olmaktadır. Uzun dalga boylarında sönüm katsayısı (k)'nın küçük olması hazırlanan rubrene filmin son derece saydam olduğunu göstermektedir (35).

Optiksel aygıt dizaynı için kırılma indisi (*n*) anahtar parametredir. Bununla birlikte, optiksel malzemelerin kırılma indisi (*n*)'nin belirlenmesi entegre optiksel aygıtlardaki anahtarlar, filtreler ve modülasyon gibi uygulamalar için oldukça önemlidir (35). Şekil 3.7, denklem (3.2) kullanılarak 200 ile 700 nm dalga boyu aralığında rubrene'nin kırılma indisinin (*n*) spektrumunu göstermektedir. Rubrene filmin kırılma indisi (*n*), 200 nm den büyük ve 390 nm den küçük dalga boyu aralığında ($200 < \lambda < 390$ nm) anormal dağılım ve 390 nm den büyük 700 nm den küçük dalga boyu aralığında ($390 < \lambda < 700$ nm) da normal dağılım göstermektedir. Bu spektrum farklı bir açıdan incelendiğinde, rubrene'in kırılma indisi (*n*) 200 nm dalga boyunda 2.27 değerinden hızla azalarak 275 nm dalga boyunda 1.79 değerine düşmektedir. Daha sonda tekrar artmakta 390 nm dalga boyunda 1.96'lık değerine ulaşmaktadır.



Şekil 3.5 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında soğurma katsayısının (α) dalga boyu ile değişimi



Şekil 3.6 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında sönüm katsayısının (*k*) dalga boyu ile değişimi



Şekil 3.7 Rubrene organik yarıiletken ince filmin oda sıcaklığında kırılma indisinin dalga boyu ile değişimi

3.4. Enerji bant aralığı ve geçişinin belirlenmesi

Rubrene filmin soğurma bantını tahmin etmek için, optiksel geçirgenliğin ve yansımanın dalga boyuna bağlı birinci türevi hesaplanmış ve Şekil 3.8. (a) ve (b)'de sırasıyla, $dT/d\lambda$ ve $dR/d\lambda$ 'nin 200 nm ile 700 nm dalga boyu arasındaki değişimi verilmiştir. Her iki şekilde de maksimum pik değerleri gözlenmiştir. Bu pikler rubrene filmin optiksel bant aralığının varlığına bir kanıttır (35). Birçok organik malzemede, banttan banta geçiş teorisinde temel soğurma kenarında optiksel soğurmayı analiz etmek olağandır (36-38). Tauc (39) tarafından önerilen Tauc çizimi, organik, inorganik ve diğer malzemelerin optik soğurma spektrumunu göstermek ve optiksel bant aralığını belirlemek için uygun bir yoldur. Bu uygulamada, bant aralığı yakınında bantlar arası geçişten dolayı soğurma katsayı verisi Tauc'un kuvvet kanunu davranışına uyar ve

$$\alpha = \frac{\beta}{h\nu} (h\nu - E_g)^m \tag{3.4}$$

ile verilir (38). Burada β enerjiden bağımsız sabit, $h\nu$ foton enerjisi, E_g optiksel bant aralığı ve *m* parametresi 1/2, 2, 3/2 ve 3 değerlerini alabilir ve sırasıyla doğrudan izinli, dolaylı izinli, doğrudan yasak ve dolaylı yasak geçişlere karşılık gelir.

3.4.1. *m*'nin belirlenmesi

Denklem (3.4) ifadesi yeniden

$$\frac{d[\ln(\alpha h\nu)]}{d(h\nu)} = \frac{m}{h\nu - E_g}$$
(3.5)

şeklinde yazılabilir. *m* değerini belirlemek için, denklem (3.5)'e göre geçiş tipi bulunabilir. Şekil 3.9 (a) rubrene ince filmi için $d[\ln(\alpha h\nu)]/d(h\nu)$ 'nin $h\nu$ 'e göre değişim grafiğini göstermektedir. Şekil 3.9'ı incelediğimizde belirli enerji değerlerindeki pikler, 1.7 ile 3.5 eV arasındaki enerji bölgesinde rubrene filmin yaklaşık olarak tahmini optiksel bant aralığını (E_g) verir. Şekil 3.9(a)'daki pikler $h\nu = E_g \approx 2.2589$, 2.4601 ve 2.6155 eV enerji değerlerine sahip olduğu belirlenmiştir. *m* parametre değerini belirlemek için, E_g 'nin tahmini 3 değeri için Şekil 3.9(b)'de $\ln(\alpha h\nu)$ - $\ln(h\nu - E_g)$ eğrisi çizdirilmiştir. E_g 'nin tahmini 3 değeri için elde edilen eğrilerin eğimleri bize *m* parametresinin değerini vermektedir. Bütün E_g değerleri için eğrilerin eğimleri yaklaşık 2'ye eşit olarak bulunmuştur ve bu değer rubrene ince filmin soğurma kenarının dolaylı izinli geçişlerle oluştuğunu göstermektedir.

3.4.2. Optik bant aralığı (E_g) 'nin belirlenmesi

İnce film malzemelerin fiziksel özelliklerinin önemli bir parametresi optik bant aralığı (E_g)'dır. E_g , filmin temel soğurma sınırını vermesi yanında optik bant yapısını da yansıtır. Denklem (3.4) yardımıyla rubrene ince filmin optik bant aralığının kesin bir değerini elde etmek için, rubrene filmin oda sıcaklığında ölçülen $(\alpha h v)^{1/2}$ 'nin hv'ye karşılık eğrisi Şekil 3.10'da gösterilmektedir. Şekilden görülebileceği gibi, hesaplama sonucu rubrene filmin 2 enerji bant aralığı vardır. Düşük enerjili olan başlangıç (onset) optik bant aralığı (E_g^{opt}) diğeri ise nakil (transport) aralığı (E_g^{trans}) dır. Nakil aralığı (E_g^{trans}), en yüksek dolu moleküler yörüngeler ile en düşük boş moleküler yörüngeler arasındaki enerji farkıdır. Hesaplanan optik bant aralığı (E_g^{opt}) hesaplanan nakil aralığından (E_g^{trans}) düşüktür ve aradaki fark bağlanma enerjisi (E_B) olarak adlandırılır (40-45). Şekil 3.10'dan rubrene ince filmin E_g^{opt} , E_g^{trans} ve E_B değerleri belirlenmiş ve sırasıyla 2.31, 2.93 ve 0.62 eV olarak hesaplanmıştır. Bu değerler Tablo 3.1'de önceden literatürde yayınlanan diğer organik bileşiklerle karşılaştırmalı olarak verilmiştir (40-45).

3.4.3. Urbach enerjisi (E_U) 'nun belirlenmesi

Rubrene ince filmin optik davranışını daha fazla analiz etmek için, rubrene filmin soğurma kuyruğu ölçülen enerji aralığında araştırılmıştır. Düşük soğurma bölgesinde ($\alpha < 10^4$ cm⁻¹), soğurma katsayısı (α) foton enerjisine ($h\nu$) üstel bir bağımlılık göstermektedir. Urbach kuyruğu veya kenarı bant aralığının altında foton enerji bölgesinde soğurmaya yakın baskındır (44). Bu bölge Urbach kuyruğu olarak adlandırılır. Urbach kuyruğu filmlerin optik bant aralığında mevcut yerelleşmiş durumların genişliği (46) olup,

$$\alpha = \alpha_0 \exp\left(\frac{h\upsilon}{E_U}\right) \tag{3.6}$$

denklemiyle belirlenir (47). Burada α_0 bir sabittir. E_U bant aralığı içinde yerelleşmiş (lokalize) durumların bant kuyruğunun genişliğini ifade eden Urbach enerjisine karşılık gelir. Şekil 3.11. rubrene filmi için ln α 'nın foton enerjisine ($h\nu$) karşılık değişimini göstermektedir. Şekil 3.11'i incelediğimizde, rubrene filmin düşük soğurma bölgesinde foton enerjisine ln α 'nın bağlı eğrisi düz bir çizgi vermektedir. Bu düz eğrinin eğiminin tersinden rubrene filmin Urbach enerji (E_U) değeri ve ln α eksenini kesme noktasından da α_0 değeri hesaplanmıştır. E_U ve α_0 değerleri sırasıyla 1.169 eV ve 167.8 cm⁻¹ olarak belirlenmiştir. Ayrıca bu değerler Tablo 3.2'de önceden literatürde yayınlanan diğer organik bileşiklerle karşılaştırma olması açısından verilmiştir (44,48-50). Urbach enerji (E_U) kenar genişliği ayrıca Urbach kenar eğimi olan başka bir parametre ile ilgilidir. Bu parametre yükseklik veya diklik parametresi $\beta = kT/E_U$ olup, elektron-fonon veya eksiton-fonon etkileşmelerinden dolayı optik soğurma kenarının genişlemesini karakterize eder (51). Oda sıcaklığı T = 300 K alarak β parametresi 0.022 olarak hesaplanmış ve Tablo 3.2'de ayrıca verilmiştir.



Şekil 3.8 (a) Geçirgenliğin dalga boyuna göre birinci türevinin $(dT/d\lambda)$ ve (b) yansımanın dalga boyuna göre birinci türevinin $(dR/d\lambda)$ dalga boyu ile değişimi


Şekil 3.9 Rubrene ince filmin (a) $d[\ln(\alpha h\nu)]/d(h\nu)$ 'nin foton enerji $(h\nu)$ değişimi ve (b) $\ln(\alpha h\nu) - \ln(h\nu - E_g)$ değişimi



Şekil 3.10 Rubrene ince filmin $(\alpha h \upsilon)^{1/2}$ 'nin foton enerji $(h \upsilon)$ değişimi



Şekil 3.11 Rubrene ince filmin Urbach eğrisi

Tablo 3.1 Rubrene organik yarıiletken ince film ve karşılaştırılması açısından diğer organik bileşikler için nakil (transport) aralığı (E_g^{trans}), optik aralık (E_g^{opt}) ve bağlanma enerjisi (E_B) değerleri

Bileşik	E_g^{trans} (eV)	E_g^{opt} (eV)	E_B (eV)	Referans
Rubrene	2.93	2.31	0.62	Bizim çalışma
NiTTP	2.88	2.58	0.30	(40)
$Ca[((NO_2)^2 - 8HQ)_2]$	2.40	1.10	1.30	(41)
Alq ₃	4.14	2.82	1.32	(42)
Tin phthalocyanine (SnPc)	2.84	1.20	1.64	(43)
PTCDA	3.16	1.76	1.40	(44)
α -sexithiophene (α -6T)	3.40	3.00	0.40	(45)
Copper phthalocyanine	2.30	1.70	0.60	(45)
(CuPc)				

Tablo 3.2 Rubrene organik yarıiletken ince film ve karşılaştırma açısından diğer organik bileşikler için optik bant aralığı (E_g) , Urbach sabiti (α_0) , Urbach enerji (E_U) ve diklik parametresi (β) değerleri

Bileşik	Geçiş tipi	E_g (eV)	α_0 (cm ⁻¹)	E_U (meV)	β	Referans
Rubrene	Dolaylı izinli	2.31	167.80	1169	0.022	Bizim çalışma
PTCDA	Dolaylı izinli	1.76		650	0.025	(44)
Methyl orange	Dolaylı izinli	2.02		543		(48)
NiPc	Dolaylı izinli	1.66		93.4		(49)
NBAA	Dolaylı izinli	1.56		658		(50)

3.5. Kırılma indisi (n) optik dağılım parametreleri

Herhangi bir malzemenin kırılma indisinin (*n*) foton enerjisiyle (hv) değişiminin ne tür bir forma uyduğunu tanımlayan bağıntılara dağılım (dispersion) ifadeleri denir (1).

3.5.1. Wemple ve DiDomenico tek osilatör modeli

Dağılım işlemi optiksel aygıtların tasarımı ve optiksel haberleşmede önemli bir faktör olduğu için optiksel malzemelerin araştırılmasında önemli bir rol oynar. Tek-osilatör modeli, optik bant aralığın altındaki geçişler için dielektrik tepkiyi tanımlar ve kırılma indisinin davranışını belirlemede önemli bir rol oynar. Bu model malzemenin elektronik özellikleri ve kimyasal bağları arasındaki ilişkiden kaynaklanır (1). Tek osilatör modeli, iyonik veya kovalent malzemeler için görünür bölgede optiksel özellikleri tanımlamak için sadece uygulanmaz ayrıca bu malzemelerin bazı yapısal özelliklerini de belirlemek için uygulanır (38,43,44,52). Rubrene ince filmi için, normal dağılım bölgesinde ($\lambda >$ 390 nm), kırılma indisinin (*n*) dağılımı Wemple ve DiDomenico (53) tarafından geliştirilen tek osilatör modelini kullanarak analiz edilmiştir. Bu modelde E_d ve E_0 dağılım enerji parametreleri sunulmuştur. Foton enerjisinin (*hv*) bir fonksiyonu olarak kırılma indisi (*n*),

$$\left(n^{2}-1\right)^{-1} = \frac{E_{0}}{E_{d}} - \frac{1}{E_{0}E_{d}}\left(h\upsilon\right)^{2}$$
(3.7)

şeklinde ifade edilebilir (35,40-45,53). Burada E_0 tek osilatör enerjisi, E_d dağılım enerjisi olup osilatör kuvvetin veya bantlar arası optik geçişin ortalama gücün ölçümüdür. Başka bir deyişle, bantlar arası optik geçişin şiddetini ölçen E_d parametresi bant aralığına önemli ölçüde bağlı değildir. E_0 ve E_d parametrelerinin iyonik veya kovalent malzemelerin iyonikliği ve kristal yapısı ile önemli bir ilişkisi vardır (38,43,44,52). E_d parametresinin kimyasal bağlarla yakından ilişkili olduğu bulunmuştur (38,43,52). Şekil 3.12 Rubrene ince film için $(n^2 - 1)^{-1}$,nin $(h\nu)^2$ ile değişimini gösterir. Şekil 3.12'deki grafiğin 5 ile 8 (eV)² enerji aralığında doğrusal olduğu gözlenmiştir. E_d ve E_0 değerleri bu doğrunun eğiminden ve kesme noktasından belirlenmiştir. Bu doğrunun uzun dalga boylarına uzatılıp $(h\nu)^2 = 0$ ' da y-ekseniyle kesişme noktası yüksek frekans optiksel dielektrik sabitinin ($\varepsilon_{\infty} = n_o^2$) değerine karşılık gelir. Sıfır foton enerjisindeki kırılma indisi (n_0), $n_0^2 = 1 + E_d / E_0$ dağılım ilişkisinden belirlendikten sonra yüksek frekans optiksel dielektrik sabiti (ε_{∞}) kolayca hesaplanabilir. Rubrene ince filmin E_0 , E_d ve ε_{∞} değerleri sırasıyla 5.47 eV, 15.16 eV ve 3.77 olarak elde edilmiş ve Tablo 3.3'de önceden literatürde yayınlanan diğer organik bileşiklerle karşılaştırmalı olarak verilmiştir (33,40,42-44,54-56). Tanaka dağılım ilişkisine (34) göre tek osilatör enerjisi (E_0), optik bant aralığının (E_g^{opt}) iki katı değere sahiptir. Rubrene ince film için E_0 / E_g^{opt} oranı 2.36 olarak hesaplanmıştır. Ayrıca, tek osilatör modelin E_0 ve E_d parametreleri kompleks dielektrik sabitinin sanal bileşeni (ε'')'nin M_{-1} ve M_{-3} momentlerine

$$E_0^2 = \frac{M_{-1}}{M_{-3}} \tag{3.8}$$

ve

$$E_d^2 = \frac{M_{-1}^3}{M_{-3}} \tag{3.9}$$

denklemleri ile bağlantılıdır. M_{-1} ve M_{-3} momentlerin değerleri denklem (3.8) ve (3.9) kullanarak sırasıyla 2.77 ve 0.092 eV² olarak hesaplanmıştır. Ayrıca, Wemple ve DiDomenico (57) tarafından önemli bir parametre olan osilatör kuvveti (*f*)

$$f = E_0 E_d \tag{3.10}$$

şeklinde ifade edilmiştir. Rubrene ince filmin osilatör kuvveti (*f*) 82.97 eV² olarak belirlenmiştir. Düşük enerjilerde kırılma indisinin (*n*) davranışı, tek osilatör modelinde serbest taşıyıcı katkısı açısından analiz edilebilir. Kırılma indisi (*n*) ,dalga boyunun (λ) fonksiyonu olarak

$$n^{2} = \varepsilon' = \varepsilon_{L} - \left(\frac{e^{2}}{4\pi^{2}c^{2}\varepsilon_{0}}\right) \left(\frac{N}{m^{*}}\right) \lambda^{2}$$
(3.11)

şeklinde ifade edilir (40,43,54). Burada ε' dielektrik sabitin gerçek kısmı, ε_L örgü dielektrik sabiti (veya yüksek frekans dielektrik sabiti), *e* temel yük, *c* ışık hızı, ε_0 boşluğun dielektrik sabiti ve N/m^* serbest taşıyıcı yoğunluğunun etkin kütleye oranıdır. Şekil 3.13 rubrene ince filmin n^2 'nin λ^2 'ye göre değişimini gösterir. n^2 'nin λ^2 'ye göre değişimi, yüksek dalga boylarında denklem (3.11)'i doğrulayan düz bir çizgi gösterir. n^2 'nin λ^2 'ye göre değişiminin doğrusal kısmını sıfır dalga boyuna doğru uzatırsak n^2 eksenini kesme noktası ε_L 'nin değerini ve doğrusal kısmın eğiminden denklem (3.11)'e göre N/m^* 'nin değeri elde edilmiştir. ε_L ve N/m^* değerleri sırasıyla 5.32 ve 4.04 x 10^{57} kg⁻¹ m⁻³ olarak hesaplanmış ve Tablo 3.3'de önceden literatürde yayınlanan diğer organik bileşiklerle karşılaştırmalı olarak verilmiştir (32,34-36,46-48). Yüksek frekans dielektrik sabiti, $\varepsilon_{\infty} = n_{\infty}^2$, 3.77 değerine eşittir. ε_L değeri $\varepsilon_{\infty} = n_{\infty}^2$ değerinden 1.55 defa büyük olduğu bulunmuştur ve bu sonuç kutuplanma için serbest taşıyıcıların küçük konsantrasyon katkısına atfedilmiştir (42-44,54-56).

3.5.2. Tek terimli Sellmeier dağılım ilişkisi

Sellmeier denklemi, 1871 yılında Wilhelm Sellmeier tarafından ilk kez düşünülmüş olup, belirli bir saydam ortam için kırılma indisi (*n*) ile dalga boyu (λ) arasındaki deneysel bir ilişkidir. Bu denklem ortamdaki ışığın dağılımını belirlemek için kullanılır (58).

Kırılma indisi (n), ortalama bantlar arası osilatör dalga boyunu (λ_0) belirlemek için,

$$\frac{n_{\infty}^2 - 1}{n^2 - 1} = 1 - \left(\frac{\lambda_0}{\lambda}\right)^2 \tag{3.12}$$

ifadesindeki tek terim Sellmeier denklemi yardımıyla ayrıca incelenmiştir. Burada n_{∞} uzun veya sonsuz dalga boyunda kırılma indisidir. Şekil 3.14 Rubrene ince filmin $n^2 - 1$ 'nin λ^{-2} 'ye göre değişimini gösterir. $n^2 - 1$ 'nin λ^{-2} 'ye göre değişiminin

doğrusal kısmını $\lambda^{-2} = 0$ 'a doğru uzatırsak $n^2 - 1$ eksenini kesme noktası $\varepsilon_{\infty} = n_{\infty}^2$ 'nin değerini ve doğrusal kısmın eğiminden denklem (3.12)'e göre λ_0 'ın değeri elde edilmiştir. $\varepsilon_{\infty} = n_{\infty}^2$ ve λ_0 değerleri sırasıyla 3.77 ve 226.54 nm olarak hesaplanmış ve Tablo 3.3'de önceden literatürde yayınlanan diğer organik bileşiklerle karşılaştırmalı olarak verilmiştir (40,42-44,52-56). Şekil 3.13 ve Şekil 3.14'den elde edilen yüksek frekans dielektrik sabiti $\varepsilon_{\infty} = n_{\infty}^2$ 'nin değeri birbirine eşit olup 3.77 olan değeri Tablo 3.3'de sadece bir defa verilmiştir. Bu sonuç boş bir örgü içinde sınırlanmış taşıyıcıların ve örgü titreşimlerinin saydam bölge içinde olduğuna atfedilmiştir (57,59). Denklem (3.12) yeniden düzenlenirse (57,59):

$$n^{2} - 1 = \frac{S_{0}\lambda_{0}^{2}}{1 - (\lambda_{0}/\lambda)^{2}}$$
(3.13)

ifadesi elde edilir. Burada S_0 , $S_0 = (n_{\infty}^2 - 1)/\lambda_0^2 = E_d / E_0 \lambda_0^2$ eşit olup ortalama osilatör kuvvetidir. Rubrene ince filmin S_0 ve E_0 / S_0 (kırılma indisi dağılım parametresi)'ın değerleri sırasıyla 5.40 x 10^{13} m⁻² ve 10.13 x 10^{-14} (eV m²) olarak hesaplanmış ve Tablo 3.3'de ayrıca verilmiştir.

3.5.3. Rubrene filminin üçüncü mertebeden doğrusal olmayan kutuplanma parametresi ($\chi^{(3)}$)

Doğrusal olmayan optik alınganlık olarak adlandırılan üçüncü mertebeden doğrusal olmayan kutuplanma parametresi ($\chi^{(3)}$), optik anahtarlamada ince filmlerin kullanılması olasılığını göstermek için önemli bir parametredir. Buna ek olarak, organik hazırlanan ince filmin moleküller arasındaki kimyasal bağların gücü hakkında bir gösterge sağlar (60-63). Lineer optik alınganlığa ($\chi^{(1)}$) göre rubrene filmin üçüncü mertebeden doğrusal olmayan alınganlığı ($\chi^{(3)}$)

$$\chi^{(3)} = A(\chi^{(1)})^4 = \frac{A}{(4\pi)^4} (n^2 - 1)^4 = A\left(\frac{E_0 E_d}{4\pi (E_0^2 - (h\nu)^2)}\right)^4$$
(3.14)

denklemi ile hesaplanmaktadır (60-63). Burada *A* bir sabit olup yaklaşık değeri $A=1.7\times10^{-10}$ esu (54,55) dur, *n* kırılma indisi, E_0 tek osilatör enerjisi ve E_d dağılım enerjisidir. Şekil 3.15 Rubrene ince filmin foton enerjisinin (hv) fonksiyonu olarak üçüncü mertebeden doğrusal olmayan kutuplanma parametresinin ($\chi^{(3)}$) değişimini göstermektedir. Şekilden görülebildiği gibi, $\chi^{(3)}$ 'ün değeri 1.77 eV da 0.45 x 10⁻¹² esu'dan başlar ve foton enerjisi 3.15 eV oluncaya kadar artar ve değeri 1.59 x 10⁻¹² esu'ya ulaşır. Daha sonra $\chi^{(3)}$, 4.43 eV'a kadar azalır ve bu enerjide değeri 0.15 x10⁻¹² esu'ya sahip olur. Son olarak $\chi^{(3)}$ 'ün değeri tekrar foton enerjisi 6.2 eV'a ulaşıncaya kadar artar ve bu enerjide değeri 2.09 x10⁻¹² esu'ya sahip olur.



Şekil 3.12 Rubrene ince filmin $(n^2 - 1)^{-1} - (h\upsilon)^2$ grafiği



Şekil 3.13 Rubrene ince filmin $n^2 - \lambda^2$ değişimi



Şekil 3.14 Rubrene ince filmin $(n^2 - 1)^{-1} - \lambda^{-2}$ değişimi



Şekil 3.15 Rubrene ince filmin $\chi^{(3)}$ - foton enerji (hv) değişimi

Tablo 3.3 Rubrene organik yarıiletken ince film ve karşılaştırma açısından diğerorganik bileşikler için dağılım parametreleri

Bileşik	E_d (eV)	E_0 (eV)	λ_0 (nm)	S_0 (10 ¹³ m ⁻²)	E_0 / S_0 x10 ⁻¹⁴ (eV m ²)	\mathcal{E}_{∞}	\mathcal{E}_L	N/m^* (kg ⁻¹ m ⁻³)	Referans
Rubrene	15.16	5.47	226.54	5.40	10.13	3.77	5.32	4.04×10^{57}	Bizim çalışma
NiTTP	10.0	1.80	-	-	-	6.40	8.50	5.30x10 ⁵⁶	(40)
Alq3	8.25	3.69	-	-	-	3.23	3.46	6.01×10^{55}	(42)
SnPc	4.09	1.28	-	-	-	4.20	5.75	4.24×10^{56}	(43)
PTCDA	9.48	5.42	228.78	3.34	1.62	2.74	4.42	5.48x10 ⁵⁸	(44)
Rhodamine B	8.40	3.05	-	-	-	3.39	2.98	2.52×10^{46}	(54)
CoPc	16.25	6.36	-	-	-	3.56	3.60	6.16x10 ⁵⁵	(55)
MgPc	8.48	3.59	-	-	-	3.36	3.58	2.50×10^{45}	(33)
PTCDI	6.59	2.41	-	-	-	2.73	4.22	8.61x10 ⁴⁵	(56)

3.6. Dielektrik karakteristikler

Kompleks kırılma indisi, $n^* = n(\lambda) + ik(\lambda)$ ve kompleks dielektrik fonksiyonu $\varepsilon^* = \varepsilon'(\lambda) + i\varepsilon''(\lambda)$ herhangi bir katı malzemenin optiksel özelliklerini tanımlamak için genellikle kullanılır. Kompleks dielektrik fonksiyonu (ε^*), madde ile elektromanyetik dalgaların etkileşimini açıklar. Bu fonksiyon moleküler mekanizma altında yatan etkileşmeyi yansıtmaktadır (64).

3.6.1. Dielektrik fonksiyonun gerçek (ε') ve sanal (ε'') kısımları

Dielekrik fonksiyonun gerçek (ε') ve sanal (ε'') kısımları, kırılma indisi (*n*) ve sönüm katsayısı (*k*) değerleri ile yakından ilişkilidir. Rubrene ince film için ε' ve ε'' değerleri (41,65),

$$\varepsilon' = n^2 - k^2 \tag{3.15}$$

ve

$$\varepsilon'' = 2nk \tag{3.16}$$

ifadelerinden elde edilmektedir. Şekil 3.16'da foton enerjisinin fonksiyonu olarak dielektrik sabitinin gerçek (ε') kısmının değişimi gösterilmektedir. Şekilden dielektrik sabitinin gerçek bileşen değerleri düşük enerji görülebildiği gibi, değerlerinden itibaren 3.1 eV'a kadar hızlı artmakta ve bu enerji değerinden itibaren 4.35 eV'e kadar azalmakta ve tekrar foton enerjisi artışıyla 6.2 eV'a kadar artmaktadır. ε' 'nün en düşük değeri 4.43 eV (280 nm)'de 3.18 olarak hesaplanmıştır. Ayrıca, ε' 'nün değerleri örneğin 3.1 eV (400 nm) ve 1.77 eV (700 nm) için sırasıvla 4.91 ve 3.86 olarak belirlenmiştir. Şekil 3.17'de foton enerjisinin fonksiyonu olarak dielektrik sabitinin sanal (ε'') kısmının değişimi gösterilmektedir. Sekil incelendiginde, ε'' 'nün spektrumunda morötesi (ultraviolet) bölgede 2 tane pikin varlığı görülmektedir. Rubrene filmi için ε'' 'nün 4.07 eV (305 nm) ve 4.87 eV (255 nm)'de değerleri sırasıyla 0.13 ve 0.21 olarak belirlenmiştir. Ayrıca, ε'' 'nün görünür (visible) bölgedeki değerleri örneğin 3.1 eV (400 nm) ve 1.77 eV (700 nm) için sırasıyla 0.032 ve 0.017 olarak belirlenmiştir.



Şekil 3.16 Rubrene ince filmin ε' - $h\upsilon$ değişimi



Şekil 3.17 Rubrene ince filmin $\varepsilon'' - h\upsilon$ değişimi

3.6.2. Kayıp tanjant (tan δ)

Kayıp tanjant (tan δ), ince bir filmde kayıp gücün film kusurları ve film boyunca iletilen toplam güce oranı olarak belirtilir. Kayıp tanjant [66]:

$$\tan \delta = \frac{\varepsilon''}{\varepsilon'} \tag{3.17}$$

olarak ifade edilir. Şekil 3.18'de rubrene ince film için foton enerjisinin fonksiyonu olarak kayıp tanjant $(\tan \delta)$ 'ın değişimi verilmektedir. Şekil incelendiğinde, $\tan \delta$ 'nın foton enerjisi ile değişimi ε'' 'nün eğilimiyle aynıdır ve $\tan \delta$ 'nın spektrumu da 255 ve 305 nm'de 2 pikin varlığı ile karakterize edilmiştir.



Şekil 3.18 Rubrene ince filmin tan δ - hv değişimi

3.6.3. Elektrik modülünün gerçek (*M*′) ve sanal (*M*″) kısımları

Elektrik modülü (M^*), durulma (gevşeme) mekanizması hakkında bilgi elde etmek için güçlü bir parametre olduğu kanıtlanmıştır (66,67). ε' ve ε'' değerlerinden, Maceode ve arkadaşları (67) tarafından tanımlandığı gibi kompleks elektrik modülü (M^*)

$$M^* = \frac{1}{\varepsilon^*} = M' + jM''$$

$$= \frac{\varepsilon'}{(\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2)} + j\frac{\varepsilon''}{(\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2)}$$
(3.18)

şeklinde ifade edilir. Burada M' ve M'' sırasıyla elektrik modülünün gerçek ve sanal bileşenleridir. Foton enerjisinin fonksiyonu olarak M' ve M'' değişimi Şekil 3.19'da verilmiştir. Şekilden M' için geniş bir pik ve M'' için de 2 ayrı pik görülmektedir.



Şekil 3.19 Rubrene ince filmin M' ve M'' - hv değişimi

3.6.4. Hacim enerji (V_{EL}) ve yüzey enerji (S_{EL}) kayıpları

Elastik olmayan elektron saçılma deneyinde katının spektral cevabı, enerji kayıp fonksiyon adlı dielektrik teorinin kapsamında ele alınabilir (68,69). Enerji kayıp fonksiyonları, hacim enerji kayıp (V_{EL}) fonksiyonu ve yüzey enerji kayıp (S_{EL}) fonksiyonu olarak bilinmektedir. Hacim ve yüzey enerji kayıp fonksiyonları sırasıyla malzemenin gövdesine ve yüzeyine hareket eden hızlı elektronların karakteristik enerji kaybı ile orantılıdır (68,69). Hacim enerji (V_{EL}) ve yüzey enerji (S_{EL}) kayıpları, sırasıyla dielektrik sabitinin gerçek ve sanal kısımlarıyla ilişkilidir (70,71):

$$V_{EL} = -\operatorname{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon^*}\right) = \frac{\varepsilon''}{\varepsilon'^2 + \varepsilon''^2}$$
(3.19)

ve

$$S_{EL} = -\operatorname{Im}\left(\frac{1}{\varepsilon^* + 1}\right) = \frac{\varepsilon''}{(\varepsilon' + 1)^2 + {\varepsilon''}^2}$$
(3.20)

 V_{EL} ve S_{EL} değerleri denklem (3.19) ve (3.20)'den görülebildiği gibi dielektrik sabitinin gerçek ve sanal kısımları kullanılarak hesaplanmaktadır. Foton enerjisinin fonksiyonu olarak Rubrene ince filmin hesaplanan hacim ve yüzey enerji kayıp dağılımları Şekil 3.20'de verilmiştir. Şekilden görülebildiği gibi Rubrene'nin V_{EL} değerleri S_{EL} değerlerinden bütün enerji değerlerinde daha büyüktür. Rubrene filmi için V_{EL} 'in 4.07 eV (295 nm) ve 4.87 eV (255 nm)'de değerleri sırasıyla 0.011 ve 0.016 olarak belirlenmiştir. Ayrıca, S_{EL} 'in 4.07 eV ve 4.87 eV'deki pik değerleri sırasıyla 6.84 x 10⁻³ ve 9.94 x 10⁻³ olarak belirlenmiştir.



Şekil 3.20 Rubrene ince filmin hacim enerjisi (V_{EL}) ve yüzey enerji (S_{EL}) kayıplarının foton enerjisi ile değişimi

3.6.5. Optik iletkenliğin gerçek (σ') ve sanal (σ'') kısımları

Kompleks optik iletkenlik $(\sigma^* = \sigma' + i\sigma'')$, kompleks dielektrik sabiti $(\varepsilon^* = \varepsilon' + i\varepsilon'')$ ile aşağıdaki bağıntılarla ilişkilidir (72):

$$\sigma' = \omega \varepsilon'' \varepsilon_0 \tag{3.21}$$

ve

$$\sigma'' = \omega \varepsilon' \varepsilon_0 \tag{3.22}$$

Şekil 3.21 foton enerjisinin (hv) fonksiyonu olarak optik iletkenliğin hesaplanan gerçek (σ') ve sanal (σ'') kısımlarını göstermektedir. Şekilden açıkca görüldüğü gibi, foton enerjisi artışı ile optik iletkenliğin gerçek kısmı (σ') 2 ayrık pike sahipken, optik iletkenliğin sanal kısmı foton enerjisi ile artar. σ' 'nün foton enerjisi ile değişimi ε'' 'nün eğilimiyle aynıdır ve σ' 'nün spektrumu da 4.07eV ve 4.96eV'da 2 pikin varlığı ile karakterize edilmiştir. Rubrene filmi için σ' 'nün 4.07 eV (205 nm) ve 4.96 eV (250 nm)'de değerleri sırasıyla 70.09 ve 143 olarak belirlenmiştir. Ayrıca, σ'' 'nün 4.07 eV ve 4.96 eV'deki pik değerleri sırasıyla 1.85 × 10³ ve 2.43× 10³ olarak belirlenmiştir.



Şekil 3.21 Rubrene ince filmin σ' ve σ'' optik iletkenliklerin foton enerjisi ile değişimi

3.6.6. Dielektrik durulma zamanı (τ)

Dielektrik durulma zamanı (τ),

$$\tau = \left| \frac{\varepsilon_{\infty} - \varepsilon'}{\omega \varepsilon''} \right| \tag{3.23}$$

denklemiyle ifade edilir. Burada ε_{∞} yüksek frekans dielektrik sabiti, ε' ve ε'' ise sırasıyla dielektrik sabitinin gerçek ve sanal kısımlarıdır. Şekil 3.22 foton enerjisinin ($h\upsilon$) fonksiyonu olarak hesaplanan dielektrik durulma zamanı (τ) kısımlarını göstermektedir. Şekilden açıkca görüldüğü gibi, τ 'nun değeri 1.77 eV da 1.1 x 10⁻¹⁴ s'den başlar ve foton enerjisi 2.19 eV oluncaya kadar artar ve değeri 1.32 x 10⁻¹⁴ s'ye ulaşır. Daha sonra τ , 2.82 eV'a kadar hemen hemen sabit olup ve bu enerji aralığında (2.19-2.82 eV) ortalama değeri 1.27 x10⁻¹⁴ esu'ya sahip olur. Son olarak τ 'nun değeri tekrar foton enerjisi 4.0 eV'a ulaşıncaya kadar hızlıca azalır ve bu enerji değerinden 5.0 eV'a kadar hemen hemen sabit değere sahip olur.



Şekil 3.22 Rubrene ince filmin durulma zamanı (τ)'nun foton enerjisi ile değişimi

4. TARTIŞMA VE SONUÇLAR

Bu çalışmada döndürme ile kaplama (spin coating) yöntemiyle cam alttabaka üzerinde hazırlanan rubrene organik yarıiletken ince filmlerin optik parametreleri, dağılım parametreleri ve dielektrik özellikleri incelenmiştir. Bu amaçla, rubrene tozu toluene içinde çözdürüldü ve oluşturulan çözelti kullanılarak, döndürme ile kaplama cihazıyla oda sıcaklığında ince film elde edilmiştir. Filmin elde edilmesi için yapılan işlemler 5 kez yinelenmiştir. Hazırlanan filmin yüzeysel özellikleri taramalı elektron mikroskobu (SEM), optiksel ve dielektriksel özellikleri de UV-VIS Spektrofotometre ile geçirgenlik, soğurma ve yansıma spektrumları alınarak incelenmiştir.

Rubrene ince filmin yüzey özelliklerini incelemek ve yüzey pürüzlülükleri hakkında bilgi edinebilmek için SEM ile yüzey görüntüleri alınmıştır. Filmin kalınlığı SEM analizinden yaklaşık 19 nm olarak bulunmuştur. SEM görüntülerinden filmin tüm yüzeyi tam olarak homojen bir dağılıma sahiptir ve 50-100 nm aralığında tane büyüklüğünde yapıların oluştuğu görülmüştür.

Rubrene ince film için 200-700 nm (UV-VIS bölge) dalga boyu aralığında optik geçirgenlik, soğurma ve yansıma spektrumları alınmıştır. 700 nm den sonraki bölgede (IR bölge) değişim benzer olduğu için verilmemiştir. Rubrene ince filmin görünür bölgede (400-700 nm) %90 ile %96 arasında bir geçirgenliğe ve %14 ile %10 arasında bir yansımaya sahip olduğu belirlenmiştir. Filmin kırılma indisi ve sönüm indisi gibi optik sabitleri dalga boyuna bağlı olarak belirlenmiş ve kırılma indisinin bazı dağılım parametreleri de hesaplanmıştır.

Fotovoltaik uygulamalar için önemli bir optik parametre de yarıiletkenlerin yasak enerji aralıklarıdır. Rubrene yarıiletken filmin yasak enerji aralığı soğurma spektrumu analizlerinden oda sıcaklığında incelenmiştir. Döndürme ile kaplama yöntemiyle hazırlanan rubrene ince filmin 2 enerji bant aralığı olduğu ve dolaylı izinli bant geçişli yapı gösterdiği saptanmıştır. Düşük enerjili olan başlangıç (onset) optik bant aralığı (E_g^{opt}) diğeri ise nakil (transport) aralığı (E_g^{trans}) olup değerleri sırasıyla 2.31 ve 2.93 eV olarak hesaplanmıştır.

Bundan başka, Rubrene filmin optik dielektriksel özellikleri incelenmiştir. Dielektrik sabiti, iletkenlik, kayıp tanjant, elektrik modülü, hacim ve yüzey enerji kayıpları, dielektrik durulma zamanı gibi Rubrene ince filmin dielektriksel özelliklerde belirlenmiştir. Bir örnek vermek gerekirse, dielektrik sabitinin gerçek kısmı ε' 'nün değerleri örneğin 3.1 eV (400 nm) ve 1.77 eV (700 nm) için sırasıyla 4.91 ve 3.86 olarak hesaplanmıştır.

Bu projeden elde edilen sonuçlara göre Rubrene organik yarıiletken ince filmler optoelektronik ve güneş pili cihaz uygulamalarında kullanım için en iyi adaylardan biridir.

KAYNAKLAR

 Nalçacıgil, Z. 2011. Perylene Türevi Organik Yarıiletken İnce Filmlerin Optik Özelliklerinin İncelenmesi, Selçuk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, pp.1-39,Konya.

(2) Park, B. 2008. Electronic and structural properties of pentacene at organic/inorganic interfaces, Doctor of Philosophy (Materials Science) at the University of Wisconsin-Madison.

(3) Brütting, W. 2005. Physics of organic semiconductors, *Wiley-Vch-Verlag*, Weinheim, pp.1-12.

(4) Akın, M. E. 2008. N-Tipi Yarı İletken Malzemelere Dayalı Organik Alan Etkili Transistörlerin Üretimleri, Performans Ve Karakterlerinin İncelenmesi, Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, pp.1, İzmir.

(5) Bernanose, A., Comte, M., Vouaux, P. 1953. J. Chim. Phys. 50, 64. and Bernanose, A., Vouaux, P. 1953. J. Chim. Phys. 50, 261.

(6) Kallmann, H., Pope, M. 1960. Positive Hole Injection into Organic Crystals. The Journal of Chemical Physics 32, 300.

(7) Kallmann, H. , Pope, M. 1960. Bulk Conductivity in Organic Crystals. Nature 186, 4718: 31.

(8) Pope, M., Kallmann, H.P., Magnante, P. 1963. Electroluminescence in Organic Crystals. The Journal of Chemical Physics 38, 2042.

(9) Heeger, A, MacDiarmid, A.G., Shirakawa, H. 2000. The Nobel Prize in Chemistry 2000 <u>http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2000/</u> web adresinden 01 Mart 2013 tarihinde edinilmiştir.

75

(10) Harima, Y., Yamashita, K., and Suzuki, H. 1984. Spectral sensitization in an organic p-n junction photovoltaic cell, Applied Physics Letters, 45 (10), 1144-1145.

(10) Tsumura, A., Koezuka, H., Ando, T. 1988. <u>Polythiophene field-effect</u> <u>transistor: Its characteristics and operation mechanism</u>. Synthetic Metals, 25, 11-23.

(11) Singh, B.Th., Erten, S., Günes, S., Zafer, C., Türkmen, G., Kuban B., Teoman, Y., Sariciftci, N.S., and İçli, S. 2006. Soluble derivatives of perylene and naphthalene dimide for n-channel organic field-effect transistors. Organic Electronics, 7, 480-489.

(12) Rockett, A. 2008, The materials science of semiconductors, Springer-Verlag, New York – U.S.A. pp.395.

 (13) Ultraviyole ve görünür (visible) spektrofotometre.
 <u>http://www.bayar.edu.tr/besergil/7_BOLUM_4.pdf._web</u> adresinden 1 Mart 2013 tarihinde edinilmiştir.

(14) Yarıiletkenler. <u>http://320volt.com/yari-iletkenler-ve-diyot/</u> web adresinden
1 Mart 2013 tarihinde edinilmiştir.

(15) HOMO,LUMO molekül diyagramı,

https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Molecule_HOMO LUMO_diagram.svg web adresinden 10 Ocak 2013 tarihinde edinilmiştir.

(16) Mert, O., Organik Elektronik. Boğaziçi Üniversitesi, elektrik Elektronik Müh. <u>http://www.bumems.ee.boun.edu.tr/publications/organik_elektronik.pdf</u> web adresinden 10 Ocak 2013 tarihinde edinilmiştir.

(17) How OLEDs work. <u>http://electronics.howstuffworks.com/oled1.htm</u> web adresinden 15 Nisan 2013 tarihinde edinilmiştir.

(18) <u>http://en.wikipedia.org/wiki/Reuben</u> web adresinden 01 Mart 2013 tarihinde edinilmiştir.

(19) Fumagalli, E.M. 2012. Growth and physical properties of crystalline rubrene. Università degli Studi di Milano-Bicocca, Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali. PhD thesis.

(20) Kim, J.S., Kajii, H., Ohnori Y. 2006. Characteristics of optical response in red organic light-emitting diodes using two dopant system for application to the optical link devices. Thin Solid Films 499, 343–348.

(21) Kim, K., Kim, M.K., Kang, H.S., Cho, M.Y., Joo, J., Kim, J.H., Kim, K.H., Hong, C.S., Choi, D.H. 2007. New growth method of rubrene single crystal for organic field-effect transistor. Synthetic Metals 157, 481–484.

(22) Chan, M.Y., Lai, S.L., Fung, M.K., Lee, C.S., Lee, S.T. 2007. Dopinginduced efficiency enhancement in organic photovoltaic devices. Applied Physics Letters 90, 023504–023506.

(23) Barış, B., Yüksel, Ö.F., Tuğluoğlu, N., Karadeniz, S. 2013. Double barrier heights in 5,6,11,12-tetraphenylnaphthacene (rubrene) based organic Schottky diode. Synthetic Metals 180, 38–42.

(24) Uchida, M., Adachi, C., Koyama, T., Taniguchi, Y. 1999. Charge carrier trapping effect by luminescent dopant molecules in single-layer organic light emitting diodes. Journal of Applied Physics 86, 1680-1687.

(25) Li, F., Lin, J., Feng, J., Cheng, G., Liu, H., Liu, S., Zhang, L., Zhang, X., Lee,S.T. 2003. Electrical and optical characteristics of red organic light-emitting diodes doped with two guest dyes. Synthetic Metals 139, 341-347.

(26) Li, F., Lin, J., Feng, J., Cheng, G., Liu, H., Liu, S., Zhang, L., Zhang, X., Lee,S.T. 2003. Electrical and optical characteristics of red organic light-emitting diodes doped with two guest dyes. Synthetic Metals 139, 341-347.

(27) William D. Callister, Jr. 2001. Fundamentals of Materials Science and Engineering. An Interactive, Fifth edition, John Wiley&Sons, Inc. pp. S297-S309.

(28) Ilıcan S. 2001. Spray Pyrolysıs Yöntemi ile elde edilen In Katkılı CdZnS Filmlerinin Özellikleri, Anadolu Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Doktora tezi, pp.49-53 Eskişehir.

(29) Akyaz, T.T. 2012. Bazı ince film iletken polimerlerin bant aralıkları ve yüzey iletkenliklerinin incelenmesi. Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, pp. 90, Çanakkale.

(30) SEM, Taramalı Elektron Mikroskobu.

http://www.selcukiltek.com/equipment-105-sem-taramali-elektron-mikroskobu.aspx web adresinden 15 Nisan 2013 tarihinde edinilmiştir.

(31) Polat E.G. 2009. Sol-Jel Yöntemi İle Bakır Ve Kalay Katkılı ZnO İnce Filmlerin Üretilmesi, Optik ve Mikro Yapısal Karakterizasyonu, Gebze İleri teknoloji Enstitüsü, Mühendislik Ve Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, pp.31-34, Gebze.

(32) Spin Kaplama Aşamaları,

http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/f/f3/SolGel_SpinCoating.jpg web adresinden 10 Ocak 2013 tarihinde edinilmiştir.

(33) El-Nahass, M.M., Atta, A.A., El-Sayed, H.E.A., El-Zaidia E.F.M. 2008.
Structural and optical properties of thermal evaporated magnesium phthalocyanine (MgPc) thin films. Applied Surface Science. 254, 2458-2465.

(34) Harper, C.A. 2001. Handbook of Ceramics, Glasses, and Diamonds, ISBN 0-07-026712-X, McGraw-Hill, New York.

(35) Farag, A.A.M., Ashery, A., Shenashen, M.A. 2012. Optical absorption and spectrophotometric studies on the optical constants and dielectric of poly (o-toluidine) (POT) films grown by spin coating deposition, Physica B 407, 2404–2411.

(36) El-Nahass, M.M., Farag, A.M., Abd El-Rahman, K.F., Darwish, A.A.A.2005. Dispersion studies and electronic transitions in nickel phthalocyanine thin films. Optics & Laser Technology, 37, 513–523.

(37) Ambily, S., Menon,C.S. 1999. The effect of growth parameters on the electrical, optical and structural properties of copper phthalocyanine thin films. Thin Solid Films, 347, 284–288.

(38) Farag, A.A.M., Yahia, I.S. 2010. Structural, absorption and optical dispersion characteristics of rhodamine B thin films prepared by drop casting technique. Optics Communications, 283, 4310–4317.

(39) Tauc, J. 1968. Optical properties and electronic structure of amorphous Ge and Si. Materials Research Bulletin, 3, 37–46.

(40) El-Nahass, M.M., Abd El-Khalek, H.M., Nawar, A.M. 2012. Topological, morphological and optical properties of Gamma irradiated Ni (II) tetraphenyl porphyrin thin films. Optics Communications, 285, 1872–1881.

(41) Farag, A.A.M., Haggag, S.M.S., Mahmoud, M.E. 2011 Spectral–optical– electrical thermal properties of deposited thin films of nano-sized calcium(II)- 8-hydroxy-5,7-dinitroquinolate complex. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 82, 467-474. (42) El-Nahass, M.M., Farid, A.M., Atta, A. 2010. Structural and optical properties of Tris(8-hydroxyquinoline) aluminum (III) (Alq3) thermal evaporated thin films," Journal of Alloys and Compounds, 507, 112-119.

(43) El-Nahass, M.M., Atta, A.A., El-Shazly, E.A.A., Faidah, A.S., Hendi, A.A. 2009. Influence of γ -irradiation on the optical properties of nanocrystalline tin phthalocyanine thin films. Materials Chemistry and Physics, 117, 390-394.

(44) Farag, A.A.M., Fadel, M. 2013. Optical absorption and dispersion analysis of nanocrystalline perylene-3,4,9,10-tetracarboxylic-3,4,9,10-dianhydride film prepared by dip coating and its optoelectronic application," Optics & Laser Technology, 45, 356-363.

(45) Hill, I.G., Kahn, A., Soos, Z.G., Pascal, Jr.R.A. 2000. Charge-separation energy in films of π -conjugated organic molecules. Chemical Physics Letters, 327, 181-188.

(46) Gupta, R.K., Cavas, M., Yakuphanoğlu, F. 2012. Structural and optical properties of nanostructure CdZnO films," Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 95, 107–113.

(47) Urbach, F. 1953. The long-wavelength edge of photographic sensitivity and of the electronic absorption of solids. Physical Review, 92, 1324–1324.

(48) Farag, A.A.M., Mansour, A.M., Ammar, A.H., Abdel Rafea, M. 2011. Characterization of electrical and optical absorption of organic based methyl orange for photovoltaic application. Synthetic Metals, 161, 2135–2143.

(49) El-Nahass, M.M., Farag, A.M., Abd El-Rahman, K.F., Darwish, A.A.A. 2005. Dispersion studies and electronic transitions in nickel phthalocyanine thin films," Optics & Laser Technology, 37, 513–523.

(50) El-Ghamaz, N.A., El-Sonbati, A.Z., Diab, M.A., El-Bindary, A.A., Seyam,
H.A. 2013. Optical properties of thermally evaporated 4-(4-nitrobenzalideneamino) antipyrine Schiff base thin films. Solid State Sciences, 19, 19–26.

(51) Mahr, H. 1962. Ultraviolet absorption of KI diluted in KCl crystals. Physical Review, 125, 1510–1516.

(52) Yakuphanoğlu, F., Çukurovalı, A., Yılmaz, I. 2004. Single-oscillator model and determination of optical constants of some optical thin film materials. Physica B, 353, 210–216.

(53) Wemple, S.H., DiDomenico, Jr. M. 1971. Behavior of the electronic dielectric constant in covalent and ionic materials. Physical Review B, 3, 1338-1351.

(54) Zeyada, H.M., El-Nahass, M.M., Samak, S.A. 2012. Effect of γ -ray irradiation on structure formation and optical constants of thermally evaporated rhodamine B thin films. Journal of Non-Crystalline Solids, 358, 915–920.

(55) El-Nahass, M.M., El-Gohary, Z., Soliman, H.S. 2003. Structural and optical studies of thermally evaporated CoPc thin films. Optics & Laser Technology, 35, 523 – 531.

(56) El-Nahhas, M.M, Abdel-Khalek, H., Salem, E. 2012. Structural and Optical Properties of Nano crystalline 3,4,9,10-Perylene-Tetracarboxylic-Diimide Thin Film. Advances in Condensed Matter Physics, 2012, 1-7.

(57) Wemple, S.H., DiDomenico, Jr.M. 1970. Theory of the elasto-optic effect in nonmetallic crystals. Physical Review B, 1, 193-202.

(58) Sellmeier equation. <u>http://en.wikipedia.org/wiki/Sellmeier_equation</u> web adresinden 12 Şubat 2013 tarihinde edinilmiştir.

(59) Abdel-Aziz, M.M., Yahia, I.S., Wahab, L.A., Fadel, M., Afifi, M.A. 2006. Determination and analysis of dispersive optical constant of TiO2 and Ti_2O_3 thin films. Applied Surface Science, 252, 8163–8170.

(60) Wagner, T. Krbal, M., Kohoutek, T., Peina, V., Vlek, M., Vlek, M., Frumar, M. 2003. Kinetics of optically- and thermally-induced diffusion and dissolution of silver in spin coated $As_{33}S_{67}$ amorphous films; their properties and structure. Journal Non-Crystalline Solids, 326, 233-237.

(61) Tichy, L., Ticha, H., Nagels, P., Callaerts, R., Mertens, R., Vlcek, M. 1999.Optical properties of amorphous As-Se and Ge-As-Se thin films. Materials Letters, 39, 122-128.

(62) Al-Ghamdi, A.A., Mahmoud, W.E., Yaghmour, S.J., Al-Marzouki, F.M. 2009. Structure and optical properties of nanocrystalline NiO thin film synthesized by sol-gel spin-coating method," Journal of Alloys and Compounds, 486, 9-13.

(63) Abdolahzadeh Ziabari, A., Ghodsi F.E. 2011. Optoelectronic studies of sol-gel derived nanostructured CdO-ZnO composite films. Journal of Alloys and Compounds, 509, 8748-8755.

(64) Kremer, F. 2002. Dielectric spectroscopy – yesterday, today and tomorrow. J. Non-Cryst. Solids, 305, 1-9.

(65) Abdel-Aziz, M.M., El-Metwally, E.G., Fadel, M., Labib, H.H., Afifi, M.A.
2001. Optical properties of amorphous Ge-Se-Tl system films. Thin Solid Films, 386, 99–104.

(66) Karadeniz, S. 2007. ⁶⁰Co γ -ray irradiation effects on dielectric characteristics of tin oxide films of different thicknesses on n-type Si(111) substrates. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 260, 571-578.

(67) Macedo, P.B., Moynihan, C.T., Bose, R. 1972. The role of ionic diffusion in polarisation in vitreous ionic conductors. Physics and Chemistry of Glasses, 13, 171-179, 1972.

(68) Luth, H. 2001. Solid Surfaces, Interfaces and Thin Films, fourth ed. Springer, Berlin.

(69) Bagheri Khatibani, A., Rozati, S.M. 2013. Synthesis and characterization of amorphous aluminum oxide thinfilms prepared by spray pyrolysis: Effects of substrate temperature. Journal of Non-Crystalline Solids, 363, 121–133.

(70) El-Nahass, M.M., Farag, A.A.M. 2012. Structural, optical and dispersion characteristics of nanocrystalline GaN films prepared by MOVPE. Optics & Laser Technology, 44, 497–503.

(71) Ziabari A.A., Ghodsi, F.E. 2011. Optoelectronic studies of sol-gel derived nanostructured CdO–ZnO composite films. Journal of Alloys and Compounds, 509, 8748-8755.

(72) Dongol, M., El-Nahass, M.M., El-Denglawey, A., Elhady, A.F., Abuelwafa,
A.A. 2012. Optical Properties of Nano 5,10,15,20-Tetraphenyl-21H,23H- Prophyrin
Nickel (II) Thin Films. Current Applied Physics, 12, 1178-1181.

ÖZGEÇMİŞ

1989 yılında Ankara'da doğdu. İlk, Orta ve Lise öğrenimini Ankara'da tamamladı.2007 yılında girdiği Giresun Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünden Haziran 2011'de birincilikle mezun oldu. Aynı yıl girdiği Giresun Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Lisans programında eğitimine devam etmektedir.

Bilimsel Araştırma Projesi (BAP) :

1- Hatice Gürel, Behzad Barış, Birol Ertuğral, Ömer Faruk Yüksel, "Organik yarıiletken rubrene ince filmin optik özelliklerinin incelenmesi", Giresun Üniversitesi, Bilimsel Araştırma Projesi, Proje No: FEN-BAP-A-160512-26, Haziran 2013.

Uluslararası Yayınlar :

1- Nihat Tuğluoğlu, Behzad Barış, Hatice Gürel, Serdar Karadeniz, Ömer Faruk Yüksel, "Investigation of optical band gap and device parameters of rubrene thin film prepared using spin coating technique" Journal of Alloys and Compounds, Volume 582, 5 January 2014, Pages 696-702.

2- Hatice Gürel, Nihat Tuğluoğlu, Behzad Barış, Serdar Karadeniz, Ömer Faruk Yüksel, Zeynep Kişnişci "Optical dispersion and dielectric properties of rubrene film" Uluslararası bir dergiye incelemeye gönderildi.

Uluslararası Kongreler :

1- Hatice Gürel, Behzad Barış, Nihat Tuğluoğlu, Serdar Karadeniz, Ömer Faruk Yüksel, "Investigation of some optical parameters of rubrene thin film" Türk Fizik Derneği 30. Uluslararası Fizik Kongresi (TFD 30), 2-5 Eylül 2013, sayfa no:513

2- Hatice Gürel, Nihat Tuğluoğlu, Behzad Barış, Serdar Karadeniz, Ömer Faruk Yüksel, Zeynep Kişnişci, "Optical dielectric and conductivity properties of 5,611,12 Tetraphenylnaphthacene thin films" Türk Fizik Derneği 30. Uluslararası Fizik Kongresi (TFD 30), 2-5 Eylül 2013, sayfa no:514