

T.C.
GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ
MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

$A^3B^3C_2$ TABAKALI YARIİLETKEN
BİLEŞİMLERİNDE OPTİK GEÇİRGENLİK VE
SOĞRULMA ETKİLERİ

Burak GÜRKAN
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

GEBZE

2004

T.C.
GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ
MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

$A^3B^3C_2$ TABAKALI YARIİLETKEN
BİLEŞİMLERİNDE OPTİK GEÇİRGENLİK VE
SOĞRULMA ETKİLERİ

Burak GÜRKAN
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

TEZ DANIŞMANI
Doç. Dr. Faik MİKAİLOV

GEBZE
2004

ÖZET

$A^3B^3C_2^6$ formüllü, tabakalı yarıiletken $TlInS_2$, $TlGaSe_2$ ve $TlGaS_2$ kristallerinde optik soğrulma spektrumlarının ölçümü ve karakterizasyonu aracılığı ile bu kristallerin enerji bant yapısı araştırılmış ve optoelektronikte uygulanma alanları belirlenmeye çalışılmıştır.

$TlInS_2$, $TlGaSe_2$ ve $TlGaS_2$ kristallerinin yasak enerji bant aralığı 2 eV değerinden yüksek olduğundan, bu enerji değeri görülebilir bölgedeki optik ışınların foton değerlerine uygun gelmektedir. Soğrulma spektrumlarının ölçümleri bu açıdan önemlidir.

Bu çalışmada kristallerin soğrulma verileri hem üç boyutlu hem de iki boyutlu modele göre incelenmiştir. Üç boyutlu modele göre yapılan fittinglerden (veriye uydurma) kristallerin izinli mi yoksa izinsiz mi geçişe sahip olduğu tam olarak anlaşılamamaktadır. Bu yüzden iki boyutlu modelden de yararlanılmış ve geçiş türü buna göre belirlenmiştir.

Kristallerden elde ettiğimiz verileri kullanarak yaptığımız fittingler sonucunda $TlInS_2$, $TlGaSe_2$ ve $TlGaS_2$ kristallerinin dolaylı bant aralığına sahip olduğunu ve bu kristallerin en çok dolaylı izinsiz geçişler için bulduğumuz verilere göre yaptığımız fittinglere uygun olduğu bulunmuştur.

Oda sıcaklığında elde edilen verilerin değerlendirilmesi sonucu üç boyutlu modele ve iki boyutlu modele göre dolaylı yasaklı bant aralıklarının değerleri kristaller için sırasıyla şöyledir: $TlInS_2$ ($E_g^i = 2,2702\text{ eV}$, $E_g^i = 2,2836\text{ eV}$), $TlGaSe_2$ ($E_g^i = 1,8758\text{ eV}$, $E_g^i = 1,9128\text{ eV}$), $TlGaS_2$ ($E_g^i = 2,396\text{ eV}$, $E_g^i = 2,425\text{ eV}$). Bu geçişlerde yardımcı olan fononların enerjileri de $TlInS_2$ için $\hbar\omega_c = 0,023\text{ eV}$, $\hbar\omega_c = 0,02615\text{ eV}$, $TlGaSe_2$ için $\hbar\omega_c = 0,0531\text{ eV}$, $\hbar\omega_c = 0,05565\text{ eV}$, $TlGaS_2$ için $\hbar\omega_c = 0,029\text{ eV}$, $\hbar\omega_c = 0,034\text{ eV}$ olarak bulunmuştur.

SUMMARY

In this thesis, band structures of $A^3B^3C_2^6$ layered semiconductors of $TlInS_2$, $TlGaSe_2$ and $TlGaS_2$ crystals are studied by measurement and characterization of optical absorption spectrums of them.

Since these crystals have forbidden band gaps above 2 eV, these energy values correspond to photon energies of the optical rays in the visible range. For this reason, measurements of the absorption spectrums are very important.

In this study, the absorption data is investigated according to both three dimensional and two dimensional models. It is hard to say that crystals have whether allowed or forbidden transitions according to only three dimensional model. Therefore two dimensional model was also used and transition types were determined according to this model.

By the results of the fittings made by using of the data obtained from the crystals, it was found that these crystals have indirect band gap and the fittings that we made according to indirect forbidden transitions are the most likely for them.

By determination of the data obtained at room temperature, indirect forbidden band gap values according three dimensional and two dimensional are found respectively: $TlInS_2$ ($E_g^i = 2,2702\text{ eV}$, $E_g^i = 2,2836\text{ eV}$), $TlGaSe_2$ ($E_g^i = 1,8758\text{ eV}$, $E_g^i = 1,9128\text{ eV}$), $TlGaS_2$ ($E_g^i = 2,396\text{ eV}$, $E_g^i = 2,425\text{ eV}$). Energy values of the phonons that contribute to these transitions are found $\hbar\omega_c = 0,023\text{ eV}$, $\hbar\omega_c = 0,02615\text{ eV}$ for $TlInS_2$, $\hbar\omega_c = 0,0531\text{ eV}$, $\hbar\omega_c = 0,05565\text{ eV}$ for $TlGaSe_2$, $\hbar\omega_c = 0,029\text{ eV}$, $\hbar\omega_c = 0,034\text{ eV}$ for $TlGaS_2$.

TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın başarıyla sona ermesinden dolayı çok mutluyum. Bu mutluluğu yaşamamda en önemli katkısı olan, yegane varlığım, Annem Gülser ÇAKAR'a, çalışmalarımın her evresinde desteğini, bilgisini ve tecrübesini benden esirgemeyen değerli hocam sayın Doç. Dr. Faik MİKAİLOV Bey'e, çalıştığım okulda her türlü yardımı sunan Rahmetli Okul Müdürüm Mehmet ÖNOL Bey'e ve şu anki Okul Müdürüm Haldun GÜLER Bey'e, Enstitüde yaptığım çalışmalarda bana yardımcı olan değerli arkadaşlarım Araştırma Görevlileri Levent TÜMBEK ve Erkan DEMİRCİ'ye en içten teşekkürlerimi borç bilir, hayatta mutluluklar ve başarılar dilerim.

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	İV
SUMMARY	V
TEŞEKKÜR	VI
İÇİNDEKİLER DİZİNİ	VII
SİMGELER DİZİNİ	VIII
ŞEKİLLER DİZİNİ	X
TABLOLAR DİZİNİ	X
1. GİRİŞ	1
2. TEMEL BİLGİLER	2
2.1.Optik Kaynaklı Elektronik Geçişler	2
2.2.Doğrudan Optik Geçişler	6
2.3.Doğrudan Olmayan Optik Geçişler	13
2.4.Literatürdeki Deneysel Bulgular	17
2.4.1.Üç Boyutlu Model İçin Geçiş Denklemleri	18
2.4.2.İki Boyutlu Model İçin Geçiş Denklemleri	18
3. DENEY	26
3.1.İri Kristal Büyütme	26
3.1.1.Bridgman Metodu	26
3.1.2.Dikey Bridgman Metodu:	27
3.1.3.Yatay Bridgman Metodu	28
3.2.Kristal Yapı	30
3.3.Spektoradyometrik Sistemler	31
3.3.1.Spektoradyometrik Sistemin Çalışma Prensibi	32
3.3.2.Monokromatörler	33
3.3.3.Lock-in amplifier	34
4. DENEY SONUÇLARI	37
4.1.TlInS ₂ 'nin Soğrulma Ölçümleri	37
4.2.TlGaSe ₂ 'nin Soğrulma Ölçümleri	47
4.3.TlGaS ₂ 'nin Soğrulma Ölçümleri	57
4.4.Sonuç	66
KAYNAKLAR	68
ÖZGEÇMİŞ	70

SİMGELER DİZİNİ

Tl	:Talyum
In	:İndiyum
Ga	:Galyum
S	:Kükürt
Se	:Selenyum
As	:Arsenik
Ge	:Germanyum
Si	:Silisyum
α	:Soğrulma Sabiti
α_{da}	:Doğrudan, İzinli Geçiş İçin Soğrulma Sabiti
α_{df}	:Doğrudan, Yasaklı Geçiş İçin Soğrulma Sabiti
α_{ia}	:Dolaylı, İzinli Geçiş İçin Soğrulma Sabiti
α_{if}	:Dolaylı, Yasaklı Geçiş İçin Soğrulma Sabiti
C_{da}	:Doğrudan, İzinli Geçiş İçin Soğrulma Denklem Katsayısı
C_{df}	:Doğrudan, Yasaklı Geçiş İçin Soğrulma Denklem Katsayısı
C_{ia}	:Dolaylı, İzinli Geçiş İçin Soğrulma Sabiti Denklem Katsayısı
C_{if}	:Dolaylı, Yasaklı Geçiş İçin Soğrulma Sabiti Denklem Katsayısı
$\hbar$	:İndirgenmiş Planck Sabiti
ω	:Açısal Frekans
ν	:Frekans
$\hbar\omega$	:Foton Enerjisi
ϵ_g	:Yasak Enerji Bant Aralığı
ω_s	:Temel Soğrulma Sınırı
$\vec{k}$	:Elektron Dalga Vektörü
$\vec{s}$	:Foton Dalga Vektörü
λ	:Dalgaboyu
ω_k	:Dolaylı Bant Aralıklı Kristaller İçin Soğrulma Sınırı
k_c	:Fonon Dalga Vektörü
$\hbar\omega_c$	Fonon Enerjisi

$\vec{A}$	:Vektör Potansiyeli
$\vec{E}$	:Elektrik Alan
$\vec{H}$	:Manyetik Alan
$\hat{H}$	:Hamiltoniyen
$\hat{H}_0$	:Unperturbe Hamitoniyen
$\hat{H}'$	:Perturbe Hamitoniyen
m	:Kütle
$\hat{p}$	:Momentum
e	:Elementer Yük
c	:Işık Hızı
$V(\vec{r})$	:Potansiyel Enerji
N	:1cm ³ 'teki Foton Sayısı
I	:Işık Şiddeti
l_f	:Fotonun Serbest Gidiş Yolu
τ_f	Fotonun Serbest Gidiş Zamanı
W_f	:Fotonun Birim Zamanda Soğrulma Olasılığı
W_{vc}	:Birim Zamanda Birim Hacimde Valans Bandından İletkenlik Bandına Geçişlerin Sayısı
$\psi(r,t)$	:Dalga Fonksiyonu

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
2.1 (a) Doğrudan bant aralıklı bir malzemede dikey geçişler.	
(b) Dolaylı bant aralıklı bir malzemede fonon yardımcı bir geçiş.	3
2.2 Kristale gelen ışık durumunu resmeden şekil.	5
2.3 GaAs'in soğrulma kıyısı.	19
2.4 Oda sıcaklığında Germanyum için soğrulma sabiti vs. enerji grafiği.	19
2.5 Ge ve GaAs'te doğrudan ve dolaylı geçişler.	20
2.6 GaAs için α ye karşı $(\alpha\hbar\omega)^2$ grafiği.	22
2.7 a. Germanyum için α ya karşı enerji grafiği.	22
2.8 Germanyum için değişik sıcaklıklardaki soğrulma verileri.	24
2.9 Silisyum için değişik sıcaklıklarda $\alpha^{1/2}$ ye karşı enerji grafiği.	25
3.1 Dikey Bridgman Metodunda kullanılan düzenek.	28
3.2 Yatay Bridgman Metodunda kullanılan düzenek.	29
3.3 Yatay ve Dikey Bridgman Metodunda konuma bağlı sıcaklık değişimi grafikleri.	29
3.4 B ₄ X ₁₀ Polihedrali.	30
3.5 Kristal Örgü.	30
3.6 Radyansı belirten şekil.	32
3.7 Deney düzeneği.	33
3.8 Tekli grating Monokromatör.	33
3.9 Kırınım ağı.	34
3.10 Faz Duyarlı detektör devresi.	35
3.11 Sinyaller arasındaki ilişki.	36
4.1 TlInS ₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.	37
4.2 TlInS ₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği (başlangıç sıfırdan alınmış hali).	38
4.3 TlInS ₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiğinin ayrıntılı gösterimi.	39
4.4 TlInS ₂ için $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği.	40
4.5 TlInS ₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{1/2} - \hbar\omega$ grafiği.	41
4.6 TlInS ₂ için Şekil 4.6'dan elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği.	42
4.7 TlInS ₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{1/3} - \hbar\omega$ grafiği.	42
4.8 TlInS ₂ için Şekil 4.8'den elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği.	43

4.9 TlInS ₂ için $\alpha^{\frac{1}{2}} - \hbar\omega$ grafiği.	44
4.10 TlInS ₂ için Şekil 4.9'dan elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.	45
4.11 TlInS ₂ için $(\alpha\hbar\omega)^2 - \hbar\omega$ grafiği.	46
4.12 TlInS ₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{\frac{2}{3}} - \hbar\omega$ grafiği.	46
4.13 TlGaSe ₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.	47
4.14 TlGaSe ₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği (başlangıç sıfırdan alınmış hali).	48
4.15 TlGaSe ₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiğinin ayrıntılı gösterimi.	49
4.16 TlGaSe ₂ için $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği.	50
4.17 TlGaSe ₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{1/2} - \hbar\omega$ grafiği.	51
4.18 TlGaSe ₂ için Şekil4.18'den elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği	51
4.19 TlGaSe ₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{1/3} - \hbar\omega$ grafiği.	52
4.20 TlGaSe ₂ için Şekil4.20'den elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği	53
4.21 TlGaSe ₂ için $\alpha^{\frac{1}{2}} - \hbar\omega$ grafiği.	54
4.22 TlGaSe ₂ için Şekil 4.21'den elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.	55
4.23 TlGaSe ₂ için $(\alpha\hbar\omega)^2 - \hbar\omega$ grafiği.	56
4.24 TlGaSe ₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{\frac{2}{3}} - \hbar\omega$ grafiği.	56
4.25 TlGaS ₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.	57
4.26 TlGaS ₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği (başlangıç sıfırdan alınmış hali).	58
4.27 TlGaS ₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiğinin ayrıntılı gösterimi.	58
4.28 TlGaS ₂ için $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği.	59
4.29 TlGaS ₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{1/2} - \hbar\omega$ grafiği.	60
4.30 TlGaS ₂ için Şekil 4.29'dan elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği	60
4.31 TlGaS ₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{1/3} - \hbar\omega$ grafiği.	61
4.32 TlGaS ₂ için Şekil 4.31'den elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği	62
4.33 TlGaS ₂ için $\alpha^{\frac{1}{2}} - \hbar\omega$ grafiği.	63
4.34 TlGaS ₂ için Şekil 4.33'ten elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.	64
4.35 TlGaS ₂ için $\alpha^2 - \hbar\omega$ grafiği	65
4.36 TlGaS ₂ için $\alpha^{\frac{2}{3}} - \hbar\omega$ grafiği	65

TABLÖLAR DİZİNİ

Tablo

Sayfa

3.1 İki bileşik için kristalografik verilerin listesi

31

1.GİRİŞ

Çağımızda optoelektronik yükselen teknolojiler arasında en önemli yerlerden birine sahip olmaktadır. Optoelektronikğin ortaya çıkmasına ve gelişmesine neden olan temel faktör yarıiletken kristal bileşimlerinin optik özelliklerinin araştırılması olmuştur. Yarıiletken malzemelerin dış etkilere, özellikle optik ışınlarla hassas olduğu bilinmektedir. Bunun temel nedeni bir çok yarıiletken kristalin yasak enerji bant genişliğinin fotonların enerjisi civarında olmasıdır.

Tez çalışmamızın amacı da katkısız ve katkılı $A^3B^3C_2^6$ formüllü, tabakalı yarıiletken kristallerinde optik soğrulma spektrumlarının ölçüm ve karakterizasyonu aracılığı ile bu bileşimlerin enerji bant yapısını araştırmak ve bu sonuçlardan yararlanarak bu kristallerin optoelektronikte uygulanma alanlarının belirlenmesidir.

Son otuz yıl içinde selenyum ve kükürt içeren, $A^3B^3C_2^6$ formüllü, tabakalı yapıya sahip yarıiletken kalkogenid bileşimler farklı deneysel yöntemlerle yoğun olarak araştırılmaktadırlar. Yapısal (X-ray, nötronografik), elektriksel (iletkenlik, dielektrik), optik (spektroskopi, infrared, Raman) ve başka deneysel yöntemlerle yapılan araştırmalar sonucunda bu tip bileşimlerle ilgili çok sayıda ilginç özellikler bulunmuştur. Bununla birlikte pratik uygulama alanlarının belirlenmesi açısından optik özelliklerinin incelenmesi oldukça öneme sahiptir.

TlInS₂, TlGaSe₂ ve TlGaS₂ kristallerinin yasak enerji bant aralığının 2 eV değerinden yüksek olması hakkında literatürde bilgiler mevcuttur [Hanas et al, 1992]. Bu enerji değeri görülebilir bölgedeki optik ışınların foton değerlerine uygun gelmektedir. Soğrulma spektrumlarının ölçümleri bu açıdan önemlidir.

2. TEMEL BİLGİLER

2.1. Optik Kaynaklı Elektronik Geçişler

Valans bandındaki elektronların elektromanyetik dalgaya tepkisi belli bir eşik değerden yüksek frekanslarda oluşur. Gelen ışığın enerjisi yasak enerji bant aralığı ϵ_g 'den yüksek olduğunda foton soğurulur ve elektron valans bandından iletkenlik bandına geçer. Bu süreç için gerekli, uygun frekans temel soğurulma sınırı olarak adlandırılır. Yalıtkan malzemeler için $\epsilon_g \approx 10$ eV ve $\omega \approx 10^{16}$ Hz bu ultraviyole bölgeye karşılık gelirken yarıiletkenler için $\epsilon_g \approx 1-3$ eV ve $\omega_s \approx 10^{14} - 10^{15}$ Hz dir bu da optik bölgededir.

Elektronun başlangıç ve son dalga vektörleri $\vec{k}$ ve $\vec{k}'$, fotonun dalga vektörü $\vec{s}$ ise

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{s}$$

olur. Fotonun dalga vektörü: $|\vec{s}| = \frac{2\pi}{\lambda} \approx 10^5 \text{ cm}^{-1}$, elektronun dalga vektörü ise:

$$|\vec{k}| \cong \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\hbar\omega - \epsilon_g)} \approx \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mk_0T} \approx 10^7 \text{ cm}^{-1}$$

Görüldüğü gibi $|\vec{s}| \ll |\vec{k}|$ dir. Böylece $\vec{k}' \approx \vec{k}$ olur. Bunun bir anlamı da uyarılmış elektron durumunun başlangıç durumuyla aynı k-değerinde olmasıdır. Şekil 2.1 (a) bu süreci gösterir. Bu tür geçişler dikey veya doğrudan optik geçişler olarak adlandırılır. İletkenlik bandının minimumu ile valans bandının maksimumu Brillouin bölgesinde aynı noktada olan kristaller doğrudan bant aralıklı kristallerdir, bu tür kristaller için temel soğurulma sınırı:

$$\omega_k = \frac{\epsilon_g}{\hbar}$$

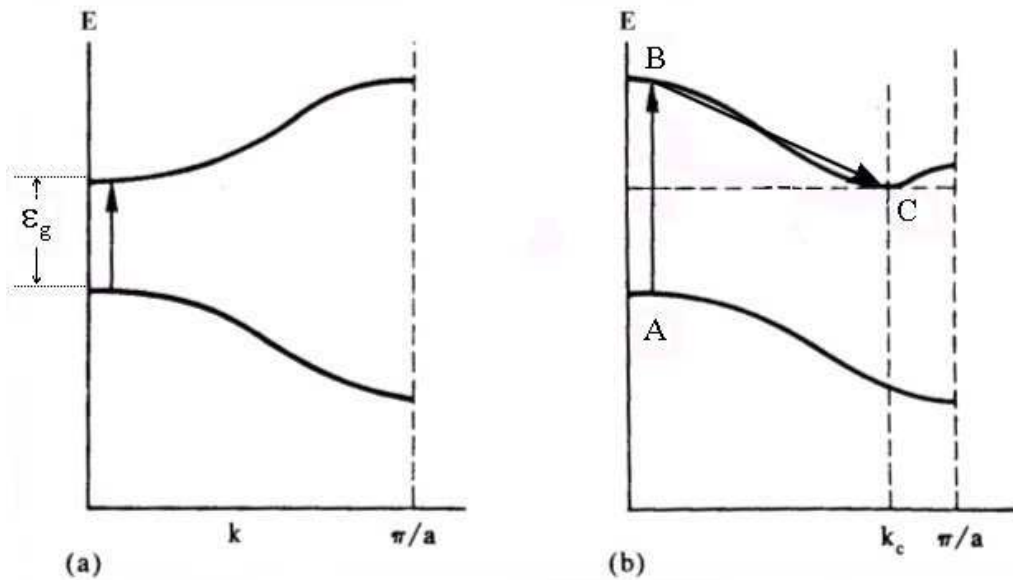
Bazı kristallerde iletkenlik bandının minimumu ile valans bandının maksimumu farklı k noktalarındadır. Bu tür kristaller ise dolaylı bant aralıklıdır. Bu durumda

$$\omega_k > \frac{\varepsilon_g}{\hbar}$$

olur. Bu tür durumlarda da enerji bant maksimum ve minimumları arasında geçişler mümkündür. Işık $\frac{\hbar\pi}{a}$ ile kıyaslandığında ihmal edilebilir bir momentuma sahip olduğundan bir başka işlem momentumu korumak için mevcut olmalıdır. Şekil 2.1 (b) fononların temel soğurulmaya nasıl yardımcı olduğunu gösteriyor. Şekilde önce foton soğurulmuş ($A \rightarrow B$) ve sonra k_c dalga vektörlü bir fonon salınmıştır ($B \rightarrow C$). Bu tür geçişlere ise dolaylı veya doğrudan olmayan optik geçişler adı verilir. Bu süreçlerde enerjinin korunumu:

$$\hbar\omega = \varepsilon_g \pm \hbar\omega_c$$

Eksi işareti fonon soğurulmasına karşılık gelir.



Şekil 2.1 (a) Doğrudan bant aralıklı bir malzemede dikey geçişler.

(b) Dolaylı bant aralıklı bir malzemede fonon yardımcı bir geçiş, k_c iletkenlik bandının minimumu için dalga vektörüdür.

Boşluktaki ışık için elektrik ve manyetik alan $\vec{A}$ vektör potansiyeli cinsinden şöyledir:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad , \quad \vec{H} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad , \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

Elektronun kristalde elektromanyetik dalga ile etkileşim Hamiltoniyeni:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2 + V(\vec{r})$$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

$$\left[\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 = \vec{p}^2 + \frac{e}{c} \vec{p} \vec{A} + \frac{e}{c} \vec{A} \vec{p} + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 = \vec{p}^2 + 2 \frac{e}{c} \vec{A} \vec{p} + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2$$

Burada $\vec{p} \vec{A} = \vec{A} \vec{p} - i\hbar \vec{\nabla} \vec{A} = \vec{A} \vec{p}$ olduğuna dikkat edin. Lineer optik özellikleri hesaplamak amacıyla 3. terim ihmal edilebilir. Böylece Hamiltoniyen:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\hat{H}_0$ unperturbe Hamiltoniyen ve $\hat{H}'$ ışık dolayısıyla perturbe Hamiltoniyen olarak belirlenmiştir.

$$\hat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}), \quad \hat{H}' = -\frac{ie\hbar}{mc} \vec{A} \vec{\nabla}$$

Düzlem monokromatik dalga için vektör potansiyel;

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = A_0 \vec{a} \exp i(\vec{s} \vec{r} - \omega t)$$

Elektrik alan;

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{i\omega}{c} \vec{A} \quad ; \quad |\vec{E}_0| = \frac{\omega}{c} |\vec{A}_0|$$

Perturbe Hamiltoniyeni yeniden yazacak olursak;

$$\hat{H}' = -\frac{ie\hbar}{mc} \vec{A} \vec{\nabla} = -\frac{ie\hbar}{mc} A_0 \exp[-i(\omega t - \vec{s} \vec{r})] \vec{a} \vec{\nabla}$$

A_0 ile fotonların enerjisi $N\hbar\omega$ arasındaki bağıntı ise şudur;

$$A(\vec{r}, t) = A_0 e^{i(\vec{s} \vec{r} - \omega t)} + A_0^* e^{-i(\vec{s} \vec{r} - \omega t)} = 2|A_0| \cos(\vec{s} \vec{r} - \omega t)$$

$$E = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t} = 2 \frac{\omega}{c} |A_0| \sin(\vec{s} \vec{r} - \omega t)$$

Burada $N \text{ cm}^{-3}$ teki foton sayısıdır. Zamana göre ortalama enerji yoğunluğu:

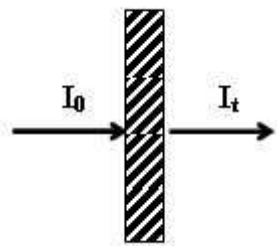
$$\frac{1}{8\pi} \left[n^2 \overline{E^2} + \overline{H^2} \right] = \frac{1}{4\pi} n^2 \overline{E^2} = \frac{1}{4\pi} n^2 \cdot 4 \cdot \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 |A_0|^2 \overline{\sin^2(\vec{s}\vec{r} - \omega t)} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 |A_0|^2 \cdot n^2 = N\hbar\omega$$

Buradan;

$$|A_0| = \frac{1}{s} \sqrt{2\pi N\hbar\omega}; s = \frac{\omega}{v}; v = \frac{c}{n}$$

bulunur.

Optik kaynaklı elektronik geçişlerde önemli olan bir parametre de α soğurulma katsayısıdır.



I_0 : Kristale gelen ışığın şiddeti

I_t : Kristalden geçen ışık şiddeti

Şekil 2.2 Kristale gelen ışık durumunu resmeden şekil.

Işık bir ortamda r_1 noktasından r_2 noktasına ilerlerken ışık şiddeti:

$$I(r_2) = I(r_1) \exp(-\alpha |r_2 - r_1|)$$

ile verilir. Bu ifadeden yararlanarak yukarıdaki şekilde kullandığımız semboller cinsinden şunu yazabiliriz:

$$I_t = I_0 \exp(-\alpha d)$$

Ayrıca soğurulma katsayısının, fotonun serbest gidiş yolunun ters değerine eşit olduğu bilindiğinden

$$\alpha = \frac{1}{l_f} = \frac{1}{v \tau_f}$$

yazılabilir, aynı zamanda:

$$\frac{1}{\tau_f} = W_f = \frac{W_{vc}}{N}$$

W_f -fotonun birim zamanda soğrulma olasılığı, W_{vc} ,birim zamanda birim hacimde valans bandından iletkenlik bandına geçişlerin sayısıdır. Böylece:

$$\alpha = \frac{W_{vc}}{N \cdot v}$$

yazılabilir. Burada W_{vc} : Valans bandından iletkenlik bandına elektron geçiş sayısıdır,Optik kaynaklı elektronik geçiş süreçlerinde esas mesele W_{vc} 'nin hesabı olacaktır.

2.2.Doğrudan Optik Geçişler

W_{vc} 'nin hesabı için birinci derece Perturbasyon Teorisini kullanacağız. Öncelikle Schrödinger denklemini ele alalım.

$$\hat{H}\psi(r,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r,t)$$

Hamiltoniyen $\hat{H}$, zamandan bağımsız unperturbe $\hat{H}_0$ ve zamana bağlı küçük bir $\hat{H}'$ perturbasyonundan oluşmaktadır:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(r,t)$$

Unperturbe kısmın bilindiğini varsayalım:

$$\hat{H}_0\phi_n(r,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_n(r,t)$$

$$\phi_n(r,t) = \phi_n(r)e^{\frac{-i\epsilon_n t}{\hbar}}$$

$$\hat{H}_0\phi_n(r,t) = \epsilon_n\phi_n(r,t)$$

Zamana bağlı perturbasyonun da şu tarzda olduğunu varsayalım:

$$\hat{H}'(r,t) = \begin{cases} \hat{H}'(r)e^{-i\omega t} + \hat{H}^{*+}(r)e^{+i\omega t} & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

Zamana bağlı Schrödinger denklemine $\psi(r,t)$ çözümünü bulmak için dalga fonksiyonunu unperturbe çözümlerin terimleriyle yazalım:

$$\psi(r, t) = \sum_n a_n(t) \phi_n(r) e^{-\frac{i\varepsilon_n t}{\hbar}}$$

$|a_n(t)|^2$ t anında n durumunda elektronun bulunma olasılığını verir. ψ için bulduğumuz açılımı Schrödinger denklemine eklersek şunu elde ederiz:

$$\sum_n \frac{da_n(t)}{dt} \phi_n(r) e^{-\frac{i\varepsilon_n t}{\hbar}} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n \hat{H}'(r, t) a_n(t) \phi_n(r) e^{-\frac{i\varepsilon_n t}{\hbar}}$$

$\phi_m^*(r)$ dalga fonksiyonu ile iç çarpımını alır ve $\int d^3 \phi_m^*(r) \phi_n(r) = \delta_{mn}$ diklik bağıntısını kullanarak şunu buluruz:

$$\frac{da_m(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n(t) H'_{mn}(t) \phi_n(r) e^{i\omega_{mn}t}$$

Burada;

$$\begin{aligned} H'_{mn}(t) &= \langle m | H'(r, t) | n \rangle \\ &= \int \phi_m^*(r) H'(r, t) \phi_n(r) d^3r \\ &= H'_{mn} e^{-i\omega t} + H'^+_{mn} e^{+i\omega t} \\ \omega_{mn} &= \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_n}{\hbar} \end{aligned}$$

ve matris elemanları da şöyle tanımlanmıştır:

$$H'_{mn} = \int \phi_m^*(r) H'(r) \phi_n(r) d^3r$$

Bir λ perturbasyon parametresi geliştirelim (ileride $\lambda = 1$ alacağız)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'(r, t)$$

ve,

$$a_n(t) = a_n^{(0)}(t) + \lambda a_n^{(1)}(t) + \lambda^2 a_n^{(2)}(t) + \dots$$

alırsak şunu elde ederiz:

$$\frac{da_m^{(0)}}{dt} = 0$$

$$\frac{da_m^{(1)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n^{(0)}(t) H'_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t}$$

$$\frac{da_m^{(2)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n^{(1)}(t) H'_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t}$$

Böylece sıfırıncı derece çözümler sabit olacaktır. Şimdi elektron i durumunda olsun, başlangıçta:

$$a_i^{(0)}(t=0)=1$$

$$a_m^{(0)}=0 \quad m \neq i$$

Böylece sıfırıncı derece çözümleri elde ederiz:

$$a_i^{(0)}(t)=1$$

$$a_m^{(0)}(t)=0 \quad m \neq i$$

Bu yüzden, hiç perturbasyon bulunmadığında elektron i durumunda kalır. Birinci derece çözüm ise şuradan elde edilir:

$$\begin{aligned} \frac{da_m^{(1)}(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} H'_{mi}(t) e^{i\omega_{mi}t} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(H'_{mi} e^{i(\omega_{mi}-\omega)t} + H'^{+}_{mi} e^{i(\omega_{mi}+\omega)t} \right) \end{aligned}$$

$m = f$ gibi bir son durumla ilgilendiğimizi varsayalım; o halde yukarıdaki denklem doğrudan entegrasyonla çözülebilir:

$$a_f^{(1)}(t) = -\frac{1}{\hbar} \left(H'_{fi} \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{(\omega_{fi}-\omega)} + H'^{+}_{fi} \frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t} - 1}{(\omega_{fi}+\omega)} \right)$$

Burada H'_{fi} ve H'^{+}_{fi} sabit, $\omega_{fi} = \frac{\epsilon_f - \epsilon_i}{\hbar}$ sistemin t anında f durumunda bulunma olasılığı veya t süresinde i durumundan f durumuna geçiş olasılığıdır. Eğer foton enerjisinin rezonans kıyısında olduğunu düşünecek olursak, $\omega \sim \omega_{fi}$ veya $\omega \sim -\omega_{fi}$ şunu buluruz:

$$\left| a_f^{(1)}(t) \right|^2 \cong \frac{4|H'_{fi}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(\omega_{fi}-\omega)t/2]}{(\omega_{fi}-\omega)^2} + \frac{4|H'^{+}_{fi}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(\omega_{fi}+\omega)t/2]}{(\omega_{fi}+\omega)^2}$$

Burada çapraz terim diğer iki terimle kıyaslandığında küçük olduğundan kaldırılmıştır. Etkileşim süresi yeterince uzun olduğunu zaman ve

$$\frac{\sin^2(x/2)}{x^2} \rightarrow \frac{\pi}{2} \delta(x)$$

yaklaşımını kullanarak şunu elde ederiz:

$$|a_f^{(1)}(t)|^2 \cong \frac{2\pi t}{\hbar^2} |H'_{fi}|^2 \delta(\omega_{fi} - \omega) + \frac{2\pi t}{\hbar^2} |H'_{fi}|^2 \delta(\omega_{fi} + \omega)$$

Bulduğumuz bu ifadeyi kullanarak geçiş olasılığını artık yazabiliriz:

$$\begin{aligned} w_{i \rightarrow f} &= \frac{d}{dt} |a_f^{(1)}(t)|^2 \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\omega) + \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i + \hbar\omega) \end{aligned}$$

Burada şu özelliğin kullanıldığına dikkat edin;

$$\delta(\hbar\omega) = \frac{\delta(\omega)}{\hbar}$$

Bulduğumuz bu ifadeye Fermi'nin Altın Kuralı adı verilir. Birinci terim bir elektron tarafından bir fotonun soğurulmasına karşılık gelirken ikinci terim bir fotonun emisyonuna karşılık gelir. Soğurulmaya uygun terimi yazarsak;

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\omega)$$

Sonuçta birim zamanda gerçekleşen elektron geçiş sayısı veya bir başka deyimle soğurulan foton sayısı:

$$W_{vc} = \sum_{i,f} w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} |H'_{fi}|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\omega)$$

Elektronun enerji bantlarındaki dalga fonksiyonunu yazacak olursak:

$$\psi_{n,k}(\vec{r}, t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \epsilon_n(\vec{k}) t\right] \cdot u_{nk}(\vec{r}) \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r})]$$

Burada n bant indeksini (c,v) gösterir, u_{nk} ise örgünün periyodikliğidir. $(v k_v) \rightarrow (c k_c)$ yani valans bandından iletkenlik bandına W_{vc} geçiş sayısının hesabı için $\left| \langle c, k_c | H'_{fi} | v, k_v \rangle \right|^2$ matris elemanının hesaplanması gerekmektedir. Daha önce bu elektron-radyasyon etkileşim Hamiltoniyeninin veya başka deyimle Perturbe Hamiltoniyenin nasıl ifade edildiğini görmüştük, onu tekrar yazacak olursak:

$$\hat{H}' = \frac{e}{mc} \vec{A} \vec{p}$$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = A_0 \vec{a} \exp[i(\vec{s}\vec{r} - \omega t)] \quad , \quad \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

idi, dolayısıyla etkileşim Hamiltoniyeni şu şekli alıyordu:

$$\hat{H}' = -\frac{ie\hbar}{mc} \vec{A} \vec{\nabla} = -\frac{ie\hbar}{mc} A_0 \exp[i(\vec{s}\vec{r} - \omega t)] \vec{a} \vec{\nabla}$$

$$\langle c, k_c | \hat{H}' | v, k_v \rangle = \int \psi_{ck_c}^* \hat{H}' \psi_{vk_v} d^3r$$

$$= -\frac{ie\hbar}{mc} A_0 \int \left\{ u_{ck_c}^* \exp[i(\vec{s} - \vec{k}_c)\vec{r}] \right\} \vec{a} \vec{\nabla} u_{vk_v} \exp[i(\vec{k}_v)\vec{r}] d^3r \exp\left[\frac{i}{\hbar} [\epsilon_c(\vec{k}_c) - \epsilon_v(\vec{k}_v) - \hbar\omega] t\right]$$

Matris elemanının hesabı uzay üzerinden integrasyon içerir. ω 'lı terimin zaman üzerinden entegrali bizi şuna ulaştırır:

$$\int \exp\left[\frac{i}{\hbar} [\epsilon_c(\vec{k}_c) - \epsilon_v(\vec{k}_v) - \hbar\omega] t\right] dt \propto \delta(\epsilon_c(k_c) - \epsilon_v(k_v) - \hbar\omega)$$

Yani Fermi'nin altın kuralındaki delta fonksiyonunu elde ediyoruz. Bu sonuç elektronun foton soğurması ve valans bandından iletkenlik bandına uyarılması anlamına gelir. Şimdi de $\vec{\nabla}$ operatörünün içerildiği integrale gelecek olursak:

$$\int \left\{ u_{ck_c}^* \exp[i(\vec{s} - \vec{k}_c)\vec{r}] \right\} \vec{a} \vec{\nabla} u_{vk_v} \exp[i(\vec{k}_v)\vec{r}] d^3r = \int \left\{ u_{ck_c}^* \vec{a} \vec{\nabla} u_{vk_v} + i \vec{a} \vec{k}_v u_{ck_c}^* u_{vk_v} \right\} \exp[i(\vec{s} - \vec{k}_c + \vec{k}_v)\vec{r}] d^3r$$

Buradaki $u_{ck_c}^*$ ile çarpılmış ikinci terim u_{vk_v} ile u_{ck_c} ortogonal olduğundan yok olur ve şu şekli alır:

$$\int u_{ck_c}^* \vec{a} \vec{\nabla} u_{vk_v} \exp[i(\vec{s} - \vec{k}_c + \vec{k}_v)\vec{r}] d^3r$$

Bu integrali de $\vec{r} = \vec{R}_j + \vec{r}'$ yazarak iki parçaya bölebiliriz, burada $\vec{r}'$ birim hücre içindeki koordinat iken $\vec{R}_j$ bir örgü vektörüdür. Bloch fonksiyonlarının periyodikliğinden dolayı şunu buluruz:

$$\left(\sum_j \exp[i(\vec{s} - \vec{k}_c + \vec{k}_v)\vec{R}_j] \right) \int u_{ck_c}^* \vec{a} \vec{\nabla} u_{vk_v} \exp[i(\vec{s} - \vec{k}_c + \vec{k}_v)\vec{r}'] d^3r'$$

Bütün $\vec{R}_j$ örgü vektörleri üzerinden $\sum_j \exp[i(\vec{s} - \vec{k}_c + \vec{k}_v)\vec{R}_j]$ toplamı bir delta fonksiyonu ile sonuçlanır:

$$\sum_j \exp[i((\vec{s} - \vec{k}_c + \vec{k}_v) \cdot \vec{R}_j)] = \frac{V}{\Omega_0} \delta(\vec{s} - \vec{k}_c + \vec{k}_v) = \frac{1}{\Omega_0} \delta(\vec{s} - \vec{k}_c + \vec{k}_v)$$

$\vec{s}$ dalga vektörü Brillouin bölgesi ile kıyaslandığında çok küçük olduğundan yani

$\vec{s} \approx 0$ ve $\vec{k}_c \approx \vec{k}_v \approx \vec{k}$ olduğundan $\exp \rightarrow 0$ olur sonuçta:

$$P_{vc} = -\frac{ie\hbar}{mc} A_0 \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{ck_c}^*(\vec{r}) (\vec{a} \cdot \vec{\nabla}) u_{vk_v}(\vec{r}) d^3r = A_0 \frac{e}{mc} (\vec{a} \cdot \vec{p}_{cv})$$

Buradaki momentum için geçişin matris elemanı şu idi:

$$\vec{p}_{cv} = -i\hbar \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{ck_c}^*(\vec{r}) (\vec{a} \cdot \vec{\nabla}) u_{vk_v}(\vec{r}) d^3r$$

Böylece birim zamanda birim hacimde valans bandından iletkenlik bandına geçişlerin sayısı:

$$W_{vc} = \frac{2\pi}{\hbar} \int |\vec{p}_{vc}|^2 \delta(\epsilon_c(k_c) - \epsilon_v(k_v) - \hbar\omega) \frac{2}{(2\pi)^3} d^3k$$

Burada $\frac{2}{(2\pi)^3} d^3k$, d^3k bölgesindeki elektron durumları sayısıdır. Soğurulma

katsayısı da şu hali alır:

$$\alpha = \frac{W_{vc}}{Nv} = \frac{1}{\pi} \frac{e^2}{m^2 c n \omega} \int |\vec{a} \cdot \vec{p}_{cv}|^2 \delta(\epsilon_c(k_c) - \epsilon_v(k_v) - \hbar\omega) d^3k$$

Şimdi de valans ve iletkenlik bant ekstremumlarının aynı $\vec{k}_0$ noktasında olduğunu kabul edelim:

$$\epsilon_c(\vec{k}) = \epsilon_c(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_c}; \quad \epsilon_v(\vec{k}) = \epsilon_v(\vec{k}_0) - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_v}; \quad \vec{k}_1 = \vec{k} - \vec{k}_0$$

O zaman:

$$\epsilon_c(\vec{k}) - \epsilon_v(\vec{k}) - \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2\mu} - (\hbar\omega - \epsilon_g)$$

Burada; $\epsilon_g = \epsilon_c(\vec{k}_0) - \epsilon_v(\vec{k}_0)$ ve $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v}$;

$$\vec{k}_0 \text{ 'a yakın } \vec{k} \text{ lar için: } \vec{a}\vec{p}_{cv}(\vec{k}) = \vec{a}\vec{p}_{cv}(\vec{k}_0) + \left[\frac{\partial}{\partial \vec{k}} \vec{a}\vec{p}_{cv}(\vec{k}) \right] (\vec{k} - \vec{k}_0)$$

O zaman $\vec{k}_0$ için $(\vec{a}\vec{p}_{cv}(\vec{k}_0) \neq 0)$ olduğu durumlarda, ki bunlara izinli geçişler diyeceğiz, soğurulma katsayısı:

$$\alpha = \frac{1}{\pi} \frac{e^2}{m^2 c n \omega} \sum_{\vec{k}_0} |\vec{a}\vec{p}_{cv}(\vec{k}_0)|^2 \cdot \int \delta \left\{ \frac{\hbar^2 k_1^2}{2\mu} - (\hbar\omega - \varepsilon_g) \right\} dk_1 dk_2 dk_3$$

$k' = k_1 / \sqrt{\mu}$ yazarsak;

$$\alpha = \frac{1}{\pi} \frac{e^2}{m^2 c n \omega} \sum_{\vec{k}_0} |\vec{a}\vec{p}_{cv}(\vec{k}_0)|^2 \mu^{3/2} \cdot \int \delta \left\{ \frac{1}{2} \hbar^2 k'^2 - (\hbar\omega - \varepsilon_g) \right\} 4\pi k'^2 dk^1$$

Burada $dk_1 dk_2 dk_3 = 4\pi k'^2 dk'$, $\frac{1}{2} \hbar^2 k'^2 = x$ olduğunu kabul edersek;

$$k'^2 = \frac{2x}{\hbar^2}; \quad k' = \frac{\sqrt{2x}}{\hbar}; \quad dk' = \frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{2}{x}} dx$$

Sonuçta:

$$\alpha = \frac{4\sqrt{2}e^2}{m^2 c n \omega} \sum_{\vec{k}_0} |\vec{a}\vec{p}_{cv}(\vec{k}_0)|^2 \frac{m^{3/2}}{\hbar^3} (\hbar\omega - \varepsilon_g)^{1/2}$$

Standart bant durumunda yani $(\vec{k}_0 = 0)$ için:

$$\alpha_{da} = \frac{2e^2}{m^2 c n \omega} |\vec{a}\vec{p}_{cv}(0)|^2 \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{3/2} (\hbar\omega - \varepsilon_g)^{1/2}$$

olarak bulunur, burada “da” indisi doğrudan izinli geçişi belirtir. Burada önemli olan soğurulmanın frekansa dolayısıyla enerjiye olan bağımlılığını göstermek olduğundan bulduğumuz ifadeyi şöyle genelleyebiliriz:

$$\alpha_{da} = \frac{C_{da}}{\hbar\omega} (\hbar\omega - \varepsilon_g)^{1/2}$$

$(\vec{a}\vec{p}_{cv}(0)=0)$ durumunda, ki bu da yasak geiř durumu olarak adlandırılır, o zaman dikkate alınacak terim:

$$\left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} [\vec{a}\vec{p}_{cv}(0)] \right|^2 = \left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} [\vec{a}\vec{p}_{cv}(0)] \right|^2 k^2 \cos^2 \vartheta$$

$d^3k = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi k^2 dk$ olduėunu dikkate alırsak;

$$\alpha = \frac{1}{\pi} \frac{e^2}{m^2 c n \omega} \left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} [\vec{a}\vec{p}_{cv}(0)] \right|^2 \int \delta \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} - (\hbar\omega - \epsilon_g) \right] k^2 \cos^2 \vartheta d\vartheta d\varphi k^2 dk$$

Sonuçta:

$$\alpha_{df} = \frac{2e^2}{3m^2 c n \omega} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{5/2} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} [\vec{a}\vec{p}_{cv}(0)] \right]^2 (\hbar\omega - \epsilon_g)^{3/2}$$

olarak bulunur, burada da “df” indisi doėrudan yasaklı geiři belirtir. Bu ifadenin de en genel hali:

$$\alpha_{df} = \frac{C_{df}}{\hbar\omega} (\hbar\omega - \epsilon_g)^{3/2}$$

2.3. Doėrudan Olmayan Optik Geiřler

Daha önce de belirttiėimiz gibi dolaylı bant aralıėına sahip kristallerde fotonun soėrulmasından sonra elektronun iletkenlik bandına gemesi sürecine fononlar da karışmaktadır. Fonon soėrulması veya ışıınımı ile tanımlanan optik geiřleri ikinci derece Perturbasyon Teorisi ile inceleyeceėiz. Perturbe Hamiltoniyeni ařaėıdaki řekilde yazalım:

$$\hat{H}'(t) = \sum_{\mathbf{k}} \hat{H}^{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t}$$

Bařlangı (i) durumundan bir ara (m) durumuna ve oradan son (f) durumuna yani, $i \rightarrow m \rightarrow f$ geiřleri iin řunu yazabiliriz:

$$\begin{aligned}
\frac{da_f^{(2)}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_k \sum_m H_{fm}^k a_m^{(1)} e^{i(\omega_{fm}-\omega_k)t} = \\
&= -\frac{1}{i\hbar^2} \sum_{k,k'} \sum_m H_{fm}^k H_{mi}^{k'} e^{i(\omega_{fm}-\omega_k)t} \left\{ \frac{e^{i(\omega_{mi}-\omega_{k'})t} - 1}{\omega_{mi} - \omega_{k'}} \right\} \\
&= -\frac{1}{i\hbar^2} \sum_{k,k'} \sum_m \frac{H_{fm}^k H_{mi}^{k'}}{\omega_{mi} - \omega_{k'}} \left\{ e^{i(\omega_{fi}-\omega_k-\omega_{k'})t} - e^{i(\omega_{fm}-\omega_k)t} \right\}
\end{aligned}$$

İntegralleme sonucunda:

$$\begin{aligned}
a_f^{(2)}(t) &= -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{k,k'} \sum_m \frac{H_{fm}^k H_{mi}^{k'}}{\omega_{mi} - \omega_{k'}} \cdot \left\{ \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega_k-\omega_{k'})t} - 1}{\omega_{fi} - \omega_k - \omega_{k'}} - \frac{e^{i(\omega_{fm}-\omega_k)t} - 1}{\omega_{fm} - \omega_k} \right\} \\
w_{if} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k,k'} \sum_m \frac{|H_{fm}^k|^2 |H_{mi}^{k'}|^2}{(\varepsilon_m - \varepsilon_i - \hbar\omega_{k'})^2} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega_k - \hbar\omega_{k'})
\end{aligned}$$

Doğrudan olmayan optik geçişler için $i \rightarrow m$; $\hbar\omega_{k'} = \hbar\omega$ fotonun soğrulması ile elektronun soğrulması, $m \rightarrow f$ prosesi ise, $\hbar\omega_k = \hbar\omega_q$ fononunun ışıma veya soğrulmasıdır. Yani sonuçta:

$$w_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_m \frac{|H_{fm}^{fon}|^2 |H_{mi}^{fot}|^2}{(\varepsilon_m - \varepsilon_i - \hbar\omega)^2} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega_q - \hbar\omega)$$

i, m , ve f durumlarındaki enerjiler, valans ve iletkenlik bantlarındaki değerlerdir.

Birim zaman süresince birim hacimdeki geçiş sayısı:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{if} \sum_m \frac{|H_{fm}^{fon}|^2 |H_{mi}^{fot}|^2}{(\varepsilon_m - \varepsilon_i - \hbar\omega)^2} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega \pm \hbar\omega_q)$$

$$\varepsilon_i = \varepsilon_v(\vec{k}) = \varepsilon_v(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} = \varepsilon_v(0) - \varepsilon'_v$$

$$\varepsilon_m = \varepsilon_c(\vec{k}) = \varepsilon_c(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} = \varepsilon_c(0) + \varepsilon_c^{0'}$$

$$\varepsilon_f = \varepsilon_c(\vec{k}') = \varepsilon_c(\vec{k}_L) + \varepsilon_c'$$

$$\varepsilon_m - \varepsilon_i - \hbar\omega = \varepsilon_c(\vec{k}) - \varepsilon_v(\vec{k}) - \hbar\omega = \varepsilon_g + \varepsilon_c^{0'} + \varepsilon_v' - \hbar\omega$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega - \hbar\omega_q &= \varepsilon_c(\vec{k}') - \varepsilon_v(\vec{k}) - \hbar\omega - \hbar\omega_q = \\ \varepsilon_c(\vec{k}_L) + \varepsilon_c' - \varepsilon_v(0) + \varepsilon_v' - \hbar\omega - \hbar\omega_q &= \varepsilon_G + \varepsilon_c' + \varepsilon_v' - \hbar\omega - \hbar\omega_q\end{aligned}$$

Burada: $\varepsilon_G = \varepsilon_c(\vec{k}_L) - \varepsilon_v(0)$,

$$\begin{aligned}H_{mi}^{tot} &= A_0 \left(\frac{e}{mc} \right) (\vec{a} \vec{p}_{cv}(\vec{k})) = \left(\frac{2\pi \hbar e^2 N}{m^2 c n s} \right)^{1/2} (\vec{a} \vec{p}_{cv}(\vec{k})) \\ |H_{mi}^{tot}|^2 &= C_q^j \left(N_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right)\end{aligned}$$

j - titreşim küpünün numarası, N_q ise Planck fonksiyonudur:

$$N_q = \frac{1}{\exp \frac{\hbar\omega_q}{k_0 T} - 1}; \quad k_0 T \gg \hbar\omega_q; \quad N_q \approx \frac{k_0 T}{\hbar\omega_q}$$

$$T \rightarrow 0; \quad N_q \rightarrow 0$$

Soğrulma katsayısı: (fonon ışınlı durumu):

$$\begin{aligned}\alpha &= 4\pi^2 \frac{e^2}{m^2 c n \omega} |\vec{a} \vec{p}_{cv}(0)|^2 C_{k_L}^j (N_{k_L}^j + 1) \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3 k \cdot \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3 k' \times \\ &\times \frac{1}{(\varepsilon_m - \varepsilon_i - \hbar\omega)^2} \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega + \hbar\omega_q)\end{aligned}$$

Burada toplamalar yerine integraller yapılıyor:

$$\begin{aligned}\sum_i &\rightarrow \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3 k = \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot 2\pi \frac{(2m)^{3/2}}{\hbar^3} \int \sqrt{\varepsilon_v'} d\varepsilon_v' \\ \sum_i &\rightarrow \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3 k' = \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot 2\pi \frac{(2m)^{3/2}}{\hbar^3} \int \sqrt{\varepsilon_c'} d\varepsilon_c'\end{aligned}$$

$\hbar\omega \geq \varepsilon_G$; $\varepsilon_g > \varepsilon_G$ dikkate alırsak, yazabiliriz:

$$(\varepsilon_m - \varepsilon_i - \hbar\omega)^2 = \left(\varepsilon_g + \varepsilon_c^0 + \varepsilon_v' - \hbar\omega \right)^2 \approx (\varepsilon_g - \hbar\omega)^2$$

O zaman:

$$\alpha = \frac{\beta}{\omega(\varepsilon_g - \hbar\omega)^2} \iint \sqrt{\varepsilon'_0 \varepsilon'_c} \delta(\varepsilon'_c + \varepsilon'_v + \varepsilon_G \mp \hbar\omega_{k_L} - \hbar\omega) d\varepsilon'_v d\varepsilon'_c$$

İntegral sonucu:

$$\int_0^b \sqrt{\varepsilon'_c (b - \varepsilon'_c)} d\varepsilon'_c = \frac{\pi}{8} b^2$$

Burada:

$$b = \hbar\omega - \varepsilon_G - \hbar\omega_{k_L}$$

Böylece, hem fonon soğrulması, hem de fonon ışıması proseslerini dikkate aldığımızda, doğrudan olmayan izinli optik geçişler için soğrulma katsayısı:

$$\alpha = \frac{B_1}{\omega(\varepsilon_g - \hbar\omega)^2} (\hbar\omega - \varepsilon_G - \hbar\omega_{k_L})^2 + \frac{B_2}{\omega(\varepsilon_g - \hbar\omega)^2} (\hbar\omega - \varepsilon_G + \hbar\omega_{k_L})^2$$

Literatürde bu ifade genel olarak şu şekilde bulunur:

$$\alpha_{ia} \hbar\omega = (\alpha_{ia}^e + \alpha_{ia}^a) \hbar\omega = C_{ia}^e \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g - \hbar\omega_c)^2}{1 - \exp(-\hbar\omega_c/k_B T)} + C_{ia}^a \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g + \hbar\omega_c)^2}{\exp(-\hbar\omega_c/k_B T) - 1}$$

İzinsiz geçişler durumunda ise ilave bir k^2 çarpımı nedeniyle:

$$\alpha_{if} \hbar\omega = (\alpha_{if}^e + \alpha_{if}^a) \hbar\omega = C_{if}^e \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g - \hbar\omega_c)^3}{1 - \exp(-\hbar\omega_c/k_B T)} + C_{if}^a \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g + \hbar\omega_c)^3}{\exp(-\hbar\omega_c/k_B T) - 1}$$

Bu denklemlerde üst indis olarak yazılan “e” ve “a” sırasıyla $\hbar\omega_c$ enerjili ve k_c dalga vektörlü bir fononun emisyonununa (salınmasına) ve soğrulmasına karşılık gelir. Alt indislerdeki “ia” dolaylı izinli geçişi “if” dolaylı yasaklı geçişi gösterir. Paydadaki Bose-Einstein faktörü fonon popülasyonunu belirtir. Fonon soğrulma katkısı emisyon katkısından daha düşük enerjilerde gözlenir ve bunun oluşması için $T > 0$ olması gerekir.

2.4. Literatürdeki Deneysel Bulgular

Önceki bölümlerimizde incelediğimiz soğrulma durumlarında kristallerin sahip oldukları bant yapısına göre doğrudan veya dolaylı geçişler olduğunu yine bu iki geçişin izinli ve izinsiz olmak üzere iki alt türe sahip olduğunu göstermiş ve bu dört geçiş süreci için soğulma katsayısının enerji bağımlılığını bulmuştuk. Buradaki incelememizde öncelikle bu sonuçları hatırlatacak ve literatürden elde ettiğimiz bazı deneysel sonuçları resmeden birkaç şekil üzerinde bunları yorumlayacağız.

Bölüm 2.2 ve 2.3 de elde ettiğimiz soğrulma katsayısının enerji bağımlılığını belirten formülleri şu şekilde genelleyeceğiz, bu formüllerde “d” doğrudan geçişi, “i” dolaylı geçişi, “a” izinli geçişi, “f” yasaklı geçişi belirtir.

Öncelikle doğrudan geçişlerle başlayalım:

$$\alpha_{da} = \frac{C_{da}}{\hbar\omega} (\hbar\omega - \epsilon_g)^{\frac{1}{2}}$$

$$\alpha_{df} = \frac{C_{df}}{\hbar\omega} (\hbar\omega - \epsilon_g)^{\frac{3}{2}}$$

AlP, GaAs, InSb, AlAs ve diğerleri gibi III-V yarı iletkenler direkt izinli absorpsiyona sahiptir. Rutil, SiO₂, Cu₂O ve diğerleri gibi çoğu kompleks oksitler doğrudan yasaklı absorpsiyona sahiptirler.

Dolaylı geçişlere gelecek olursak burada belirtmemiz gereken bir durum var, bu geçiş süreçlerinde fonon katkısının da bulunduğunu belirtmiştik. Gelen fotonun enerjisi, $\hbar\omega$, yasak bant aralığından bir fononun enerjisi, $\hbar\omega_c$ kadar fazla olduğu zaman fonon emisyonu katkısı başlar, bundan düşük enerjilerde fonon soğrulma katkısı gözlemlenir, yani dolaylı izinli ve yasaklı geçişler için yazdığımız denklemler belirli sınırlar için şu hali alır;

2.4.1. Üç Boyutlu Model İçin Geçiş Denklemleri

$$\begin{aligned}
 \alpha_{ia} \hbar\omega &= \begin{cases} C_{ia} \left[\frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g - \hbar\omega_c)^2}{1 - \exp(-\hbar\omega_c/k_B T)} + \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g + \hbar\omega_c)^2}{\exp(\hbar\omega_c/k_B T) - 1} \right] & \hbar\omega > \varepsilon_g + \hbar\omega_c \\ C_{ia} \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g + \hbar\omega_c)^2}{\exp(\hbar\omega_c/k_B T) - 1} & \varepsilon_g - \hbar\omega_c < \hbar\omega \leq \varepsilon_g + \hbar\omega_c \\ 0 & \hbar\omega \leq \varepsilon_g - \hbar\omega_c \end{cases} \\
 \alpha_{if} \hbar\omega &= \begin{cases} C_{if} \left[\frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g - \hbar\omega_c)^3}{1 - \exp(-\hbar\omega_c/k_B T)} + \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g + \hbar\omega_c)^3}{\exp(\hbar\omega_c/k_B T) - 1} \right] & \hbar\omega > \varepsilon_g + \hbar\omega_c \\ C_{if} \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g + \hbar\omega_c)^3}{\exp(\hbar\omega_c/k_B T) - 1} & \varepsilon_g - \hbar\omega_c < \hbar\omega \leq \varepsilon_g + \hbar\omega_c \\ 0 & \hbar\omega \leq \varepsilon_g - \hbar\omega_c \end{cases}
 \end{aligned}$$

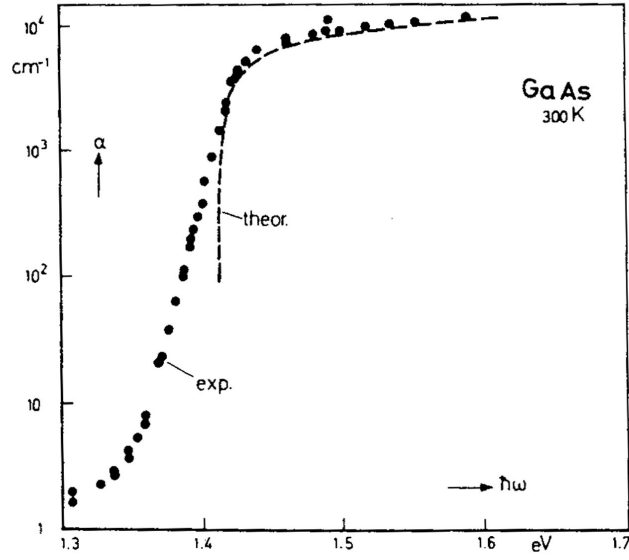
[Bardeen et al, 1956]

2.4.2. İki Boyutlu Model İçin Geçiş Denklemleri

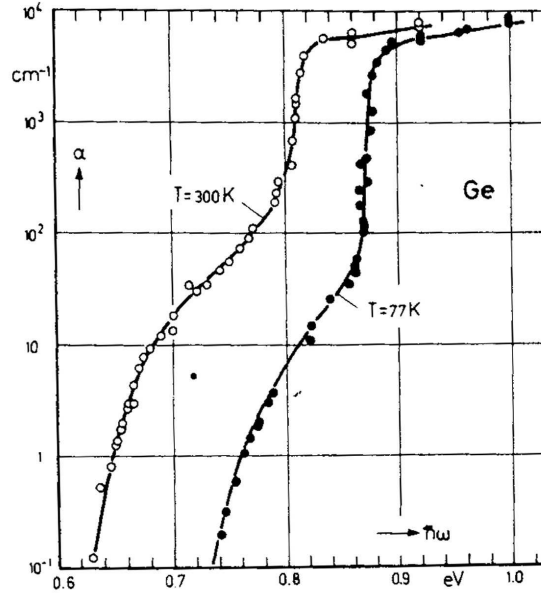
$$\begin{aligned}
 \alpha_{ia} &= \begin{cases} C_{ia} \left[\frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g - \hbar\omega_c)}{1 - \exp(-\hbar\omega_c/k_B T)} + \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g + \hbar\omega_c)}{\exp(\hbar\omega_c/k_B T) - 1} \right] & \hbar\omega > \varepsilon_g + \hbar\omega_c \\ C_{ia} \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g + \hbar\omega_c)}{\exp(\hbar\omega_c/k_B T) - 1} & \varepsilon_g - \hbar\omega_c < \hbar\omega \leq \varepsilon_g + \hbar\omega_c \\ 0 & \hbar\omega \leq \varepsilon_g - \hbar\omega_c \end{cases} \\
 \alpha_{if} &= \begin{cases} C_{if} \left[\frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g - \hbar\omega_c)^2}{1 - \exp(-\hbar\omega_c/k_B T)} + \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g + \hbar\omega_c)^2}{\exp(\hbar\omega_c/k_B T) - 1} \right] & \hbar\omega > \varepsilon_g + \hbar\omega_c \\ C_{if} \frac{(\hbar\omega - \varepsilon_g + \hbar\omega_c)^2}{\exp(\hbar\omega_c/k_B T) - 1} & \varepsilon_g - \hbar\omega_c < \hbar\omega \leq \varepsilon_g + \hbar\omega_c \\ 0 & \hbar\omega \leq \varepsilon_g - \hbar\omega_c \end{cases}
 \end{aligned}$$

[ElKorashi, 1986]

Şimdi yukarıda belirttiğimiz formüllere göre temel soğurulma sınırının belirlenmesinde kullanılan şekilleri inceleyelim. Şekil 2.3 ve Şekil 2.4 sırasıyla GaAs ve Ge'nin soğurulma katsayısını gösterir.



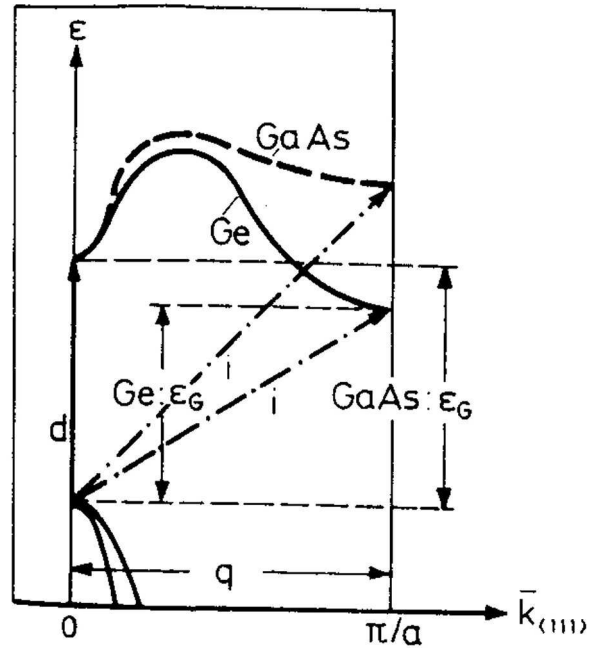
Şekil 2.3 GaAs'in soğurulma kıyısı [Moss and Hawkins, 1962].



Şekil 2.4 Oda sıcaklığında Germanyum için soğurulma sabiti vs. enerji grafiği [Newman and Tyler, 1959].

Şekil 2.3 ve Şekil 2.4'ün karşılaştırılması GaAs ve Ge'nin soğurulma sınırlarının farklı enerji bağımlılığına sahip olduğunu gösterir. Germanyumda Galyum Arsenide olmayan bir omuz gözlemliyoruz. Bu omuzun nedeni Germanyumun iletkenlik bandının en alçak minimumunun Birinci Brillouin bölgesinin kıyısında olmasıdır. Galyum Arsenide ise bu $k=0$ dadır. Dolayısıyla Galyum Arsenit doğrudan bant aralığına sahipken Germanyum dolaylı bant aralığına sahiptir. Her iki malzeme için de valans bant maksimumları $k=0$ da olduğundan Germanyumdaki geçiş momentumda bir değişim içerirken Galyum Arsenide bu olmaz. Bu durum Şekil 2.5'te gösterilmiştir.

Germanyumun soğrulma grafiğini dikkatle incelediğimizde gelen foton enerjisi dolaylı bant aralığını geçtikten sonra bir doğrudan geçişin daha olduğu gözlenebilir. Bu durumun gözlemlendiği bölgede Germanyumun soğrulma grafiği ile yapılacak analizlerle Germanyumun doğrudan geçiş bant aralığı da bulunabilir.

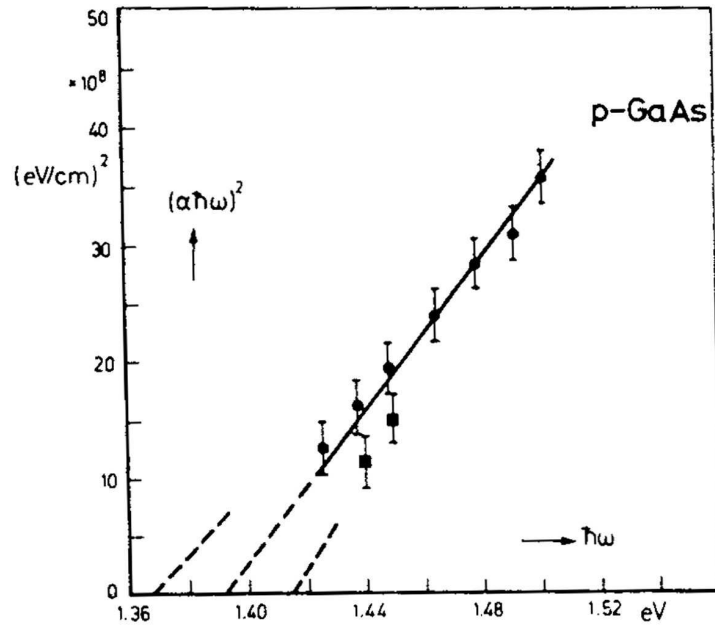


Şekil 2.5 Ge ve GaAs'te doğrudan ve dolaylı geçişler [Seeger, 1973].

Bu noktaya kadar incelediğimiz iki örneğin bant yapılarını ve enerjiye göre soğurulmanın değişimini gördük şimdi ise bu verilerden yararlanarak bu örneklerin yasak enerji bant aralıklarının hesaplamasına geçeceğiz, ve bulduğumuz bu metotları tez çalışmamızda kullandığımız üç yarıiletken kristal üzerinde uygulayacağız.

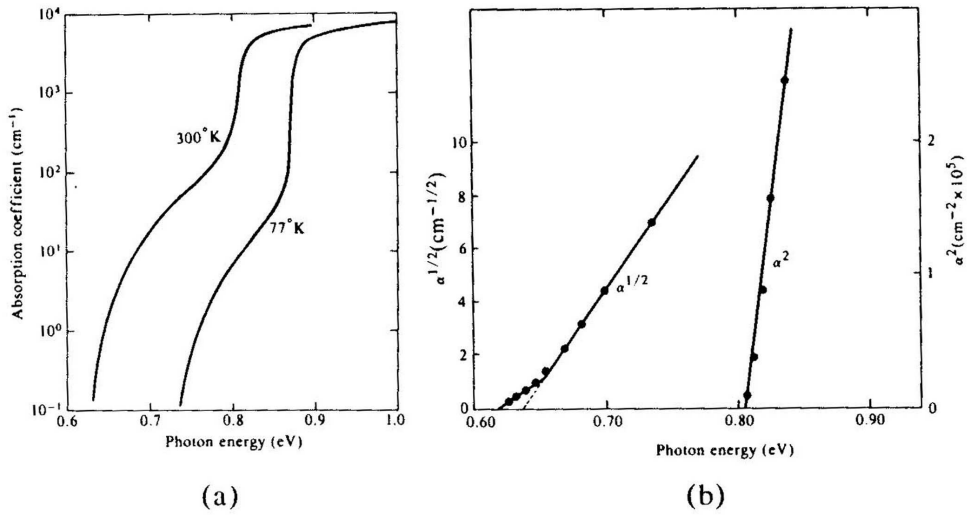
Soğurulma sınırının belirlenmesi için sıkça kullanılan metot Şekil 2.6'da gösterilmiştir. Kuantum mekaniksel uygulamayla soğurulma katsayısının frekansa, bant yapısına göre değişen bir $(\hbar\omega - \epsilon_x)^n$ (burada $\epsilon_x = \epsilon_g, \epsilon_g \mp \hbar\omega_c$ olabilir) bağıntısıyla bağlı olduğunu göstermiştik. Burada $n = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, 1, 2, 3$ değerlerini alıyordu. Bu bağıntıdan yola çıkarak üç boyutlu model için $\alpha\hbar\omega$ 'nın $\frac{1}{n}$ kuvvetine karşı enerji grafiğinin, iki boyutlu model için ise α 'nın $\frac{1}{n}$ kuvvetine karşı enerji grafiğinin doğrusal olan bölgeler içereceği ve bu doğruların enerji eksenile kesişim noktalarından bant aralıklarının hesaplanabileceği sonucuna varabiliriz.

GaAs için daha önce incelediğimiz soğurmaya karşı enerji grafiğinden direkt geçişe sahip olduğunu sonucuna varmıştık, şimdi soğurulma sabitinin foton enerjisi ile çarpımının karesine karşı enerji grafiği verilmiştir. Görüldüğü üzere lineer bir çizgi oluşmuştur. Bu çizginin yatay eksenle kesişimi 1.39 eV'luk bir enerji aralığına ulaştırmıştır. Demek ki GaAs'in yasak bant aralığı $\epsilon_g = 1,39\text{eV}$ değerindedir.



Şekil 2.6 GaAs için α ya karşı $(\alpha\hbar\omega)^2$ grafiği [Kumdan, Seidel, 1962].

Sıradaki şekil dolaylı bant aralıklı bir yarıiletken olan Ge ile ilgili grafiği gösterir;



Şekil 2.7 a. Germanyum için α ya karşı enerji grafiği.

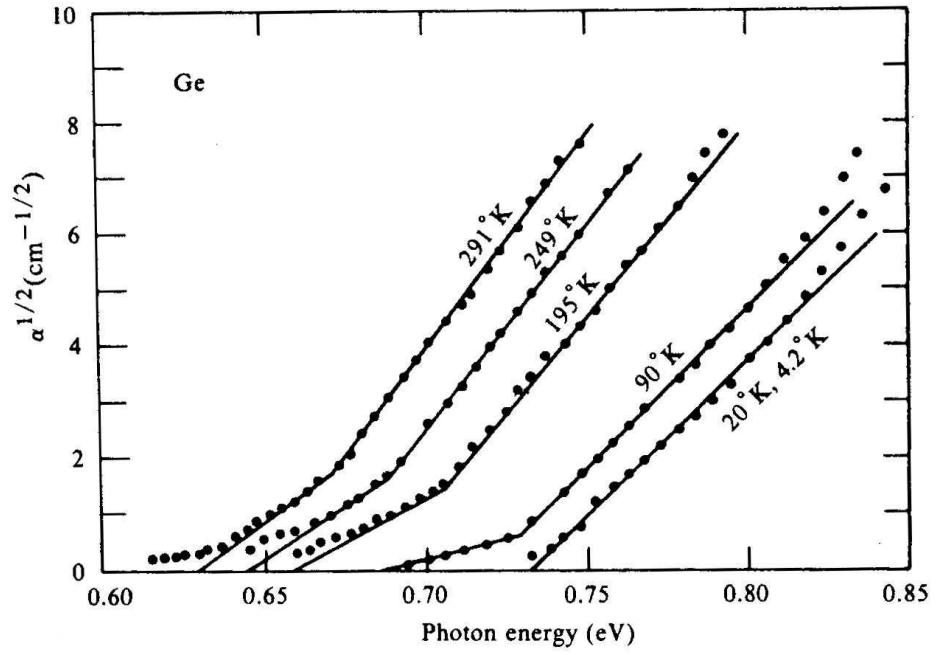
b. Solda $\alpha^{1/2}$ ya karşı enerji grafiği, sağda α^2 ye karşı enerji grafiği.

Şekil 2.7.b’de sol tarafta verilen lineer iki parçalı çizgi dolaylı geçiş bant aralığını bulmakta kullanılacaktır. Eğimi az olan birinci parça fonon soğrulma katkısının bulunduğu bölgedir. Bu doğrunun enerji eksenini kestiği noktadan $\epsilon_g^i - \hbar\omega_c$, doğrunun eğiminden C_{ia} bulunur. Sağ taraftaki doğrunun enerji eksenini kestiği nokta ile de $\epsilon_g^i + \hbar\omega_c$ bulunabilir. Bu enerji değerinden itibaren fonon emisyonu katkısı da devreye girmiştir.

Bulduğumuz bu iki değerden bant aralığı, $\epsilon_g^i = 0,63$ eV bulunmuştur, ki bu Germanyum’daki en küçük aralıktır. Fonon enerjisi, $\epsilon_p = \hbar\omega_c \approx 0,01$ eV olarak bulunmuştur.

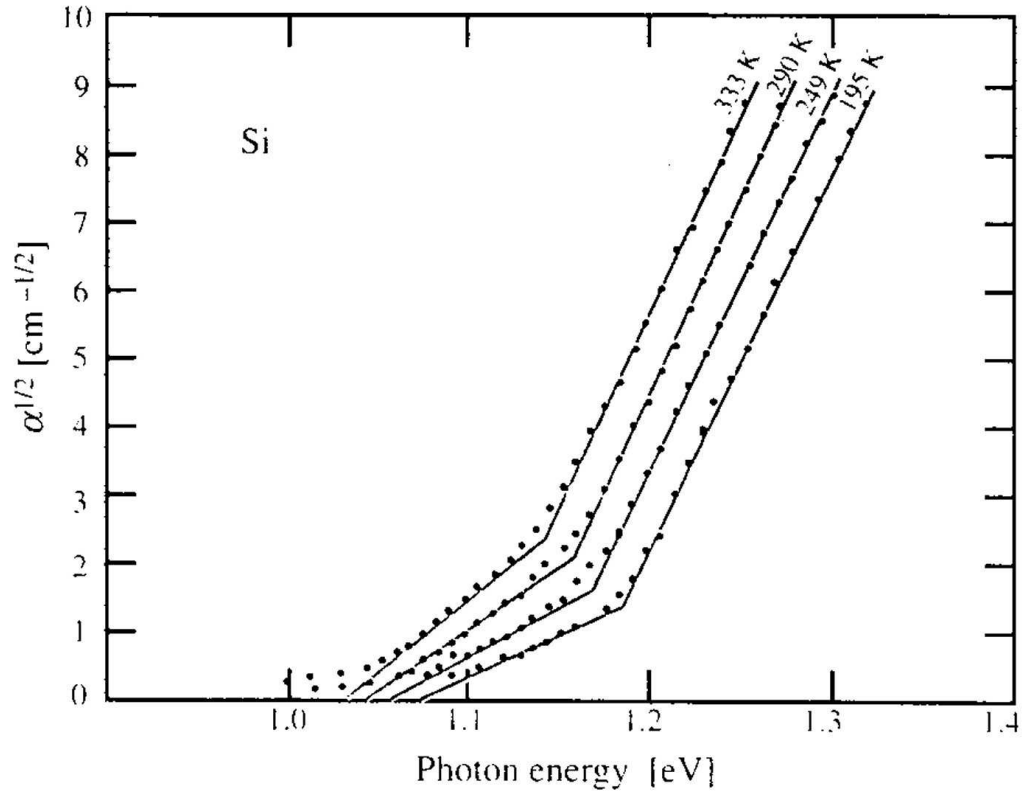
Şekil 2.7.b.’de sağ tarafta verilen doğru, doğrudan geçişe aittir ve bu doğrunun enerji eksenini kestiği noktadan da direkt bant aralığı, $\epsilon_d = 0,81$ eV olarak bulunmuştur.

Şekil 2.8 Germanyum için daha geçerli soğrulma verilerini göstermektedir. Bu grafikte sıcaklık değişimine göre bant aralığının değiştiği açıkça görülmektedir. Bu verilerden elde edilen bir başka önemli sonuç da kristal momentumunun korunmasında yardımcı olan iki fononun enerjileridir. Bu fononlar 0,008 eV enerjili TA(Enine Akustik) fononu ve 0,027 eV enerjili LA (Boyuna Akustik) fononudur.



Şekil 2.8 Germanyum için değişik sıcaklıklardaki soğrulma verileri [MacFarlane and Roberts, 1955, 97].

Germanyum gibi dolaylı bant aralıklı bir başka yarıiletken de Silisyumdur, Silisyum için soğrulma katsayısının kareköküne karşı enerji grafiği aşağıdadır. Bu grafikte yine farklı sıcaklıklar için hesaplanmış veriler kullanılmıştır.



Şekil 2.9 Silisyum için değişik sıcaklıklarda $\alpha^{1/2}$ ye karşı enerji grafiği [MacFarlane and Roberts, 1955, 98].

Bu grafikte Germanyumda olduğu gibi sıcaklık değişimine göre bant aralığının nasıl değiştiğini görmekle beraber düz çizginin iki farklı eğimli parçası fonon soğurulması ve salınmasından kaynaklanmaktadır.

3.DENEY

3.1.İri Kristal Büyütme

İri kristal büyütme teknikleri temel olarak aygıtların sonuçta oluşturulacakları alt tabakaları üretmek için kullanılır. Si, GaAs ve IP gibi bazı yarıiletkenlerin büyütme teknolojileri oldukça gelişmişken çoğu diğer yarıiletkenler için yüksek kaliteli, geniş yüzeyli alt tabakalar elde etmek zordur. İri kristal büyütme tekniklerinin amacı mümkün olduğunca geniş yarıçaplı ve az kusurlu tek parça kristal bulleri (boule) üretmektir. Geniş alanlı tabakalar aygıt üretim fiyatının düşük olmasını sağlar.

İri kristal büyütme tekniklerinden önemli iki tanesi şunlardır:

- a) Bridgman Metodu
 - Yatay Bridgman Metodu
 - Dikey Bridgman Metodu
- b) Czochralski Metodu

Malzemelerin elde edileceği bullerin büyütülmesi için öncelikle kristali meydana getirecek elementlerin saflaştırılmış halleriyle yola çıkılır. İncelediğimiz üç kristal de Azerbaycan Ulusal Bilimler Akademisi Fizik Enstitüsü Optoelektronik Laboratuvarında Dikey Bridgman Metoduna göre büyütüldüğünden bu teknik üzerinde durulacaktır.

3.1.1. Bridgman Metodu

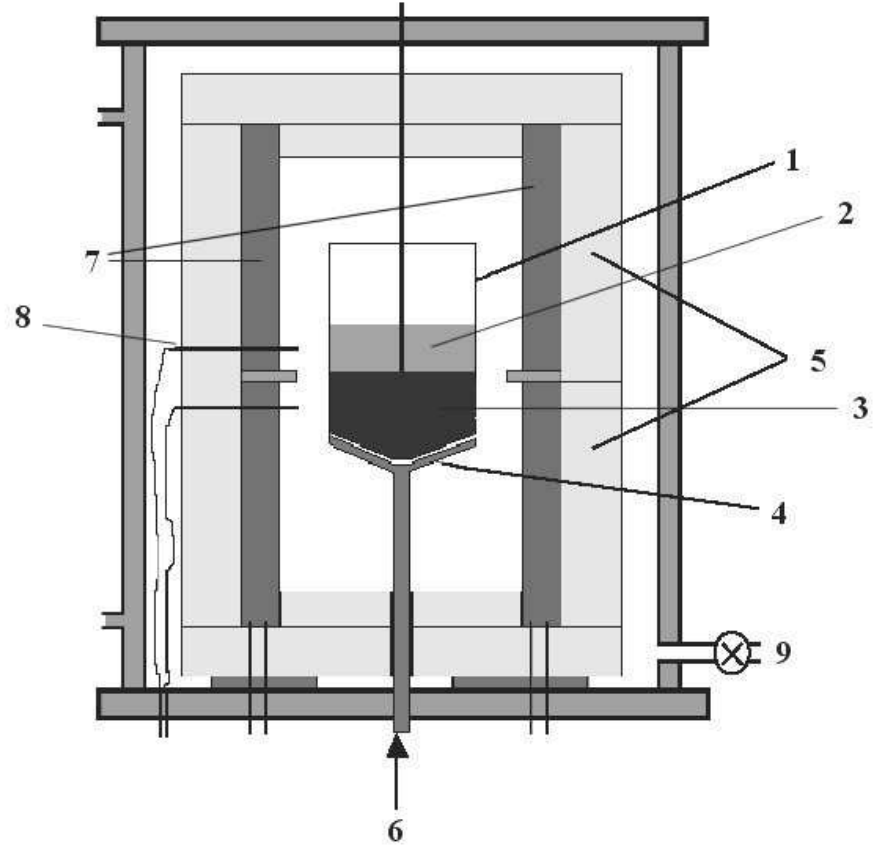
Bridgman metodu 1920'lerin sonunda geliştirilmiş ilk olarak metallerle kullanılması hedeflenmiş bir metoddur [Bridgman, 1926]. Yatay ve dikey olmak üzere iki ayrı çeşidi vardır. Her iki halde de kristal eriyik haldeki malzemenin erime noktasının üstünden altına kadar uzayan sıcaklık gradyanlı bir bölge boyunca hareket ettirilmesiyle büyütülür.

Büyüme, ampul olarak adlandırılan erimiş malzemeyi barındıran kabın veya ısıtıcı fırının mekanik olarak hareket ettirilmesiyle sağlanır [Brunet et al, 1993].

3.1.2. Dikey Bridgman Metodu:

Bu metodun uygulanması şu şekilde gerçekleşir. Kristalize edilecek malzeme ampul olarak adlandırılan bir kabın içine konur. Ampul genellikle yuvarlak veya konik uçlu bir silindir şeklindedir, kuartz veya grafit gibi malzemelerden üretilir. Malzemenin oksitlenmemesi için ampul vakumlanarak kapatılır. Kap Şekil 3.1'deki düzenekte gösterilen fırının içine yerleştirilir ve içindeki malzemelerin erime noktalarının üstünde ısıtılır. Sıcaklıklar genellikle çok yüksektir, örneğin incelediğimiz malzemelerden TlInS₂'nin erime sıcaklığı yaklaşık olarak 900 C'dir. Fırın güç çıkışının bağımsız kontrolüne izin veren çoklu ısıtma elemanlarına sahiptir. Böylece fırının bir ucu diğerine göre daha sıcak yapılabilir. Homojenliğin sağlanması için malzeme fırın içinde iki gün bekletilir. Malzeme tamamen eridiğinde kap sıcak uçtan başlayarak soğuk uca doğru yavaşça çekilmeye başlanır. Homojen bir kristal yapının oluşması için bu çekme süreci çok yavaş yapılır. Kristalin çekme hızı 1.2 mm/saat'tir. İşlem 15 günde tamamlanır. Soğuk uçtaki sıcaklık malzemenin erime noktasının altındadır. Şekil 3.3 yatay ve dikey Bridgman metodunda uçlar arasındaki sıcaklık değişimini gösterir. Malzemenin katılaşması soğuk uçta başlar ve diğer uca doğru sürer. Bu süreç yönlü katılaşma olarak adlandırılır. Bu şekilde malzeme kristalize edilir. Şekil 3.1 Dikey Bridgman Metodu için kullanılan düzeneği göstermektedir [Pandelisev, 2002].

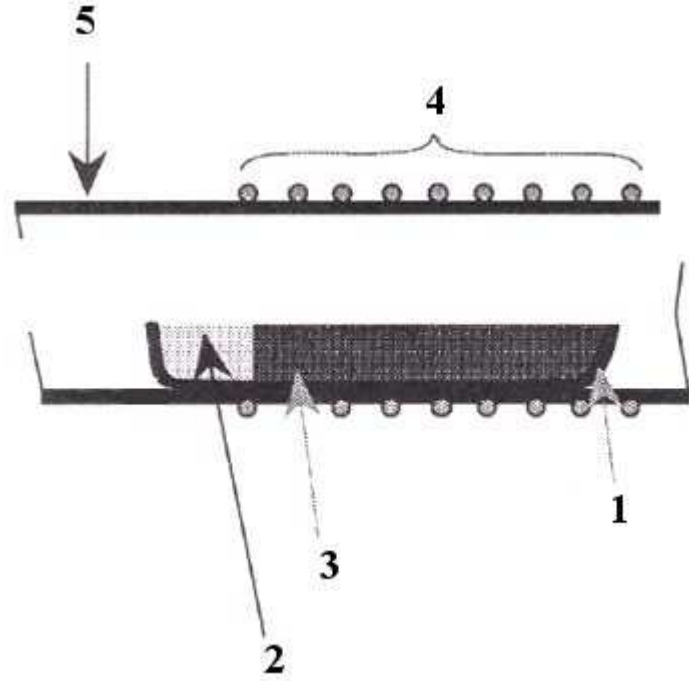
Kristal soğutulur ve ampulden çıkarılır. Kristal kırılkan ve katmanlı yapıda olduğundan özel sabitleme yöntemleriyle sabitlenir ve özel bir testere yardımıyla ince diskler oluşturacak şekilde bul eksenini boyunca kesilir.



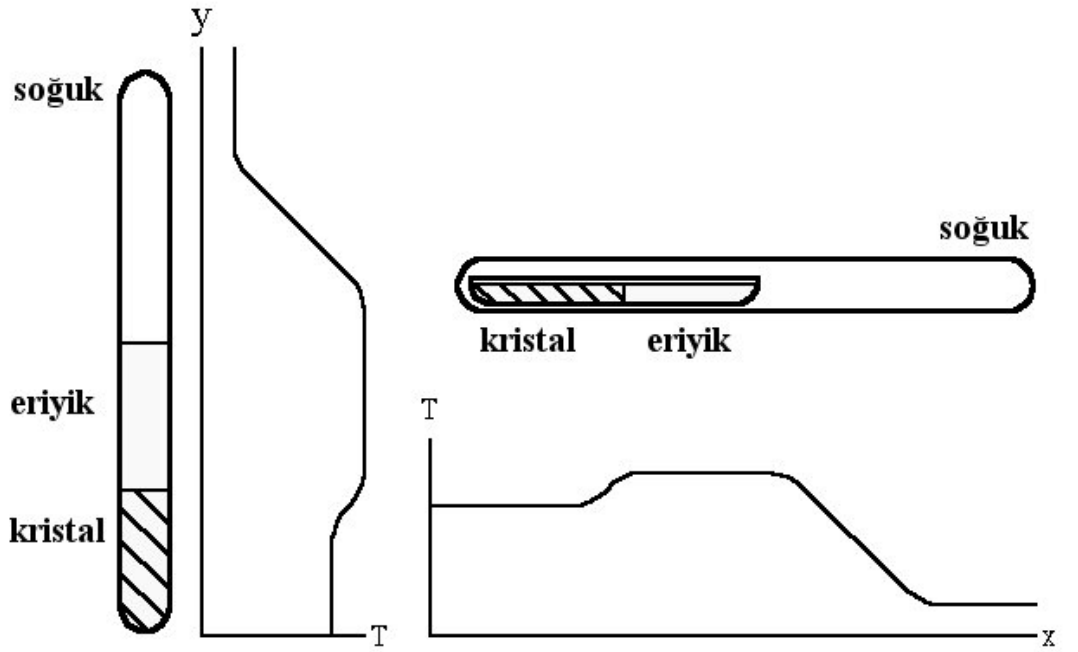
Şekil 3.1 Dikey Bridgman Metodunda kullanılan düzenek: 1- Eritme kabı, 2- Erimiş malzeme, 3- Kristal, 4- Eritme kabı tutacağı, 5- Isı yalıtkanları, 6- Eritme kabı asansörü, 7- Isıtıcı, 8-Isı sensörü, 9- Vakum pompası.

3.1.3. Yatay Bridgman Metodu

Aşağıdaki şekilde Yatay Bridgman Metodu için kullanılan düzenek gösterilmektedir [Singh, 2003].



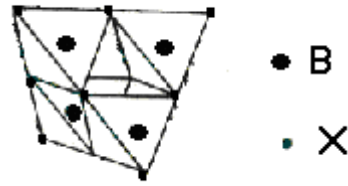
Şekil 3.2 Yatay Bridgman Metodunda kullanılan düzenek: 1- Eritme kabı, 2- Kristal, 3- Erimiş malzeme, 4- Isıtıcı, 5- Fırın tüpü.



Şekil 3.3 Yatay ve Dikey Bridgman Metodunda konuma bağlı sıcaklık değişimi grafikleri [Lachish, 1998].

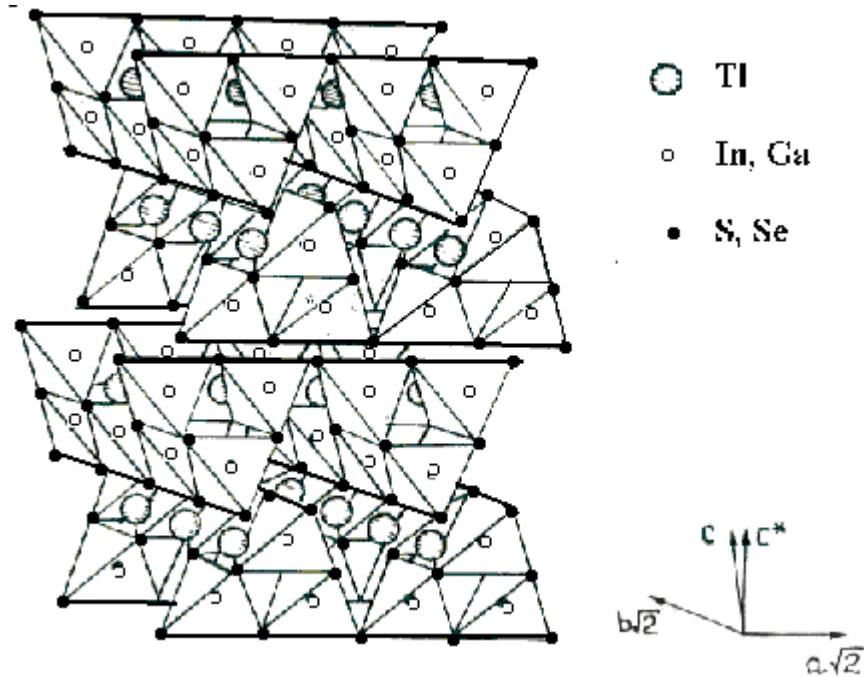
3.2. Kristal Yapı

Bütün kristallerimiz oda sıcaklığında monoklinik yapıya ve C_{2h}^6 simetrisine sahiptir. Kristalin temelini B_4X_{10} polihedraller oluşturur (Şekil 3.4). B_4X_{10} polihedra ortak köşeli 4 tane BX_4 tetrahedrallerin bir araya gelmesi ile oluşur. Polihedrallerde ortak köşelerinden dört komşu polihedra ile bağlanır.



Şekil 3.4 B_4X_{10} Polihedrali.

Ardışık tabakalar trigonal prizmatik boşluklar oluşturacak şekilde birbirlerine 90 derece dönüktür. Tl^+ iyonları paralel düz çizgiler üzerine düzenlenen tabakalar arasına, trigonal prizmatik boşluklara yerleşirler (Şekil 3.5) [Henkel et al, 1982]



Şekil 3.5 Kristal Örgü.

Tablo 3.1. İki bileşik için kristalografik verilerin listesi.

Bileşik	Yapı	Uzay Grup	Kafes sabitleri				
			a(A°)	b(A°)	c(A)	C/A	Z
TlInS ₂	Monoklinik	C _{2h} ⁶	10.95	10.95	15.14	100°	16
TlGaSe ₂	Monoklinik	C _{2h} ⁶	10.772	10.77	15.636	100.06°	16

In ve Ga kalgogenidleri iki boyutlu yarıiletkenlerdir [Yu and Cardona, 1996]. TlInS₂ ve TlGaS₂'nin iki boyutlu olduğu belirtilmiştir [Muller and Hahn, 1978]. Bu tür yarıiletkenler iki boyutlu enerji bantlarına (yüzey bantları) sahiptir, katmanlar arası bağlar tipik olarak kovalenttir ve katmanlar arasındaki Van der Waals kuvvetlerinden daha güçlüdür.

İncelediğimiz örneklerin kalınlıkları şöyledir: TlInS₂ 350 mikron, TlGaS₂ 300 mikron ve TlGaSe₂ 430 mikron.

3.3. Spektrodadyometrik Sistemler

Işık $1,5 \times 10^{12}$ Hz. ile 3×10^{16} Hz. aralığında frekansa sahip elektromanyetik enerji akışıdır. Günümüz teknolojisiyle bu tür dalgaların dalga boylarını ölçmek doğrudan frekanslarını ölçmekten daha kolaydır. Bu yüzden genellikle ışığı dalga boylarıyla tanımlarız (100 Å ile 2 milyon Å arası)

Radyometri Ultraviyole radyasyon (UV) (200 nm – 400 nm dalga boyları arası), görünür ışık (VIS) (400 nm- 700 nm dalga boyları arası) ve infrared radyasyon (IR) (700 nm-1 mm dalga boyları arası) ölçümelerini içerir. Biz bu çalışmamızda görünür bölgede çalışacağız. Spektrodadyometri ölçümleri, ölçümleri dalga boyu spektrumu-fonksiyonları şeklinde sunar [Schneider,1985].

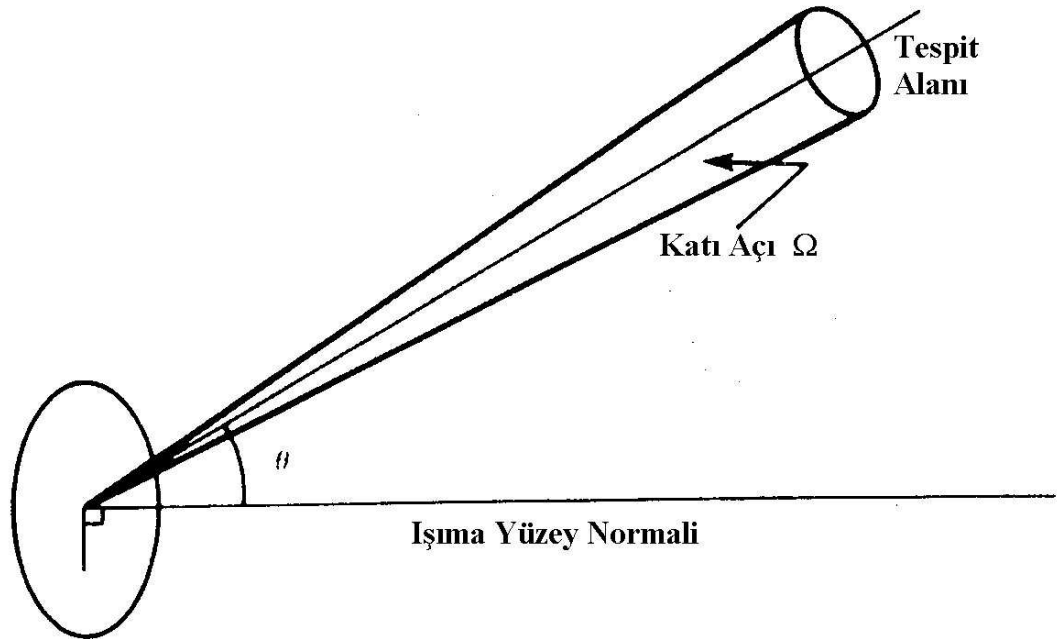
Bir spektrodadyometre şu elemanları içerir: Ayarlanabilir dağıtıcı eleman (radyasyonu spektral öğelerine ayıran bir ağ (grating)), bir detektör (üzerine optik radyasyon düştüğünde elektriksel bir sinyal üreten bir fotodiyot), bir güçlendirici ve detektör sinyal okuyucu.

3.3.1. Spektroradyometrik Sistemin Çalışma Prensibi

Fotometrik ölçümler toplam ışık miktarını – enerji akısını veya güç oranını – ışığın yolunu kesecek bir detektör koyarak ölçer. Detektör alanı arttıkça detektör tarafından soğrulan güç de artar. Soğrulan gücü detektörden bağımsız bir ölçüm elde etmek için detektör alanına bölerek irradyansı (E) – birim alan başına düşen soğrulan güç -buluruz.

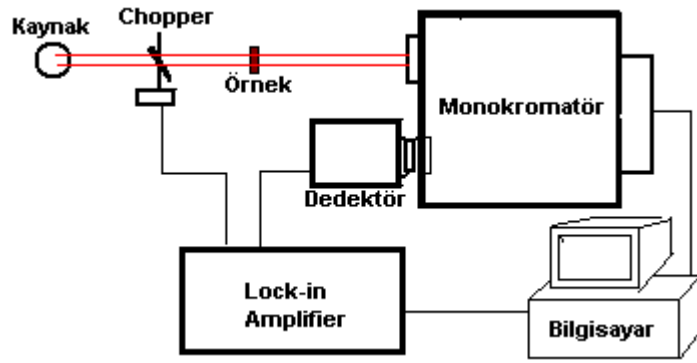
Kaynaklar ışığı bütün yönlerde düzgün olarak göndermezler. Şekil 3.6 radyansı (L) – birim katı açı başına düşen verilen bir yöndeki irradyans -tanımlayan geometriyi gösterir.

$$L = \frac{E \cdot \cos \theta}{\Omega}$$



Şekil 3.6 Radyansı belirten şekil.

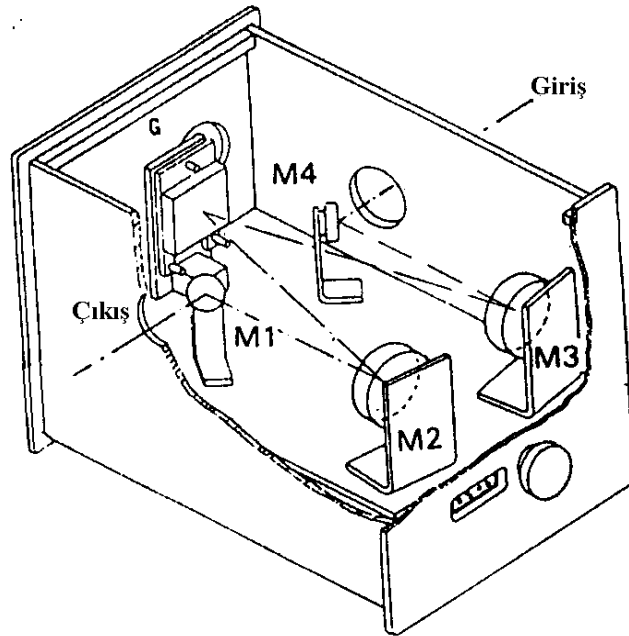
Spektroradyometreler gelen ışığın dalga boyu spektrumunda nasıl dağıldığını belirler. Şekil 3.7 deney düzeneğimizi göstermektedir.



Şekil 3.7 Deney düzeneği.

3.3.2. Monokromatörler

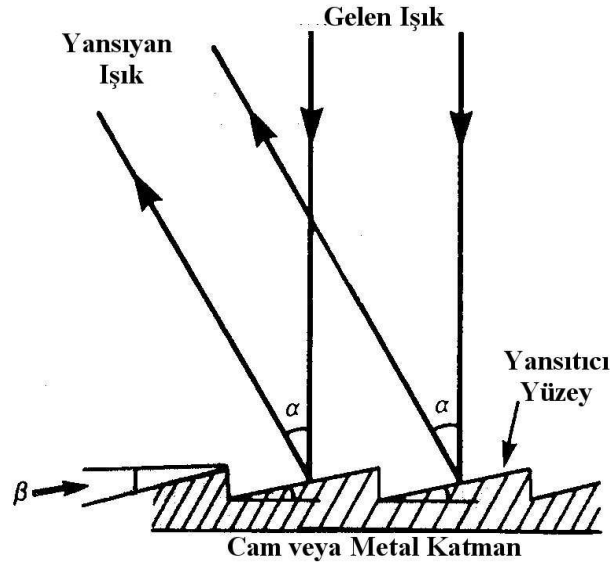
Bir spektrometrik sistemde optik dağıtıcı eleman olarak en sık kullanılan öge gratingdir. Tekli monokromatörler bir grating içerir. Şekil 3.8 tekli bir monokromatörü göstermektedir.



Şekil 3.8 Tekli grating Monokromatör.

Şekil 3.9 kırınım ağını (diffraction grating) gösterir. Paralel yivler gratingin yüzeyini bir merdiveni andıracak şekilde kaplar. Gelen ışık her bir adımın yansıtıcı yüzeyine çarpar. Bitişik basamaklardan yansıyan ışınlar farklı fazlarda çıkış yarığına

ulaşır. Yapıcı girişim sadece $\lambda = d \cdot \sin \alpha$ formülüyle verilen dalga boyu civarındaki bir dar bantta gerçekleşir.



Şekil 3.9 Kırınım ağı.

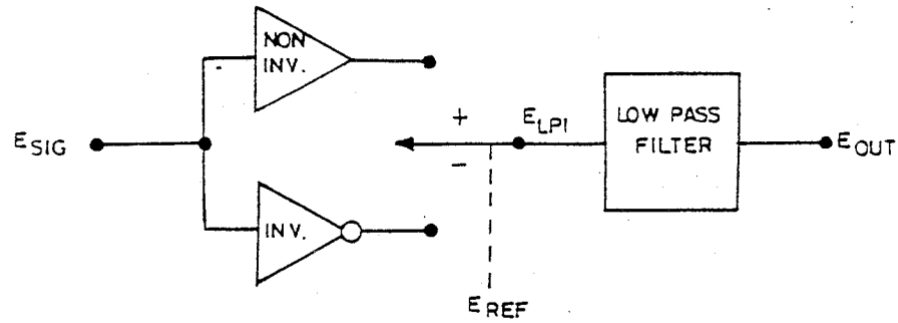
Gratingin kalitesi, boyutu ve giriş yarıklarının genişliği monokromatörün çıkış bant genişliğini belirler. α açısını değiştirmek monokromatörü farklı dalga boylarına ayarlar. Grating β açısına bağlı bir “parlaklık dalga boyunda” (λ_b) en verimlidir. Monokromatör bu dalga boyuna ayarlandığında yansıtıcı yüzeyler giriş yarığından gelen ışığı çıkış yarığına yansıtmak için tam doğru yönelimdedir. Kırınım ağı ve diğer dizayn özellikleri monokromatörün işleyeceği dalga boyu aralığını belirler. Aynı aygıtla sadece kırınım ağına yapılacak bir değişiklik farklı dalga boylarında çalışılabilir. Monokromatörden çıkan ışık detektör üzerine gelir. Detektör soğurduğu güçle orantılı bir elektrik sinyali üretir.

3.3.3. Lock-in amplifier

Detektörün çıkış sinyalini arttırmanın iki metodu vardır. Genel olarak gözlenmesi gereken sinyal çok zayıftır bu yüzden onu spektrometre ile ölçmek çok güçtür. Bu yüzden bazı uygulamalarda bu tür sinyaller bir chopperdan (satur) geçirmek suretiyle arttırılabilir.

İkinci mekanizmada çıkış sinyali bir lock-in amplifier'a beslenir. lock-in amplifierlar genlik ölçümünde ve çok düşük seviyeli AC sinyallerinin faz ölçümünde, gürültü veya girişim nedeniyle çok belirsiz olabilen herhangi bir AC sinyalinin ölçümünde uygulama bulurlar. Bir lock-in amplifier, yüksek seviyeli arka plan gürültüsü içine gömülmüş düşük seviyeli sinyallerinin genliğini doğru olarak ölçen özelleştirilmiş bir AC voltmetresidir.

Lock-in amplifier temel olarak giriş sinyalini bir referans sinyaline karşı kıyaslayan, faz duyarlı bir AC voltmetresidir. Bu kıyaslama faz duyarlı detektör olarak bilinen, Şekil 3.10'te görüleceği gibi bir elektronik polarite çevirici anahtar olarak düşünülebilecek bir devrede meydana gelir.

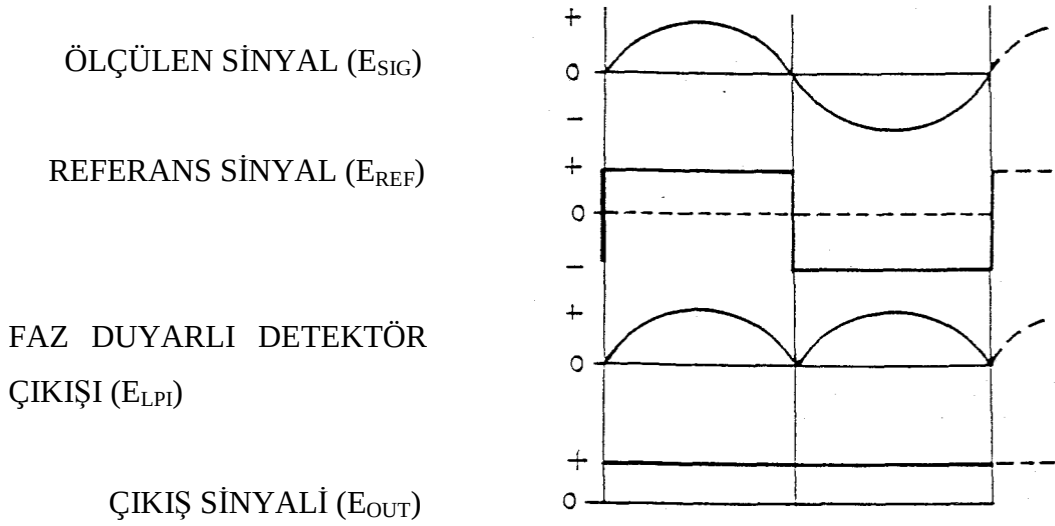


Şekil 3.10 Faz Duyarlı detektör devresi.

Giriş sinyali, ilgilenilen, referans frekansta bilgiye ilaveten rasgele gürültü bileşenleri ve muhtemelen çeşitli farklı frekanslarda sahte sinyaller de içerir. Bu sinyal, uygun amplifikatörler ve hassasiyet kontrolleri içeren sinyal kanalıyla faz duyarlı detektöre uygulanır.

Giriş sinyali ve faz duyarlı detektördeki referans kare dalga arasındaki mevcut olan ilişki Şekil 3.11'de gösterilmiştir. Düzgün ayarlandığında, elektronik polarite çevirici anahtar geçişi girişin uygun bileşeninde meydana gelen polarite çevrimlerine senkronize edilir. Sonuç olarak, uygun bileşen onun pozitif yarım çemberindeyken anahtar onun ters çevirmeyen pozisyonunda olacaktır, uygun

bileşen onun negatif yarım çemberindeyken anahtar ters çeviren pozisyonunda olacaktır.



Şekil 3.11 Sinyaller arasındaki ilişki.

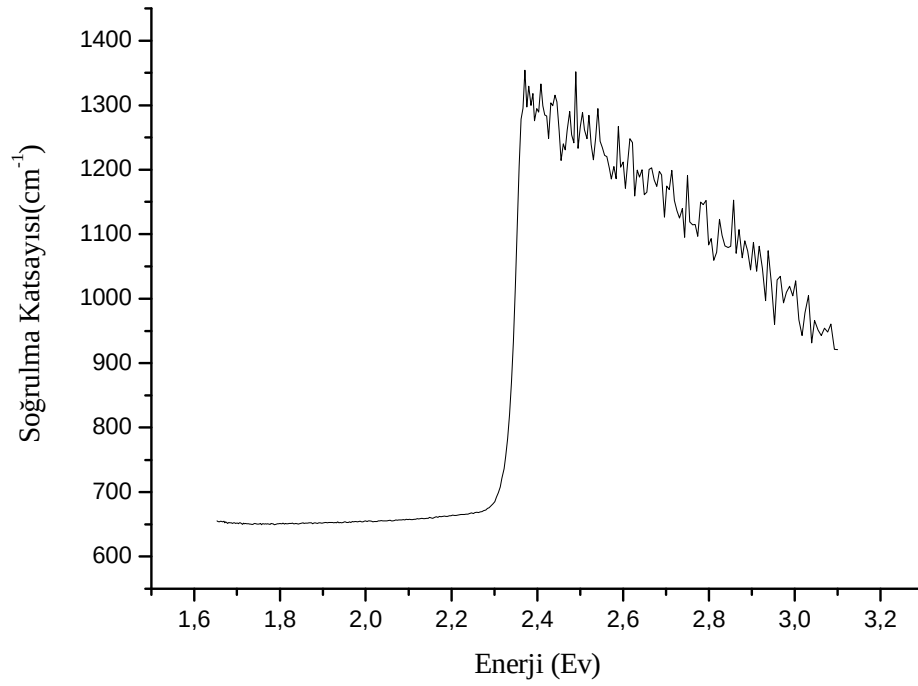
Bu koşullar altında, çıkış, sahte sinyalli ve üst üste binmiş gürültülü bir seri pozitif yarı çemberden meydana gelecektir.

Detektör çıkışı, uygun girişin ortalama değeriyle orantılı bir DC voltajı üretmek için bir low pass filtreden geçirilir. Filtreleme işleminde sahte sinyaller ve rasgele gürültü büyük ölçüde önlenmiş olur.

4.DENEY SONUÇLARI

4.1.TlInS₂'nin Soğrulma Ölçümleri

Şekil 4.1'de TlInS₂ için oda sıcaklığında elde ettiğimiz soğrulma katsayısına karşı enerji grafiği verilmiştir.



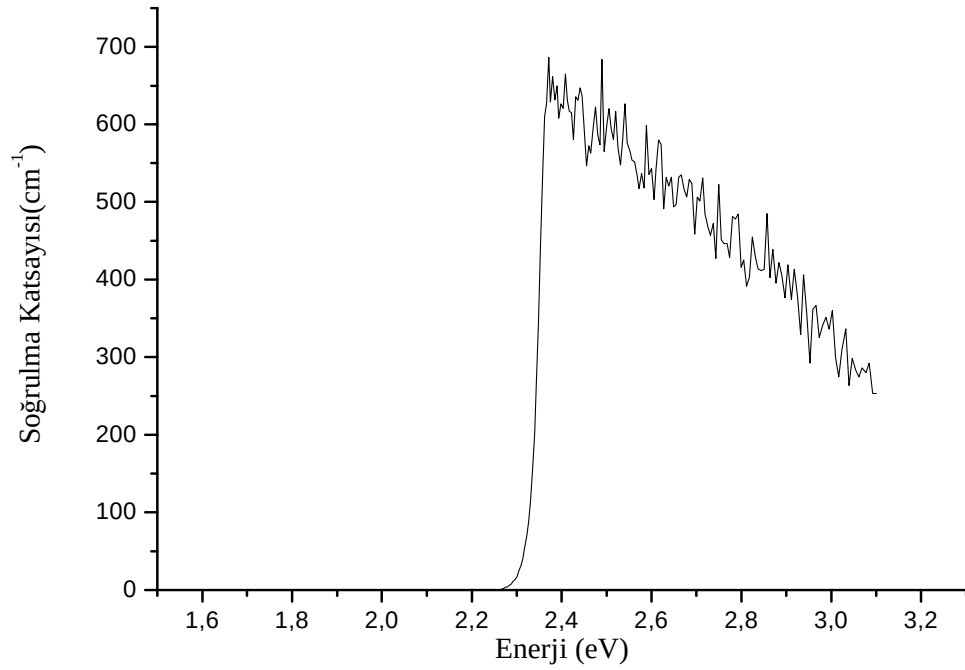
Şekil 4.1 TlInS₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.

Grafikten görüleceği üzere soğrulma katsayısı bütün enerji değerleri için sıfıra varmamaktadır. Buradan şunu düşünebiliriz soğrulma sürecine etki eden iki mekanizma vardır ve bunlardan birincisi bantlar arasında gerçekleşen geçişlerden ikincisi ise diğer mekanizmalardan kaynaklanmaktadır. Bunu şu şekilde ifade edebiliriz:

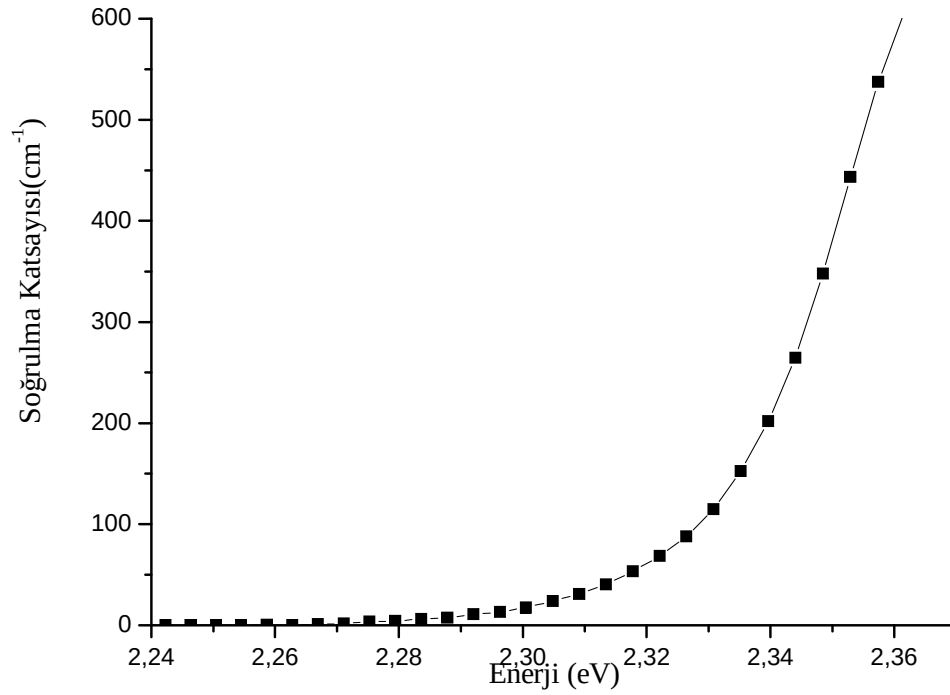
$$\alpha = \alpha_i + \alpha_o$$

α_i bantlar arasında geiş sonucu soğrulmayı, α_o ise diğerk mekanizmalardan kaynaklanan soğrulmayı temsil eder. Temel soğrulma kıyısı altında $\alpha = \alpha_o$ iken temel soğrulma kıyısından yüksek enerjiye sahip fotonlar için α_i daha baskın hale gelir [Rahman and Belal, 2000]. Çalışmamızda kullanmamız gereken α_i 'yi elde etmek için α_o ile gösterdiğimiz düşük enerji kısmını α 'dan çıkardık. Fakat elde ettiğimiz deęerleri yine soğrulma katsayısı olarak α ile temsil edeceğiz.

Öncelikle kristalin dolaylı bant aralığının deęerini, geişin izinli mi yoksa yasaklı mı olduğunu araştırmakla yola çıkacağız. Bunu bulmak için hem üç boyutlu model hem de iki boyutlu modelde incelenmesi gereken verilerin grafiklerini aşağıda vereceğiz.



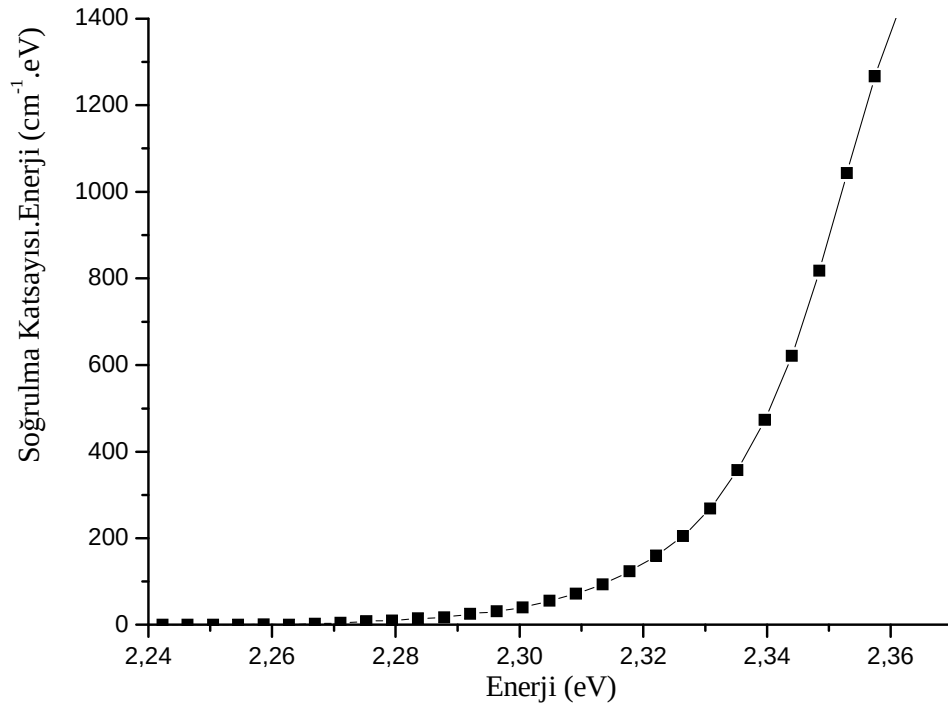
Şekil 4.2 TlInS₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiğı (başlangıç sıfırdan alınmış hali).



Şekil 4.3 TlInS₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiğinin ayrıntılı gösterimi.

İnceleme sırasında temel soğrulma kıyısı üzerinde çalışacağımızdan soğrulma katsayısının düşük enerji ve yüksek enerji parçalarını gözardı ederek Şekil 4.3.'te gösterilen kısım üzerinde duracağız.

Üç boyutlu modelle başlayacak olursak, bu modelde soğrulma sabiti α ile gelen fotonun enerjisi $\hbar\omega$ 'nın çarpımına karşı enerji $\hbar\omega$ grafiklerinin incelendiğini hatırlatmamız gerekir. Şekil 4.4 de bunu göstermektedir.



Şekil 4.4 TlInS₂ için $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği.

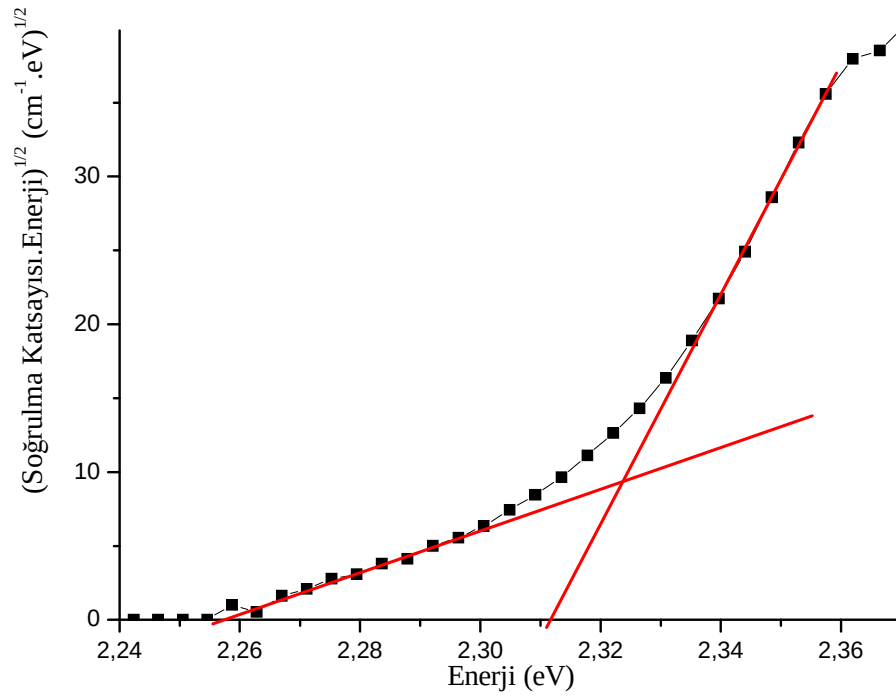
Önceki bölümde belirttiğimiz gibi üç boyutlu modelde izinli geçiş için $\alpha\hbar\omega$ $(\hbar\omega - E_g \mp \hbar\omega_c)^2$ ile orantılıydı, bundan dolayı $(\alpha\hbar\omega)^{\frac{1}{2}}$ 'ye karşı $\hbar\omega$ grafiğimizin lineer parçalarından gerekli katsayıları ve enerji değerlerini öncelikle bularak, $\alpha\hbar\omega$ 'ye karşı $\hbar\omega$ grafiğini çizecek ve deney verileriyle elde ettiğimiz grafiklerle karşılaştıracacağız.

Şekil 4.5'te iki lineer parçadan oluşmuş bir doğru görüyoruz. Sol taraftaki az eğimli parçanın enerji eksenine kesiştiği nokta $E_g - \hbar\omega_c$ değerini verir, sağ taraftaki doğrunun uzatılması ile elde edilen değer de $E_g + \hbar\omega_c$ dir. Grafikten elde ettiğimiz sonuçlar şöyledir:

$$E_g - \hbar\omega_c = 2,2576 \text{ eV} , E_g + \hbar\omega_c = 2,3117 \text{ eV} ,$$

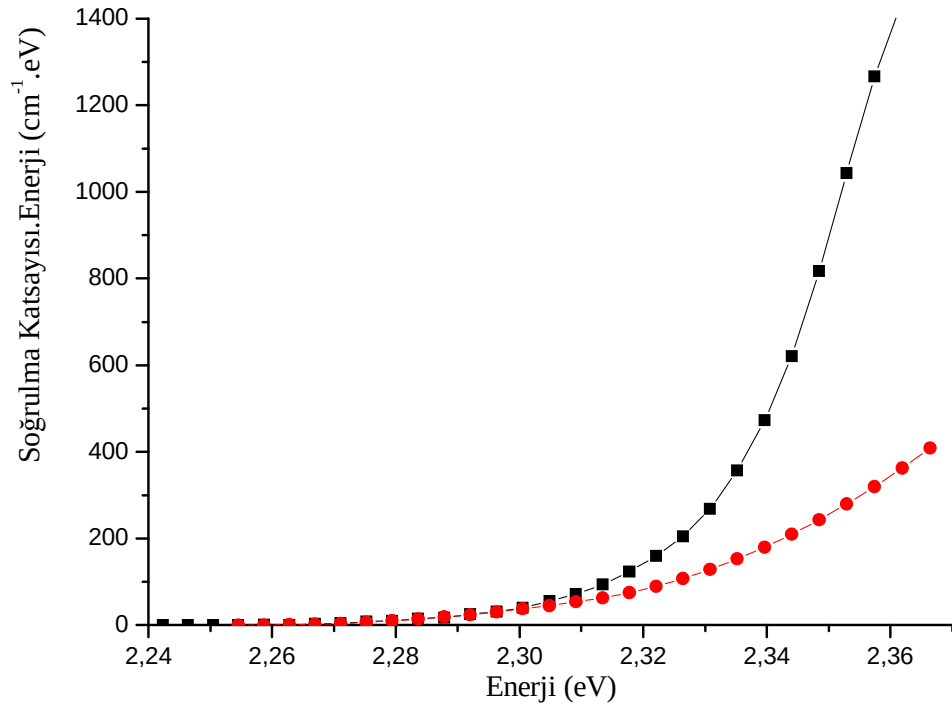
$$E_g = 2,2846 \text{ eV} , \hbar\omega_c = 0,027 \text{ eV}$$

$$C_{ia} = 36973 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$$

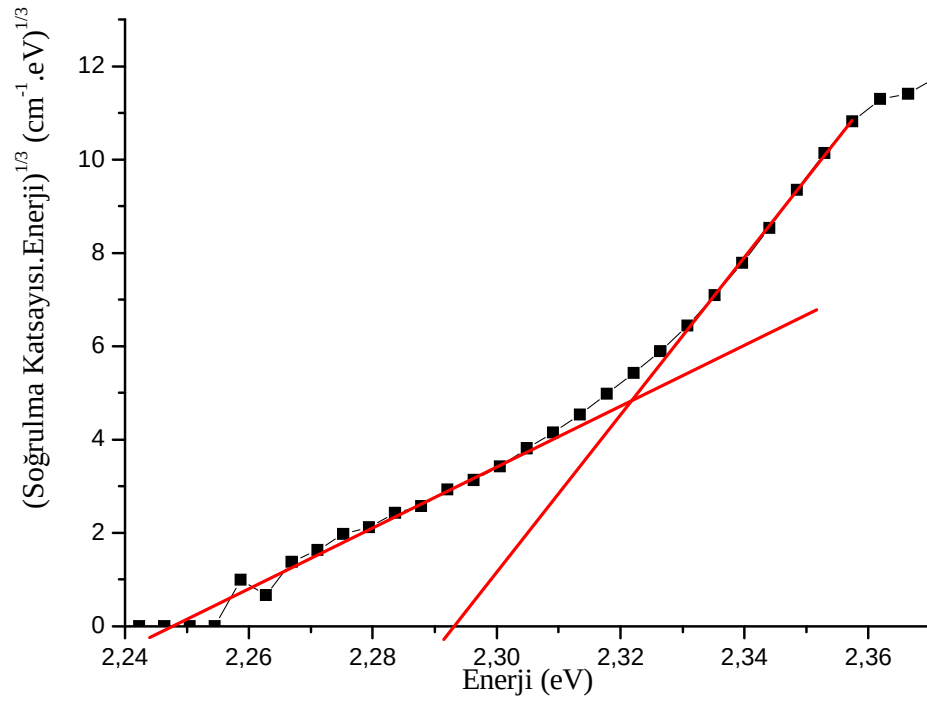


Şekil 4.5 TlInS₂ için $(\alpha \hbar \omega)^{1/2} - \hbar \omega$ grafiği.

Elde ettiğimiz bu verilerle çizdiğimiz grafik ve deney sonucu çizilen grafik birlikte Şekil 4.6'da verilmiştir.



Şekil 4.6 TlInS₂ için Şekil 4.5'ten elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği.



Şekil 4.7 TlInS₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{1/3} - \hbar\omega$ grafiği.

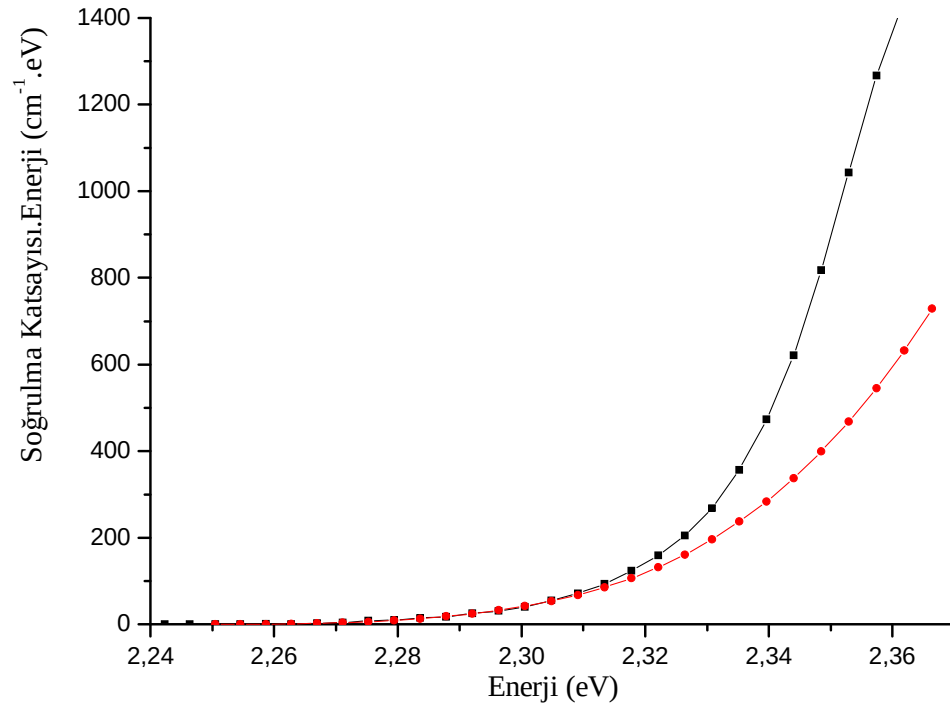
Üç boyutlu modelde yasaklı geçiş için $\alpha\hbar\omega$, $(\hbar\omega - E_g \mp \hbar\omega_c)^3$ ile orantılıydı, bundan dolayı Şekil 4.7’de görülen $(\alpha\hbar\omega)^{\frac{1}{3}}$ ’ye karşı $\hbar\omega$ grafiğini çizdik. Grafikten elde ettiğimiz sonuçlar şöyledir:

$$E_g - \hbar\omega_c = 2,2473\text{eV}, E_g + \hbar\omega_c = 2,2932\text{eV},$$

$$E_g = 2,2702\text{eV}, \hbar\omega_c = 0,023\text{eV}$$

$$C_{if} = 395046\text{cm}^{-1}\text{eV}^{-2}$$

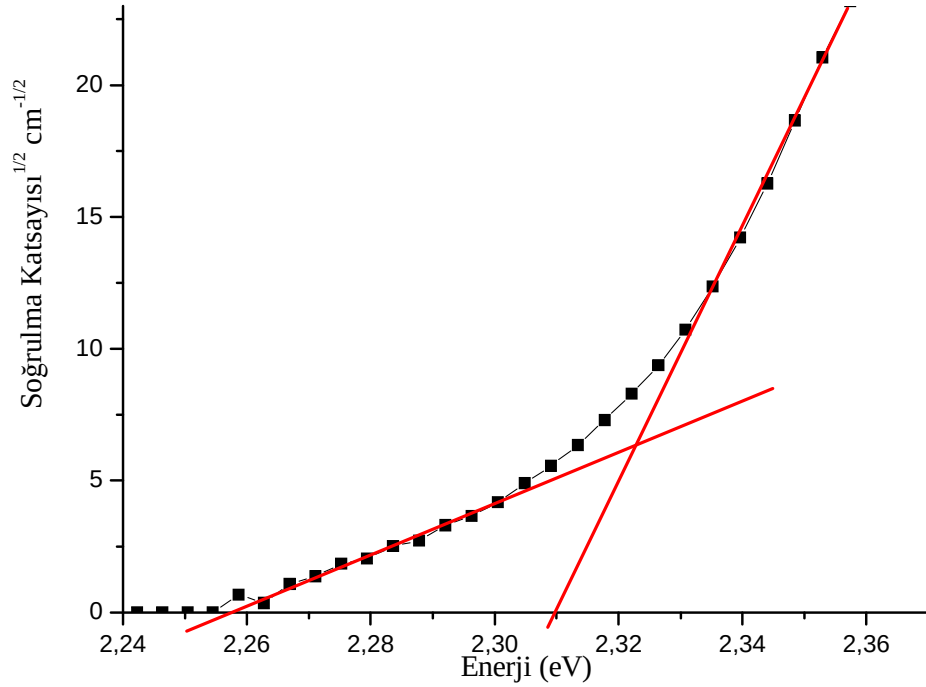
Elde ettiğimiz bu verilerle çizdiğimiz grafik ve deney sonucu çizilen grafiğin karşılaştırılması Şekil 4.8’te verilmiştir.



Şekil 4.8 TlInS₂ için Şekil 4.7’den elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği.

İkinci olarak iki boyutlu modele geçecek olursak öncelikle inceleyeceğimiz grafiklerde α ya karşı $\hbar\omega$ değerleriyle çalışacağımızı hatırlatmakta yarar vardır. Bu modelde izinli geçiş için verilen eşitlikte α 'nın $(\hbar\omega - E_g \mp \hbar\omega_c)$ ile orantılı olduğu verilmişti, fakat Şekil 4.3'ten de görüleceği üzere soğrulma sabiti ile enerji arasında böyle bir lineer bağıntı yoktur.

Yasaklı geçiş için soğrulma sabiti ile enerji arasında $(\hbar\omega - E_g \mp \hbar\omega_c)^2$ bağıntısı mevcuttu. Şekil 4.9'da $\sqrt{\alpha}$ 'ya karşı $\hbar\omega$ grafiği verilmiştir.



Şekil 4.9 TlInS₂ için $\alpha^{1/2} - \hbar\omega$ grafiği.

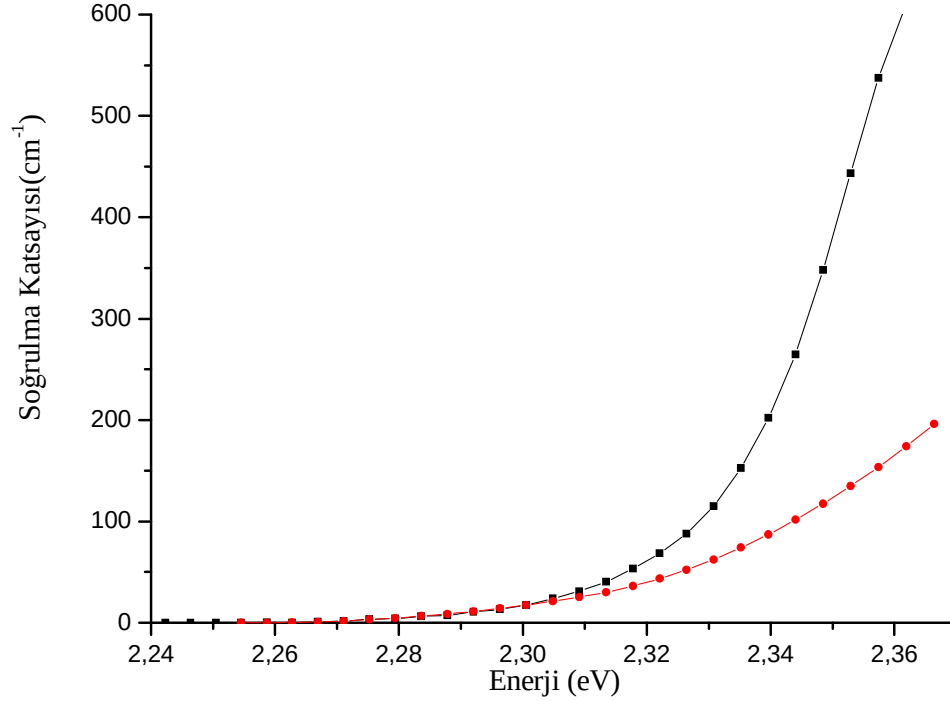
Bu grafikte de görüldüğü üzere iki lineer parçalı bir doğru elde ettik, bu doğrulardan elde ettiğimiz sonuçlar ise şöyledir:

$$E_g - \hbar\omega_c = 2,2575 \text{ eV} , E_g + \hbar\omega_c = 2,3098 \text{ eV} ,$$

$$E_g = 2,2836 \text{ eV} , \hbar\omega_c = 0,02615 \text{ eV}$$

$$C_{if} = 16588,3 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-2}$$

Bu değerlerden yararlanarak çizdiğimiz grafik ve deney sonuçlarından çizilen grafik birlikte Şekil 4.10'da verilmiştir.



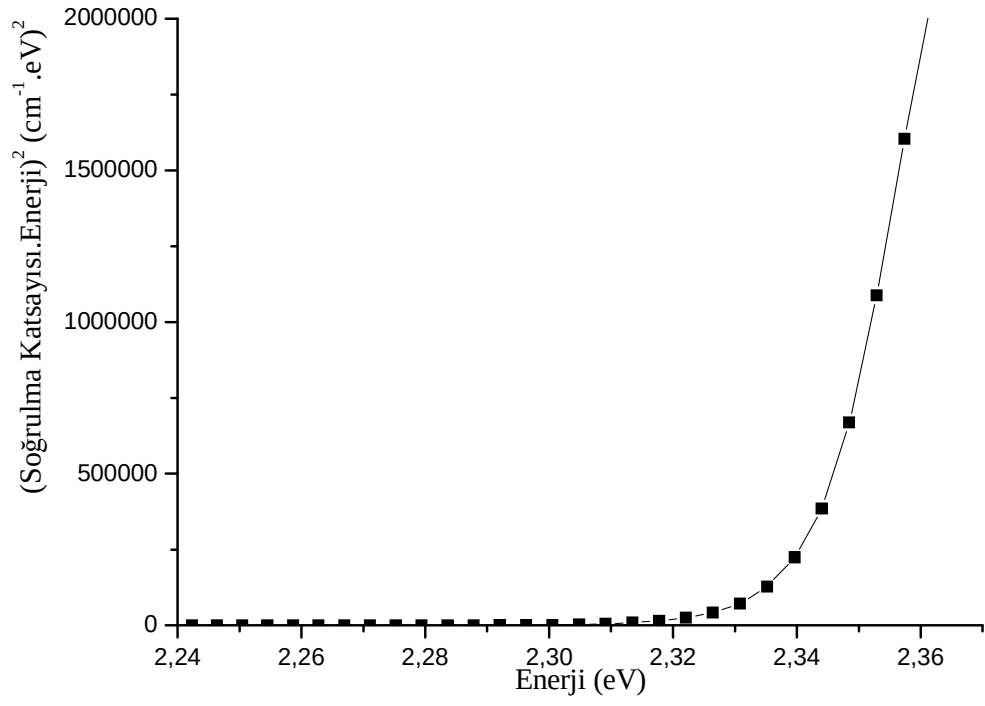
Şekil 4.10 TlInS₂ için Şekil 4.9'dan elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.

Şimdi ise doğrudan geçiş bant aralığının değerini ve türünü belirlemeye çalışacağız.. Bölüm 2.2 de belirttiğimiz gibi doğrudan geçişler de izinli ve yasaklı olmak üzere ikiye ayrılırlar. Öncelikle izinli geçiş denklemlerine göre yapacağımız hesaplar üzerinde duracağız.

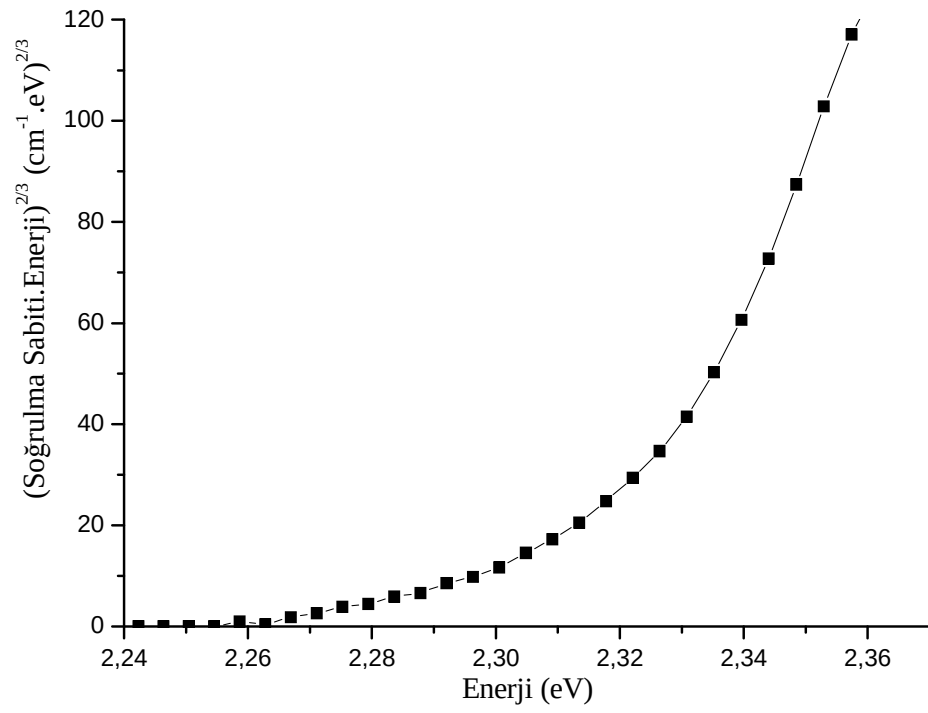
İzinli geçişte $\alpha_{da} = \frac{C_{da}}{\hbar\omega} (\hbar\omega - \epsilon_g)^{\frac{1}{2}}$ idi. Bu yüzden Şekil 4.11'de gösterilen

grafik çizilmiştir. Yasaklı geçiş denklemlerine göre ise $\alpha_{df} = \frac{C_{df}}{\hbar\omega} (\hbar\omega - \epsilon_g)^{\frac{3}{2}}$ idi. Bu

ifadeye göre gerekli değerleri bulmak için çizilen grafik de Şekil 4.12'de çizilmiştir.



Şekil 4.11 TlInS₂ için $(\alpha\hbar\omega)^2 - \hbar\omega$ grafiği.



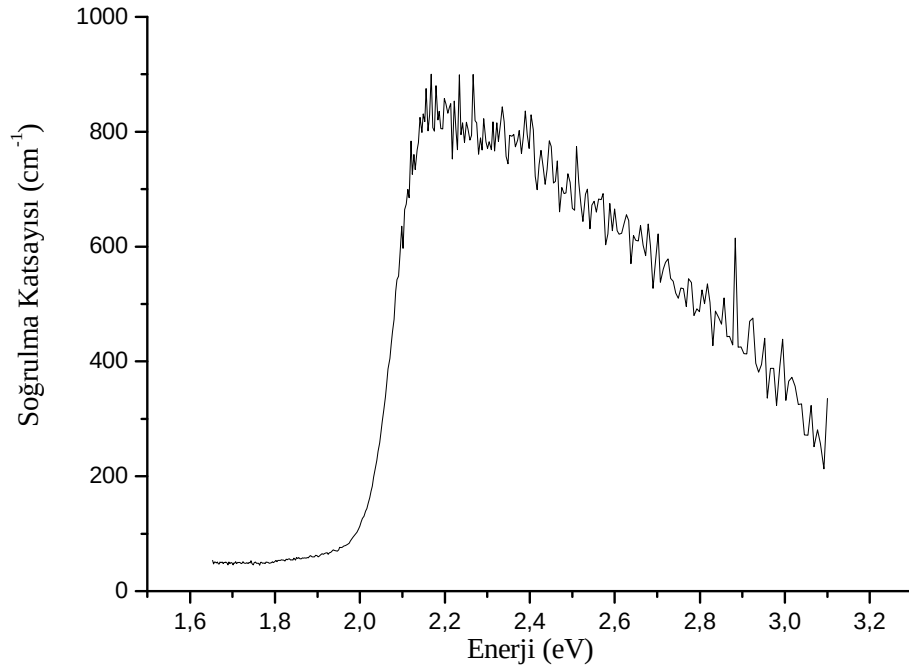
Şekil 4.12 TlInS₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{2/3} - \hbar\omega$ grafiği.

Her iki grafikten de görüleceği üzere temel soğrulma kıyısında enerji eksenine kesişecek bir düz çizgi oluşmamıştır. Bundan dolayı diyebiliriz ki TlInS_2 için temel soğrulma kıyısında doğrudan bir geçiş söz konusu değildir.

Yaptığımız bu incelemeden yararlanarak diyebiliriz ki TlInS_2 kristali için oda sıcaklığında temel soğrulma kıyısında en olası geçiş türü dolaylı yasaklı geçiştir. Üç boyutlu modelde dolaylı bant aralığı $E_g^i = 2,2702 \text{ eV}$, iki boyutlu modelde dolaylı bant aralığı $E_g^i = 2,2836 \text{ eV}$ olarak bulunmuştur. Bu geçişlerde yardımcı olan fononların enerjisi de sırasıyla $\hbar\omega_c = 0,023 \text{ eV}$ ve $\hbar\omega_c = 0,02615 \text{ eV}$ değerlerindedir.

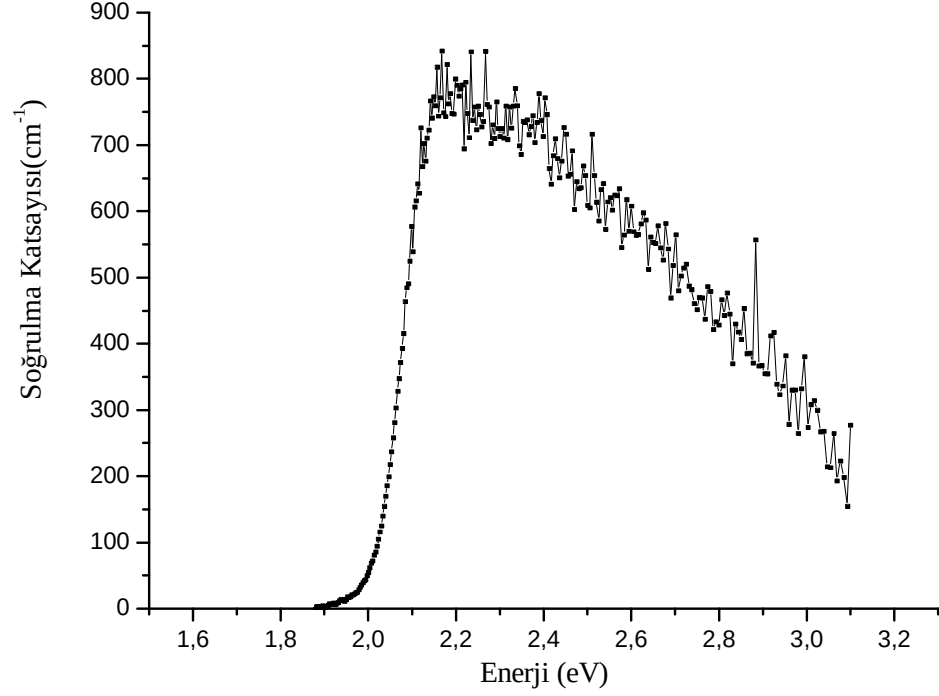
4.2. TlGaSe_2 'nin Soğrulma Ölçümleri

Şekil 4.13'de TlGaSe_2 için oda sıcaklığında soğrulma katsayısına karşı enerji grafiği verilmiştir.

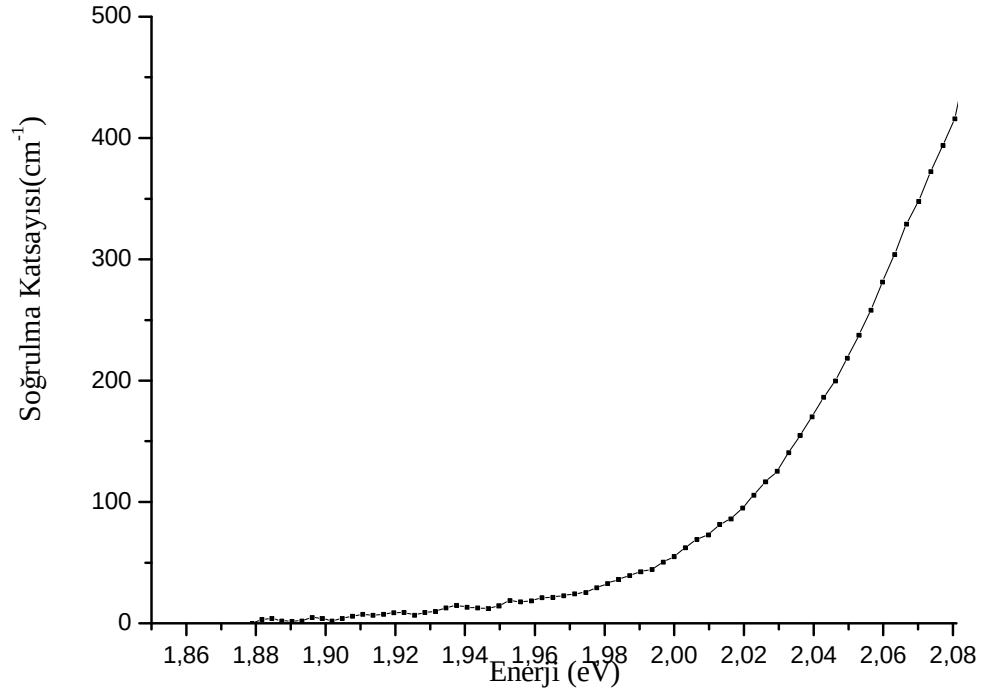


Şekil 4.13 TlGaSe_2 için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.

Bu kristalin soğrulma verisinin başlangıcını sıfıra aldığımız grafik Şekil 4.14'de gösterilmiştir.

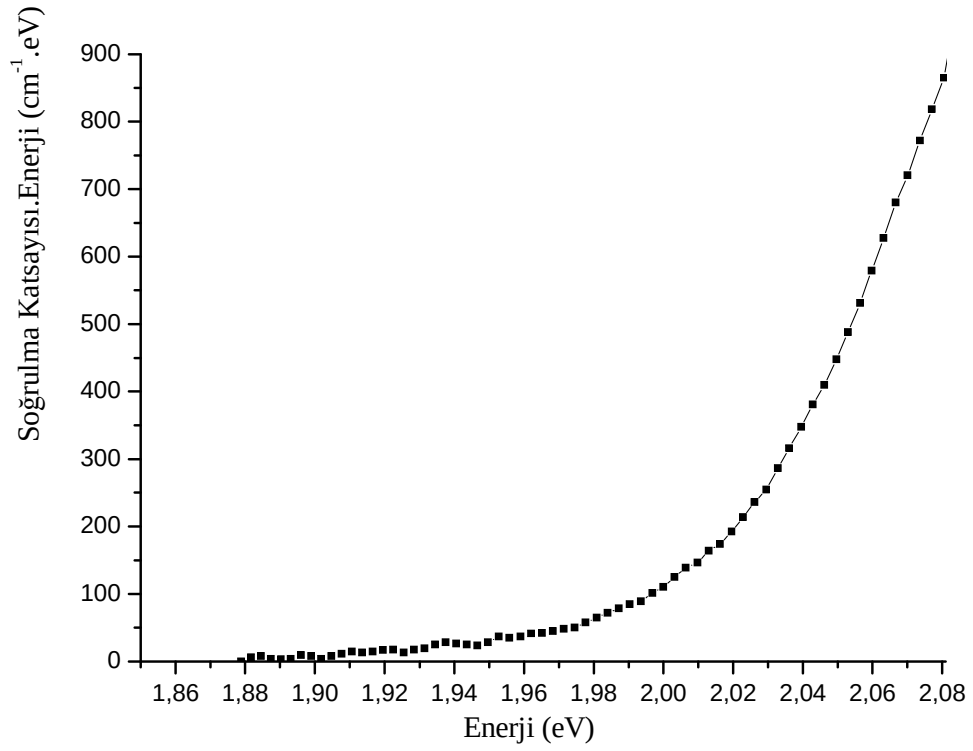


Şekil 4.14 TlGaSe₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği (başlangıç sıfırdan alınmış hali).



Şekil 4.15 TlGaSe₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiğinin ayrıntılı gösterimi.

Üç boyutlu modelle başlayacak olursak, Şekil 4.16'te $\alpha\hbar\omega$ 'ya karşı $\hbar\omega$ grafi verilmiştir.



Şekil 4.16 TlGaSe₂ için $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği.

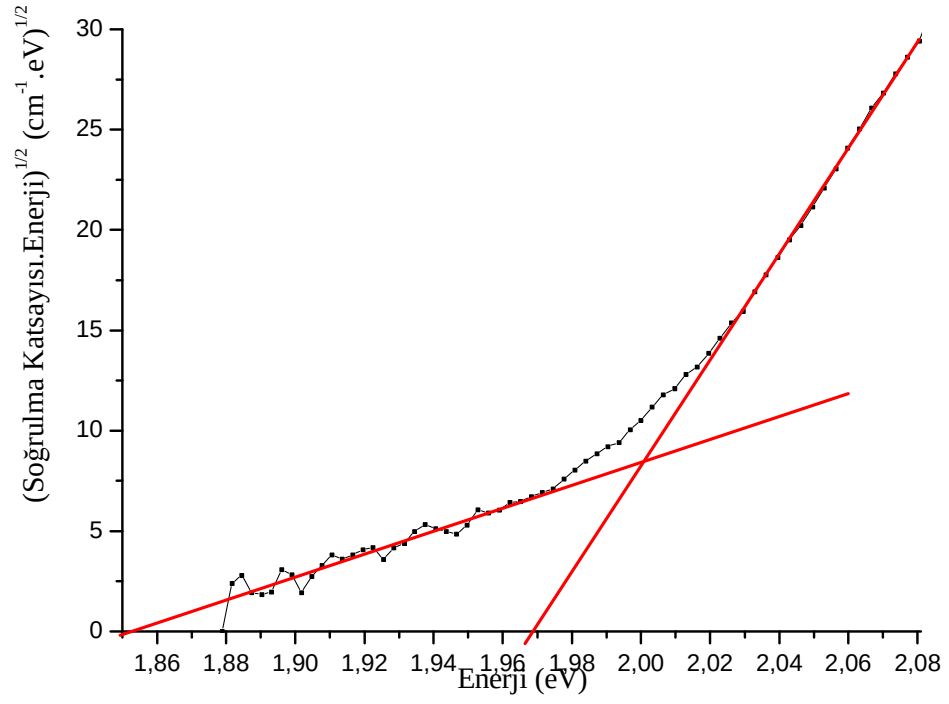
Şekil 4.17’de verilen $(\alpha\hbar\omega)^{\frac{1}{2}}$ ’ye karşı $\hbar\omega$ grafiğinin lineer parçalarından elde edilen gerekli katsayılar ve enerji değerleri şöyledir:

$$E_g - \hbar\omega_c = 1,853\text{eV} , E_g + \hbar\omega_c = 1,9688\text{eV} ,$$

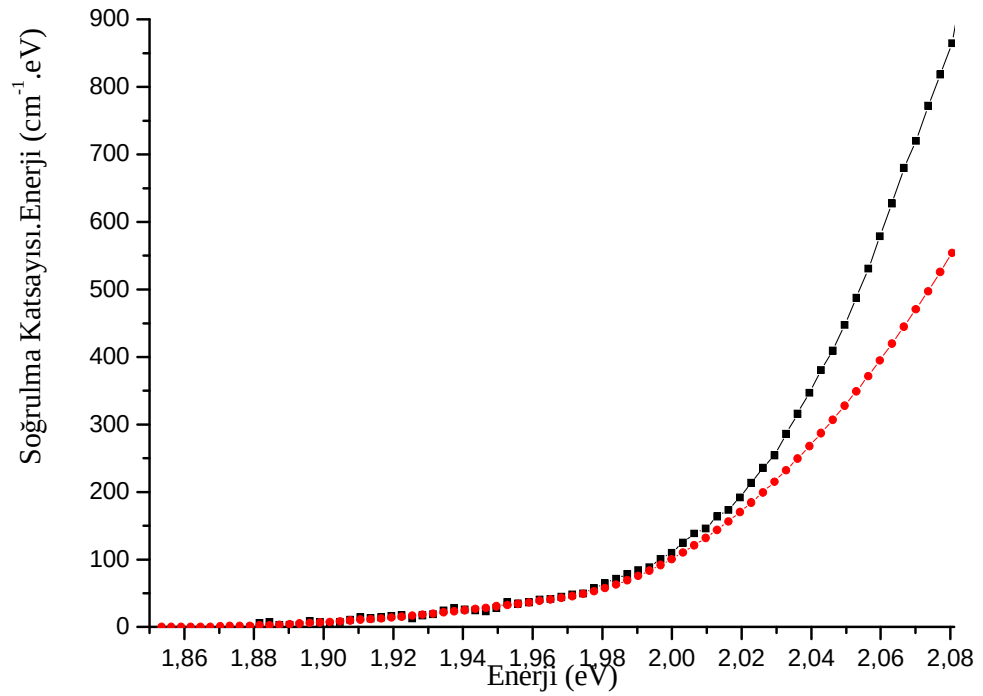
$$E_g = 1,911\text{eV} , \hbar\omega_c = 0,0579\text{eV}$$

$$C_{ia} = 27536,3\text{cm}^{-1}\text{eV}^{-1}$$

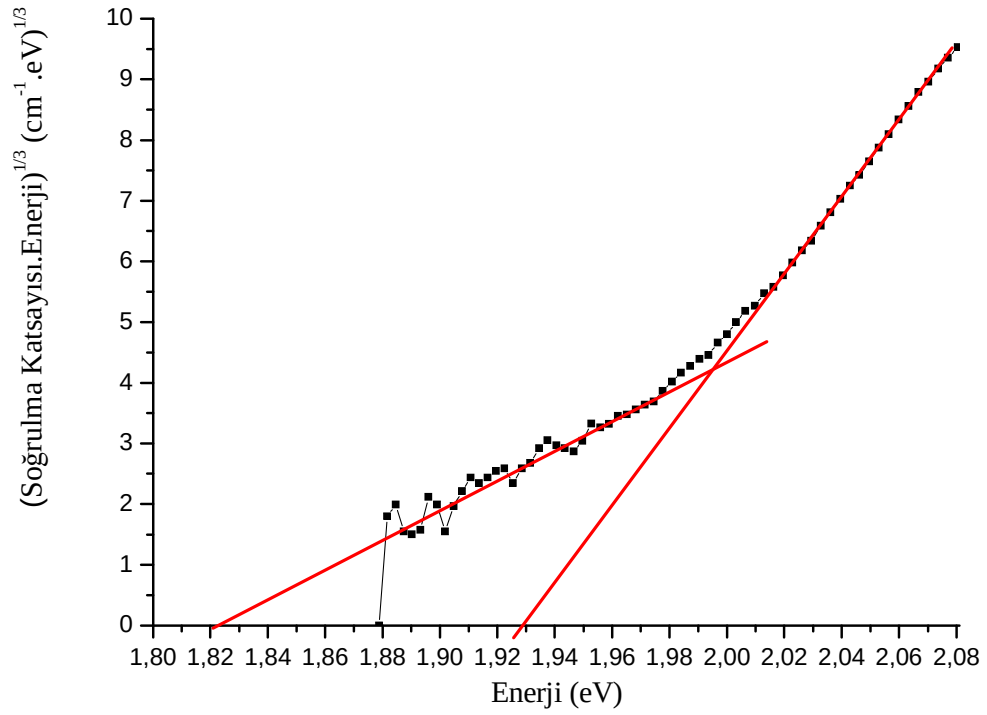
Elde ettiğimiz bu verilerle çizdiğimiz grafik ve deney sonucu çizilen grafik birlikte Şekil 4.18’de verilmiştir.



Şekil 4.17 TlGaSe₂ için $(\alpha \hbar \omega)^{1/2} - \hbar \omega$ grafiği.



Şekil 4.18 TlGaSe₂ için Şekil 4.17'den elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha \hbar \omega - \hbar \omega$ grafiği.



Şekil 4.19 TlGaSe₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{1/3} - \hbar\omega$ grafiği.

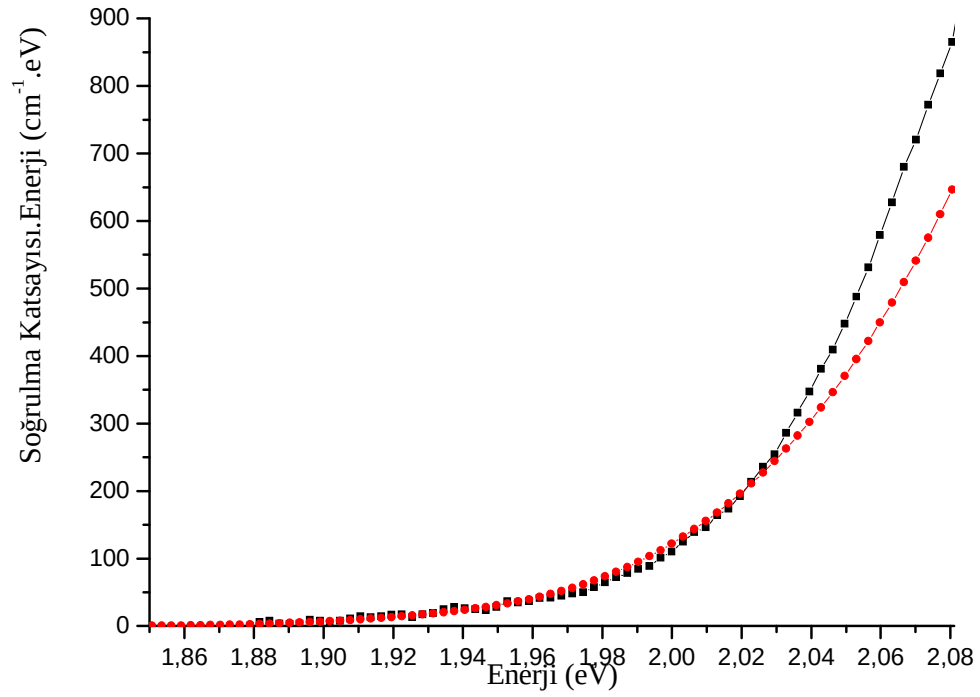
Üç boyutlu modelde dolaylı yasaklı geçiş değerlerini bulmak için Şekil 4.19'da görülen $(\alpha\hbar\omega)^{1/3}$ 'ye karşı $\hbar\omega$ grafiğini çizdik. Grafikten elde ettiğimiz sonuçlar:

$$E_g - \hbar\omega_c = 1,8227 \text{ eV} , E_g + \hbar\omega_c = 1,9289 \text{ eV} ,$$

$$E_g = 1,8758 \text{ eV} , \hbar\omega_c = 0,0531 \text{ eV}$$

$$C_{if} = 99184,6 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-2}$$

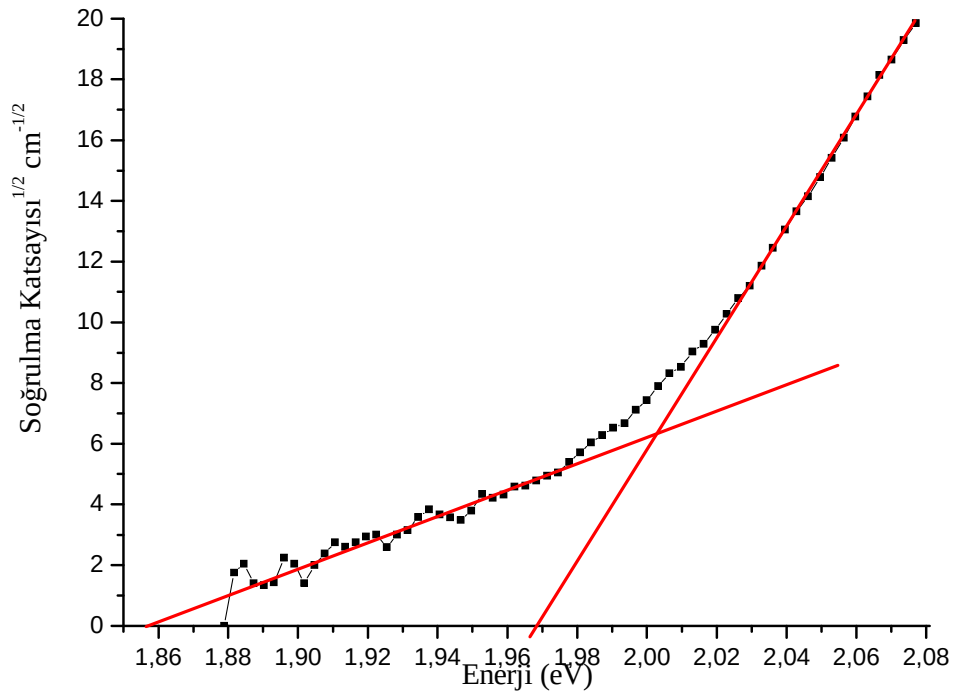
Elde ettiğimiz bu verilerle çizdiğimiz grafik ve deney sonucu çizilen grafik birlikte Şekil 4.20'de verilmiştir.



Şekil 4.20 TlGaSe₂ için Şekil 4.19’den elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha \hbar\omega$ - $\hbar\omega$ grafiği.

İki boyutlu modelde izinli geçiş için verilen eşitlikte α ’nın $(\hbar\omega - E_g \mp \hbar\omega_c)$ ile orantılı olduğunu belirtmiştik. TlInS₂’de olduğu gibi TlGaSe₂ için de soğrulma sabiti ile enerji arasında böyle bir lineer bağıntı yoktur. Bu Şekil 4.15’ten anlaşılabilir.

Yasaklı geçiş bağıntısına geçecek olursak soğrulma sabiti ile enerji arasında $(\hbar\omega - E_g \mp \hbar\omega_c)^2$ bağıntısı mevcuttu. Şekil 4.21’de $\sqrt{\alpha}$ ’ya karşı $\hbar\omega$ grafiği verilmiştir.



Şekil 4.21 TlGaSe₂ için $\alpha^{1/2} - \hbar\omega$ grafiği.

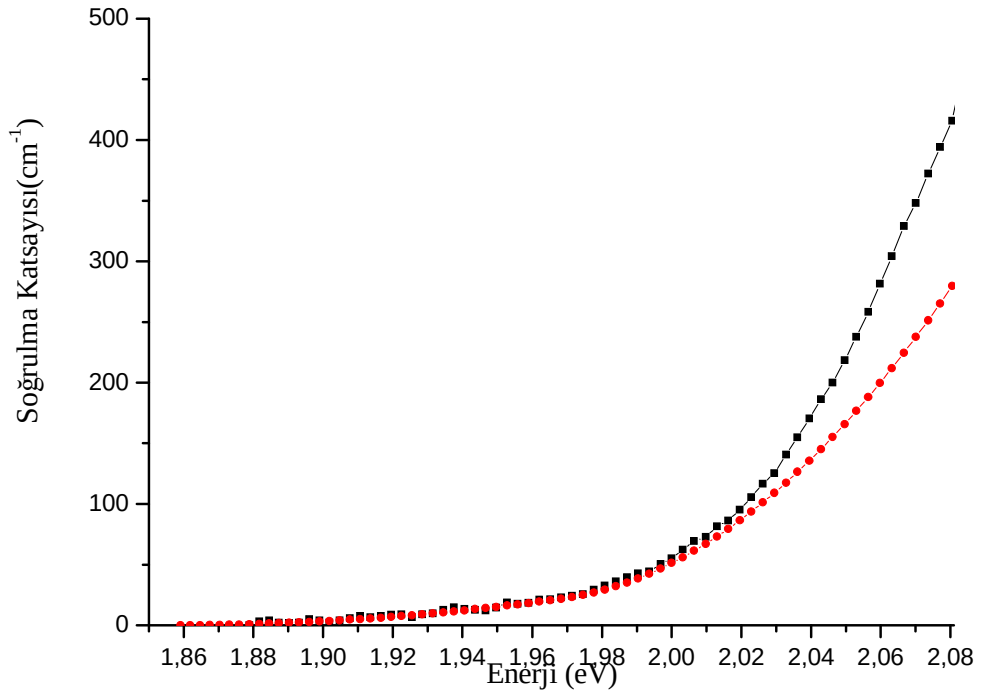
Bu grafikte de görüldüğü üzere iki lineer parçalı bir doğru elde ettik, bu doğrulardan elde ettiğimiz sonuçlar ise şöyledir:

$$E_g - \hbar\omega_c = 1,8572 \text{ eV}, \quad E_g + \hbar\omega_c = 1,9685 \text{ eV},$$

$$E_g = 1,9128 \text{ eV}, \quad \hbar\omega_c = 0,05565 \text{ eV}$$

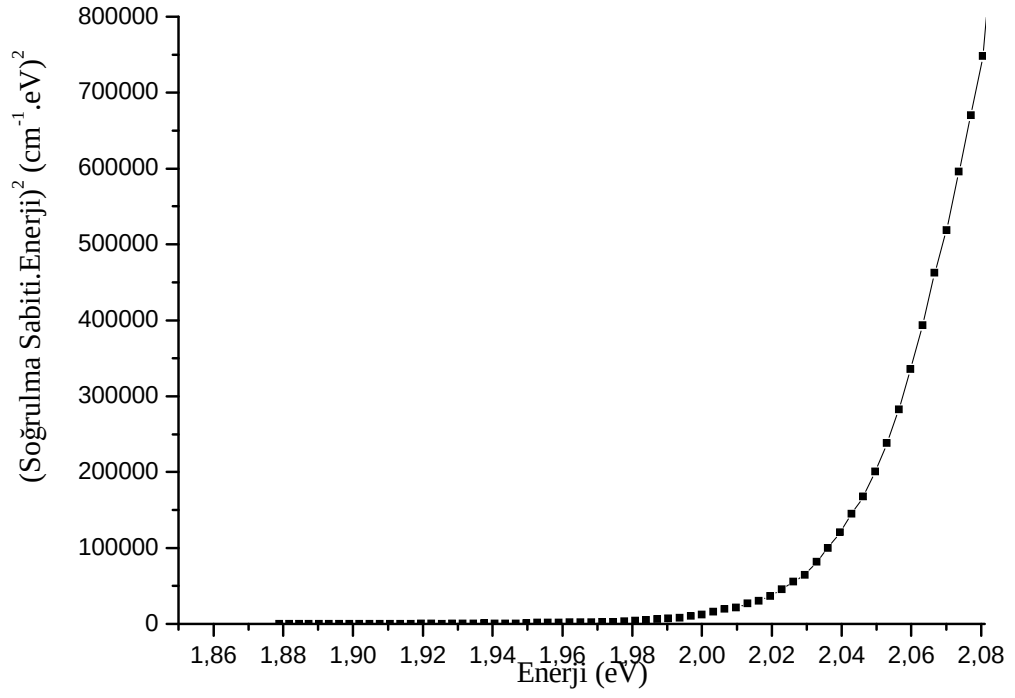
$$C_{if} = 13472,4 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-2}$$

Bu değerlerden yararlanarak çizdiğimiz grafik ve deney sonuçlarından çizilen grafik birlikte Şekil 4.22’de verilmiştir.

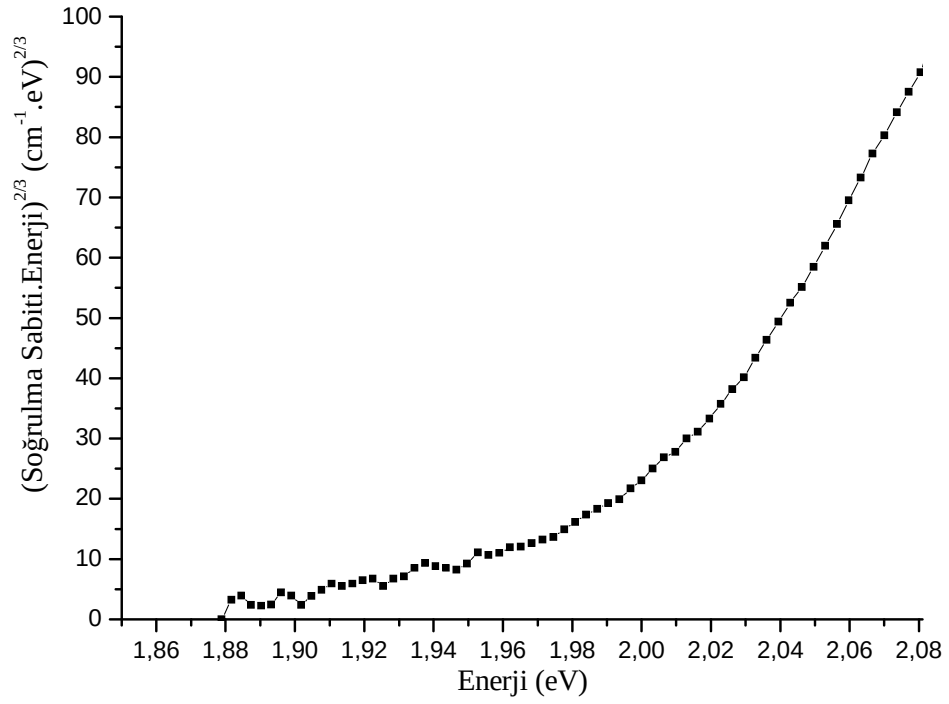


Şekil 4.22 TlGaSe₂ için Şekil 4.21’den elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.

TlGaSe₂ için doğrudan geçiş incelemesine başlayacak olursak. Doğrudan izinli geçiş için Şekil 4.23’teki grafik, doğrudan yasaklı geçiş için ise Şekil 4.24’teki grafik çizilmiştir. Her iki grafikte de TlInS₂’te olduğu gibi temel soğrulma kıyısında enerji eksenine kesişecek lineer bir çizgi oluşmamıştır. Bundan dolayı TlGaSe₂ için temel soğrulma kıyısında doğrudan bir geçiş söz konusu değildir.



Şekil 4.23 TlGaSe₂ için $(\alpha\hbar\omega)^2 - \hbar\omega$ grafiği.

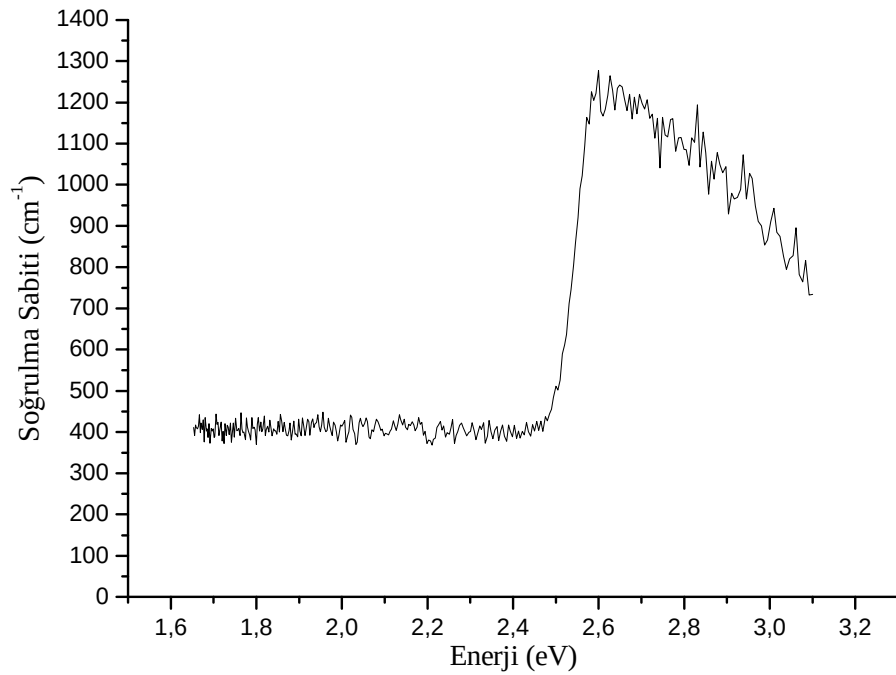


Şekil 4.24 TlGaSe₂ için $(\alpha\hbar\omega)^{2/3} - \hbar\omega$ grafiği.

Elde ettiğimiz bu sonuçlara dayanarak diyebiliriz ki TlGaSe₂ kristali için de oda sıcaklığında temel soğrulma kıyısında en olası geçiş türü dolaylı yasaklı geçiştir. Üç boyutlu modelde dolaylı bant aralığı $E_g^i = 1,8758 \text{ eV}$, iki boyutlu modelde dolaylı bant aralığı $E_g^i = 1,9128 \text{ eV}$ olarak bulunmuştur. Bu geçişlerde yardımcı olan fononların enerjisi de sırasıyla $\hbar\omega_c = 0,0531 \text{ eV}$ ve $\hbar\omega_c = 0,05565 \text{ eV}$ değerlerindedir.

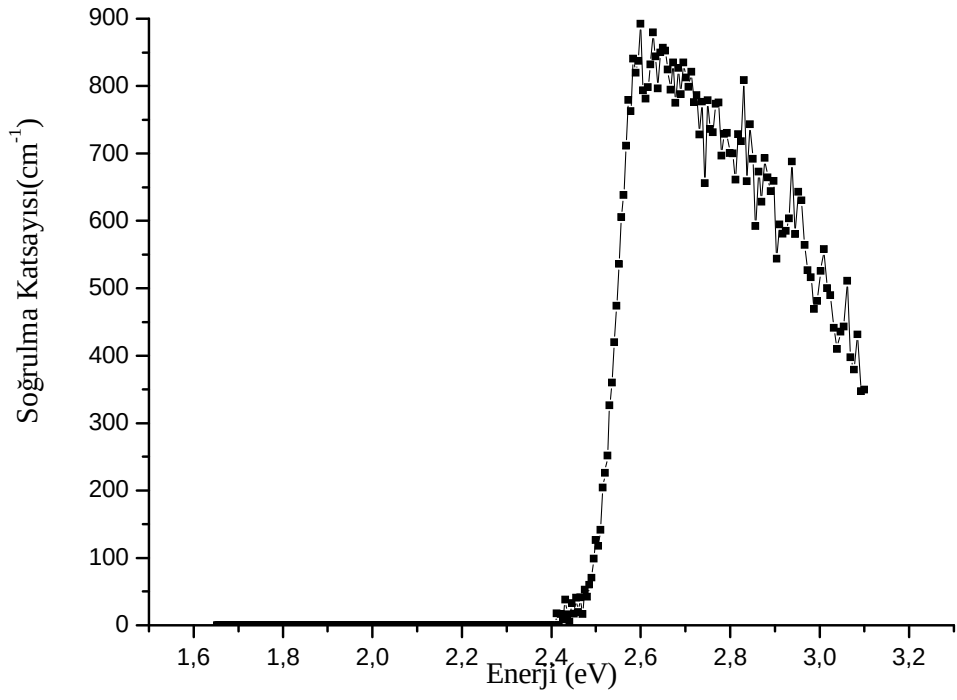
4.3. TlGaS₂'nin Soğrulma Ölçümleri

Şekil 4.25'te soğrulma sabitine karşı enerji grafiği verilmiştir.

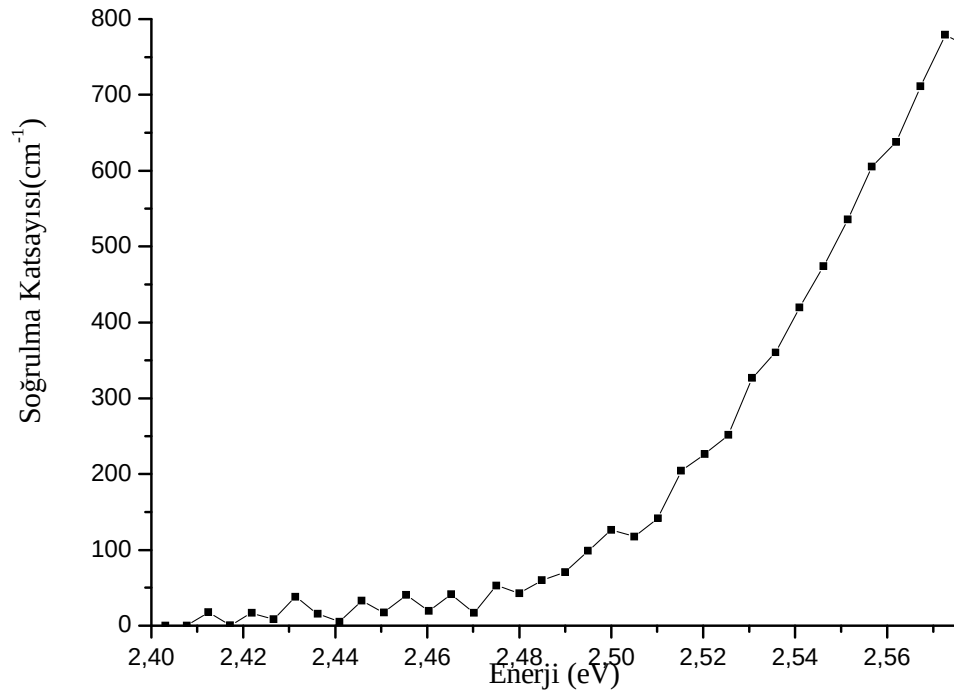


Şekil 4.25 TlGaS₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.

Bu kristalin soğrulma verisinin başlangıcını sıfıra aldığımız grafik Şekil 4.26'da gösterilmiştir.

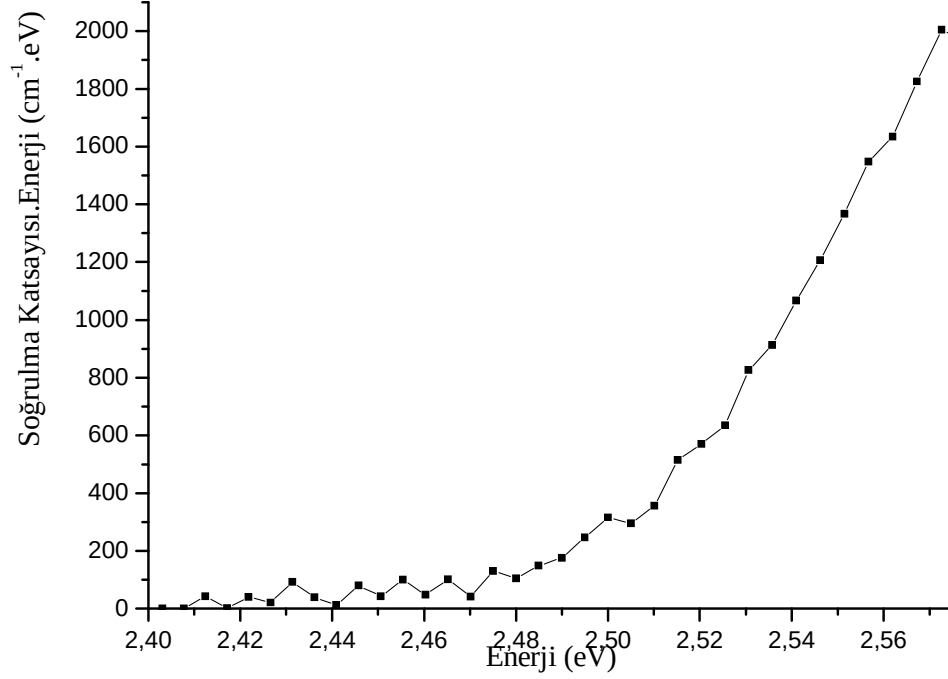


Şekil 4.26 TlGaS₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiği (başlangıç sıfırdan alınmış hali).



Şekil 4.27 TlGaS₂ için $\alpha - \hbar\omega$ grafiğinin ayrıntılı gösterimi.

Şekil 4.28'te soğrulma katsayısı ile enerjinin çarpımına karşı enerji grafiği verilmiştir.



Şekil 4.28 TlGaS₂ için $\alpha\hbar\omega - \hbar\omega$ grafiği.

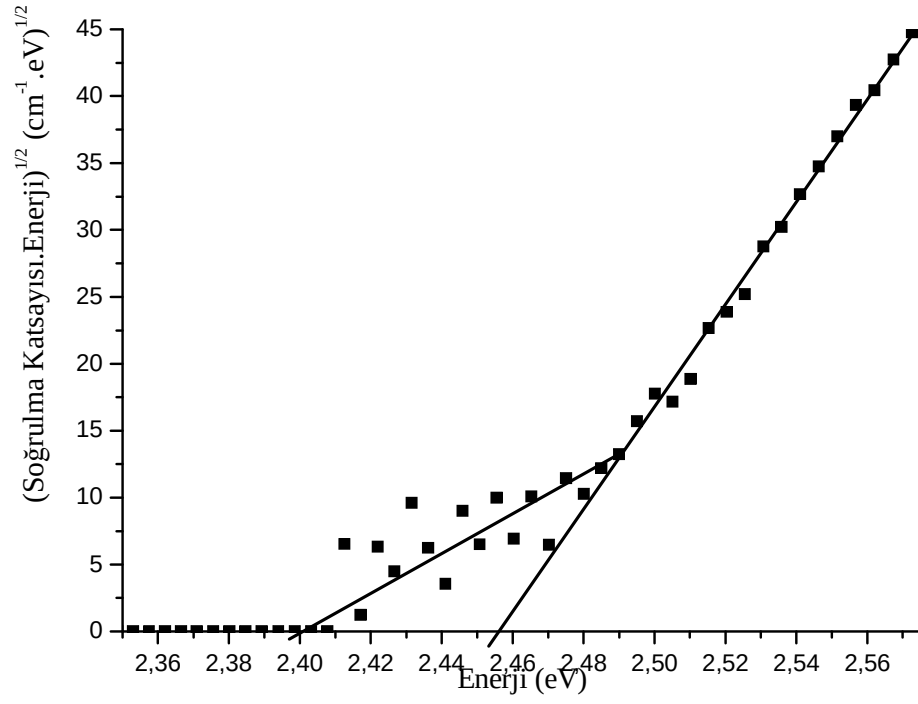
Üç boyutlu modelde izinli geçiş için Şekil 4.29 grafiği çizildi. Grafikten elde ettiğimiz sonuçlar:

$$E_g - \hbar\omega_c = 2,4\text{eV} , E_g + \hbar\omega_c = 2,456\text{eV} ,$$

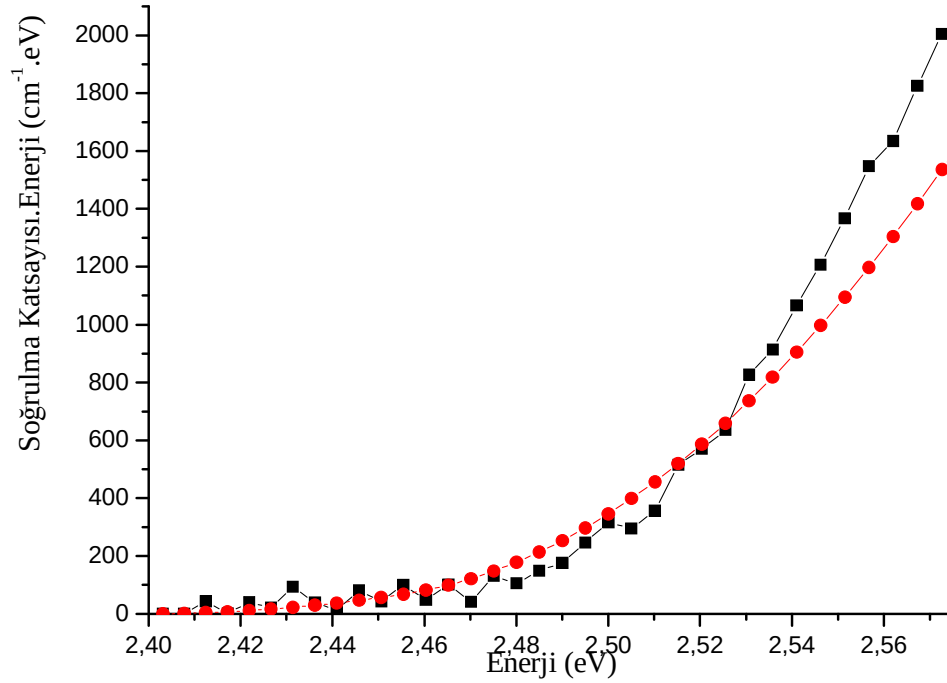
$$E_g = 2,428\text{eV} , \hbar\omega_c = 0,028\text{eV}$$

$$C_{ia} = 42899\text{cm}^{-1}\text{eV}^{-1}$$

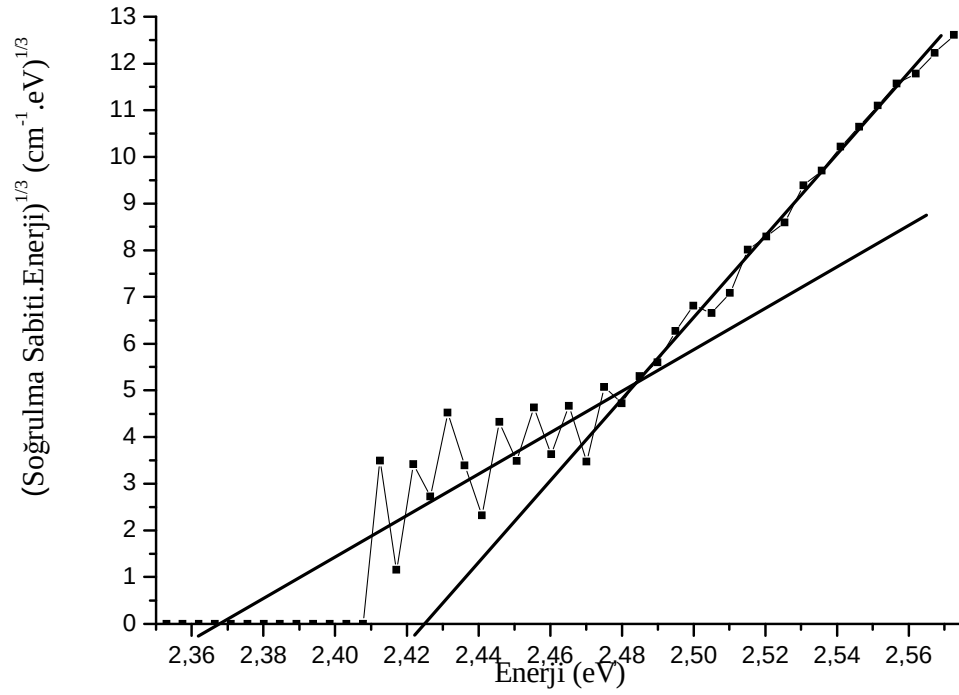
Elde ettiğimiz bu verilerle çizdiğimiz grafik ve deney sonucu çizilen grafik birlikte Şekil 4.30'da verilmiştir.



Şekil 4.29 TlGaS₂ için $(\alpha \hbar \omega)^{1/2} - \hbar \omega$ grafiği.



Şekil 4.30 TlGaS₂ için Şekil 4.29'dan elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha \hbar \omega - \hbar \omega$ grafiği.



Şekil 4.31 TlGaS₂ için $(\alpha \hbar \omega)^{1/3} - \hbar \omega$ grafiği.

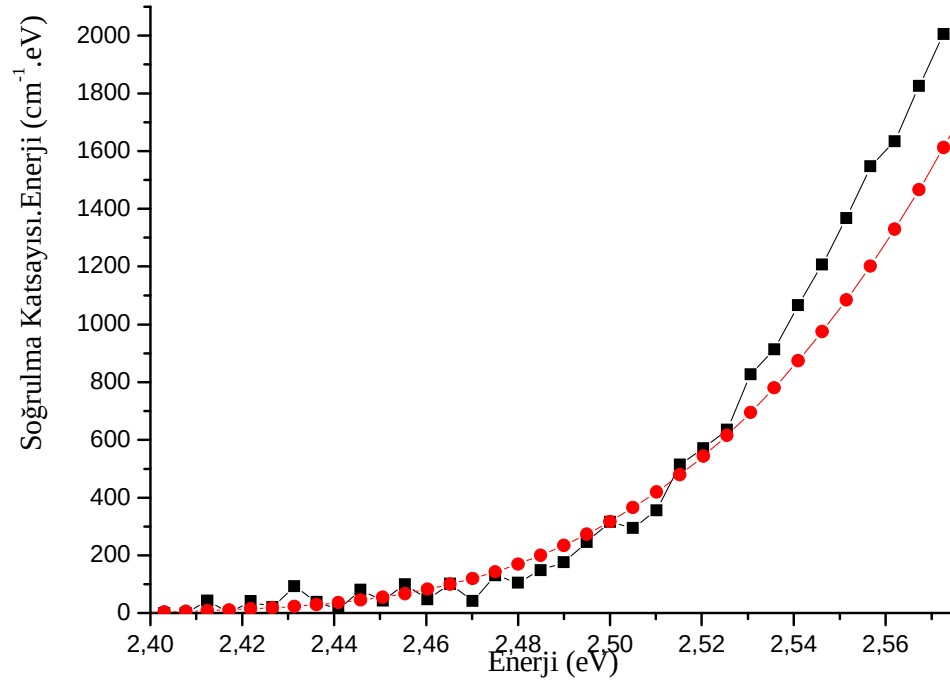
Üç boyutlu model yasaklı geçiş için Şekil 4.31 grafiğini çizdik. Grafikten elde ettiğimiz sonuçlar:

$$E_g - \hbar \omega_c = 2,367 \text{ eV} , E_g + \hbar \omega_c = 2,425 \text{ eV} ,$$

$$E_g = 2,396 \text{ eV} , \hbar \omega_c = 0,029 \text{ eV}$$

$$C_{if} = 179851 \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-2}$$

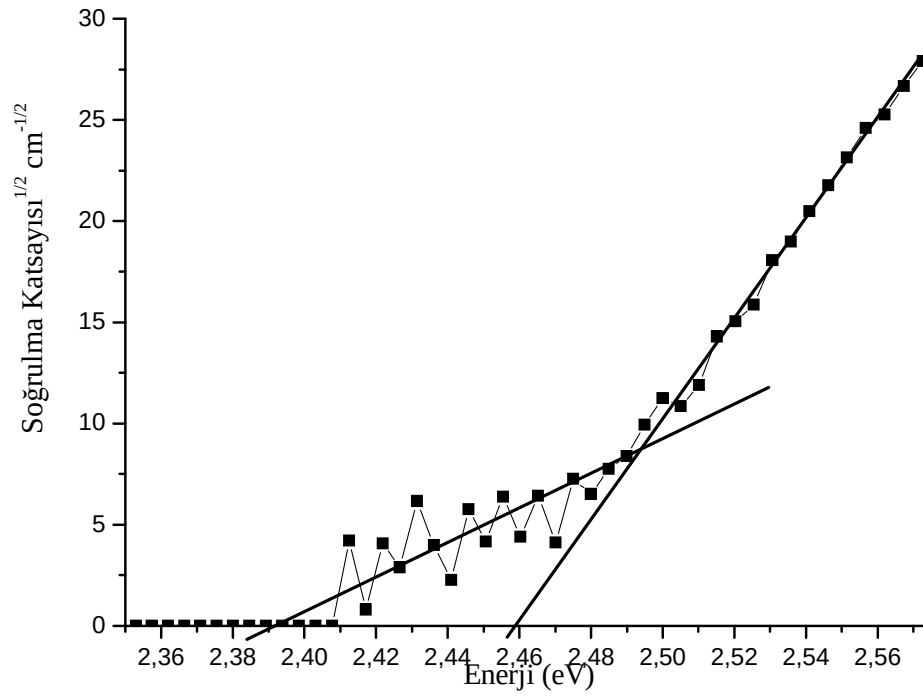
Elde ettiğimiz bu verilerle çizdiğimiz grafik ve deney sonucu çizilen grafik birlikte Şekil 4.32’de verilmiştir.



Şekil 4.32 TlGaS₂ için Şekil 4.31'den elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha \hbar \omega - \hbar \omega$ grafiği.

İki boyutlu model izinli geçiş için gerekli soğrulma sabiti ile enerji arasındaki r lineer bağıntı Şekil 4.27'den de görüleceği üzere yoktur.

İki boyutlu model yasaklı geçiş için Şekil 4.33 grafiğini çizdik.



Şekil 4.33 TlGaS₂ için $\alpha^{1/2} - \hbar\omega$ grafiği.

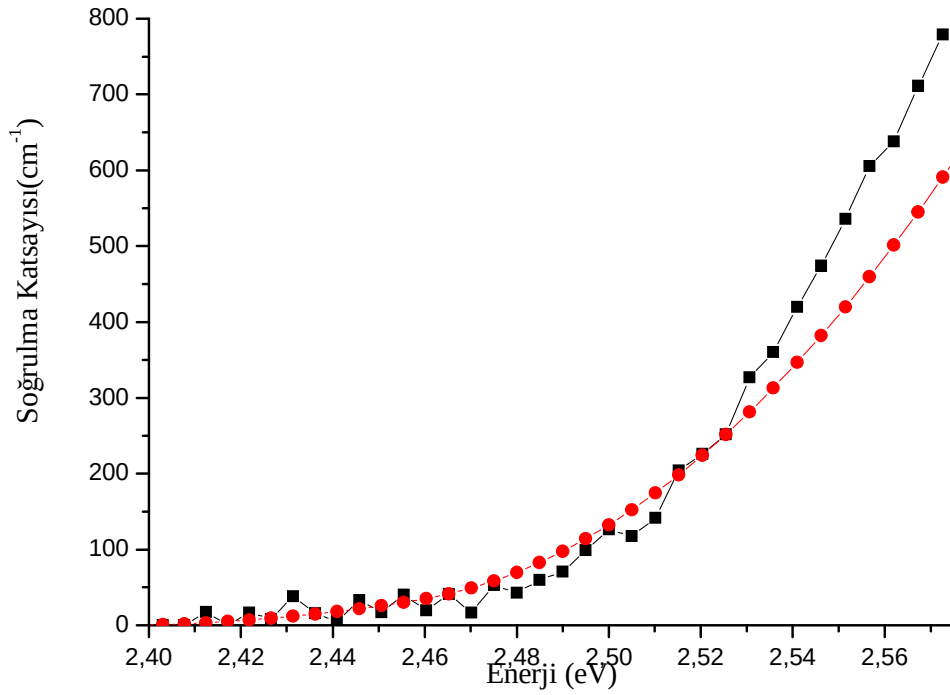
Bu grafikte de görüldüğü üzere iki lineer parçalı bir doğru elde ettik, bu doğrulardan elde ettiğimiz sonuçlar ise şöyledir:

$$E_g - \hbar\omega_c = 2,391\text{eV} , E_g + \hbar\omega_c = 2,459\text{eV} ,$$

$$E_g = 2,425\text{eV} , \hbar\omega_c = 0,034\text{eV}$$

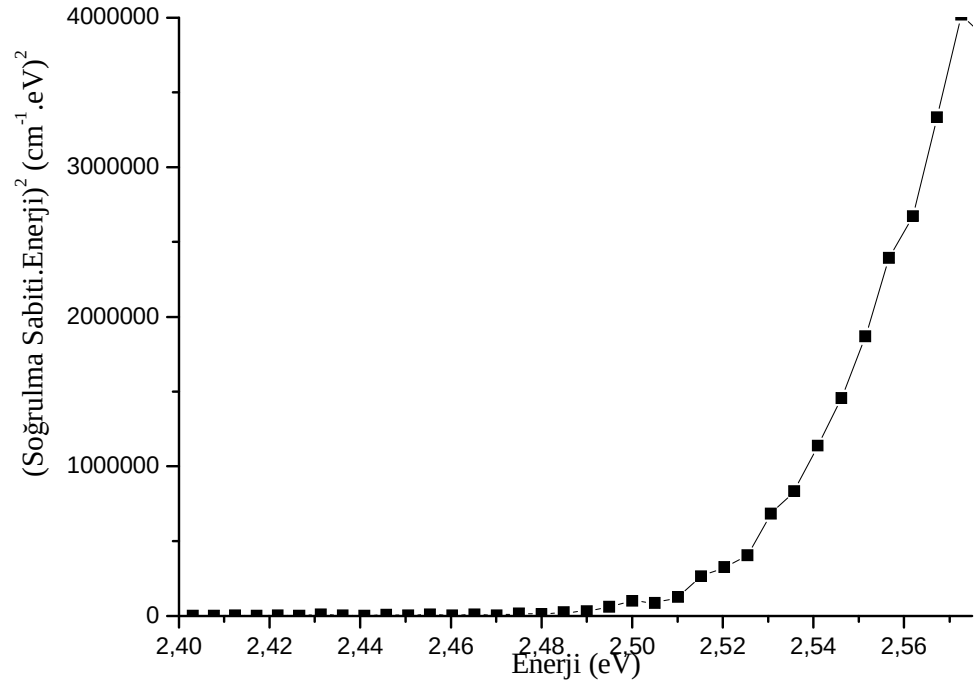
$$C_{if} = 19879\text{cm}^{-1}\text{eV}^{-2}$$

Bu değerlerden yararlanarak çizdiğimiz grafik ve deney sonuçlarından çizilen grafik birlikte Şekil 4.34'te verilmiştir.

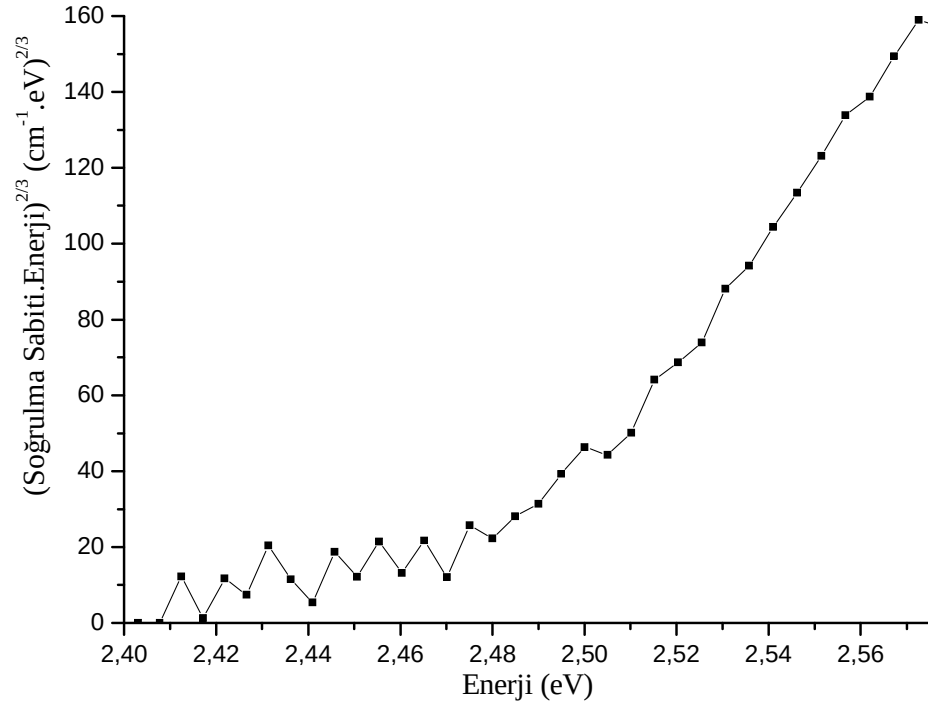


Şekil 4.34 TlGaS₂ için Şekil 4.33'ten elde edilen verilerden çıkarılan $\alpha - \hbar\omega$ grafiği.

Son olarak TlGaS₂ için doğrudan geçiş incelemesi yapalım. Doğrudan izinli geçiş için Şekil 4.35'teki grafik, doğrudan yasaklı geçiş için ise Şekil 4.36'daki grafik çizilmiştir. Her iki grafikte de TlInS₂'te ve TlGaSe₂'de olduğu gibi temel soğrulma kıyısında enerji eksenine kesişecek lineer bir çizgi oluşmamıştır. Bundan dolayı TlGaS₂ için de temel soğrulma kıyısında doğrudan bir geçiş söz konusu değildir diyebiliriz.



Şekil 4.35 TlGaS₂ için $\alpha^2 - \hbar\omega$ grafiği



Şekil 4.36 TlGaS₂ için $\alpha^{2/3} - \hbar\omega$ grafiği

Elde ettiğimiz bu sonuçlara dayanarak diyebiliriz ki TlGaS_2 kristali için de oda sıcaklığında temel soğrulma kıyısında en olası geçiş türü dolaylı yasaklı geçiştir. Üç boyutlu modelde dolaylı bant aralığı $E_g^i = 2,396 \text{ eV}$, iki boyutlu modelde dolaylı bant aralığı $E_g^i = 2,425 \text{ eV}$ olarak bulunmuştur. Bu geçişlerde yardımcı olan fononların enerjisi de sırasıyla $\hbar\omega_c = 0,029 \text{ eV}$ ve $\hbar\omega_c = 0,034 \text{ eV}$ değerlerindedir.

4.4. Sonuç

Kristallerden elde ettiğimiz verileri kullanarak yaptığımız fittingler (veriye uydurmalar) sonucu bu kristallerin en çok dolaylı izinsiz geçişler için bulduğumuz verilere göre yaptığımız fittinglere uygun olduğunu bulduk.

Yaptığımız inceleme sonucunda TlInS_2 , TlGaSe_2 ve TlGaS_2 kristallerinin dolaylı bant aralığına sahip olduğunu bulduk. Oda sıcaklığında elde edilen verilerin değerlendirilmesi sonucu üç boyutlu modele ve iki boyutlu modele göre dolaylı yasaklı bant aralıklarının değerleri kristaller için sırasıyla şöyledir:

TlInS_2 ($E_g^i = 2,2702 \text{ eV}$, $E_g^i = 2,2836 \text{ eV}$), TlGaSe_2 ($E_g^i = 1,8758 \text{ eV}$, $E_g^i = 1,9128 \text{ eV}$), TlGaS_2 ($E_g^i = 2,396 \text{ eV}$, $E_g^i = 2,425 \text{ eV}$). Bu geçişlerde yardımcı olan fononların enerjileri de TlInS_2 için $\hbar\omega_c = 0,023 \text{ eV}$, $\hbar\omega_c = 0,02615 \text{ eV}$, TlGaSe_2 için $\hbar\omega_c = 0,0531 \text{ eV}$, $\hbar\omega_c = 0,05565 \text{ eV}$, TlGaS_2 için $\hbar\omega_c = 0,029 \text{ eV}$, $\hbar\omega_c = 0,034 \text{ eV}$ olarak bulunmuştur. Fonon enerjilerinin enerji bant aralığına oranla çok küçük olduğu ve değerlerinin (~ 0.01 ile 0.03 eV) olduğu [Kittel, 1986]'te de belirtilmiştir.

Literatürde rastladığımız sonuçlar şöyledir; Aynı kristaller dolaylı bant aralığına sahiptir ve oda sıcaklığında enerji bant aralıkları değerleri şunlardır: TlInS_2 ($E_g^i = 2,28 \text{ eV}$), TlGaSe_2 ($E_g^i = 1,83 \text{ eV}$), TlGaS_2 ($E_g^i = 2,32 \text{ eV}$) [Hanas et al, 1992]. TlGaSe_2 oda sıcaklığında $2,1 \text{ eV}$ değerinde yasaklı doğrudan enerji bant aralığına ve $1,95 \text{ eV}$ değerinde dolaylı bant aralığına sahiptir [Kalomiros et al, 1995].

Ölçümler oda sıcaklığında alındığından grafiklerde eksitonlardan kaynaklanan bir etkiye rastlanmamıştır. Bu artan sıcaklıkla beraber eksiton çizgilerinin genişlemesinden kaynaklanmaktadır ve TlInS_2 ve TlGaS_2 için daha önce elde edilmiş soğrulma spektrumlarında açıkça görülmektedir [Mamedov et al, 1997].

İncelediğimiz kristallerin görünür bölgede yüksek ışık hassasiyetine ve geniş bir şeffaflık aralığına sahip olmasından dolayı optoelektronik uygulamaları için kullanışlı olduğu belirtilmiştir [Allakhverdiev , 1999].

KAYNAKLAR

- [1] K. Seeger, "Optical absorption and reflection" Chapter 11 in Semiconductor physics 6th edition, Springer, Berlin, 1997
- [2] S.L. Chuang, "Optical processes in semiconductors" Chapter 9 in Physics of optoelectronic devices, Wiley, New York, 1995
- [3] P.Y Yu, M. Cardona, "Optical properties II" Chapter 7 in Fundamentals of semiconductors, Springer, Berlin, 1996
- [4] J. Bardeen, F.J. Biatt, L.H. Hall, Proceedings of the Atlantic City Photo-Conductivity Conference, Wiley/Chapman and Hall, New York/London, 1956, p. 56 p. 146
- [5] A.M ElKorashi, Phys. Status Solidi (b) 135 (1986) 702
- [6] M.A. Rahman, A.E. Belal, Journal of Physics and Chemistry of Solids 61, 2000, 925-929
- [7] T.S.Moss, T.D. Hawkins: Infrared Phys. 1, 111 (1962)
- [8] R. Newman, W.W Tyler: Solis State Physics 8, 49 (1959)
- [9] K. Seeger: Semiconductor Physics 329 (1973)
- [10] J. Kudman, T. Seidel: J. Appl. Phys. 33, 771 (1962)
- [11] G.G. MacFarlane, V. Roberts: Phys. Rev. 97, 1714 (1955)
- [12] G.G. MacFarlane, V. Roberts: Phys. Rev. 98, 1865-1866 (1955)
- [13] P.W.Bridgman,1926,"Crystals and Their Manufacture"
- [14] P. Brunet, A. Katty, D. Schneider, A.Tromsoncarli and R. Triboulet, Mat. Sci. and Eng. B 16 44 (1993)
- [15] K.A.Pandelisev, Turning Crystal Growth on its side, 2002
- [16] J. Singh, Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures P.4, 2003
- [17] U. Lachish, "CdTe and CdZnTe Crystal Growth and Production of Gamma Radiation Detectors", 1998
- [18] W.Henkel, H.D.Hochheimer, C.Carlone, A.Werner, S.Ves and H.G.v.Schnering, Phys. Rev. B 26, 3211 (1982)
- [19] P.Y Yu, M. Cardona, Fundamentals of semiconductors, Springer, Berlin, 1996, p.433
- [20] D. Muller and H. Hahn, Z.Anorg. Allg. Chem. 438 258-272, 1978
- [21] W.E. Schneider, Automated Spectroradiometric Systems, Dun-Donnelley, 1985

- [22] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, Wiley, New York, 1986 çevirisi p.141
- [23] M.P. Halias, A.N. Anagnostopoulos, K. Kambas, J. Spyridelis, Mat. Res. Bull., 27 (1992) 25
- [24] J.A. Kalomiros, N. Kalkan, M. Halias, A.N. Anagnostopoulos, K. Kambas, Solid State Comm., Vol.96, No. 8, pp.601-607, 1995
- [25] N. Mamedov, S. Iida, Tamao Matsumoto, H. Uchiki, Yo. Tanaka, Ins. Phys. Conf. Ser. No 152 Section G: Magnetic Materials, 1997
- [26] K.R. Allakhverdiev, Solid State Comm.111 (1999) 253-257

ÖZGEÇMİŞ

1978 yılında Edirne’de doğdu. İlkokulu ve ortaokulu Edirne’nin Keşan ilçesinde okudu. Lise öğrenimini 1994 yılında Tekirdağ Malkara Lisesinde tamamladı. Aynı yıl Marmara Üniversitesi Atatürk Eğitim Fakültesi Fizik Öğretmeliği (İngilizce) Bölümüne girdi. 2000 yılında mezun olarak Tekirdağ Anadolu Teknik, Teknik ve Endüstri Meslek Lisesinde öğretmenliğe başladı. 2001 yılında Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsünde yüksek lisans öğrenimine başladı.