T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

AMORF SİLİSYUM TABANLI SCHOTTKY DİYOTLARIN OPTİK VE ELEKTRİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

GİZEM ÇELİKOK

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

DANIŞMAN
PROF. DR. KUBİLAY KUTLU

İSTANBUL, 2011

T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

AMORF SİLİSYUM TABANLI SCHOTTKY DİYOTLARIN OPTİK VE ELEKTRİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

GİZEM ÇELİKOK

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

DANIŞMAN
PROF. DR. KUBİLAY KUTLU

İSTANBUL, 2011

T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

AMORF SİLİSYUM TABANLI SCHOTTKY DİYOTLARIN OPTİK VE ELEKTRİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Gizem ÇELİKOK tarafından hazırlanan tez çalışması 31.10.2011 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Fizik Anabilim Dalı'nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Tez Danışmanı

Prof. Doç. Dr. Kubilay KUTLU
Yıldız Teknik Üniversitesi

Jüri Üyeleri

Prof. Doç. Dr. Kubilay KUTLU
Yıldız Teknik Üniversitesi _____

Doç. Dr. Orhan ÖZDEMİR
Yıldız Teknik Üniversitesi _____

Yrd. Doç. Dr. Saffettin YILDIRIM
İstanbul Üniversitesi _____

Bu çalışma, Yıldız Teknik Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü' nün 2011-01-01-YULAP04 numaralı projesi ile desteklenmiştir.

ÖNSÖZ

Bitirme tezimin hazırlanması esnasında bilgi, tecrübe ve önerileriyle beni yönlendiren tez danışmanım saygıdeğer hocam Prof. Dr. Kubilay KUTLU'ya, tez çalışmamım her aşamasında desteğini hiç esirgemeyen bilgi ve tecrübesiyle bana yol gösteren saygıdeğer hocam Doç. Dr. Orhan ÖZDEMİR'e,

Deneylerimin yapılması esnasında destek ve yardımlarını benden esirgemeyen Sayın Arş. Gör. U.Deneb MENDA'ya, çalışma grubu arkadaşlarım Pınar GÖKDEMİR, Pelin AYDOĞAN ve Ayşe Evrim BULGURCUOĞLU'na,

Sevgileriyle beni yücelten, hep yanımda olan ve desteğini benden esirgemeyen aileme ve dostum Miray ŞARLAK'a teşekkürü bir borç bilirim.

Ekim, 2011

Gizem ÇELİKOK

İÇİNDEKİLER

Sayfa

SİMGE LİSTESİ.....Vİİ

KISALTMA LİSTESİ .....İX

ŞEKİL LİSTESİ..... X

ÇİZELGE LİSTESİ .....XİV

ÖZET .....XVİ

ABSTRACT..... XVİİİ

BÖLÜM 1

GİRİŞ 1
1.1Literatür Özeti **1**
1.1.1 Katıların Değerlendirilmesinde Sıkı Bağlama Yaklaşımı 2
1.1.2 Dışlanmış durumlar bandı, Yerelleşmiş durumlar bandı 6
1.1.3 Bağ Gerilmesi 6
1.1.4 Katkılanma Mekanizması 9
1.1.5 Termodinamik Açıdan Bakış 12
1.1.6 Radyo Frekansı (RF) Plazma (ya da Parlaklık Boşalması)..... 28
1.2 Tezin Amacı.....Hata! Yer işareti tanımlanmamış.
1.2.1 Yarıiletkenler Tarafından Özden Işık Soğurması 42

1.3 Bulgular 60

BÖLÜM 2

YAPISAL VE ELEKTRİKSEL ANALİZ YÖNTEMLERİ..... 61
2.1 a-Si:H Filmlerin Yapısal Analiz Araştırmalarının Teorik Özeti **61**
2.1.1UV-Visible Ölçümleri: 61

2.1.2Elektriksel Karakterizasyon 63
2.1.3Akım – Gerilim Karakteristiği 65
2.1.4Admittans Karakteristiği 66

BÖLÜM 3

NUMUNELERİN HAZIRLANMASI 70
3.1 Taban (Altlık) Hazırlığı: 70
3.1.1RCA Temizleme 70
3.1.2a-Si:H Filmlerinin PECVD Sistemiyle Büyütülmesi 71

BÖLÜM 4

ÖLÇÜM SİSTEMLERİ 76
4.1 a-Si:H Filmlerin Optik Özellikleri 76
4.1.1Morötesi – görünür bölge geçiş spektroskopisi 76
4.2 Elektriksel Analiz 79
4.2.1İletkenlik Ölçüm Sistemi 79
4.2.2Admitans ölçüm sistemi 81
4.2.3a-Si:H/c-Si Eklemlerde Kapasitans Voltaj karakteristiği 84

BÖLÜM 5

SONUÇLAR VE ÖNERİLER 89

5.1PECVD Yöntemiyle Büyütülmüş katkılı/katkısız a-Si:H filmlerin UV-Visible Ölçüm Sonuçları 89
5.2PECVD'de Büyütülmüş Katkılı/Katkısız a-Si:H İnce Filmlerin FTIR Analizi 101
5.3Akım Voltaj Ölçümleri 112
5.4Kapasitans Voltaj Ölçümleri 147

KAYNAKLAR 169

ÖZGEÇMİŞ 171

SİMGE LİSTESİ

N Valans elektron sayısı
$U_{P_4^0}$ Nötr verici için oluşum enerjisi
$U_{P_4^+}$ İyonize verici için oluşum enerjisi
i Kimyasal tür
S Entropi
T Sıcaklık
μ_i Kimyasal potansiyel
P Basınç
n_i Mol sayısı
V Hacim
U_{D^0} Nötr sarkık bağ için oluşum enerjisi
U_{D^-} Negatif yüklenmiş sarkık bağ için oluşum enerjisi
k Boltzmann sabiti
WB Zayıf bağ
DB Sarkık bağ
VB Kuvvetli bağ
$P(E_D)$ Kusur havuz fonksiyonu
σ Havuz genişliği
E_{DP} Sarkık bağ oluşumu için uygun konumunun dağılımının en olası enerjisi
S_e Elektron entropisi
$D(E_D)$ E_D enerjisindeki DB kusur yoğunluğu
$[H]P(E_D)$ Hidrojenin toplam konsantrasyonu
P_{DB} E_D enerjisinde DB kusurunun oluşturan (potansiyel olarak) hidrojen konumunun yoğunluğu
E_v Valans bandı iletkenlik sınırındaki elektron enerjisi
E_{vt} SiSi zayıf bağ elektron enerjisi
E_{siH} SiH bağı elektron enerjisi
E_{HI} Taşınır nötral hidrojen atomu elektron enerjisi
E_D Sarkık bağda +/0 elektron geçiş enerjisi
E_{max} En olası enerji değeri
dN Valans ve iletim band durumları arasında foton soğurulması için olası durum çiftleri sayısı.
A Alan
E e^- enerjisi
$f(E)$ e^- dağılımı

n_e	e^- yoğunluğu
τ	Residence zamanı
ω	Foton enerjisi
ω_{fonon}	Fonon enerjisi
E_0^+	Gelen dalga genliği
E_0^-	Yansıyan dalga genliği
E_2^+	Geçen dalga genliği
$g(E_C)$	İletkenlik bandı sınırında durum yoğunlu
Z	Empedans
R	Rezistans
X	Reaktans

KISALTMA LİSTESİ

ESR	Electron Spin Rezonans
PECVD	Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition
DOS	Density of States
DLTS	Deep Level Transient Spectroscopy
RIE	Reactive Ion Etching
DB	Dangling Bond
WB	Weak Bond
RF	Radio Frequency
FTIR	Fourier Transform Infrared Spectroscopy
DW	Distilled Water
ITO	Indium Tin Oxide
Cr	Krom
Al	Alüminyum
XTC	Thin Film Deposition Controller

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 1.1 Si^{0}_{4} e^{-} dizilimi 3
Şekil 1.2 SiH e^{-} dizilimi 3
Şekil 1.3 Si^{0}_{3} e^{-} dizilimi 4
Şekil 1.4 Si^{+}_{3} e^{-} dizilimi 4
Şekil 1.5 Si^{-}_{3} e^{-} dizilimi 4
Şekil 1.6 $P^{+}_{4} = Si^{0}_{4}$ e^{-} dizilimi 4
Şekil 1.7 $B_4 = Si^{0}_{4}$ e^{-} dizilimi 4
Şekil 1.8 basit kusurların farklı tiplerinin amorf malzemeler ve kristaller için gösterimi [1] 5
Şekil 1.9 İnter atomik uzaklık ve bağ açısının gösterimi 6
Şekil 1.10 Katkısız ve katkılı amorf silisyumun şematik gösterimi 9
Şekil 1.11 Verici ve sarkık bağlar 10
Şekil 1.12 Oluşum enerjilerinin kıyaslanması 12
Şekil 1.13 E_f etkisi, oluşum enerjisindeki kusur pseudo aralığının içinde yer alır. 12
Şekil 1.14 A ve B durumları arasındaki enerji farkının gösterimi 15
Şekil 1.15 Elektronik durumlarda değişme zayıf bağın (WB) sarkık bağa (DB) dönüştüğü zamanlar için gösterilmiştir. 19
Şekil 1.16 WB'nin DB'ye dönüştürülmesi sırasındaki enerji değişimleri 19
Şekil 1.17 ilki yalıtılmış SiH bandından İkincisi ise (SiHDSi) yalnız hidrojenleştirilmiş SiSi bandından yaratılmış iki kusur 24
Şekil 1.18 SiSi bağlarının H işgali 24
Şekil 1.19 Birinci DB'nin yaratılması 26
Şekil 1.20 İkinci DB'nin yaratılması 27
Şekil 1.21 DB kusur oluşumu 27
Şekil 1.22 DB kusur oluşumunu sağlayan enerji bariyeri gösterimi 28
Şekil 1.23 ac voltajla çalışan plazma reaktörü. 30
Şekil 1.24 Elektron ve iyonların akım voltaj grafiği 31
Şekil 1.25 RF Plasma reaktörü 31
Şekil 1.26 Reaktördeki Jeneratörün voltaj zaman grafiği 31
Şekil 1.27 A elektrodundaki voltajın zamanla değişim grafiği 32
Şekil 1.28 A elektrodundaki akımın zamanla değişim grafiği 32
Şekil 1.29 Akımın voltajla değişim grafiği 33
Şekil 1.30 Bölgelerdeki potansiyel değişimler 34
Şekil 1.31 Plazma parametreleri 35
Şekil 1.32 Plazma reaksiyon türleri 37
Şekil 1.33 Denge durumunda durum yoğunluğu - Enerji grafiği. 42
Şekil 1.34 Direk band yapısı 53

Şekil 1.35 Band yapısının farklı geçiş olasılıkları 54
Şekil 1.36 Sınır koşullarında kırılma ve yansıma değerleri 55
Şekil 1.37 Sonsuz kalınlıktaki saydam ara yüzeyli soğurucu ince film 56
Şekil 1.38 Saydam arayüzeyin gösterimi 56
Şekil 1.39 Sonlu kalınlıktaki saydam ara yüzeyli soğurucu ince filmler 57
Şekil 1.40 Farklı kırılma indisli ortamlarda tam yansıma 57
Şekil 1.41 n kırılma indisinin hesaplanması. 59
Şekil 3.1 PECVD sistemi. 72
Şekil 3.2 Metal Kaplama Düzeneği 75
Şekil 3.3 a) Adi ve kuvartz cam üzerine büyütülen a-SiC:H filmler için dört parmak, b) Si üzerine büyütülenler için ise nokta şeklinde alüminyum elektrotlar büyütülmüştür. 75
Şekil 3.4 Vakum sisteminin genel şeması. 75
Şekil 4.1 Morötesi – görünür bölge geçiş spektroskopisi sistemi. 77
Şekil 4.2 Fourier dönüşüm kızılötesi spektroskopi (FTIR) sistemi. 78
Şekil 4.3 Oda sıcaklığında (dc) iletkenlik ölçüm sistemi 79
Şekil 4.4 Sıcaklığa bağlı (dc) iletkenlik ölçüm sistemi. 80
Şekil 4.5 HP 4192A empedans analiz cihazı 82
Şekil 4.6 HP 4192A kontrol paneli 83
Şekil 4.7 Enerji Band diyagramları 84
Şekil 5.1 (n)a-Si:H üretilmek üzere taşıyıcıların PECVD sistemindeki yerleşiminin şematik görünümü. 90
Şekil 5.2 PECVD yöntemiyle cam altlıklar üzerine büyütülen (n)a-Si:H filmlerin reaktör içindeki konumlarına göre geçirgenlik ölçümleri 91
Şekil 5.3 UV-Visible ile alınan geçirgenlik ölçümleri ile optichar programı ile türetilmiş geçirgenlik değerlerinin karşılaştırılması. 91
Şekil 5.4 Dalgaboyuna göre Optichar programı ile elde edilen kırma indisi ve söndürme katsayısı değerleri 92
Şekil 5.5 Foton enerjisine karşılık soğurma katsayısı grafiği. 93
Şekil 5.6 Foton enerjisine göre $(\alpha h\upsilon)^{1/2}$ değerlerinin değişimi ve E_G'nin belirlenmesi 93
Şekil 5.7 (i)a-Si:H üretilmek üzere taşıyıcıların PECVD sistemindeki yerleşiminin şematik görünümü. 95
Şekil 5.8 (i) a-Si:H/cam T – λ grafiği 95
Şekil 5.9 (i) a-Si:H/cam (k1) T – λ grafiği 96
Şekil 5.10 (i) a-Si:H/cam (k1) n/k – λ grafiği 96
Şekil 5.11 (i) a-Si:H/cam (k1) $(\alpha h\upsilon)^{1/2}$ – hυ grafiği 97
Şekil 5.12 (p)a-Si:H üretilmek üzere taşıyıcıların PECVD sistemindeki yerleşiminin şematik görünümü 98
Şekil 5.13 (p)a-Si:H/cam T – λ grafiği 99
Şekil 5.14 (p)a-Si:H/cam (k1y) T – λ grafiği 99
Şekil 5.15 (p)a-Si:H/cam (k1) n/k – λ grafiği 100
Şekil 5.16 (p)a-Si:H/cam (k1) $(\alpha h\upsilon)^{1/2}$ – hυ grafiği 100
Şekil 5.17 SiH, SiH2 ve SiH3 için Si - H titreşimsel modları çizimleri 102
Şekil 5.18 a-Si:H olası yapısal konfigürasyonları 102
Şekil 5.19 (n)a-Si:H Soğurganlık – dalga sayısı grafiği 106
Şekil 5.20 (n)a-Si:H Transmitans – dalga sayısı grafiği 107
Şekil 5.21 (p)a-Si:H Transmitans – dalga sayısı grafiği 108
Şekil 5.22 (p)a-Si:H Soğurganlık – dalga sayısı grafiği 109
Şekil 5.23 (i)a-Si:H Transmitans – dalga sayısı grafiği 110

Şekil 5.24 (i)a-Si:H Soğurganlık – dalga sayısı grafiği 111
Şekil 5.25 Cr/(n)a-Si:H/ITO..... 112
Şekil 5.26 Cr/(p)a-Si:H/ITO..... 113
Şekil 5.27 ITO/(i)a-Si:H/Cr 114
Şekil 5.28 ITO/(n)a-Si:H/ITO..... 115
Şekil 5.29 ITO/(p)a-Si:H/ITO..... 116
Şekil 5.30 ITO/(i)a-Si:H/ITO..... 117
Şekil 5.31 Cr/(n)a-Si:H/Cr 118
Şekil 5.32 Al/(i)a-Si:H/Cr 119
Şekil 5.33 Al/(i)a-Si:H/CSi-n100..... 120
Şekil 5.34 Cr/(i)a-Si:H/CSi-n100..... 121
Şekil 5.35 ITO/(i)a-Si:H/CSi-n100 122
Şekil 5.36 Al/(i)a-Si:H/CSi-n111..... 123
Şekil 5.37 Cr/(i)a-Si:H/CSi-n111..... 124
Şekil 5.38 ITO/(i)a-Si:H/CSi-n111 125
Şekil 5.39 Al/(i)a-Si:H/CSi-p100..... 126
Şekil 5.40 Cr/(i)a-Si:H/CSi-p100..... 127
Şekil 5.41 ITO/(i)a-Si:H/CSi-p100 128
Şekil 5.42 Al/(i)a-Si:H/CSi-p111..... 129
Şekil 5.43 Cr/(i)a-Si:H/CSi-p111..... 130
Şekil 5.44 ITO/(i)a-Si:H/CSi-p111 131
Şekil 5.45 Cr/(n)a-Si:H/CSi-n100..... 132
Şekil 5.46 ITO/(n)a-Si:H/CSi-n100 133
Şekil 5.47 Cr/(n)a-Si:H/CSi-n111..... 134
Şekil 5.48 ITO/(n)a-Si:H/CSi-n111 135
Şekil 5.49 Cr/(n)a-Si:H/CSi-p100..... 136
Şekil 5.50 ITO/(n)a-Si:H/CSi-p100 137
Şekil 5.51 Cr/(n)a-Si:H/CSi-p111..... 138
Şekil 5.52 ITO/(n)a-Si:H/CSi-p111 139
Şekil 5.53 Cr/(p)a-Si:H/CSi-n100..... 140
Şekil 5.54 ITO/(p)a-Si:H/CSi-n100 141
Şekil 5.55 Cr/(p)a-Si:H/CSi-n111..... 142
Şekil 5.56 ITO/(p)a-Si:H/CSi-n111 143
Şekil 5.57 Cr/(p)a-Si:H/CSi-p100..... 144
Şekil 5.58 ITO/(p)a-Si:H/CSi-p100 145
Şekil 5.59 Cr/(p)a-Si:H/CSi-p111..... 146
Şekil 5.60 ITO/(p)a-Si:H/CSi-p111 147
Şekil 5.61 ITO3/(i) a-Si:H/p(100) CSi C-V grafiği 148
Şekil 5.62 ITO3/(i) a-Si:H/p(100) c-Si $1/C^2$-V grafiği 148
Şekil 5.63 Al1/(i)a-Si:H/n(100)c-Si C-V grafiği 149
Şekil 5.64 Al1/(i)a-Si:H/n(100)c-Si $1/C^2$-V grafiği 149
Şekil 5.65 ITO2/(i)a-Si:H/n(100)c-Si $1/C^2$-V grafiği 150
Şekil 5.66 ITO2/(i)a-Si:H/n(100)c-Si $1/C^2$-V grafiği 150
Şekil 5.67 Cr/(i)a-Si:H/n100 C-V grafiği..... 151
Şekil 5.68 Cr/(i)a-Si:H/n100 $1/C^2$-V grafiği 151
Şekil 5.69 Cr/ (i) a-Si:H /p100 C-V grafiği..... 152
Şekil 5.70 Cr/ (i) a-Si:H /p100 $1/C^2$-V grafiği 152
Şekil 5.71 Al / (i)a-Si:H /p111 C-V grafiği..... 153
Şekil 5.72 Al/ (i) a-Si:H /n111 C-V grafiği..... 153

Şekil 5.73 ITO/ (i) a-Si:H/ n111 C-V grafiği 154
Şekil 5.74 ITO/ (i) a-Si:H / n111 $1/C^2$-V grafiği 154
Şekil 5.75 ITO / (i) a-Si:H / p111 C-V grafiği 155
Şekil 5.76 ITO / (i) a-Si:H / Cr C-V grafiği 155
Şekil 5.77 ITO / (i) a-Si:H / Cr $1/C^2$-V grafiği 156
Şekil 5.78 Cr / (i) a-Si:H / n111 C -V grafiği 156
Şekil 5.79 Cr / (i) a-Si:H / n111 $1/C^2$ -V grafiği 157
Şekil 5.80 ITO / (p) a-Si:H / ITO C-V grafiği 157
Şekil 5.81 ITO / (p)a-Si:H / ITO $1/C^2$-V grafiği 158
Şekil 5.82 Cr / (p) a-Si:H / n100 C-V grafiği 158
Şekil 5.83 ITO / (p) a-Si:H / Cr C-V grafiği 159
Şekil 5.84 ITO / (p)a-Si:H / Cr $1/C^2$-V grafiği 159
Şekil 5.85 ITO / (p) a-Si:H / n100 C-V grafiği 160
Şekil 5.86 ITO / (p) a-Si:H / n100 $1/C^2$-V grafiği 160
Şekil 5.87 Cr / (p) a-Si:H / n111 C-V grafiği 161
Şekil 5.88 Cr / (p) a-Si:H / n111 $1/C^2$-V grafiği 161
Şekil 5.89 ITO / (n) a-Si:H / n100 C-V grafiği 162
Şekil 5.90 ITO / (n)a-Si:H / n100 $1/C^2$-V grafiği 162
Şekil 5.91 ITO / (n) a-Si:H / p111C-V grafiği 163
Şekil 5.92 ITO / (n)a-Si:H / p111 $1/C^2$-V grafiği 163
Şekil 5.93 Cr / (n) a-Si:H / p111 C-V grafiği 164
Şekil 5.94 ITO / (n) a-Si:H / ITO C-V grafiği 164
Şekil 5.95 ITO / (n)a-Si:H / ITO $1/C^2$-V grafiği 165
Şekil 5.96 ITO / (n) a-Si:H / p100 C-V grafiği 165
Şekil 5.97 ITO / (n) a-Si:H / p100 $1/C^2$-V grafiği 166
Şekil 5.98 ITO / (n) a-Si:H / Cr C-V grafiği 166
Şekil 5.99 ITO / (n) a-Si:H / Cr $1/C^2$-V grafiği 167
Şekil 5.100 Cr / (n) a-Si:H / Cr C-V grafiği 167
Şekil 5.101 Cr / (n) a-Si:H / Cr $1/C^2$-V grafiği 168

ÇİZELGE LİSTESİ

Sayfa

Çizelge 5.1 Plazma odacığında farklı konumlardaki cam altlıklar üzerine büyütülen (n)a-Si:H filmlerin optik özellikleri 94
Çizelge 5.2 Plazma odacığında farklı konumlardaki cam altlıklar üzerine büyütülen (i)a-Si:H filmlerin optik özellikleri 97
Çizelge 5.3 Plazma odacığında farklı konumlardaki cam altlıklar üzerine büyütülen (p)a-Si:H filmlerin optik özellikleri 101
Çizelge 5.4 IR ve Raman a-Si:H filmlerde farklı hidrojen bağlanma konfigürasyonlarında aktif titreşimsel frekansları. 103
Çizelge 5.5 a-Si:H filmler için ilgili modlar ve uygun frekanslar 105
Çizelge 5.6 Cr/(n)a-Si:H/ITO direnç hesapları 113
Çizelge 5.7 Cr/(p)a-Si:H/ITO direnç hesapları 114
Çizelge 5.8 ITO/(i)a-Si:H/Cr direnç hesapları 114
Çizelge 5.9 ITO/(n)a-Si:H/ITO direnç hesapları. 115
Çizelge 5.10 ITO/(p)a-Si:H/ITO direnç hesapları 116
Çizelge 5.11 ITO/(i)a-Si:H/ITO direnç hesapları 117
Çizelge 5.12 Cr/(n)a-Si:H/Cr direnç hesapları 118
Çizelge 5.13 Al/(i)a-Si:H/Cr direnç hesapları 119
Çizelge 5.14 Al/(i)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları. 120
Çizelge 5.15 Cr/(i)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 121
Çizelge 5.16 ITO/(i)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 122
Çizelge 5.17 Al/(i)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 123
Çizelge 5.18 Cr/(i)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 124
Çizelge 5.19 ITO/(i)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları. 125
Çizelge 5.20 Al/(i)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 126
Çizelge 5.21 Cr/(i)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 127
Çizelge 5.22 ITO/(i)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 128
Çizelge 5.23 Al/(i)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 129
Çizelge 5.24 Cr/(i)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları. 130
Çizelge 5.25 ITO/(i)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 131
Çizelge 5.26 Cr/(n)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 132
Çizelge 5.27 ITO/(n)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 133
Çizelge 5.28 Cr/(n)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 134
Çizelge 5.29 ITO/(n)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 135
Çizelge 5.30 Cr/(n)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 136
Çizelge 5.31 ITO/(n)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 137

Çizelge 5.32 Cr/(n)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 138
Çizelge 5.33 ITO/(n)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları..... 139
Çizelge 5.34 Cr/(p)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları. 140
Çizelge 5.35 ITO/(p)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları..... 141
Çizelge 5.36 Cr/(p)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 142
Çizelge 5.37 ITO/(p)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları..... 143
Çizelge 5.38 Cr/(p)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 144
Çizelge 5.39 ITO/(p)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları..... 145
Çizelge 5.40 Cr/(p)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları 146
Çizelge 5.41 ITO/(p)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları..... 147
Çizelge 5.42 Eğim, bariyer yüksekliği ve oluşum potansiyeli tablosu 168

ÖZET

AMORF SİLİSYUM KATKILI SCHOTTKY DİYOTLARIN OPTİK VE ELEKTRİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Gizem ÇELİKOK

Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Kubilay KUTLU

Çağdaş iletişim teknolojisi, iki temel bölümle tanımlanabilir: bir yanda mikroişleyiciler (microprocessors), öteyandan da çevre birimleri (insan-makina ara yüzünü oluşturan giriş ve çıkış birimleri). Mikroişlemcilerin gelişmesi tek kristal silisyum üzerinde gitgide minyatürleşen tümdevrelerle sürerken, giriş-çıkış birimleri büyük boyutlu kalarak geliştiriliyorlar. Klavye, yazıcı, belge okuyucu ve kopyalayıcı, elektronik gösterim gibi birimlerden oluşan çevre birimlerinin gerektirdiği teknoloji, geniş yüzeyli mikroelektronik teknolojisi diye adlandırılmaktadır. Bunun için gerekli 20-25cm boyutlarında elektronik malzeme, ancak ince film biçiminde elde edilebilir ve giderek ucuz taban üzerinde elde edilebildiği ölçüde de kabuledilebilir maliyette üretilebilirler.

Bilindiği gibi, yarıiletkenleri, aygıt üretiminin temeli yapan özelliklerinin başında, iletimi sağlayan serbest elektrik yükü taşıyıcılarının, hem türlerinin (n yada p) hem de miktarlarının denetimli biçimde ayarlanabiliyor olması yatmaktadır. Oysa amorf silisyum (a-Si) filmler, önlenemez sarkık bağlı yapılarından dolayı, yasak enerji aralığı ortalarına doğru 10^{20} $cm^{-3}eV^{-1}$ gibi yüksek yoğunlukta yerelleşmiş derin durum yoğunluğu dağılımı içerirler; böylece olası katkı atomlarının sağlayabileceği fazlalık serbest elektronlar bu derin tuzaklar tarafından yakalanarak etkin katkılanma önlenmiş olur. Dolayısıyla iletkenliğinin türü ve miktarı denetlenemiyen bir yarıiletkenin teknolojik öneminin sınırlı olduğu açıktır. Amorf silisyum filmlerinin bu tıkanıklığı, sarkık bağların hidrojenle doyurulmasıyla aşılmıştır. Yaklaşık %10 hidrojenle alaşımlaştırılan a-Si filmlerde, sarkık bağların hidrojenle doyurulmalarından dolayı derin yerel durum yoğunluğu yaklaşık 10^5 kez azalmaktadır, başka bir deyişle neredeyse bambaşka bir film oluşmaktadır. Bu hidrojenlenmiş amorf silisyum (a-Si:H) filmlerde her tür ve miktarda katkılama yapılabildiğinden elektronik aygıt üretiminde önü açılmaktadır. Öteyandan, kristal silisyuma göre, yasak enerji aralığı yaklaşık %60, optik

soğurma katsayısı ise 10-20 kez büyüdüğünden, hem ışık duyarlılığı insan gözünün etkili olduğu görünür bölgeye taşınmakta, hem de belli bir foton miktarı soğurmak için çok daha ince malzeme yeterli olmaktadır. Düşük taşıyıcı hareketliliği ve optik yıpranma sorunlarına karşın a-Si:H filmler, optik özellikleri zayıf olan kristal silisyumun bu açığını büyük ölçüde kapatmaktadır. Ayrıca germanyum, karbon, azot... gibi elementlerle alaşım yapabilen hidrojenlenmiş amorf silisyum filmlerin yasak enerji aralığı kızıl altından mor ötesine kadar ayarlanabilmekte ve geniş yüzeyli optoelektronik uygulamalara yol açmaktadır. Bunlarla birlikte son zamanlarda yapılan çalışmalar incelendiğinde, a-Si:H filmler HIT türü güneş pili çalışmalarında temel yarı-iletken olduğu görülmektedir.

Böylece, a-Si:H filmler, ilginç özelliklerinin yanında, mevcut mikro/nano-elektronik malzemelerle (tek kristal Si, SiO_2 , Si_3N_4...) uyumlu olması, düşük sıcaklıklarda çok katlı yapılara girebiliyor olması, günümüzde "amorf silisyum teknolojisi" diye adlandırabilecek bir teknolojinin temel malzemesini oluşturmaktadır.

Hidrojenlenmiş amorf silisyum (a-Si:H) filmlerin hazırlığında kullanılan teknikler ve parametreler malzemenin istenilen özelliklerde oluşması için önemli bir rol oynamaktadır. a-Si:H filmlerin oluşturulması için plazma destekli kimyasal buhar biriktirme sistemi (PECVD) kullanılacaktır. Bu sistem plazma reaktörü ve gazların bulunduğu kabinlerden oluşmaktadır. Bu sistemde, a-Si:H film üretimi için başlıca gaz silan (SiH_4) gazıdır. Sistemin çalışması basınç, sıcaklık, güç ve kaynak gazların akış oranı gibi büyütme parametrelerinin itinalı ve dikkatli bir biçimde kontrolü zorunludur. Bu parametreler büyütülen filmin yapısal, elektronik ve optik özelliklerini tamamıyla etkilemektedir. Yöntemler kısmında, filmlerin üretimi ve inceleme araçları hakkında daha detaylı bilgiler verilecektir.

Bu çalışmada, PECVD yöntemiyle a-Si:H filmler, cam, metallenmiş cam ve silisyum altlıklar üzerine simultane olarak ilk önce katkısız daha sonra da fosfor (n türü) ve bor (p türü) katkılı olarak büyütüldü. Elde edilen numulerdeki optik sabitler (film indisi, yasak enerji aralığı, soğurma katsayısı vb.) UV-Visible yansıma-geçirme spektroskopisiyle elde edilerek, yapısal özellikler ise IR spektrumlarıyla açığa çıkarıldı. Çeşitli altlıklar üzerine büyütülen a-Si:H filmlerin metallenmesi sonucu kontaklar üretilerek, ilk önce bu kontakların türü, yani “ohmik” yada “Schottky” belirlendi, daha sonrada elde edilen aygıtın akım iletim mekanizmaları akım gerilim (I-V) deneylerince ortaya konuldu. Bunların yanısıra, filmlerin yük tutma kabiliyetleride admittans tekniğiyle belirlendi.

Anahtar kelimeler: Hidrojenlenmiş amorf Silisyum (a-Si:H), akım iletim mekanizmaları, admittans, PECVD

ABSTRACT

INVESTIGATION OPTİCAL AND ELECTRICAL PROPERTİES OF AMORPHOUS SILICON DOPED SCHOTTKY DIODES

Gizem ÇELİKOK

Department of Physics
MSc. Thesis

Advisor: Prof. Dr. Kubilay KUTLU

The hardware of modern information system can be divided into two categories: Electronic processors (microelectronics) and input/output devices. The improvement of processors has been associated with continuous miniaturization on crystalline silicon chips. Therefore integrated circuit technology develops as electronic processors with gradually reducing device dimensions (Submicron). On the other hand, input/output devices have to continue to be of large dimensions. Electronic displays, printers, keyboards or document scanners require electronics technology with large formats, which is called large area electronics. Each of these applications requires an electronic device, whose size matches the interface with human activity – either a display screen or a sheet of paper- with typical dimensions of 25 cm or larger. Therefore economic fabrication of large area electronic devices requires homogeneous materials with larger size.

Amorphous silicon and its alloys, apart from the fundamental importance in theoretical point of view, they are building stone of today's large area opto-electronics in the relevant market. These large area devices have to stay large in dimensions as a necessity of man/machine interface such as image sensors, document scanners, electronic displays, printers etc. The crystalline silicon based conventional microelectronics could not satisfy the requirements of these large area opto-electronic devices due to both its poor optical properties and limited dimensions. The solutions developed on the semiconductors other than the crystalline silicon have created mismatching problems with the existing silicon based microelectronic structures.

Amorphous silicon whose huge amount of dangling bond states around midgap energy region (10^{20} $cm^{-1}eV^{-1}$) are reduced to minute amount (10^{15} $cm^{-1}eV^{-1}$) by the hydrogen compensation process, becomes able to be selectively doped both n and p types leading to a large number of practically useful devices such as p-n, p-i-n, Schottky diodes etc.

As device feasibility of hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) has been achieved, the above mentioned two main drawbacks of crystalline silicon (c-Si), (namely poor optical properties and limited geometrical area or too high cost of material), are tried to be solved nowadays by this a-Si:H films. As for the optical weakness of c-Si the optical gap of a-Si:H is widened up to the visible region (≈1.75 eV) leading to the photoconductivity spectrum, shifted to shorter light wavelength compared with crystalline silicon. In other words, the a-Si:H spectrum coincides better with the sensitivity range of human eye (the alloying ability of a-Si:H with Ge, Sn, C, N and O creates a flexibility of adjusting the optical gap from IR to UV). Moreover, the optical absorption of a-Si:H is about 20 times larger than that of c-Si. On the other hand, a-Si:H seems to be a solution to the large area problem of crystalline silicon because it can be deposited at low temperature (<300 °C) by the glow discharge method at reasonable cost as large area thin films on low cost substrate (such as glass and ordinary rude organic materials).

Besides, the control of the electrical conductivity over 10 orders of magnitude [4] due to its dopability, the field effect allows the sheet conductance of a-Si:H layer to be switched over 6 orders of magnitude. As a result, the development of thin film transistors for addressing circuits on large area electronics is facilitated by the fact that the gate dielectric layer (mostly a-SiNx:H film), the channel layer of a-Si:H film and the ohmic source and drain n+ contact layers can all be deposited in the same plasma reactor (PECVD).

Various techniques could be employed to deposit a-Si:H thin films. According to the applied techniques and deposition conditions, properties of a-Si:H films alter. Due to the requirement of large dimension with low processing temperature, plasma enhanced chemical vapor deposition (PECVD) is suitable technique to grow a-Si:H films on various substrates. Main precursor gas for the system is SiH4. Pressure, substrate temperature, flow rate of gases that introduced into the chamber of plasma reactor, resident time of the gases, power are the parameters for the system. With the mentioned growth conditions, both structural and electrical properties of a-Si:H thin films can be tuned. Details of the film production stage will be given in subsequent section.

Through this work, structural and electrical properties of PECVD grown films on various substrates were investigated by suitable tools. For the optical features such as refractive index, forbidden energy band gap, absorption properties, bond types in a-Si:H were studied via UV-Vis. transmission measurements and Infrared spectroscopy, respectively. As for the electrical properties, current-bias voltage (I-V) and admittance (capacitance together with conductance) analyses were used to find out transport and storage properties. First, selected metals like Aluminum, chromium and ITO metals were evaporated on to a-Si:H films with different geometries. After determining the type of chosen metals as either injecting (ohmic) or blocking type, the structure at hand were analyzed in MS or Schottky type structure.

Keywords: doped/intrinsic a-Si:H, PECVD, transport mechanism(s), admittance

BÖLÜM 1

GİRİŞ

1.1 Literatür Özeti

Amorf yarıiletkenlerde yapısal düzensizliğin benzersiz özellikleri taşıması ilgi kaynağı olmuş ve incelenmiştir. Başlangıçta a-Si:H filmler kristal silisyumun bir alt sınıfı olarak düşünülmüş ve elektriksel özelliklerinin kötüleşme nedenin film yapısındaki düzensizlik olduğu ileri sürülmüştü. Ancak incelemeler bu fikri doğrulamamıştır. Atomik yapının düzensizliğiyle beraber hidrojen ile birleşimi kristal yarıiletkenlerden çok farklı yeni olgular doğurmuştur. Yapısal düzensizlik nedeniyle amorf yapılara özgü yerelleşmiş band etek kusurları oluşmuş ve bu kusurlar optik, yük iletimi ve rekombinasyon özelliklerini kristal durumu göre farklılaştırmıştır. Bunlara ilaveten, hidrojenlenmiş amorf silisyum kendine özgü kusurlara, ve kararsızlığa neden olurken [1-6] diğer yandan katkılama olanağı sunmuştur. Yeni bir malzemenin teknolojik uygulamalar için geliştirilmeye olanak vermesi nadiren gerçekleşir. A-Si:H fotovoltaik uygulamalar açısından hem geçmişte hemde günümüzde (HIT türü) yapıtaşıdır [7-17]. Ayrıca, geniş alan elektroniği içinde vazgeçilmezdir. Eşsiz ve fark yaratan en temel unsuru geniş alana düşük maliyetle büyütülebiliyor [1-24] olmasından kaynaklanır. Hernekadar entegre devreler için kristal silisyum doğru tercihse, geniş alan elektroği için doğru seçim a-Si:H'dur.

Hidrojenlenmiş amorf silisyum, amorf yarıiletkenlere göre geç farkedilmiştir; ilk çalışmalar 1950-1960 lı yıllarındadır. Kükürt, selenyum ve tellür içeren sıvımsı amorf yarıiletkenler 1930 yıllarda kopyalama cihazların keşfinde kullanilabileceği ortaya çıkmışken, amorf silisyum ilk olarak 1960 larda çığlama (sputtering) ve termal

buharlaştırma yöntemiyle hidrojenlenmeden üretilmiştir. Üretilen filmlerdeki yüksek kusur yoğunluğu elektronik uygulamalar açısından arzu edilen katkılama (doping), ışınsal iletkenlik (photoconductivity) vb. özelliklerine gore elverişsiz bir yarıiletken olduğunu göstermekteydi. Hidrojenmiş amorf silisyum ilk olarak plazma yöntemiyle Chittick tarafından büyütüldü [1] ve Si-H bağların titreşimiyle beraber kararsızlık olayı gözlendi. Üretimde kullanılan plazma sistemi küçük değişikliklerle beraber günümüzde kullanılan sistemler gibidir. Çalışmaların ve üretim sisteminin önemi ilk bakışta farkedilemese de sonraki yıllarda ilk once ışınsal iletim değerlerinin kristal silisyuma oranla çok daha iyi olması [23-24] ve n (fosfor) ve p (bor) türü katlılama yapılabilmesi [23-24] aygıt üretimi için dönüm noktası olmuştur. Carlson ve Wronski ile başlayan a-Si:H tabanlı aygıt üretim çalışmaları, bu filmlerin güneş pillerinde potansiyelinin olduğunu göstermiştir. Başlangıçta % 2-3 verim elde edilmesine karşın, RCA türü temizlemenin de başarıyla uygulanması sonucu % 12-14 değerlere 1989 yılında ulaşılmıştır. İlk ürün pazara şuanda HIT türü güneş pillerinde öncül olan SANYO şirketince sunulmuştur. Verimin laboratuvar şartlarına gore daha düşük elde edilmesine karşın hesap makinelerini ofis ortamında çalıştırabilecek yeterli güç elde edildiği görülmüş ve bu firma tarafından güneş piliyle çalışan hesap makineleri olarak pazara sürülmüştür. Verimin yükseltilmesiyle ilk güneş pilleri 1979 yılların sonunda Sanyo tarafından üretilmiştir. Daha sonra, a-Si:H tabanlı LCD ekranları suren alan etkili transistörlerde kullanılmaya başlanmıştır [23-24]. Ayrıca optic tarayıcılarda, el televizyonlarında, faks makinelerinde ve radrasyon görüntüleme cihazlarında kullanım alanı bulmuştur.

1.1.1 Katıların Değerlendirilmesinde Sıkı Bağlama Yaklaşımı

4. Grup elementleri (tathojen) $3s^2\ 3p^2$ (kısa dizilim sebebiyle sıkı bağlama) yalıtılmış silikon (Si), atomik s ve p gibi dalga fonksiyonları hibrit "molekül" oluşturmak için birleşir.[1]

Orbitaller: $\phi_{hib} = a\phi(3s) + b\phi(3p)$ (a ve b sabittir). Her orbital, s durumunun ¼ 'ü ve 3 eşdeğer p durumlarından birinin ¾ 'ünden oluşur. Yani sp^3 orbitali hibrit orbitaldir.

Orbitallerin maksimum sayıları s ve p durumlarının hibridizasyonun 4 olmasından ileri gelir. Bağlayıcı orbitallerde olabildiğince çok uygun elektronun sıralanmasıyla toplam enerjinin minimizasyonu sebebiyle, tür ve hibridizasyon sayısı sonuçlanır.

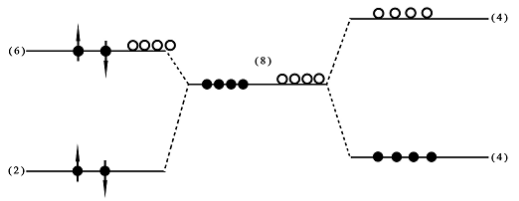
Si atom formu en yakın komşu diğer 4 Si atomu ile uygun tetrahedral yönlerde 4 bağ, Pauli dışarlama ilkesinenden dolayı 8 dejenere sp^3 orbitalleri, 4 daha alt seviyede orbitallerine (bütün atomla göz önünde tutulunca valans bandı önderliğinde) ve 4 üst seviye zıt bağlama orbitallerine bölünür. (iletim bandı) Sonuç olarak katı malzeme, bileşen atomlarıyla karşılaştırıldığında, kendi toplam enerjisini minimize eder.

- Grup 5 elementleri (uygun n tipi katkılayıcı) : $3s^2\ 3p^3$

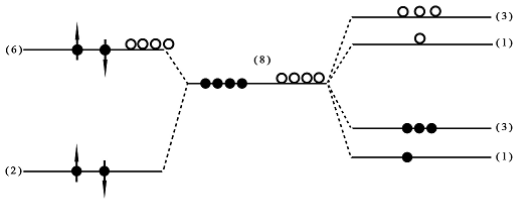
S elektron formu tek çift ya da bağsız çift P elektron formu kovalent bağ; bağlama ve zıt-bağlama orbitallerine Şekil 1.1 de görüldüğü gibi bölünür.

Grup 3 elementleri (uygun p-tipi katkılayıcı) : $3s^2\ 3p$

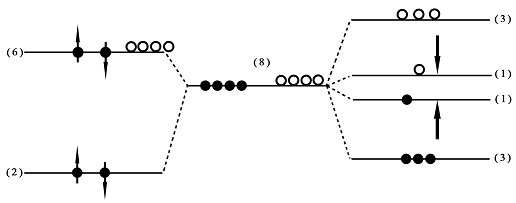
sp^2'nin 3 hibrit bağ, (şekilde görüldüğü gibi) "planar!"



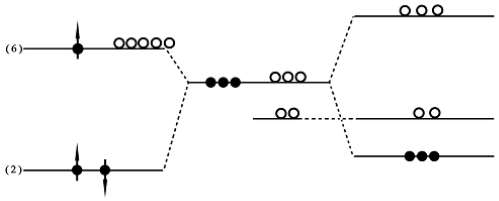
Şekil 1.1 $Si^0_4\ e^-$ dizilimi



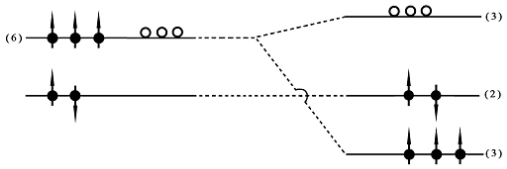
Şekil 1.2 SiH e^- dizilimi



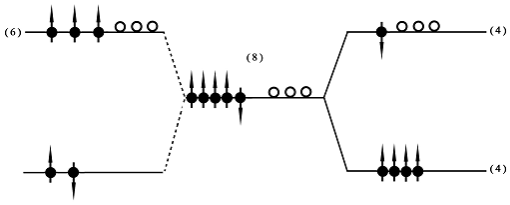
Şekil 1.3 Si^{0}_{3} e^{-} dizilimi



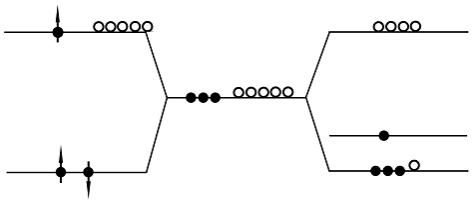
Şekil 1.4 Si^{+}_{3} e^{-} dizilimi



Şekil 1.5 Si^{-}_{3} e^{-} dizilimi



Şekil 1.6 P^{+}_{4} = Si^{0}_{4} e^{-} dizilimi



Şekil 1.7 B_4 = Si^{0}_{4} e^{-} dizilimi

1. grup (Alkali) – 1 tek s bandı

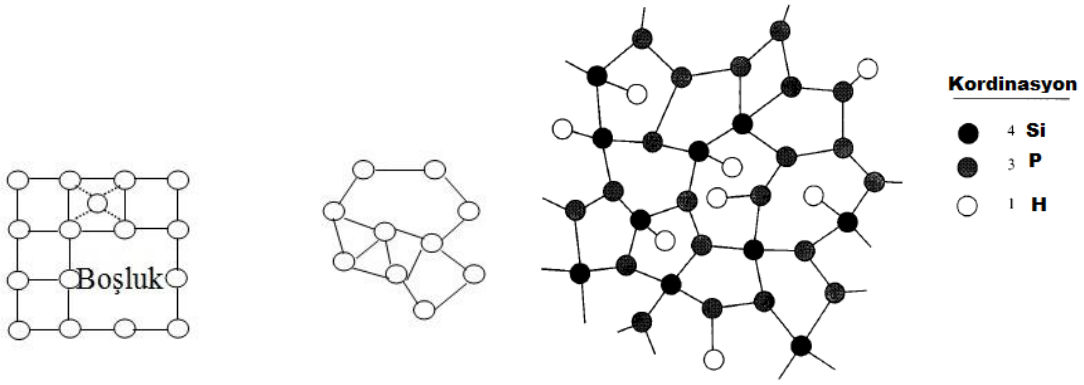
2. grup (toprak alkali) – 2 sp hibrit bağı (ya da orbitaller)

6. grup (kalkojen) – 2sp bağları

7. grup (halojenler) – 1 tek p bağı

8. grup (soygaz) – genellikle kovalent bağ yok.

N/8-N kuralı: koordinasyon sayısı z; Z=N N≤4 için Z=8-N N≥4 için (Böylece N/8-N kuralı kovalent bağlama içindir.Taban durumunda; I-IV sütun elementleri N tane iken IV-VII sütun elementleri 8-N tane bağ içerir.)[1] Kristal yapılarda, konum örgü tarafından tanımlanır. Sonuç olarak katkılayıcı atomlar örgü koordinasyonuna sahip olmaya zorlanır; Si kristali için bu dörttür. Ancak, amorf malzemelerde kesin olarak tanımlanan konum yoktur. Örneğin; saflık bozucu (impurity), kendi bağlanmasını optimize etmek için yerel çevreye kendini N/8-N kuralı gereğince adapte eder ve çoğunluk rastgele atomik ağın (örgünün) parçası olmaya devam eder.

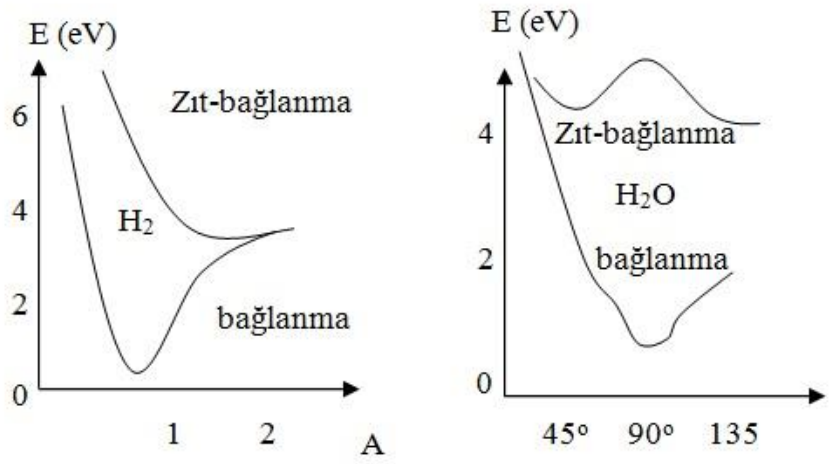


Şekil 1.8 basit kusurların farklı tiplerinin amorf malzemeler ve kristaller için gösterimi [1]

N/8-N kuralı, atomik olmayan katkılayıcıların (n tipi için fosfor, p-tipi için boron) amorf ortamında üç-bükümlü koordine edilmesini önermektedir ve bu yüzden elektronik katkılayıcı olarak başlıca inaktiftir. Başka bir deyişle, gerçekte katkılama yasaklanmamıştır fakat şiddetle sınırlandırılmıştır. Bu kuralın sonucu olarak; kimyasal bağlar, maksimum sayıda elektronun bağlanma durumlarında çiftlenmiş, kalan

elektronların zıt bağlı durumda çiftlenmiş ve bağlanmayanların boş olduğu biçimde şekillenmiştir.

1.1.2 Dışlanmış durumlar bandı, Yerelleşmiş durumlar bandı



Şekil 1.9 İnter atomik uzaklık ve bağ açısının gösterimi

Bağdaki uzamaya ya da bükülmeden herikisi de değerlik band durumunun enerjisini yükseltici (bağlanma) ve iletim band durumunun enerjisini düşürücü eğilim göstermektedir. Bandtail durumunun başlangıç durumu, Pauli dışarlama ilkesinden dolayı dışlanmış durumdaki ilgili bağa bağlıdır.

1.1.3 Bağ Gerilmesi

Düzensiz enerjinin en önemli kaynağı rastgele ağ (ağ koordinasyonu ve düzensizlik arasında bir ilişki vardır.) içindeki bağ gerilmesidir. Burada;

$\frac{\bar{Z}}{2}$ atom başına ortalama bağ (Atom başına sınırlandırılımış) sayısını verirken, $\frac{\bar{Z}(\bar{Z}-1)}{2}$ ise atom başına(atom başına sınırlandırılmış) ortalama bağ açıları verir.

Sabitlerin toplam sayısı;

$$N_C(\bar{Z}) = \frac{\bar{Z}}{2} + \frac{\bar{Z}(\bar{Z}-1)}{2} = \frac{Z^2}{2} \qquad (1.1)$$

ile hesaplanır. (Kimyasal kuvvetler; bağ uzunluğu daha kuvvetli olacak şekilde hem bağ uzunluklarını hem de bağ açılarını en uygun hale getirmeye eğilim gösterirler.) Her atom 3 boyutta hareket etmekte serbest olduğundan, sınırlandırılmış bağ uzunlukları ve bağ açıları sadece

$$N_C(\bar{Z})\left(=\frac{Z^2}{2}\right)\leq 3 \qquad (1.2)$$

'de (3 serbestlik derecesi) hesaplanabilir. Bu hesaplamada ideal koordinasyon $\bar{Z}$=2,45'tir.

$$N_C=\frac{Z}{2}+\frac{Z(Z-1)}{2}=\frac{Z^2}{2} \qquad (1.3)$$

(ilk terim gerilme (uzama) sayısı ve ikinci terim ise bağ bükülmesidir.)

Buna bağlı olarak a-Si, $\bar{z}$≈4, fazla düzenli ağdır (ya da sınır üstü). Bu gerilmeler;

1- Büyük yapısal özellikler:

   1.1- Yarılmalar

   1.2- Boşluk

2- Yerel kusurlar

   2.1- Değiştirilmiş bağ

   2.2- Kusur merkezleri

oluşumuna sebep olur.

Atomik boyut koordinasyon kusurları için, sadece koordinasyon altında bütün gerilmeleri $\bar{z}$'lerin düşürülmesi ile azaltılabilir (boşluklandırılamayan sarkık bağ). Aynı şekilde, peryodik tablonun 4. grup elementlerinden farklı olan diğer elementlerle yapılan Si alaşımları da Z'yi düşürerek gerilmeyi azaltır. $\bar{z}=4$ olan a-Si rastgele ağı olarak (katılarda kovalent bağlanmanın maksimum uygun sayısı için) ağ sınırlarının üstündedir. Bu sistem (toplam enerjiyi düşürerek) büyük sayıda $\bar{z}=3$ koordinasyonu

konumunu yaratarak (ya da $\bar{z} = 2$) rahatlatılabilir. Aşağıdaki şekilde görüldüğü gibi; düzensiz ya da sarkık bağlar yüksek yoğunluklu yerel elektronik durumlara sebep olur. Dolayısıyla bu saf a-Si; geniş alanlı opto-elektronik uygulamalarına bağlı olarak sıradan bir malzeme saf a-Si'un H (hidrojen) ile alaşımı a-Si:H bu malzemeyi geniş alanlı opto-elektronikler için temel bir malzemeye dönüştürür. H katkısı iki katlı :$\bar{Z}$ azaltılarak ağ rahatlatılır.:

$$\bar{Z} = 4(1 - x) + x = 4 - 3x \qquad (1.4)$$

(a-$Si_{1-x}H_x$ için %10 H için; $\bar{Z} = 3{,}7$) bu bağları sature ederek sarkık bağların yoğunluğunu azaltır. H'ın üçüncü katkısı ise malzemenin band aralığını arttırmasıdır. H, Si'den daha elektronegatif olduğundan, sıkı bağlanma hesapları göstermektedir ki, Si-H zıt bağlanma orbitalleri iletim bandının taşınırlık sınırından çok uzak olmadığı halde, Si-H bağlanma durumu a-Si:H valans bandında derindir. (Si-H bağ kuvveti≈3,4eV, Si-Si bağ kuvvetinden %40 daha fazla). (Şekil 1.1 – Şekil 1.7)

Ağın tamamını rahatlatmak için H yapısının %50'si gerekmektedir.($\bar{Z} \approx 2{,}5$) En iyi filmler %10 iken a-Si:H nispeten daha sınır üstü kalmaktadır. Ayrıca, a-Si: H yapısal olarak homojen olmadığı unutulmamalıdır. Diğer bir deyişle mikro boşluklar içerir. Daha çok H içerikli analizlerde bu durum göz ardı edilmemelidir. Hidrojenleme büyük ölçüde a-Si:H den kusur yoğunluğunu azalttığı halde, kalan kusurlar katkılamayı da içeren optik ve elektronik özelliklerin belirlenmesinde rol alır. Kusurların açıklamaları onların 3 genel özelliği ile gerçekleştirilir :

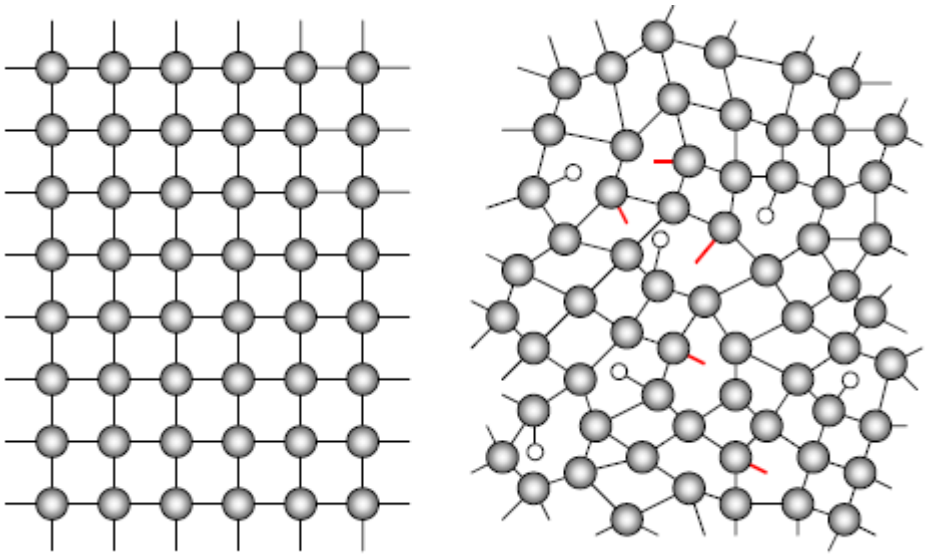
1. Aralıktaki enerjiyi seviyeleri
2. Atomik yapı ve bağlanma
3. Kusur reaksiyonları

İdeal amorf ağında (yani, bütün bağların doyduğu devamlı eden rastgele ağ) ($\overline{Z}$=4) ≠ C-Si (koordinasyon kusur durumu en anlamlısı) 50 noktadan daha fazla kusur olmasına ve çok büyük sayıda dışlanmış durumun kristal yapıda ayrılmasına rağmen, amorf yapılarda, koordinasyon kusurlarından ayrı olarak, bir kısmına yerel yapıda, optimum değerlikli (N/8-N kuralı) ideal amorf ağının parçası saflık bozucu ile birliktedir. Sadece

iletim ve valans bandlarını katkılandırır. N/8-N kuralının sonucu olarak kolon 5 ve 3 katkılayıcı elementler (baş katkılayıcı olarak fosfor ve boron) a-Si daki dışarıdan eklenen geniş önemdeki saflık bozucu çalışmaz. Bunlar 3 bağı (ve indirgenmiş $\bar{Z}$) oluşturarak ağ rahatlatıcısı olarak görev alırlar : P_3^0(fosfor) katkılamada inaktif olsa bile a-Si iki etki yaratır.

a) E_G yükseltir.

b) Dolaylı katkılama sağlar.



Şekil 1.10 Katkısız ve katkılı amorf Silisyumun şematik gösterimi

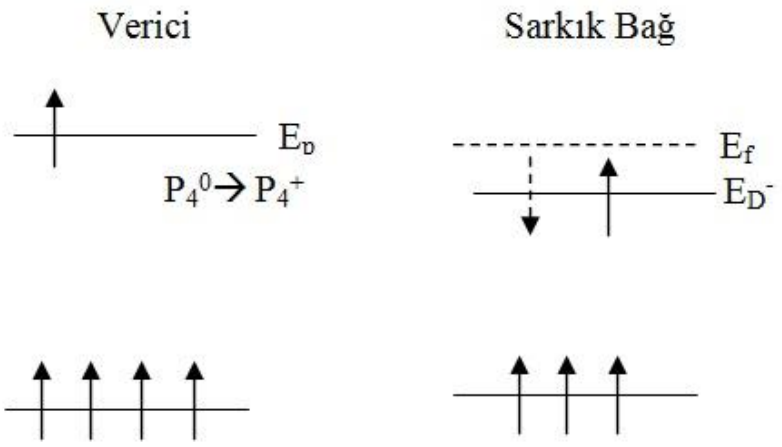
a)Si-P bağı Si-Si bağından daha güçlüdür,Si-H bandıyla da kıyaslanabilir. (Biraz daha zayıf, ÖR : P elektronegatifliği H'den biraz daha düşüktür.) P^3 gibi bağlı / zıt-bağlı Orbitaller (3s bağsız çift) tıpkı H'deki gibi E_G yükseltmeye öncülük eder.

b) Si-P zıt bağlı orbitalleri iletkenlik kenarının hemen altına yerleşmiştir, bu iletkenlik kenarının yerini düşürür, $E_c - E_c'$ $E_c' - E_f$ düşüş etkin katkılama ile sonuçlanır. (ya da katkılanması)

1.1.4 Katkılanma Mekanizması

Deneyler göstermiştir ki $E_c' - E_f$ değeri 0,7-0,8eV den 0,15eV a düşmüştür. Bu göstermektedir ki fosfor atomu ağa tetrahedral (sp^3) konfigürasyonda (P_u) olarak

katılmaktadır. Bu aktif katkılayıcılar toplam fosfor konsantrasyonun küçük kısmını oluşturduğundan beri N/8-N kuralından kısmi sapmalara sebep olabilir. Bu durum açıklanması gerekli bir durumdur: Aşağıdaki tek olasılık ;



Şekil 1.11 Verici ve sarkık bağlar

4 katlı konfigürasyonun 3 katlı konfigürasyona göre daha fazla enerjisinin olmasına rağmen, açıklanabilir konsantrasyon da enerjisi gösterilebilecek kadar düşüktür.

Sonuç olarak iyonize verici, P_4^+, N/8-N kuralına uyar. (Silikon atomları sp^3 orbitali önderliğinde, valans elektronlarına benzer duruma gelir.) (Şekil 1)

P_4^+konfigürasyonu (Şekil 1.11) : Katkılayıcı (P_4) ve sarkık bağ, kusur (D) yük takası açısından çift olabilir. (Bu konumlarının yakın olmasını gerektirmez, Birbirlerinden çok uzakta olabilirler fakat yinede termodinamik enerjisi Fermi enerjisi olarak (E_f) tanımlanan elektron dağılımı (Fermi denizi) ile etkileşebilir.)

Düşünün (oluşum enerjisi kavramı yakında tartışılacak)

$$U_{P_4^+} = U_{P_4^0} - (E_p - E_F) \qquad (1.5)$$

($U_{P_4^0} \uparrow E_F \downarrow$)(oluşum enerjisindeki düşüş zıt bağlı elektronların Fermi denizine (E_f) transferine bağlıdır.)

Burada E_f ; E_p (zıt bağlanma verici seviyesi) ve E_D^- (negatif olarak yüklenmiş ya da tutulmuş sarkık bağ kusuru çiftlenimi, D^-) arasında yer alır.[3]

Başka bir açıdan düşünürsek ;

U_{D^0}= (D^o), U_{D^-}= (D^-)

$U_{D^-} = U_{D^0} - (E_F - E_{D^-})$ (İki elektron durumu U_D↓ E_f↑)

verici – kusur çiftinin toplam oluşum enerjisi ($P_4^+ - D^-$)

$$U_{D^-} + U_{P_4^+} = U_{D^0} + U_{P_4^0} - (E_p - E_{D^-}) \quad (1.6)$$

Oluşum enerjisindeki azalma zıt bağlı verici elektronların, nötr sarkık bağa geçişi ile olur. Boron katkılaması da aynı şekilde düşünülebilir :

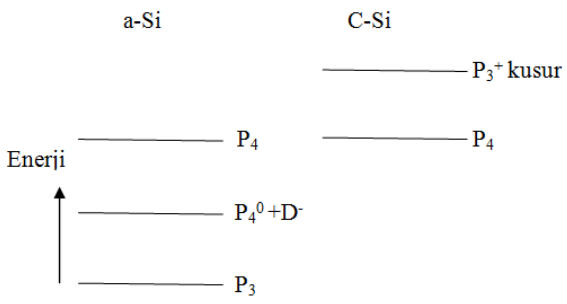
$$U_{B_4^-} = U_{B_4^0} - (E_f - E_B) \quad (1.7)$$

$$U_{D^+} = U_{D^0} - (E_{D^+} - E_f) \quad (1.8)$$

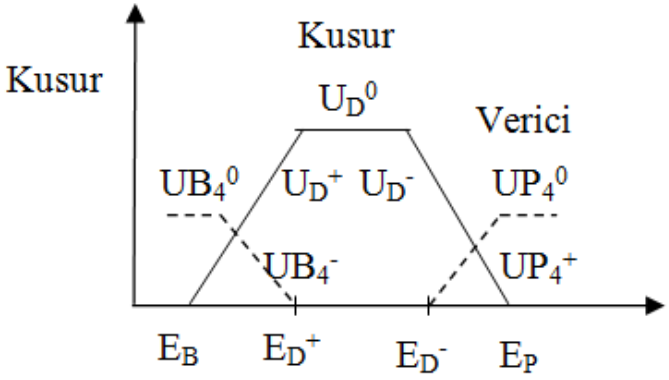
Burada E_f, E_B (bağlanma alıcı seviyesi) ve E_{D^0} (nötr kusur D^o) (Şekil 1.11) arasında yer alır. Alıcı ve kusur çiftinin toplam enerjisi ($B_4^- - D^+$) :

$$U_{B_4^-} + U_{D^+} = U_{B_4^0} + U_{D^0} - (E_{D^+} - E_B) \quad (1.9)$$

Oluşum enerjisinin azaltılması sarkık bağın tek elektronunun bağlanma alıcı seviyesine taşınması ile gerçekleşir.



Şekil 1.12 Oluşum enerjilerinin kıyaslanması



Şekil 1.13 E_f etkisi, oluşum enerjisindeki kusur pseudo aralığının içinde yer alır.

Fermi seviyesi Ef nin yeri yarıkta iletim bandına doğru yükseldiğinde, verici oluşum enerjisi $U_{P_4^+}$artar, sonuç olarak verici yaratılması durur; paralel olarak kusur oluşum enerjisi U_{D^-} düşer ve daha sonra kusur konsantrasyonu artar. Bu durum a-Si:H de bir çok metastable kusur yaratılmasına sebep olur.[4] (Benzer analiz E_f valans band doğrultusunda yöneldiğinde de yapılır.)

Deneyler (σ-T) göstermektedir ki E_f,'nin E_c'nin üzerindeki dışlanmış durumlara ulaşması engellenmektedir. (Burada hiç metalik iletkenlik yok) E_f yerelleşmiş durumlarda ve düşük katkılı etkilerde (Şekil 1.13) band tail içinde kalır. Üst limiti $E_c - E_f \approx 0{,}1eV$ tur. $E_f - E_v \approx 0{,}3eV$(geniş valans bandından dolayı büyük) Tail, E_f'yi E_v'den uzak tutmaktadır. (İletkenlik p durumunda < n durumundan)

1.1.5 Termodinamik Açıdan Bakış

Her katı çok sayıda mikroskobik parçacıktan oluşur ve bir sistem oluşturur. Bu sistemin makroskobik durumu, herbir bağımsız bileşenin durumuyla uğraşmadan termodinamiğin konusudur. Termodinamik sistem, sıcaklık ve iş değişimi ya da çevresi ile ilişkisi olmadığında ya açıktır (izole olmayan) ya da kapalıdır (izole). Denge durumu, sonsuz uzunlukta değişmeden kalan ve bağımsız ölçülebilir fiziksel parametrelerle belirlenen nadirliğe sahip makroskobik durumdur.

Durum parametreleri;

- Sistemin Hacmi V
- Basınç P
- Sıcaklık T
- Eğer birçok tür varsa, Ni türü
- Bu alandaki sistemler için elektrik ve manyetik alan şiddeti

Termodinamik sistemlerde zamandaki herhangi bir değişim en az bir durum parametresi dönüşümünü gerektirmektedir ve termodinamik süreç olarak adlandırılır.

Termodinamik yaklaşımlar iki ana postülaya (ya da yasa) dayanır.

1- İlk yasa

2- İkinci yasa

İlk Yasa : $du = -\Delta WP.\Delta V$ dış kuvvetler ya da basınçtan dolayı sistem tarafından

$\Delta Q =$ uygulanan net iş miktarı

$\Delta W =$ Sistemin iç enerjisindeki değişim.

Çevresinden (dışarıdan) alınan net sıcaklık miktarı.

(İç enerji) u ≡ Kapalı bir sistemde tüm enerji tiplerinin toplamı

- Bileşke parçacıların kinetik enerjisi
- Parçacıklar arası etkileşim potansiyel enerji
- Her parçacığın iç enerjisi

Durum fonksiyonu (ya da fonksiyon) dengedeki sistem için durum parametreleri arasında fonksiyonel etkileşim.[2] İç enerji U, sistemin durum fonksiyonu (Her duruma

benzeyen iç enerjinin bir ve sadece bir belirli değeri vardır, prosesin ısı durumunun yöntemi yoldan bağımsızdır.)

U = fonk (T, P, V) ΔQ ve dW nun zıtlık sadece sistemin başlangıç ve bitiş durumuna bağlı değildir, fakat prosesin yoluna da bağlıdır. Bir durumdan diğerine sabit T sıcaklığında geçen bir sistem, soğurulan ısı ΔQ, ΔQ/T gibi mutlak fonksiyon S (entropi) toplam diferansiyeline bağlıdır, iç enerji U gibi, sadece sistemin durumunda : ds = ΔQ/T dir.[20] Daha genel durumda, hem tersinir hem de tersinmez durumları kapsayan proseslerde; ds ≥ ΔQ/T olur. Termodinamiğin ikinci yasasına göre ısının ısının tersinmez değişimindeki entropi artışı tersinir prosesteki artıştan daha fazladır.

İlk Yasa dU = Tds-PdV halini aldı. Ancak,.sistemin iç enerjisi yapılan iş ya da değiştirilen ısıdan başka N bileşen parçacık sayısı ile de değişir. Bırakılan her parçacık belli miktarda enerjiyi kendisiyle birlikte taşır. Sonuç olarak, tersinir prosesler için du = TdS-PdV+μdN ; μ : kimyasal potansiyel, elektrostatik potansiyel ϕ ile benzerlik (enerjideki değişim dq ; enerjideki değişimin durumu = ϕ.dq).

G = Gibbs serbest enerjisi = H-TS burada H = U-PV U = oluşum enerjisi H = entropi

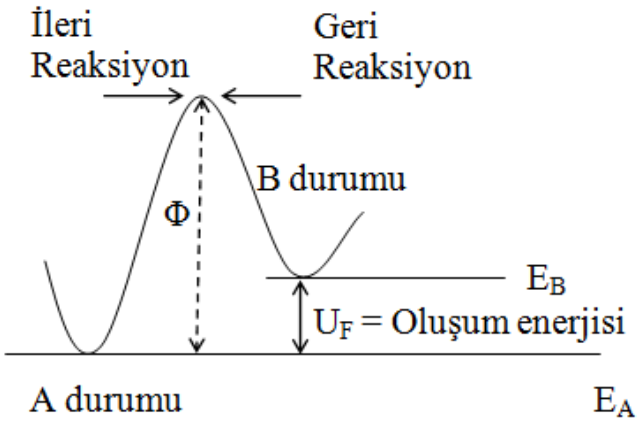
$$dG = -SdT + VdP + \sum_i \mu_i dn_i \qquad (1.10)$$

Termodinamik dengede dG = 0; T, P, n ; (her türün mol sayısı) sabit halini alır. Sistemin sıcaklığı (katı), fononların sayesinde çevre (ısı banyosu) ile enerjisini değiştirerek sabit hale getirir. (dT = 0) Ayrıca, katılarda birçok deney sabit basınç altında yürütülmektedir. (numune üzerinde ya da nummune tarafından hiçbir iş yapılmamış ise, numune mekanik dengededir) dP = 0 olur. Sonuç olarak; $dG \approx \sum \mu dn$; başka bir deyişle ; başka bir deyişle; her çeşit, bir türün kimyasal reaksiyon sayesinde diğer bir türe dönüşmesi ile değişir;bu yüzden termodinamik denge kimyasal reaksiyon oranı ile sınırlandırılır.

Termal denge de; sistem ve çevresi arasındaki ısı değişim oranı eşittir. (Bu değişime fonon (ya da foton) taşınması aracılık eder.)

Kimyasal denge; Kimyasal reaksiyon ileri ve geri oranları dengededir.

Atomik (ya da moleküler) taşınmaya aracılık eden bu kimyasal reaksiyon, a-Si:H daki kusurları analiz etmek için kullanılan anahtar prosestir.



Şekil 1.14 A ve B durumları arasındaki enerji farkının gösterimi

İki tür A ve B arasında kimyasal reaksiyon düşünelim: A ⇄ B

Kütle etki yasası

$$[B]_{eq} \;=\; [A]_{eq} e^{-\frac{U_f}{kT}} \tag{1.11}$$

Burada Φ kinetiği arttıran B durumunun oluşumuna karşı olan enerji bariyeridir.

$$[B]_{(t)} - [B]_{(eq)} = \{[B](0) - [B]_{eq}\} e^{-\frac{t}{\sigma}} \sigma = \sigma_0 e^{\frac{\Phi}{kT}} = denge\ sabiti \tag{1.12}$$

(U_f her türün bağıl konsantrasyonunu belirler)

Örneğin, entropi, S, N_0 özdeş konumunun ağı içindeki N kusurları için kusurların

$$s = kln(\Gamma)\Gamma = \frac{N_0!}{N!(N_0-N)!}, \tag{1.13}$$

Stirling yaklaşımı kullanılarak

$$Ln(x!) \cong xln(x) - x \tag{1.14}$$

Entropi eşitliği

$$S = k\left[N_0 \ln\left(\frac{N_0}{N_{0-N}}\right) - N\ ln\ (\frac{N}{N_0-N})\right] \approx -kN \ln\frac{N}{N_0} \quad (1.15)$$

farklı yollarla Γ dengeli sayılarında tanımlanmaktadır.

$$G = U + PV - TS = NU_f + PV = KT\left[N_0 \ln\left(\frac{N_0}{N_0-N}\right) - N \ln\left(\frac{N}{N_0-N}\right)\right] \quad (1.16)$$

$$\Delta G = NU_F - kT\left[N_0 \ln\left(\frac{N_0}{N_0-N}\right) - N \ln\left(\frac{N}{N_0-N}\right)\right] \approx NU_F + NkT \ln\left(\frac{N}{N_0}\right) \quad (1.17)$$

$$\frac{d}{dN}(\Delta G) = \mu \approx U_F + kT \ln\left(\frac{N}{N_0}\right) \quad (1.18)$$

Kimyasal potansiyelin genel tanımlaması:

$$\mu = \mu_0 + kT\ ln\ (c) \quad (1.19)$$

burada, $\mu^0 = U_f$

Kütle etki yapısı :

$$aA + bB \leftrightarrows cC + dD \quad (1.20)$$

A, B, C, D türler; a, b, c, d reaksiyondaki molekül sayısı; $\delta 0$ serbest enerjideki değişim; dG, girenlerin infinetisma değerleri ürüne dönüştüğünde:

$$dG = \mu_C dn_C + \mu_D dn_D - \mu_A dn_A - \mu_B dn_B \quad (1.21)$$

$$x = \frac{dn_A}{a} = \frac{dn_B}{b} = -\frac{dn_C}{c} = -\frac{dn_D}{d} \quad (1.22)$$

$$\frac{dG}{dx} = 0 = c\mu_C + d\mu_D - a\mu_A - b\mu_B \quad (1.23)$$

olduğunda G minimum olur.

$$\mu = \mu_0 + kTln\ (C) \quad (1.24)$$

$$\frac{C_A^a C_B^b}{C_C^c C_D^d} = e^{\frac{c\mu_C^0 + d\mu_D^0 - a\mu_A^0 - b\mu_B^0}{kT}} \quad (1.25)$$

oluşum enerjisi

Etkileşimsiz parçacıkların sisteminin entropisi $E = Sistemin\ enerjisi$

$$E = \sum_i E_i P_i \; P_i = e^{-\frac{E_i}{kT}/F} \quad (1.26)$$

k= Boltzmann faktörü

$e^{-\frac{E_i}{kT}/F}$=parçacık fonksiyonu (1.27)

E'nin çok küçük (infinitesimal) değişimi

$$dE = \sum_i E_i dP_i + \sum_i P_i dE_i = \sum E_i dP_i \quad (1.28)$$

$$sı = Td\sigma - PdV = 0 \quad (1.29)$$

görülmektedir ki:

$$E_{\ i} = kT(\log P_i + \log F) \quad (1.30)$$

$$dE = -kT \sum_i \log P_i dP_i - kT \log F \sum_i dP_i \quad (1.31)$$

$$d(\sum_i P_i \log P_i) = \sum_i \log P_i dP_i \mathrm{d0} \quad (1.32)$$

$$\sum_i E_i dP_i = -kTd(\sum_i P_i \log P_i) = TdS \quad (1.33)$$

çünkü

$$\sum_i P_i = 1 \sum_i dP_i = 0 \quad (1.34)$$

$$S = -k \sum_i P_i \log P_i \quad (1.35)$$

Denklem (1.16)'ya dönelim:

$$dG = \frac{dG}{dN} dN = 0 \quad (1.36)$$

$$N = N_0 \frac{e^{-\frac{U_F}{kT}}}{1+e^{\frac{U_F}{kT}}} = \frac{N_0}{1+e^{\frac{U_F}{kT}}} \approx N_0 e^{-\frac{U_F}{kT}} \quad (1.37)$$

Amorf silikon malzemede (a-Si) silikon sarkık bağ kusurları aşırı zorlanan ağların rahatlatılması sonucunda kaçınılmazdır. ([DB]=10^{19}-$10^{20}$$cm^{-3}$) Bu büyük miktardaki sarkık bağlar a-Si vasat duruma indirger ve neredeyse kullanışsız malzemeye dönüşür. Neyse ki pasifleştirerek hidrojenleştirme prosesi (düzeltme ya da H-bitirme) [DB]=10^{15}-$10^{17}$$cm^{-3}$'e düşürür. Buna rağmen yüklü miktarda hidrojen atomu bu malzemeyi (%10 atomik ya da tüm bağların %2,5'u; $5x10^{21}$ cm^{-3}, bu 50-500 kere üzerinde hidrojenlenmemiş a-Si sarkık bağları pasifleştirme miktarına ihtiyaç duyar.) DB'nin bazı kısımları sonlandırılmamış olarak kalır. Başka bir değişle; kusur oluşumuyla (ekzotermik reaksiyon) kazanılan entropinin, sistemin toplam serbest enerji minimizasyonunun lehine olması gerekir. Bu nedenle [DB] küçük keyfi varsayımlarla [DB] ve [Si], Si ⇄ DB basit denge reaksiyonu boyunca yapılamaz, (1.37)'deki yaklaşım kullanılarak;

$$[DB]_{eq} = [Si]_{eq} e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \quad (1.38)$$

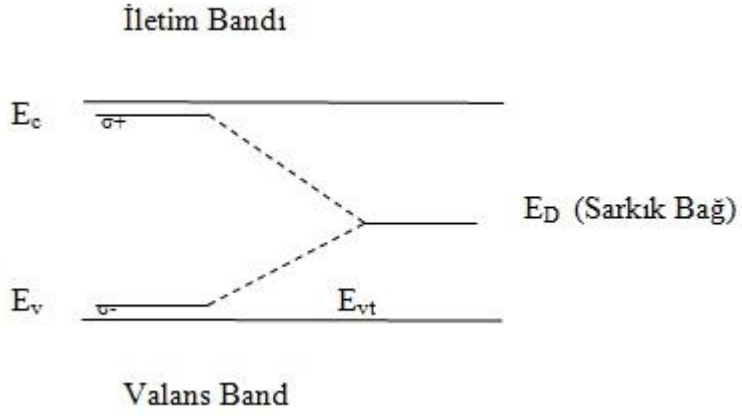
$[DB]_{eq}$~$10^{16}$$cm^{-3}$, $[Si]_{eq}$ =$5x10^{23}$$cm^{-3}$ ve $\Delta E = 0{,}4\ eV$ olduğu [DB]'ye bağlı çok güçlü sıcaklık gerektirir, ancak, deneyler göstermektedir ki aktivasyon enerjisi 0,15-0,20eV civarında olan düşük sıcaklık bağlılığı [DB] ve zayıf bağ olabilecek [WB] 10^{18}- $10^{19}$$cm^{-3}$ civarında ağ bileşeninin çok daha küçük alt kümesi arasındaki dengeyi yönetir.[11]

$$[WB] \leftrightarrows [DB] \quad (1.39)$$

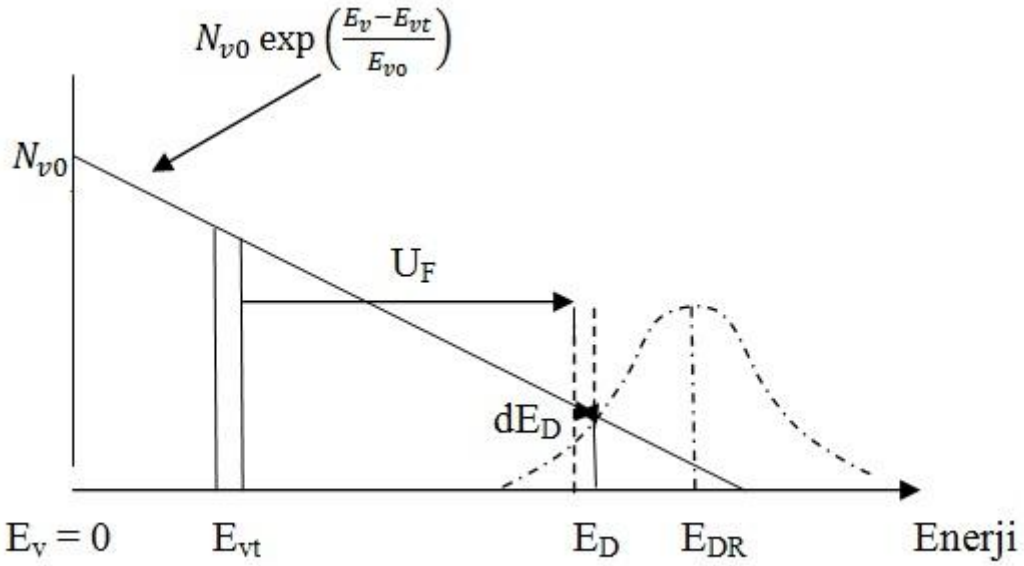
Bir kopuk bağ iki yerine bir DB yönetir.

$$SiSi[WB] \rightleftarrows 2DB \quad (1.40)$$

(Nötral, çünkü ESR deneydeki göstermektedir ki paramanyetizm diğer değişle spin aktif kusurdur.)



Şekil 1.15 Elektronik durumlarda değişme zayıf bağın (WB) sarkık bağa (DB) dönüştüğü zamanlar için gösterilmiştir.[7]



Şekil 1.16 WB'nin DB'ye dönüştürülmesi sırasındaki enerji değişimleri

Nötral kusurun oluşum enerjisi aşağıdaki gibi değerlendirilebilir :

$$U_f = E_D - E_{vt} + [\sum_{VB+WB}(E'_{VB} - E_{VB}) + \Delta E_{iyon}] \quad (1.41)$$

WB'yi DB'ye dönüştürme elektronlardaki değişime yol açar. (Valans bandındaki bağlanma durumu E_{vt}'den aralıktaki bağsız durum E_D'ye)

VB, WB ve diğerleri kopuk bağlardan (E_{vB} ve E_{vB}'nin valans band enerjileri olduğu elektron durumları önce ve sonra sırayla bağlar kırılır), bu multi (çoklu) elektronik etki

olarak adlandırılır. ΔE_{iyon}; iyon çekirdek etkileşimi yapı için DB kusuru ile ve ilesiz enerjideki değişim (iyonik rahatlama) çoklu elektronik etki ve iyon rahatlaması ihmal edilir. (a-Si:H yüksek oranda düzensizdir, rahatlama enerjileri bu malzemede küçük olmalıdır, üstelik bu iki bahsedilen etki birbirlerini iptal edebilir) Sonuç.olarak bundan sonra U_f ;

$$U_f = E_D - E_{vT} \tag{1.42}$$

olarak alınacaktır.E_D=son, E_{vT}=başlangıç

U_f'nin beklenen dağılımı: U_f, oluşum enerjisi amorf malzemenin rastgele ve düzensiz bağlı olarak konumdan konuma değişir. Diğer bir deyişle E_{vt} ve E_D'nin her ikisi de konuma bağlıdır : WB yoğunluğunun enerji (E_{vt}) bağımlılığı eksponansiyel olarak VB sınırından aralık içinin derinliklerine kadar azalan bir fonksiyondur. [4]([WB]≈exp ($(E_v-E_{vt})/E_{vo}$)). DB_s için yoğunlukları Gausyen bir dağılım segilemektedir.

$$P(E_D) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(E_D - E_{DP})^2}{2\sigma^2}} \tag{1.43}$$

$P(E_D)$ konumun statik dağılımını verir. (ya da dağılımı $P(E_D)$ tarafından verilen büyük potansiyel havuzu) DB kusur yoğunluğu hesaplamak için, kimyasal potansiyel μ_d (E_D) U_f oluşumu yerine kullanılmalıdır. (μ_d ekstra DB kusuru için sisteme serbest enerji ilavesi olarak tanımlanır.) μ_d'nin değerlendirilmesinde, DB durumunun yükü hesaba katılmalıdır ; diğer bir deyişle ;

μ_d = fonk (E_f) (band aralığında DB'ler dağıldığında, DB'nin amfoter doğası aynı zamanda 3 yük durumunu da etkiler. Şekil 13) DB durumundaki elektronların ortalama enerjisi $<E_D>$ aşağıdaki gibi ifade edilir:

gibi ifade edilir :

$$< ED > = E_F f^+(E_D) + E_D f^0(E_D) + (2E_D - E_f + U) f^-(E_D) \tag{1.44}$$

$E_F f^+(E_D)$ =Elektronların Pozitif DB durumu (DB^+) Fermi seviyesi E_f'de bulunmaktadır.

$E_D f^0(E_D) =$ Nötral DB durumu E_D'nin elektronu (DB^0) kusur enerjisi E_D'de bulunmaktadır.

$(2E_D - E_f + U)f^-(E_D)$ =Ekstra ikinci elektron E_f'den negatif DB durumu için (DB^-) kusura (E_D) durumu elektronları $E_D+E_D-E_f+U$ toplam enerjisine yöneltir. (düzeltme enerjisi)

a) f^+, f^0 ve f^- her yük durumundaki DB kusurlarının olasılığıdır. (Şekil 13)

b) E_D =DB'nin (+/0) dönüşüm enerjisi ;

τ/S = yük durumu τ'den S'ye termodinamik dönüşüm enerjisi, bandın taşınırlık sınırı bağıl ölçülür. (termal dengede DLTS gibi deneylerde) $E_D + U$ =DB'nin 0/- dönüşüm enerjisi kimyasal potansiyel kusuru μ_d olur:

$$\mu_D =< ED > -TSe \tag{1.45}$$

$$Se = -k\,[f^+ \ln f^+ + 2\,(f^0/2)\,ln\,(f^0/2) + f^- lnf^-\,] \tag{1.46}$$

İki alternatif (spin dejenerasyonu ↑ ya da ↓)

Eğer kusur yüklüyse

$f^+ = 1$; Se = 0

$f^- = 1$; Se = 0

Eğer kusur nötral ise;

$f^0 = 1$; Se = - kln (½)

$$(f^+)^{-1} = 1 + 2e^{\frac{E_F - E}{kT}} + e^{\frac{2E_F - 2E - U}{kT}} \tag{1.47}$$

$$f^0 \Big/ f^+ = 2e^{\frac{E_F - E}{kT}} \tag{1.48}$$

$$f^{-}\Big/_{f^{+}} = e^{\frac{2E_F - 2E - U}{kT}} \tag{1.49}$$

$$f^{+} + f^{-} + f^{0} = 1 \tag{1.50}$$

(1.50)'yi kullanarak

$$\mu_d(E_D) = E_F + kT \ln f^{+}(E_D) \tag{1.51}$$

$$\mu_d(E_D) = E_D + kT \ln \frac{f^{0}(E_D)}{2} \tag{1.52}$$

$$\mu_d(E_D) = 2E_D - E_f + U + kT \ln f^{-}(E_D) \tag{1.53}$$

Bundan sonra, kusur enerjisi E_D kimyasal potansiyel ile yer değiştirebilir,

(1.52)'ye kütle yasasındaki etki hesaba katılmalıdır:

Diyagramda (Şekil 1.17-1.19) E_f etkisi DB'nin değeri (metastabilty) ve yük durumu gösterilmektedir. Bütün etkiler Ef'yi değiştirir (yarı kararlıdır). Bu günlerde, DB durumunda Si yoğunluğunun, WB ve DB dönüşümüne bağlı olan kimyasal denge prosesi tarafından belirlendiğine dair fikir birliğine varılmıştır.[17]

$$\mathrm{SiSi\ (\ WB\ )} \rightleftarrows 2\mathrm{DB} \tag{1.54}$$

Pratikte, bu konfigürasyon (ya da reaksiyon) hem aynı WB konumunda kusur kalıntılarının yerelleştiği yerde ESR deneyleri paramanyetik ESR sinyalini gösterdiği için doğru olmayabilir (etkin spin ya da yalıtılmış nötral DP gereklidir.) ESR deneyleri ile tutarlı olabilmek için, DB kusurunun bu çifti birbirinden uzağa hareket etmelidir. Fakat, bu DB kusurları (ya da difüzyon) sonuç hareketi göreceli olarak düşük sıcaklıkta olası olmadığı görülür. Dolayısıyla deneysel olarak mikroskobik proseslerin dengesinin taşınabilir türlere ihtiyacı gözlenmektedir. [gerilme potansiyeli ($\approx e^{-(\frac{t}{\tau})\beta}$)] dengeleme kinetiği çeşidi tek türe ihtiyaç duyar,göreli düşük sıcaklıkta malzeme boyunca dispersiv difüzyon prosesleştirilir : Türlerin difüzyonu devamlı rastgele zaman ilerlemesi (CRN) gibi çalışıp alternatif adımlardan ve Tail durumu boyunca taşınan yüklerin transferindeki benzer durumlardan ibarettir ; daha derin tuzaklarda serbest bırakma

zamanı daha uzundur, denge daha uzun zamanda daha çok yavaşlar, diğer bir deyişle durdurma zaman dağılımının zamana bağlı güç yasası vardır. Bu yönden hidrojen atomu (a-Si:H'da dağılım hareketlidir) taşınır türlere ihtiyaç duyabilir. Sonuç olarak hidrojen "bitiş sonucu" için gerekli olmamasına rağmen, katkısı iki şekilde olur:

a)Kusur yaratılması ya da prosesi dengeleme sırasında mikroskobik mekanizmayı sağlar.

b)Kusur oluşum enerjisini düşürmek için ekstra entropi sağlar:

DB kusurlarında olduğundan daha çok H konumunda birçok düzen vardır. ([H]≈ $5x10^{21}$ cm^{-3}, [DB]≈ 10^{19} katkılanmamış a-Si:H da) Bu yüzden entropinin büyük miktarı kusurlar tarafından oluşan birçok H konum olasılığından ileri gelir; diğer bir değişle entropi kazancından E_D enerjisindeki DB kusuru sadece Si-H konumlarından elde edilebilir ve bu form aynı E_D enerjisinde DB kusurunu oluşturur. [1]

$$P_{DB} = \frac{D(E_D)}{[H]P(E_D)}\mathrm{E_D} \tag{1.55}$$

Herhangi verilen hidrojen konumunun oluşturduğu DB kusurunun olasılığı Kusur başına bileşik entropi denklem 6'nın $D(E_D)$'ye bölünmesiyle elde edilir :

$$S_H = -k\sum\frac{P_{DB}\ln(P_{DB})}{D(E_D)} = -k\frac{[H]P(E_D)}{D(E_D)}P_{DB}\ln(P_{DB}) = -k\ln\left[\frac{D(E_D)}{[H]P(E_D)}\right] \tag{1.56}$$

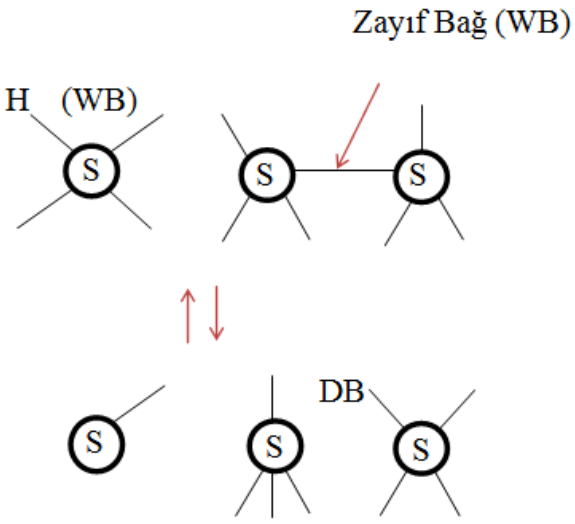
Tüm $[H].P(E_D)$ 'nin hidrojen konumunun belirli $P(E_D)$ olasılığı üzerinden

DB kimyasal potansiyel kusurunun önceden verilen ifadesi ((1.45) ve (1.51)) μ_d (E_D) şu duruma gelir:

$$\mu_d(E_D) = E_D + kT\ln\left[\frac{f^0(E_D)}{2}\right] + kT\ln\left[\frac{D(E_D)}{[H]P(E_D)}\right] \tag{1.57}$$

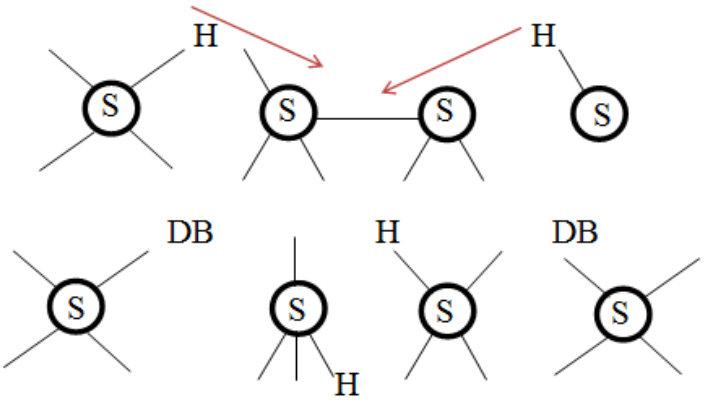
Bu son hidrojen katkı terimi, aynı etki hidrojenin yer aldığı denge reaksiyonunda kütle etki yasası uygulaması olduğundan ihmal edilebilir.

Sonuç olarak hidrojen denge gerektirmekte (ya da aracılık etme) ya da a-Si:H'da denge reaksiyonu:



Şekil 1.17 ilki yalıtılmış SiH bandından İkincisi ise (SiHDSi) yalnız hidrojenleştirilmiş SiSi bandından yaratılmış iki kusur

$$SiH + SiSi \rightleftarrows DB + (SiHDSi) \tag{1.58}$$



Şekil 1.18 SiSi bağlarının H işgali

SiSi bağlarının sadece sıfır ya da iki H atomuna sahip olabilmesi düzeltme enerjisinin (UH) H işgalinin negatif durumlar için olduğu anlamına gelir

$$2SiH + SiSi \rightleftarrows 2DB + SiHHSi \tag{1.59}$$

Kütle etki yasasının uygulaması taşınabilir türler gerektirmektedir, reaksiyondaki (1.58) ve (1.59) hidrojen atomu Si ile güçlü bağ oluşturur. (SiH bağlanma enerjisi 3-4eV

civarındadır.) Bu hidrojen sıçraması bu konumdan hareketli (ya da çatlak) konum boyunca çoklu uyarma boyu " yerelleşir " durum SiH konumu ve hareketli konum boyunca bırakılır. Sonuç olarak çatlaklı hidrojen (H_I) ve çatlakhidrojen konumu (I) dengede türleri kapsayan ya da başlıca 3 kimyasal dengeleyici reaksiyonu ((1.60), (1.61) ve (1.62)'de verilen) olarak sunulmalıdır.[12]

$$SiH + (I - HI) \rightleftarrows DB + HI \tag{1.60}$$

$$(SiHDSi)(I - HI) \rightleftarrows SiSi + HI \tag{1.61}$$

$$(SiHHSi) + (I - HI) \rightleftarrows (SiHDSi) + HI \tag{1.62}$$

(1.61) + (1.62) aşağıdaki genel denklemi verir.

$$(SiHHSi) + 2(I - HI) \rightleftarrows SiSi + 2HI \tag{1.63}$$

(1.60) – (1.61) = (1.58)'i verir.

(1.60) + (1.60) – (1.61) – (1.62) = (1.59) verir.

Fakat (1.58) ve (1.59) bu kombinasyonların kütle etki yasası uygulamasında farklı sonuçlar vermelidir. Çünkü serbest enerji eski durum çiftlerinde minimize olmalıdır. Dehidrojenasyon deneyi, (1.62)'de gösterilen DB'nin yaratıldığından daha çok hidrojen uzaklaştırılmıştır, bu çift hidrojenleşmiş bağların oluşmasına yol açabilir. (SiHHSi) iki komşu Si konumu arasındaki hidrojen düzeni tartışmalıdır. (bağ merkezli, H2* ya da SiHSiH); ancak eğer her iki H atomu da uzaklaştırılırsa, normal SiSi bağları yeniden düzenlenir.Diğer bir deyişle ileri hidrojenlendirme ya da sınırlı dehidrojenasyon WB ve DB dağılımlarının her ikisini de çok fazla etkilemez, bu da sonuçta kimyasal reaksiyonun SiSi bağ enerjisinden bağımsız olduğunu göstermektedir. ((1.63) göstermektedir ki tipik ya da normal SiSi bağları WB'dan daha çok kapsamaktadır.)Diğer taraftan, termodinamik olarak, WB'ler tercihen hidrojenler tarafından tutulmaktadır.Bu duruma uygun bir açıklama şu şekildedir: Bu ikili hidrojenleme (SiHHSi) bileşimi çevre örgüdeki bağları zayıflatır. (SiSi bağların hidrojenlenmemiş SiSi bağlarıyla kıyaslanmasında iki H atomunun uyum sağlaması için daha çok yere ihtiyacı vardır, bu her nasılsa çoklu elektronik etkili gerilme enerjisine

öncülük eder.) Net sonuç aşağıdaki gibidir: H işgali bazı WB'leri etkisiz hale getirir, fakat SiHHSi bileşimini saran zayıflamış SiSi bağları yeni WB'leri oluşturur öyle ki kapsamlı WB dağılımı etkilenmemiş olarak kalır. (Hidrojenlemenin başlangıcında, en zayıf WB'lar hidrojen atomları tarafından tutulur. Band tail durumu dağılımı daha keskinleşir, fakat bazı hidrojen içeriklerinde kararlı duruma geçilir.)

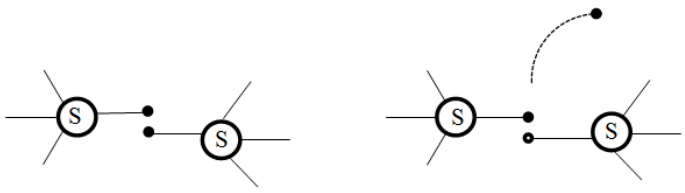
Sonuç: Tüm WB dağılımı değişmezken, etkideki eklenen hidrojen zayıf SiSi bağları yerine tipik SiSi bağlarını tutar. SiSi bağları bu nedenle iki gruba ayrılabilir .

- Bu iki H atomundaki bağlanma (güçlü bağlar), iyi bir kalitedeki a-Si:H %10 hidrojenin yaklaşık %35'iSiHHSi yapısında sınırdadır.

- Kusurları tek hidrojen atomunu bağlayarak (zayıf bağlar) (SiHDSi) oluşturabilir.

DB kusurlarını yalıtılmış SiH konumlarında oluşturan denklem 23 reaksiyonu için enerji olarak uygunluğu yoktur. (DB kusurlarının SiHDSiDB ihtiyacı için enerji göz önüne alındığında, yalıtılmış DB kusur conc. aşmaktadır.) Bu yüzden en az bir tanesi göz ardı edilir. Bu nedenle (1.61) ve (1.62) denge ve dengelemenin ana reaksiyonudur: Bu mikroskobik model taşınır çatlak hidrojen atomları (HT) serbestliğini değerlik band tail teki SiHHSi yapısının bir DB yaratmasından dolayı kapsamaktadır. (SiHDSi)

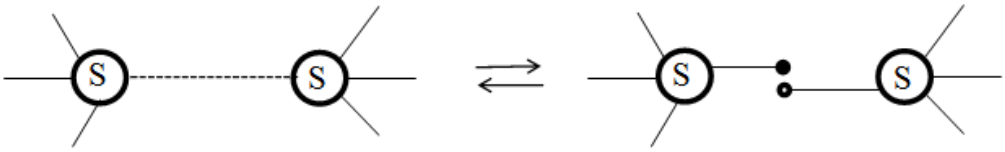
$$SiHHSi \rightleftarrows SiHDSi+H_I \qquad (1.64)$$



Şekil 1.19 Birinci DB'nin yaratılması

Hareketli H, (.) daha sonra ağ boyunca yayılır ve uzak konumdaki SiSi bağına ikinci bir DB vermesi için konar.

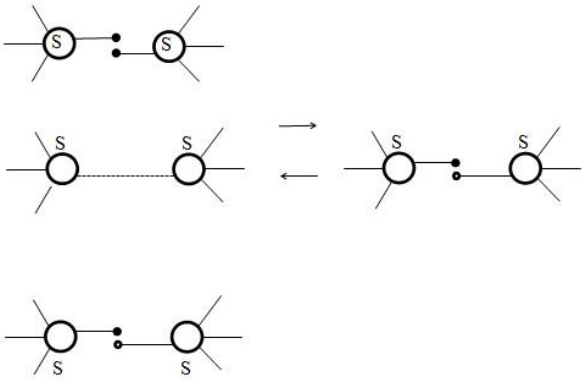
$$Si\text{-}Si + H_I \leftrightarrows SiHDSi \quad (1.65)$$



Şekil 1.20 İkinci DB'nin yaratılması

Yukarıdakine ek olarak iki ardışık reaksiyon genel reaksiyonu verir.

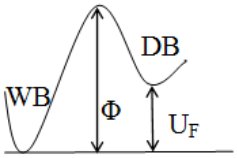
$$SiHHSi + Si \rightleftarrows 2SiHDSi \quad (1.66)$$



Şekil 1.21 DB kusur oluşumu

$$SiHHSi \rightleftarrows SiHDSİ + H_I \quad (1.67)$$

$$SiSi + H_I \rightleftarrows SiHDSi \quad (1.68)$$



Şekil 1.22 DB kusur oluşumunu sağlayan enerji bariyeri gösterimi

Φ = DB kusur oluşumunu sağlayan enerji bariyeri (kusur oluşum kinetiğini kontrol eden)

U_f = Dengede kusur yoğunluğunu kontrol eden oluşum enerjisi.

Denge kusur yoğunluğu yukarıdaki reaksiyonlara kütle etki yasası uygulanarak çözülebilir. ((1.60), (1.61), (1.62), (1.63)) her iki WB ve DB enerjileri E_{vt} ve E_D sırasıyla dağılırken, kütle hareketinin uygulaması farklı olarak yapılmalıdır. Denge için WB dE_{vt} enerji dilimi içinde ve dE_D (E_D ve E_D+dE_D arasında) dilimindeki kusur arasında izinlidir. Yukarıda gösterilen kimyasal reaksiyon enerjisi elektronik enerji değişimi olarak ifade edilebilir. (Bu reaksiyon enerjisi tanımlanabilir, keza hidrojen geçiş enerjisi terimi)

Reaksiyon enerjisi final (ürün) – başlangıç (giren) olarak ölçülür.

(1.60)'ın; $\Delta E = E_D + E_{HI} - 2E_{SiH}$

(1.61)'in; $\Delta E = 2E_{vt} + E_{HI} - 2E_{SiH} - E_D$

(1.62)'nin; $\Delta E = E_D + E_{HI} - 2E_{SiH} - 4E_{SiH} - 2(E_{vt} - E_v)$

$$= E_D + E_{HI} - 2E_{SiH} - 2(E_v - E_{vt})$$

(1.63)'ün; $\Delta E = 2E_{HI} + 2E_{vt} - 4E_{SiH} - 2(E_{vt} - E_v)$

$$= 2E_{HI} + 2E_v - 4E_{SiH}$$

1.1.6 Radyo Frekansı (RF) Plazma (ya da Parlaklık Boşalması)

Yeterli büyüklükteki F'nin elektrik alan altında (yeterli yüksek voltajda), reaktördeki gaz bozulur; yaratılmış olan elektronun serbest bırakılması ile başlar.

- Fotoiyonizasyon
- Alan emisyonu
- İkincil elektron emisyonu (Malzemede bir iyonun çarpışmasından sonuçlanır.)

Bu elektron, F altında ivmelenir, gaz molekülleri ile esnek ve esnek olmayan çarpışma yapar. Esnek çarpışmanın etkisi ihmal edilebilir, fakat esnek olmayan çarpışmanınki aşırı derece etkin olduğundan ihmal edilemez, bunlar iki gruba ayrılır;

- İyonlaştırıcı çarpışması: elektron ve iyon çiftinin üretilmesi.
- İyonlaştırmayan çarpışma

Moleküllerin ya da atomların elektron ilgisi ışıklı parlaklığa öncülük eder. (parlaklık boşalması, plazma)

Moleküler parçalanma yüksek reaktif atomlara ve serbest radikallere öncülük eder; bu türlerin üretilmesi kimyasal ve katı yüzeyle fiziksel etkileşim tarafından çöküntü (ya da aşındırma) oluşturur.

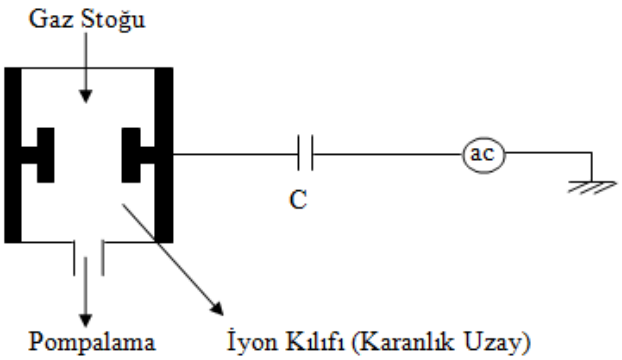
Elektrik anlamda nötr ve tamamlanmamış kimyasal bağlanmanın önünde bir atom ya da bir grup atom olması molekülü reaktif yapar (Serbest radikal).

- Bir taraftan elastik olmayan çarpışma plazmanın içinde yüklenmiş parçacıklar yaratır.
- Diğer taraftan; yüklü parçacıklar plazmadan şu sebepten yok olur;
    - ✓ Sürüklenme ve konteyner sınırlarında difüzyon
    - ✓ Yeniden birleşme (elektronun pozitif iyonlarla birleşmesi)
    - ✓ Negatif iyonlardan elektronegatif nötral moleküllere ekler (elektronlar)
    - ✓ Kararlı durumda yüklü parçacık yaratılması ve kayıp süreçlerin birbirlerini dengelemesi
    - ✓ Plazma devamlıdır

Ayrıca, 1 Torr civarında gaz basıncı için

- ✓ 10^{10} elektron (ya da iyon) / cm^3 (Zayıf iyonlaştırılmış ortam)

✓ 10^{16} nötral molekül / cm^3 (Zayıf iyonlaştırılmış ortam)



Şekil 1.23 ac voltajla çalışan plazma reaktörü

(Gaz durmadan önce; dış akım = 0), (Gaz durduktan sonra; dış akım ≠ 0)

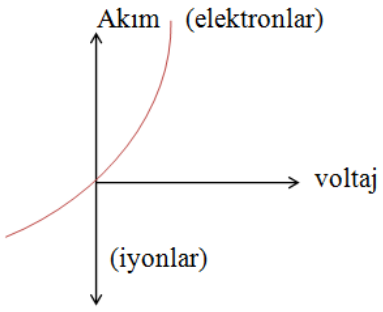
Verilen elektrod;

Eğer potansiyel > 0 ise, I_e akımı öncülüğünde elektronlar plazmada toplanır.

Eğer potansiyel < 0 ise, I_{iyon} akımı öncülüğünde pozitif iyonlar plazmada toplanır.

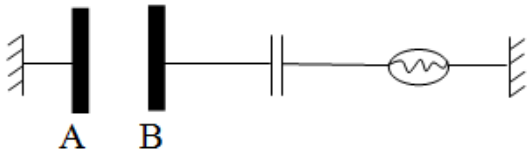
Elektronlar ağır iyonlardan daha çok fazla taşınabilir. ($I_e > I_{iyon}$)

Uygulama alanı frekansı (f) çok düşük (dc) değerlerden daha yüksek değerlere (ac) yükselir, kesin bir değer ötesinde yaratılan iyonlar, analiz sırasında bir yarım alan içindeki elektrod aralığından tam olarak çıkarılamaz.



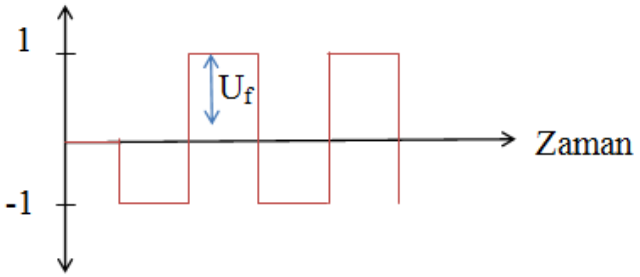
Şekil 1.24 elektron ve iyonların akım voltaj grafiği

Fakat e^- kolayca çıkarılır (kütlelerin farkından dolayı). Yarım döngüde elektronların pozitif elektroda sürüklenme zamanı yetersiz olduğunda, f artar (büyük kesir) ve bu elektronlar ara elektrod aralığında salınıp çarpışmalar gaz molekülleri ile etkileşir.

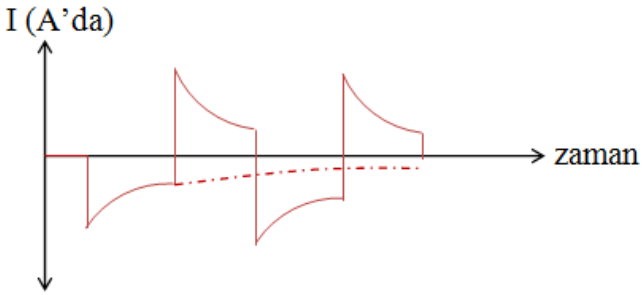


Şekil 1.25 RF Plasma reaktörü

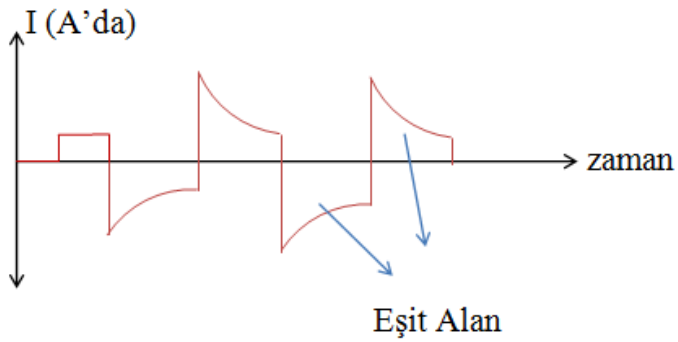
V_0 potansiyelinin değeri çemberdeki gaz prosesini durdurmaya sebep olacak büyük olmalıdır. dc durumunda; bir yalıtkan yüzeyinde, taşınmış elektronlar + iyonların nötrleştirilmesinden dolayı tekrar doldurulamaz. + yüklerin yığılması yavaş yavaş – elektrodların öngerilimini sıfır yapar.



Şekil 1.26 Reaktördeki Jeneratörün voltaj zaman grafiği

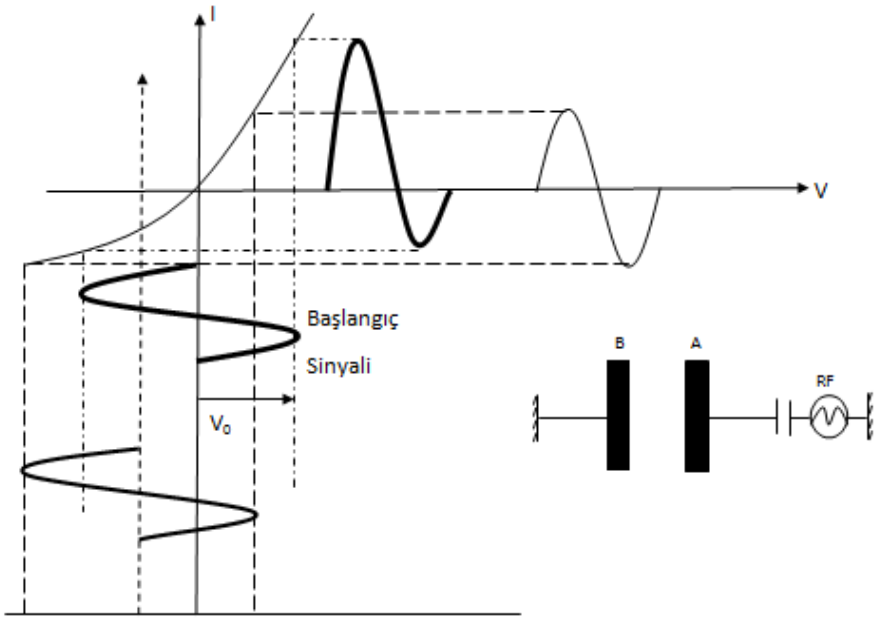


Şekil 1.27 A elektrodundaki voltajın zamanla değişim grafiği



Şekil 1.28 A elektrodundaki akımın zamanla değişim grafiği

Negatif döngüde; + iyonlar A elektrodu doğrultusundaki boşalmalardan ivmelenir. (pozitif döngüde boşalmış elektronlar elektrod doğrultusunda ivmelenir) Bu iyonlar elektrod yüzeyinden nötrleşmek için elektron koparır ve arkasında pozitif yükü bırakır (elektrod yüzeyinden).[15] Döngünün pozitif kısmı sırasında, elimizdeki elektrodlar elektron toplar. Elektronların kütlesi iyonlardan daha küçüktür (ve elektrik alan elektrod yüzeyine çabucak ivmelenir). İlk döngüyü yarıya indirme sırasında iyonlardan çok daha fazla elektron net negatif yüklere öncülük eder. Sonraki döngüler için, bu negatif



Şekil 1.29 Akımın voltajla değişim grafiği

yüklenme negatif döngüde kazanılan elektronların itildiği ve kazanılan iyonların uyarıldığı daha güçlü elektron konsantrasyonu (iyon konsantrasyonu gibi durumlarda kararlı durum) artar. Elektrod bu ortamada negatif yük oluşumu negatif dc offset voltajının bu elektrodla boşalım (plazma) arasında oluşumasına sebep olur. Buna neredeyse uygulanmış RF voltajının tepesine eşit "self bias voltajı" adı verilir. (Bu self bias voltajı iyonları hızlandırır.)[18]

$$\frac{V_B}{V_A} = \left(\frac{A_A}{A_B}\right)^4 \tag{1.69}$$

(Sırasıyla A ve B elektrodu için)

A_B = Topraklanmış elektrod alanı (Kontaktta plazma ile tüm topraklanmış yüzey alanları; plazma çemberi duvarlarıda dahil.). $A_B >> A_A$ ve $|V_A| > |V_B|$ için.

$$J = \frac{KV^{3/2}}{\sqrt{m}D^2} \tag{1.70}$$

J = Child – Langmuir Denklemi (Sınırlı Akım için uzay yükü)

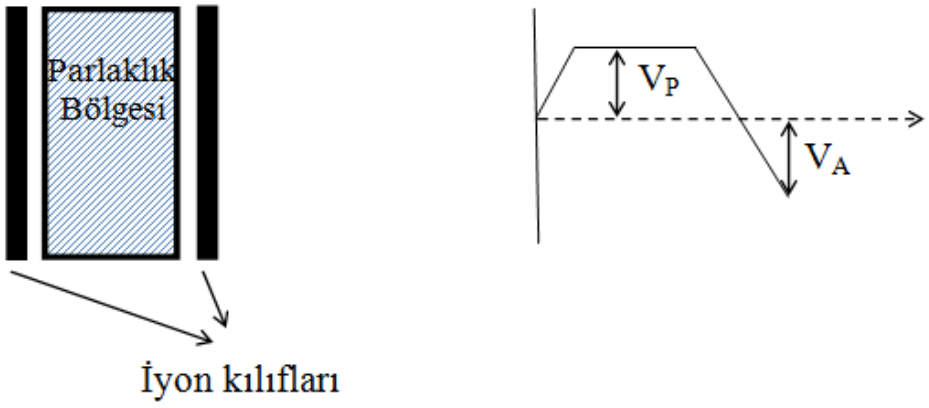
$$J_A = J_B \quad \text{ya da} \quad \frac{V_A^{3/2}}{D_A^2} = \frac{V_B^{3/2}}{D_B^2} \tag{1.71}$$

Karanlık uzay kapasitansı

$$C_A \approx \frac{A_A}{D_A} C_B \approx \frac{A_B}{D_B} \tag{1.72}$$

Potansiyel dağılımda 3 ana bölge vardır:

- ✓ Topraklanmış elektrod: V_B
- ✓ Plazma potansiyeli: V_P (çoğunlukla pozitif)
- ✓ Güçlendirilmiş elektrod: V_A



Şekil 1.30 Bölgelerdeki potansiyel değişimler

Eğer örnekler topraklanmış elektroda konursa, plazma aşınır ya da çöker. Eğer öncelikle cihaz açıkken konursa reaktif iyon aşındırması (RIE) olur.[6]

karanlık uzaya giriş ile; karanlık uzay alanı tarafından karşı elektroda ivmelenen atomlar ile karanlık uzay üzerinden gerçekleşen çarpışmalar elektrodda (katot) iyonizasyona sabep olur ve sistem bu yüzden yavaşlarlar. Yavaş elektronlardan, daha az enerjik olduğundan, bu atomların çarpıması sadece uyarılma olayına (iyonizasyondan daha çok) sebep olurlar.(Parlaklık bölgesi oluşumu)[19]

Tipik değerler;

f = 50 kHz – 40 MHz

p = 0,02 – 10 Torr

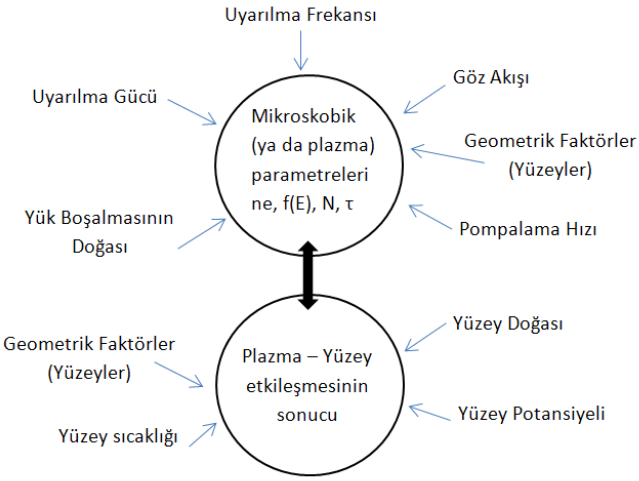
$n_e = 10^8 – 10^{12}$ cm^{-3} yüklü parçacık yoğunluğu

$N = 10^{15}$ cm^{-3} (>>n_e) çökme aşındırma prosesindeki ana etken

kT_e = 1-10 eV

kT_i = 0,04 eV

Te > Ti olduğunda parlaklık boşalması olarak adlandırılır. Plazma parametreleri;



Şekil 1.31 Plazma parametreleri

Parlaklık boşalmasında yer alan ters anlaşılır ya da bilinmeyen olarak kalmış kimyasal reaksiyonlar oldukça karmaşıktır. Bu reaksiyonlar aşağıdaki reaksiyon tiplerine aktarılır;

- ✓ Uyarılma (rotasyonel, titreşimsel, elektriksel)

$$e^- + X_2 \rightarrow X_2^* + e^- \tag{1.73}$$

- ✓ Disosiyatif ek

$$e^- + X_2 \rightarrow X + X^- \tag{1.74}$$

- ✓ Disosiyatasyon (İyonizasyonsuz kırılma, çünkü iyonizasyonun daha çok enerjiye ihtiyacı var.)

$$e^- + X_2 \rightarrow 2X + e^- \tag{1.75}$$

- ✓ İyonizasyon

$$e^- + X_2 \rightarrow X_2^+ + 2e^- \tag{1.76}$$

- ✓ Disosiyatif iyonizasyon

$$e^- + X_2 \rightarrow X + X^+ + 2e \tag{1.77}$$

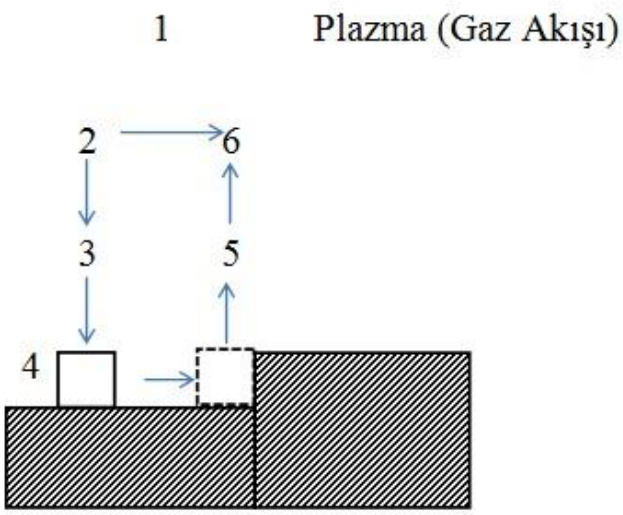
Çökme ve aşındırma prosesinde plazmanın rolü iki tanedir: (kimyasal ve fiziksel prosesin bileşimi).

a) Kimyasal reaktif türlerin yaratılması (kimyasal).

b) Enerjik radyasyon kaynağı (yönelimsel, anizotropik proses)

✓ Homojen tipli reaksiyonlar (gaz fazında) : 1, 2 ve 6

✓ Heterojen tipli reaksiyonlar (gaz - yüzey) : 3, 4 ve 5



Şekil 1.32 Plazma reaksiyon türleri

1. Reaktif türleri yaratılması (radikaller)
2. Substrat yüzey doğrultusunda reaktif türleri difüzyonu
3. Yüzeyde soğurma
4. Reaksiyon
5. Ürün tarafından geri bırakma
6. Gaz fazında yığının yüzeyden bu ürünlerin difüzyonu (uçucu olabilir)

Eğer herhangi bir tek süreç bile olmazsa, döngünün devamlılığı baştan başa çöküntüdür (ya da aşındırma).

a) Reaksiyon üzerinde ΔE enerjisi, sarkık bağ kusurları nötral yük durumundaymış gibi farz edilir (tek elektron). Fakat kusur havuzunun açısından, sarkık bağların her üç yük durumunda da (+, 0, -) bulunmasına izin verilmiştir. Bu sebeple ΔE deki E_D kusurunun kimyasal potansiyel tarafından yeri doldurulmalıdır.

$$\mu_D = E'_D = E_D + kT \ln[f^0(E_D)/z] \quad (1.78)$$

b) SiHHSi konfigürasyonunun elektronik enerjisi için, ekstra gerilme enerjisi terimi $E_{vt} - E_v$ olarak ifade edilir. Her nasılsa çoklu elektronik etki ile gelirmemiş bağ E_v, durum bandının iletkenlik sınırına kadar uzatır.

c) Yukarıda önerilen, denklem (1.60)'dan türetilen sarkık bağ ihmal edilebilir (Örneğin yalıtılmış Si-H bağı gibi). Çünkü SiH bağında hidrojen atomunun bağlanma enerjisi zayıf bağlarınkinden (SiHDSi) daha yüksektir. Bu durum $[DB]_{yalıtılmış} <<$ [SiHDSi] sebep olur. Dolasyısıyla [SiHDSi] türlerinde sarkık bağ kusurları, yalıtılmış sarkık bağ kusurları üzerine baskındır. Sarkık bağ yoğunluğunu hesaplamak için, (1.61) kullanılacaktır.

d) Elemental reaksiyon boyunca mikroskobik denge sonucu olarak aşağıda reaksiyon ya da denklem gösterilmiştir:

$$SiHHSi + SiSi \leftrightarrows 2SiHDSi \quad (1.79)$$

A) Hidrojen Korelasyon Enerjisi (U_H) :

$U_H < 0$ durumu için ;

Heriki zayıf bağlar ve sarkık bağların enerji dağılımını hesaba katarak, yukarıda denklem 1.79 da çok sayıda reaksiyonların süperpozisyonu gösterilmektedir. Diğer taraftan daha önceden bahsedildiği gibi denklem (1.59) çoğu SiSi bağlarında, hidrojen korelasyon enerjisi U_H negatiftir ($U_H<0$) ve sonrasında denklem (1.79)

$$2SiHDSi \longrightarrow SiHHSi + SiSi \quad (1.80)$$

halini alır. Diğer bir deyişle, zayıf bağı kırmaktansa normal bağı kırmak tek bir H atomunu SiSi bağına eklemek için uygun olur (SiHDSi). Gerilme enerjisi (E_{vt} -E_v) çift H atomunu SiSi bağına eklemek için kullanılmalıdır (SiHHSi), deneyler göstermektedirki ikili işgal edilmiş konumlar baskındır (SiHHSi). (Hidrojenin %95'i bu formda biriktirir) Burada (SiHHSi) konum ve normal (SiSi) konum (H yoğunluğu SiSi enerjisinden bağımsızdır, zayıf bağ enerjisi E_{vt}) arasında denge olmalıdır.

Şimdi kütle $\frac{[SiSi][H_I]^2}{[SiHHSi][I-H_I]^2} = e^{-\frac{\Delta E_{26}}{kT}}$ (1.81)

$$\Delta E_{26} = 2E_{HI} + 2E_v + 4E_{SiH} \quad (1.82)$$

(E_{vt} bağımsız)

a) N = SiSi bağlarda elektron toplam konsantrasyonu = 2[SiSi]

H = SiSi bağ çiftinde bulunan a-Si:H daki H konsantrasyonu ≈ a-Si:H toplam hidrojen konsantrasyonu

H ≈ 2[SiHH] = 10 a-Si:H yüzdesi = $\frac{10}{100} 5.10^{22} = 5.10^{21} cm^{-3}$

$$\frac{N}{H} = \frac{[SiSi]}{[SiHHSi]} \quad (1.83)$$

b) [I - H_I] ≈ [I] (1.81) göstermektedirki;

$$\frac{[H_I]}{[I]} = \left(\frac{N}{H}\right)^{1/2} e^{-\frac{\Delta E_{26}}{kT}} \quad (1.84)$$

B) U_H> 0 durumu :

Zayıf bağ boyunca, valans band tail da, U_H ilerledikçe pozitifleşmeye başlar. H basitçe SiSi konumunun tutulduğu SiHDSi tipi sarkık bağ kusur konumunu onaylar. Sonuç olarak denklem (1.79);

$$SiHHSİ + SiSi \rightarrow 2SiHDSi \quad (1.85)$$

halini alır. Yalıtılmış sarkık bağlar, yalıtılmış SiH konumlarından başlayarak ihmal edilebilir. Sarkık bağ yoğunluğu dönüşümü için, SiHDSi konumu düşünülmelidir; bu bağlamda kütle etki yasası denklem (1.61) için uygulanmalıdır.

$$= \frac{\delta[SiSi]_{denklem}[H_I]}{\delta[SiHDSi][I - H_I]} = e^{-\frac{\Delta E_{24}}{kT}} \approx [\mathrm{I}] \tag{1.86}$$

$$\Delta \mathrm{E}_{24} = 2E_{vt} + E_{HI} - 2E_{SiH} - E'_D \tag{1.87}$$

$$\frac{\delta[SiSi]_{denklem}}{\delta[SiHDSi]} = \frac{[I]}{[H_I]} e^{-\frac{\Delta E_{24}}{kT}} = \left(\frac{N}{H}\right)^{1/2} e^{\frac{\Delta E_{26}}{2kT}} e^{-\frac{\Delta E_{24}}{kT}} = \left(\frac{N}{H}\right)^{1/2} e^{-\frac{E_{vt}+E'_D-2E_{vt}}{kT}} \tag{1.88}$$

(1.88)'de δ[SiSİ]denklem zayıf bağ konsantrasyonu dengesi Evt ve Evt+dEvt arasında gösterilmiştir;

$$\delta[SiSi]_{denklem} = \delta[SiSi]_{toplam} - \delta[SiHDSi] \tag{1.89}$$

$\delta[SiSi]_{denklem}$ = Zayıf bağların deplasyonu: Hali hazırda tek H yakalanmış zayıf bağlardan çıkarılmıştır.

$\delta[SiSi]_{toplam}$ = Bunlar, $\mathrm{E_D}$ ve $\mathrm{E_D}$+$\mathrm{dE_D}$ arasında bulunan sarkık bağ kusurlarından (potansiyel olarak) kaynaklanan $\mathrm{E_{vt}}$ ve $\mathrm{E_{vt}}$+$\mathrm{dE_{vt}}$ arasındaki tüm durumlarıdır.

$\delta[SiHDSi]$ = dD ($\mathrm{E_D}$, $\mathrm{E_{vt}}$) $\mathrm{dE_D}$ (1.90)

$$\delta[SiSi]_{toplam} = g(E_{vt})dE_{vt}\, P(E_D)dE_D \tag{1.91}$$

$$P(E_D) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(E_D - E_{max})^2}{2\sigma^2}} \tag{1.92}$$

$$dD(E_D, E_{vt}) = \frac{g(E_{vt})P(E_D)dE_{vt}}{1+\left(\frac{N}{H}\right)^{1/2} e^{\frac{E_v+E'_D-2E_{vt}}{kT}}} \tag{1.93}$$

$$dD = \frac{g(E_{vt})P(E_D)dE_{vt}}{1+e^{\frac{E_v+E'_D-2E_{vt}+\frac{1}{2}\ln\left(\frac{N}{H}\right)}{kT}}} \tag{1.94}$$

$$E'_D = E_D + kT \ln\left[\frac{f^0(E_D)}{2}\right] \tag{1.95}$$

$$D(E_D) = \int_{E_v}^{\infty} dD(E_D, E_{vt}) = \int_{E_v}^{\infty} \frac{g(E_{vt})P(E_D)dE_{vt}}{1+e^{\frac{E_v+E'_D-2E_{vt}+kT\ln\left[\frac{f^0(E_D)}{2}\right]+\frac{kT}{2}\ln\left(\frac{N}{H}\right)}{kT}}} \tag{1.96}$$

Şimdi tanımlayalım;

$$2\zeta = E_v + E_D + kT\ln\left[\frac{f^0(E_D)}{2}\right] + \frac{kT}{2}\ln\left(\frac{N}{H}\right) \tag{1.97}$$

$$D(E_D) = \int_{E_v}^{\infty} \frac{g(E_{vt})P(E_D)dE_{vt}}{1+e^{\frac{2(\zeta-E_{vt})}{kT}}} = \int_{E_v}^{\infty} \quad + \int_{\zeta}^{\infty} \quad = I_1 + I_2 \tag{1.98}$$

Sırasıyla, $\zeta > E_{vt}$ $\zeta < E_{vt}$ için.

$$I_1 \approx \int_{E_v}^{\zeta} N_{v0} e^{\frac{E_v-E_{vt}}{E_{v0}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} e^{-\frac{\left[E_D-E_M\right]^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{2(\zeta-E_{vt})}{kT}} dE_{vt} \tag{1.99}$$

(Zayıf bağlara dönüştürülmüş Boltzmann kesiri)

$$I_2 \approx \int \quad N_{v0} e^{\frac{E_v-E_{vt}}{E_{v0}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} e^{-\frac{\left[E_D-E_M\right]^2}{2\sigma^2}} dE_{vt} \tag{1.100}$$

(Bütün zayıf bağlar dönüştürülmüştür)

$$D(E_D) = I_1 + I_2 \approx \frac{N_{v0}}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} e^{-\frac{\left[E_D-E_M\right]^2}{2\sigma^2}} \frac{E_{v0}}{2E_{v0}-kT}\left[2E_{v0}e^{\frac{E_v-\zeta}{E_{v0}}} - kTe^{\frac{2(E_{v-\zeta})}{kT}}\right] \tag{1.101}$$

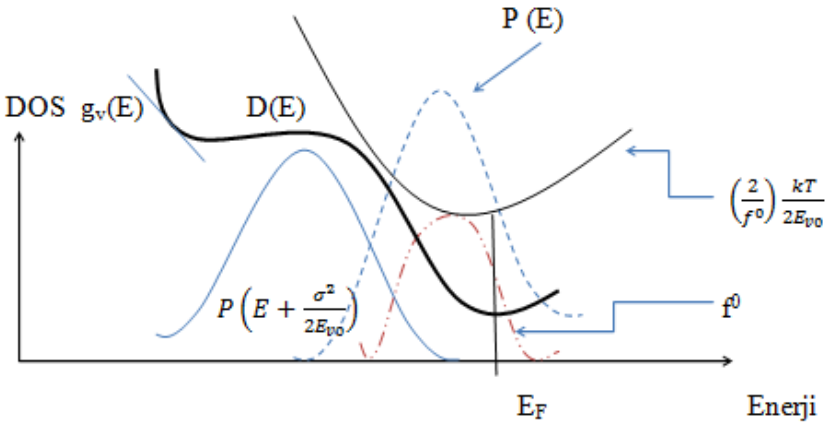
Şimdi $E_v = 0$ alalım.

$$e^{-\left[\frac{(E_D-E_M)^2}{2\sigma^2}+\frac{E_D}{2E_{v0}}\right]} = \exp\left\{-\frac{\left[E_D+\frac{\sigma^2}{2E_{vt}}+E_M\right]^2}{2\sigma^2}\right\}\left[-\frac{\left(E_M-\frac{\sigma^2}{4E_{v0}}\right)}{2E_{v0}}\right] \tag{1.102}$$

Sonuç olarak :

$$D(E_D) = \left[\frac{2}{f^0(E_D)}\right]^{\frac{kT}{2E_{v0}}} P\left(E_D + \frac{\sigma^2}{2E_{v0}}\right)\gamma \tag{1.103}$$

$$\gamma = \frac{N_{v0}2E_{v0}^2}{2E_{v0}-kT}\left[\frac{H}{N}\right]^{\frac{kT}{4E_{v0}}} e^{-\frac{\left[E_{vt}-\frac{\sigma^2}{4E_{v0}}\right]}{2E_{v0}}} \tag{1.104}$$



Şekil 1.33 Denge durumunda Durum yoğunluğu - Enerji grafiği

Yukarıdaki ilişki (1.103), denge durumunda durum yoğunluğunu (DOS) tanımlar. (Bu denge sarkık bağ, zayıf bağ arasında, elektronik yük taşıyıcıları ve hareketli çatlak hidrojen ile birliktedir.) Bu denge zamanı deneysel zaman skalasından daha kısa olduğu yerlerde (ölçüm zamanı), yüksek sıcaklıklarda nispeten daha anlıktır. (T ≥ 200) denge (rahatlama) Geçiş sıcaklığının altında (geçiş sıcaklığı ile ilgili, T*, rahatlama zamanı ≈ ölçüm zamanı) D (E) etkin olarak donmuştur.(Örneğin, düşük sıcaklıklar tarafından tanımlı herhangi bir rahatlama üzerindeki yeni dağılım oldukça yavaştır.) Bu nedenle oda sıcaklığı T_0 da belirli bir Fermi pozisyon seviyesi tarafından isimlendirilen (T>T*) T denge sıcaklığında, D(E) oluşmaktadır.

Sonuç olarak oda sıcaklığı T_0 da, D(E) uygulanmış öngerilim voltajı ile değişmez, fakat sadece bütün bu işgaller donma durumunu değiştirebilir. (D(E) farklı yük yoğunluğu bileşenlerine bölünmüştür.)

$$D^+ \rightarrow [= D(E)f^+(E)] \tag{1.105}$$

$$D^0 \rightarrow [= D(E)f^0(E)] \tag{1.106}$$

$$D^- \rightarrow [= D(E)f^-(E)] \tag{1.107}$$

$$D(E) = D^+(E) + D^0(E) + D^-(E) \tag{1.108}$$

D(E), T* sıcaklığı üzerindeki kusur havuz parametreleri tarafından düzeltilir; bu her iki sıcaklık değişimi T* üzerinde ve taranan E_f değerleri tarafından değiştirilemez. Sadece kusur havuz parametreleri bu sıcaklığın > T* olduğu durumlarda, birlikte değişen bileşenlerin herbirinin yük yoğunluğunun D(E) zarfına bağlıdır. Bu bileşenler D^+, D^0 ve D^- sırasıyla D_h, D_z ve D_e^- olarak etiketlendirlir. T* dan küçük sıcaklıklarda her iki sıcaklık değişimi ve E_f taraması göreli yoğunluğun bileşenleriyle değişir. Örneğin; T=0^oK, E_f değeri üzerindeki tüm durumlar D^+, E_f-U üzerindeki tüm durumlar $D^{+;}$ ve geriye kalan tüm diğer ara durumlar ise D^0'dır. Değişmiş Gausyeni veren $\left[\frac{2}{f^0}\right]^{\frac{kT}{2E_{vt}}}$ ile düzeltilen denklem (1.103) enerjinin DOS'a bağlılığını ifade eder.

Her iki düşük ve yüksek enerjilerdeki bu son faktör, eksponansiyel olarak enerjiye bağımlıdır ve bu daha sonrasında güçlü olarak DOS etkiler. Diğer bir deyişle D(E) artık basit bir gausyen değildir. (Şekil 1.33)

Birçok spektroskopik teknikte alan etkisi, DLTS gibi yukarıda etiketlenmiş D_h, D_z ve D_e termal geçişlerinden herbirini kullanmak (+/0 ve 0/- geçişi), her iki (+/0) ve (0/-) tek–elektron geçiş enerjisinin durum yoğunluğuna katkısını verebilir.

Diğer bir deyişle, herbir D_e, D_z ve D_h durumu kendi (+/0) ve (0/-) geçiş enerjilerine yarılır. E_f boyunca hareket ettiği zaman toplam tek elektron durum yoğunluğunun 6 tane bileşeni vardır.

$E_G = D_e^{+/0}, D_e^{0/-}, D_z^{+/0}, D_z^{0/-}, D_h^{+/0}, D_h^{0/-}$ valans ve iletim band tail durum yoğunuğunun bir kısmı sırasıyla $g_v(E)$ ve $g_c(E)$ dir. (Fermi seviyesini E_f'yi aralık boyunca tararken, bütün bu durumların zarfı keşfedilir.) Örneğin alan etkisi ile ölçüm (D_e, D_z ve D_h doluluk oranı E_f süpürdüğü zamanla değişir.) Doluluk oranındaki değişim ölçümün çok gergin ve sıcaklığın T* üstüne çıkmasına kadar sarkık bağ durumunun yoğunluğunu değiştirmez.

1.2 Tezin Amacı

1.2.1 Yarıiletkenler Tarafından Özden Işık Soğurması

Radyasyonun bir ortamdan geçişi ve farklı ortam arayüzeylerinde bu radyasyonu davranışının analizi, Maxwell alan denklemlerinden etkilenmiş genel elektromanyetik dalgaların davranışlarının ile ifade edilir:

$$\vec{\nabla}x\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{d\vec{B}}{dt};\ \vec{\nabla}x\vec{H} = -\frac{1}{c}\frac{d\vec{D}}{dt} + \frac{4\pi}{c}\vec{j};\ \vec{\nabla}.\vec{D} = \rho;\ \vec{\nabla}.\vec{B} = 0 \quad (1.109)$$

$$\vec{D} = \epsilon\vec{E}\vec{B} = \mu\vec{H}\vec{j} = \sigma\vec{E} \quad (1.110)$$

Bir ışık dalgası kendi $\vec{E}$ elektrik alanı ve $\vec{B}$ manyetik indüksiyon ile tanımlanır. Gauss sistemlerinde vektör potansiyeli $\vec{A}$, $\vec{E}$ ve $\vec{B}$ yi tanımlamak için verilmiştir;

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{d\vec{A}}{dt}\vec{B} = \vec{\nabla}x\vec{A}\vec{\nabla}.\vec{A} = 0 \quad \text{(Lorentz sabiti)} \quad (1.111)$$

g = 0 ,j = 0 olduğu vakum ortamında yukarıdaki denklemlere öncülük eder;

$$\vec{E} = \overrightarrow{E_0}e^{j(\omega t - \vec{g}.\vec{r})} \quad \text{ve} \quad \vec{A} = \overrightarrow{A_0}e^{j(\vec{g}.\vec{r} - \omega t)} \quad (1.112)$$

$$\left|\overrightarrow{E_0}\right| = \frac{\omega}{c}\left|\overrightarrow{A_0}\right| \left(= |\vec{g}|\left|\overrightarrow{A_0}\right|\right) |\vec{g}| = \text{ışık momentumu} \quad (1.113)$$

Kristal içindeki elektronun $\widehat{H_0}$ Hamiltonyenini dikkate alalım:

$$\widehat{H_0} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) \quad (1.114)$$

$\hat{p}$ burada elektron momentumu ve U(r) kristalde olduğu gibi aynı periyodiklikle kristal potansiyelini ifade eder. Aydınlatma altında, elektronun genelleştirilmiş momentumu $\hat{P}$, şu şekilde ifade edilir; $\hat{P} = \hat{p} + \frac{e}{c}\vec{A}$, $\hat{p} = \hat{P} - \frac{e}{c}\vec{A}$ ve hamiltonyen $\widehat{H_0}$, $\widehat{H}$ halini alır;

$$\widehat{H} = \frac{\left(\hat{P} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m} + U(r) = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(r) + j\frac{\hbar e}{mc}\left(\vec{\nabla}.\vec{A}\right) + j\frac{\hbar e}{mc}\left(\vec{\nabla}.\vec{A}\right) + \frac{e^2\left(\vec{A}\right)^2}{2mc^2} \quad (1.115)$$

Lorentz sabitini hesaba katarsak, $\vec{\nabla}.\vec{A} = 0$ ve $\hat{P} \equiv -j\hbar\vec{\nabla}$ ile $\vec{A}$'nın sadece lineer terimlerini dikkate alalım;

$$\widehat{H} \approx \widehat{H_0} + \widehat{W} \text{ ile } \widehat{W} = j\frac{\hbar e}{mc}\vec{A}.\vec{\nabla} = \text{pertürbasyon} \quad (1.116)$$

Bu pertürbasyonda durumdan duruma elektronik geçiş aydınlığa bağlıdır.

Dalga fonksiyonu ile karakterize edilen sabit durum setinin $\widehat{H_0}$ (pertürbesiz) hamiltonyeni ile tanımlandığı bir sistem düşünelim (özfonksiyon). $\Psi_k^0(r,t)$ ve denk enerji seviyeleri (özdeğer) $E^0(k)$ gibi,

$$\widehat{H_0}\Psi_k^0(r,t) = E^0(k)\Psi_k^0(r,t) \tag{1.117}$$

Burada k kristaldeki devamlı fiziksel büyüklüklerin seti $\hbar k = quasimomentum$

Potansiyel zamana bağlı olduğundan, zaman ve uzay değişimi ayrımı mümkündür;

$\Psi_k^0(r,t) = \Psi_k^0(r)X(t)$ gibi. Zamana bağlı Schrödinger denklemini dikkate alırsak;

$$j\hbar\frac{d}{dt}\Psi_k^0(r,t) = \widehat{H_0}\Psi_k^0(r,t) \tag{1.118}$$

olarak verilir.

$$X(t) = e^{-\frac{E^0(k)}{\hbar}t} \tag{1.119}$$

Pertürbasyon da olduğu gibi zamanın t = 0 olduğunu düşünelim, $\widehat{W}$ operatörü uygulaması aşağıdaki kuantum sisteminde tanımlanmıştır:

$$j\hbar\frac{d}{dt}\Psi = \widehat{H}\Psi \tag{1.120}$$

Bu Schrödinger denklemini çözmek için, Ψ 'yi seri olarak kararlı $\Psi_k^0(r,t)$ 'ya aşağıdaki Dirac fonksiyonu yardımıyla genişletelim;

$$\Psi(r,t) = \int c_k(t)\Psi_k^0(r,t)dk \tag{1.121}$$

(1.121) denkleminin (1.120) içindeki ilişkisini her iki denkleminde sol tarafını $\Psi_{k'}^{0*}(r,t)$'a bölerek açıklayabiliriz. ($\Psi_k^0(r,t)\ nin\ kompleks\ konjugesi$) Aşağıdaki denklem zamana bağlı Schrödinger denkleminde denklem (1.120) yerine konularak bulunur;

$$j\hbar\frac{d}{dt}C_k' = \int_{\substack{kristal\\hacim}} C_k(t)e^{j\omega_{k'k}t}W_{k'k}dk \tag{1.122}$$

Burada;

$$\omega_{k'k} = \frac{E^0(k') - E^0(k)}{\hbar} \tag{1.123}$$

$$W_{k'k} = \int_{\substack{kristal \\ hacim}} \Psi_{k'}^{0*}(r) \widehat{W} \Psi_k^0(r)\, dr \tag{1.124}$$

$$\int_{\substack{kristal \\ hacim}} \Psi_{k'}^{0*}(r) \widehat{W} \Psi_k^0(r)\, dr = \delta(k - k') \tag{1.125}$$

$(kararlı\ durumlar\ için\ normalizasyon\ durumu)$

Bu denklemin çözümü açık değildir fakat eğer $\widehat{W}$ yeterince küçükse, bu pertürbasyon method yaklaşımıyla çözülebilir. $C_k(t)$ katsayısı $\widehat{W} = 0$ da C_k^0'ın yerini tutan seri haline dönüşebilir.

$$C_k(t) = C_k^0(t) + C_k^1(t) + C_k^2(t) + \cdots \tag{1.126}$$

$C_k^0(t) =$ t=0 olduğu an, $C_k^1(t) =$ ilk sıra, $C_k^2(t) =$ ikinci sıra

t = 0 anında, $\widehat{W}$ pertürbasyonunu uygulamadan hemen önce, $\Psi_{k"}^0$'nın $E^0(k")$ enerjisine uygun karalı durumundaki bir sistem olduğunu farz edelim. ((1.121) denkleminde bütün C_k = 0 kabul edilip $C_{k"}$; $C_{k"} = \delta(k - k')$dır.) (1.122) denklemi (sadece ilk terim ele alınırsa);

$$j\hbar \frac{dC_{k'}^1(t)}{dt} = \int \delta(k - k') e^{j\omega_{k'k"}t} W_{k'k"} dk = e^{j\omega_{k'k"}t} W_{k'k"} \tag{1.127}$$

halini alır. Bu integrali almak, aşağıdaki denklemle ilişkilidir;

$$C_{k'}^1(t) = \frac{1}{j\hbar} \int_0^{t_0} W_{k'k"} e^{j\omega_{k'k"}t} dt \tag{1.128}$$

$$\left|C_{k'}^1(t_0)\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^{t_0} W_{k'k"} e^{j\omega_{k'k"}t} dt \right|^2 \tag{1.129}$$

Bu denklemler t_0 süreci boyunca $\widehat{W}$ pertürbasyonu altında $\Psi_{k"}^0(r, t^0)$ durumundan $\Psi_{k'}^0(r, t^0)$ durumuna geçiş olasılığı olarak yorumlamaktadır.

$M_{k'\leftarrow k"} = \frac{d}{dt_0}\left|C^1_{k'}(t_0)\right|^2$ = birim zaman başına geçiş olasılığı. (1.130)

Periyodik U(r) potansiyeline sahip Kristal elektronları için, hamiltonyen

$\widehat{H_0} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)$ ya da $\widehat{H_0} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2$ (1.131)

olarak ifade edilebilir.

(Periyodik U(r) potansiyeli etkisini içeren m* kütlesi serbest elektron kütlesi m'den olarak değil etkin kütle olarak tanımlanır.) Bu yaklaşıma "etkin kütle yaklaşımı" adı verilir. Bu yaklaşımda elektronlar quasifree olarak ele alınırlar. Bundan dolayı dalga fonksiyonu için $\widehat{H}\Psi = E\Psi$;

$k = \pm\sqrt{\frac{2mxE}{\hbar^2}}$ ve $\left|\Psi^0_k\right|^2 = sabit = |\varphi^0|^2$ olduğu

$\Psi^0_k(r) = \varphi^0 e^{j\vec{k}\vec{r}}$ = Düzlem dalgası ya da De Broglie Dalgası (1.132)

Yukarıda altı çizilen etkin kütle yaklaşımı sadece belli koşullar için geçerlidir.

Fakat periyodik U(r) potansiyelli kristalde elektron dalga fonksiyonunu elde etmenin genel sonucu uzayda kristal potansiyelinde olduğu gibi φ^0 sabit değerli olduğu denklem (1.132)'deki düzlem dalga değişiminden elde edilmektedir.

$\Psi^0_k(r) = \varphi^0_k(r)e^{j\vec{k}\vec{r}} = Bloch\ fonksiyonu$ (1.133)

(1.112) denklemi (1.125), (1.129) ve (1.130) kullanılarak aşağıdaki denklem elde edilir;

$M_{k'\leftarrow k"} = \frac{2e^2A_0^2}{m^2c^2\hbar^2}\left|P_{k'k"}\right|^2\frac{\sin[\omega_{k'k"}-\omega]}{\omega_{k'k"}-\omega}$ (1.134)

$P_{k'k"} = \int_{(Kristal\ Hacmi)}\varphi^*_{k'}(r)\, e^{-j(k'-g,\ r)}(\overrightarrow{a_0}\vec{p})\varphi^0_{k"}(r)e^{jk"r}dr$ (1.135)

$\overrightarrow{a_0} = A_0$ genlikli vektör potansiyeli boyunca birim vektör

$\overrightarrow{a_0}.\vec{p} = p_a =$ vektör potansiyeli $\vec{A}$ boyunca momentum bileşeni

$$I = \frac{\sin \beta t_0}{\beta} = t_0 \, , \frac{\sin x}{x} \Rightarrow \lim_{\beta \to 0} I \to t_0 \tag{1.136}$$

$\Delta\beta = \frac{2\pi}{t_0}$ $t_0 \to \infty$ olduğu zaman [büyük]$\Longrightarrow \Delta\beta \longrightarrow 0$

$$I \longrightarrow 0; \Longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} I d\beta = \pi; \Longrightarrow \frac{1}{\pi}\frac{\sin \beta t_0}{\beta} \cong \delta(\beta); \Longrightarrow \delta(\hbar\beta) = \frac{1}{\hbar}\delta(\beta)$$

$$M_{k' \leftarrow k"} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2 A_0^2}{m^2 c^2}|P_{k'k"}|^2 \delta[E^0(k') - E^0(k") - \hbar\omega] \tag{1.137}$$

$\delta(\beta) = \delta(\omega_{k'k"} - \omega)$ Eğer $\beta = 0$ denklem 0 olmaz.

$$E^0(k') = \hbar\omega + E^0(k") \tag{1.138}$$

Bu denklem, sistemin enerjisinin korunduğunu gösterir. [22] Denklem (1.133) de verilen Block fonksiyonunun genliğinin $\varphi_k^0(r) = sabit = \varphi^0$ olduğu, etkin kütle yaklaşımını düşünelim. $\Psi_k^0(r) = \varphi_k^0 e^{j\vec{k}\vec{r}}$ normalizasyon durumudan bulunur,

$$\int_{(r)} \Psi_{k'}^{0*}(r)\, \Psi_k^0 dr = \delta_{k'k} \Rightarrow \varphi^0 = \frac{1}{\sqrt{r}} \tag{1.139}$$

Sonuç olarak, Matris elemanı ($P_{k'k"}$) (1.135) denklemi ile verilmiştir;

$$P(k'k") = \hbar(\overrightarrow{a_0}\overrightarrow{k"})\frac{1}{r}\int_{(r)} e^{-j(\overrightarrow{k'} - g - \overrightarrow{k"}, \vec{r})}\, dr = \hbar(\overrightarrow{a_0}\overrightarrow{k"})\delta\overrightarrow{k'} - \vec{g}, k" \tag{1.140}$$

Bu matris elemanı

$$\overrightarrow{k'} = \vec{g} + \overrightarrow{k"} \tag{1.141}$$

olduğunda sıfır olmaz.

Bu denklem (1.141) sistemde quasimomentumun korunduğunu yansıtır. Pratikte,

$$|\vec{g}| \ll |\overrightarrow{k'}|, |\overrightarrow{k"}| \tag{1.142}$$

$\overrightarrow{k'} = \overrightarrow{k"}$ halini alır.

Örneğin, termal elektronun quasimomentumu

$$\frac{1}{2}m^*V_{th}^2 = \frac{3}{2}k_BT \Longrightarrow \hbar k = \sqrt{3m^*k_BT} \tag{1.143}$$

denkleminde k≈10^7 cm^{-1} alınır. $m^* = 10^{-27}g;\ k_B = 1{,}38.10^{-23}\,j/{}^0K;\ T = 300\,{}^0K.$ Diğer bir yandan, $\lambda = 1\mu m$ olduğu ışık için; $g = \frac{2\pi}{\lambda} = 6x10^4 cm^{-1} \Longrightarrow g \ll k.$ Bu çerçevede etkin kütle yaklaşımı, denklem (1.134) ile yukarıdaki P(k'k") ifadesi foton soğurma olasılığı M(k'k") yı vermektedir;

$$M(k'k") = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2{A_0}^2\hbar^2}{m^2c^2}(\overrightarrow{a_0}\overrightarrow{k"})^2\delta[E^0(k') - E^0(k") - \hbar\omega]\delta_{k'-g,k"} \tag{1.144}$$

Şimdi denklem (1.135) de verilen P(k'k") matris elemanını hesaplamak için denklem (1.133) de verilen Bloch fonksiyonunu dikkate alalım,

- (yarı iletken valans bandında) E_i(k") enerjili durumu ve ilgili dalga fonksiyonunu dikkate alırsak;

$$\Psi^0_{ik"}(r) = \varphi^0_{k"}(r)e^{j(\overrightarrow{k"}\vec{r})} = başlangıç\ durumu \tag{1.145}$$

- (İletim bandında) Ef(k') enerjili durum ve ilgili dalga fonksiyonu $\Psi^0_{k'}(r)$ dikkate alırsak;

$$\Psi^0_{fk'}(r) = \varphi^0_{k'}(r)e^{j\left(\overrightarrow{k'}\vec{r}\right)} = final\ durumu \tag{1.146}$$

Matris elemanı P(k'k") bu başlangıç ve final durumu ile ilişkilidir;

$$\widehat{\nabla}\left[\varphi^0_{k"}(r)e^{j(\overrightarrow{k"}\vec{r})}\right] = e^{j(\overrightarrow{k"}\vec{r})}\nabla\varphi^0_{k"}(r) + jk"\varphi^0_{k"}(r)e^{j(\overrightarrow{k"}\vec{r})} \tag{1.147}$$

$$P_{if}(k'k") =$$
$$\int_{(r)}\varphi^{0*}_{k'}(r)e^{-j\left(\overrightarrow{k'}-\vec{g}-\overrightarrow{k"}\vec{r}\right)}[\overrightarrow{a_0}(-j\hbar\widehat{\nabla})]\,\varphi^0_{k"}(r)dr +$$
$$\int_{(r)}\varphi^{0*}_{k'}(r)e^{-j\left(\overrightarrow{k'}-\vec{g}-\overrightarrow{k"}\vec{r}\right)}[\overrightarrow{a_0}\hbar\overrightarrow{k"}]\,\varphi^0_{k"}(r)dr \tag{1.148}$$

olduğu zaman;

$$P_{if}(k'k") = \int_{(r)}\varphi^{0*}_{k'}(r)e^{j\left(\overrightarrow{k'}-\vec{g},\vec{r}\right)}(\overrightarrow{a_0}\vec{p})\varphi^0_{k"}(r)e^{j(\overrightarrow{k"}\vec{r})}dr \tag{1.149}$$

$(\overrightarrow{a_0}\vec{p}) = -j\hbar\widehat{\nabla}$ dır. Yukarıdaki P(k'k") ifadesi daha öncede tartışıldığı gibi; $|\vec{g}| \ll |\overrightarrow{k'}|, |\overrightarrow{k"}|$ dır.

$P_{if}(k'k") =$

$$\int_{(r)} \varphi_{k'}^{0*}(r) e^{-j\left(\overrightarrow{k'}-\vec{g}-\overrightarrow{k"}\vec{r}\right)} [\overrightarrow{a_0}(-j\hbar\widehat{\nabla})]\, \varphi_{k"}^{0}(r) dr - \hbar(\overrightarrow{a_0}\overrightarrow{k"}) \int_{(r)} \Psi_{k'}^{0}(r)\, \Psi_{k"}^{0} dr \qquad (1.150)$$

$$\int_{(r)} \varphi_{k'}^{0*}(r) e^{-j\left(\overrightarrow{k'}-\vec{g}-\overrightarrow{k"}\vec{r}\right)} [\overrightarrow{a_0}(-j\hbar\widehat{\nabla})]\, \varphi_{k"}^{0}(r) dr \qquad (1.151)$$

(momentum korunması bu terim içinde $\overrightarrow{k'} = \overrightarrow{k"}$ olduğu farz edilir.)

$\int_{(r)} \Psi_{k'}^{0}(r)\, \Psi_{k"}^{0} dr =$ δk'k" burada quasimomentumun korunumu etkin kütle yaklaşımında olduğu gibi yansıtır.

$$P_{if}(k") = \int_{(r)} \varphi_{ik"}^{0*}(r) [\overrightarrow{a_0}, \left(-j\hbar\widehat{\nabla}\right) + \hbar\overrightarrow{k"}]\, \varphi_{fk"}^{0}(r) dr \qquad (1.152)$$

Bu (1.152) denklemini (1.144) içinde yorumlamakla aşağıdaki denklem elde edilir;

$$M(k'k") = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 {A_0}^2}{m^2c^2} |P_{k'k"}|^2 \delta_{k'k"} \delta\left[{E_f}^0(k') - {E_i}^0(k") - \hbar\omega \right] \qquad (1.153)$$

$M(k'k") =$ *birim zaman başına geçiş olasılığı*.

F_0 = soğurucu yarı iletken malzemeden gelen, foton; f ln x (birim alan başına fotonların sayısı ,birim zaman aralığı başına) olduğunu düşünelim.

$F_0 \Rrightarrow \boxed{F(x) \longrightarrow\longrightarrow F(x+dx)}$ yarı iletkenin kesit alanı = S

Birim zaman aralığı başına , $dV = sdx$ basit hacminde x ve x+dx yer aralığında soğurulan, fotonların sayısı;

$$dn = [F(x) - F(x+dx)]S = -\frac{dF}{dx} dx\, S \qquad (1.154)$$

Diğer bir taraftan, bu dn sayısı;

- σ = birim akı başına foton soğrulma olasılığı

- dN = N S dx = soğurulan her N'li atomik merkezler ile bu merkezlerin yoğunluğu,

- F(x) = bu hacime doğru gelen ortalama akı

Değerleri ile orantılıdır. Burada σ = tek soğurucu merkez tarafından fotonların birim akısının soğurma olasılığıdır.[13]

$$dn = \sigma F(x) N S dx = (-dFS) \tag{1.155}$$

$$dF = -\sigma N F(x) dx \Longrightarrow F(x) = F_0 e^{-(\sigma N)x} = F_0 e^{-\alpha x} \quad \text{ile} \quad \alpha = \sigma N \tag{1.156}$$

$\alpha = soğurma\ katsayısı$

Örneğin; atomik kesidi = 10^{-16} cm^2 , N = 10^{22} cm^{-3} , α = 10^6 cm^{-1} ya da $\alpha^{-1} = 10^{-6}$ cm = 10^2 A^0 = eğer ħw>E_G ise sc kristalinde fotonların serbest yolundan ayrılan elektronların tanımı. J = ışık şiddeti = birim zamanda birim kesit alanı boyunca ışığın yayılma doğrultusunda parlaklık enerjisinin büyüklüğüdür. $J \equiv \hbar\omega$; $J(x) = J_0 e^{-\alpha x}$; $\alpha(\omega) ya\ da\ \alpha(\lambda) \equiv$ cismin soğurma spektrumudur. Işık enerjisinin ortalama yoğunluğunu (birim hacim başına); $\frac{\in E_0^2}{8\pi}$ olduğu düşünülürse ışık şiddeti J aşağıdaki gibi ifade edilmiştir;

$$J = Sdx \frac{\in E_0^2}{8\pi} = v \frac{\in E_0^2}{8\pi} \tag{1.157}$$

ve $v = \frac{c}{n}$ dir. n=kırılma indisi, S=alan1, dx=vdt, t=1, v = kristaldeki ışık hızı. E_0 , A_0 (1.111) ve (1.112) denklemi kullanılarak yerine konur.

$$F = \frac{J}{\hbar\omega} = \frac{\in E_0^2}{8\pi} \frac{\omega}{c\hbar} \tag{1.158}$$

$F \leftrightarrow 1\ (alan);\ M(k_f{}' k_f{}'') \rightarrow \sigma;\ 1 \rightarrow \sigma;\ F \rightarrow M(k_f{}' k_f{}'')$

Alan (soğurucu atom çevresindeki efektif alan)

$$\sigma = \frac{M(k_f{}' k_f{}'')}{F} = \frac{\in E_0^2}{8\pi} \frac{c\hbar}{\omega} M(k_f{}' k_f{}'') \tag{1.159}$$

Sonlu τ_v hacimdeki (çok büyük) yarı iletkenin elektronları için, Heisenberg belirsizliklerini kullanalım;

$$\Delta x \Delta P_x = h \; ya \; da \; \Delta x \Delta k_x = 2\pi \tag{1.160}$$

$$\Delta y \Delta P_y = h \; ya \; da \; \Delta y \Delta k_y = 2\pi \tag{1.161}$$

$$\Delta z \Delta P_z = h \; ya \; da \; \Delta z \Delta k_z = 2\pi \tag{1.162}$$

$$\Delta x \Delta y \Delta z \; \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = 8\pi^3 \tag{1.163}$$

$$\Delta x \Delta y \Delta z = \tau_v \; (çok \; büyük) \tag{1.164}$$

$$\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \tau_k \tag{1.165}$$

Burada $\tau_k =$ k-uzayında üç boyutta hacim (quasimomentum) z elektron durumunun yerini tutan (spin ↑ ve spin ↓)

$$\tau_k = \frac{8\pi^3}{\tau_v} \rightarrow z \; durumu; \; d\tau_k = \rho(k)dk$$

$$\rho(k)dk = \frac{\tau_v d\tau_k}{4(\pi)^3} \tag{1.166}$$

$\tau_v = 1$ için $\rho(k)dk = \frac{d\tau_k}{4(\pi)^3} \; d\tau_k$ momentum hacimi çevresinde k uzayında ortalama momentumdaki birim hacim başına elektron durumları sayısıdır.

k quasimomentum vektörü tarafından tanımlanan elektron durumlarının işgal yoğunluğu verildiğini Fermi Dirac f(k) dağılımı için;

$$f(k) = \frac{1}{e^{\frac{E^0(k) - E_F}{k_B T}} + 1} \tag{1.167}$$

Denklem (1.156) kullanılarak, basit soğurma katsayısı aşağıdaki gibi ifade edilmiştir;

$d\alpha = \sigma dN$ kullanılarak; (1.159) $d\alpha = \frac{8\pi n}{\epsilon A_0^2} \frac{c\hbar}{\omega} M(k_f{}' k_f{}'') dN$ elde edilmiştir.

$$dN = f(k")[1 - f(k')]\frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3}\frac{d\tau_{k"}}{4\pi^3} \approx \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3}\frac{d\tau_{k"}}{4\pi^3} \quad (1.168)$$

$f(k")$ = pratikte doldurulmuş valans bandda başlangıç durumu

$$f(k") = \frac{1}{e^{\frac{E^0(k")-E_F}{k_BT}+1}} \approx 1 \quad (1.169)$$

$f(k')$ =Pratikte boş olan iletim bandında final durumu

$$f(k') = \frac{1}{e^{\frac{E^0(k')-E_F}{k_BT}+1}} \approx 0 \quad (1.170)$$

$$d\alpha \approx \frac{8\pi n}{\epsilon A_0^2}\frac{c\hbar}{\omega}M(k_f{}'k_f")\frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3}\frac{d\tau_{k"}}{4\pi^3} \quad (1.171)$$

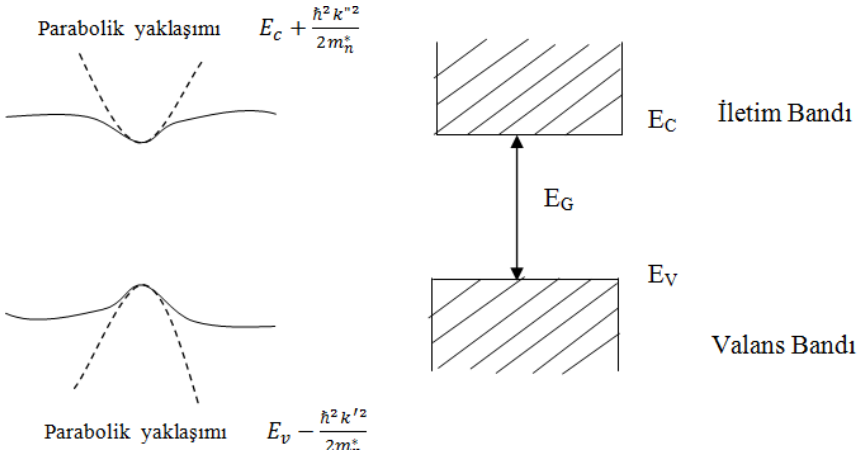
$$\alpha = \frac{nc\hbar}{2\pi^5\epsilon A_0^2\omega}\iint_{(\tau_k)} M(k_f{}'k_f")d\tau_{k'}\tau_{k"} \quad (1.172)$$

(1.153) ifadesi (1.172)'de yerine yazılırsa;

$$\alpha = \frac{e^2}{\pi^4 cm^2 n\omega}\int_{(\tau_{k'})}\int_{(\tau_{k"})}\left|P_{if}(k")\right|^2\delta\left[E_f{}^0(k') - E_i{}^0(k") - \hbar\omega\right]\delta k'k"d\tau_{k'}d\tau_{k"} \quad (1.173)$$

elde edilir. k" = k' ise

$$\alpha = \frac{e^2}{\pi^4 cm^2 n\omega}\int_{(\tau_{k'})}\left|P_{if}(k")\right|^2\delta\left[E_f{}^0(k") - E_i{}^0(k") - \hbar\omega\right]d\tau_{k"} \quad (1.174)$$



Şekil 1.34 Direk band yapısı

Şimdi yukarıdaki şekilde gösterilen yarı iletkenlerin direk enerji band yapısına sahip olduğunu dikkate alalım. Valans bandın maksimum değerinin k = 0 noktasına yerleştiğini düşünülüp, matris elemanın $P_{if}(k")$ denklem (31) de aşağıdaki gibi gösterilmiştir;

$$P_{if}(k") = P_{if}(0) + \frac{dP_{if}}{dk"}dk" + \cdots \tag{1.175}$$

Bu ifade de sıfırlı terimin $P_{if}(0) \neq 0$ olduğunu düşülelim;

$$P_{if}(k") \approx P_{if}(0) \quad ; \quad E_i^0(k") = E_v - \frac{\hbar^2 k"^2}{2m_p^*}; \quad E_f^0(k") = E_c - \frac{\hbar^2 k"^2}{2m_n^*}; \; d\tau_{k"} = 4\pi k"^2 dk";$$

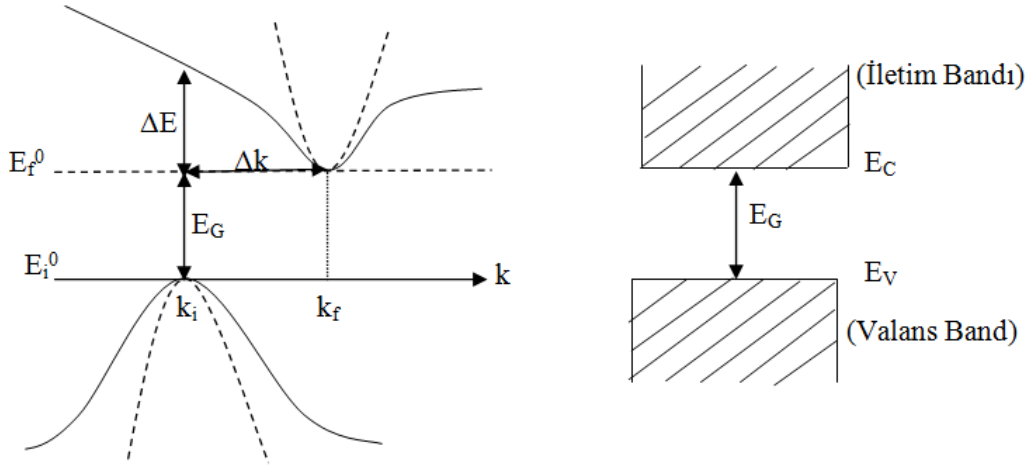
$m_{ind.}^* = \frac{m_n^* m_p^*}{m_n^* + m_p^*}$ = elektron-hole çiftinin indirgenmiş kütlesi.

$$\int_{(\tau_{k"})} \delta[\hbar\omega - E_G - \frac{\hbar^2 k"^2}{2m_{ind.}^*}] 4\pi k"^2 dk" = 2\pi \left(\frac{2m_{ind.}^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} (\hbar\omega - E_G)^{1/2} \tag{1.176}$$

$$\alpha = B(\hbar\omega - E_G)^{1/2} \text{ ile } B = \frac{2e^2 |P_{if}(0)|^2 (2m_{ind.}^*)^{3/2}}{\pi^3 c m_p^{*2} \hbar^2 n\omega} \tag{1.177}$$

$$\alpha = B' \frac{(\hbar\omega - E_G)^{1/2}}{\hbar\omega} \tag{1.178}$$

Dolaylı aralıklı yarı iletkenin band yapısının farklı geçiş olasılıkları vardır.



Şekil 1.35 Band yapısının farklı geçiş olasılıkları

Quasimomentum uzayında ħΔk kadar kaydırılmış valans bandının maksimumundan iletim bandının minimumuna elektron geçişi hem quasimomentum hem de enerjinin korunumunu gerektirir. Bu sadece örgü titreşim (fononlar tarafından) öncülüğünde mümkündür:

$$E_i^0(k_i) + \hbar\omega \pm \hbar\omega_{fonon} = E_f^0(k_f) \tag{1.179}$$

+ (ya da -) işaretler fononların soğurulmasını gösterir (ya da emilsyon).

$$k_f = k_i + K_{fonon} \tag{1.180}$$

Bunun gibi direk olmayan optik geçişler, fononların bazı pertürbasyonlarını içerir: Elektron geçiş olasılığı hem elektrik alandan kaynaklanan pertürbasyonların matris elemanı ve hemde örgüden kaynaklanan pertürbasyonların matris elemanı tarafından belirlenir. Örgü pertürbasyonunun matris elemanının fonon frekansı w_{fn} ya bağlı olduğunu düşünürsek;

$$\alpha(\omega) = (\hbar\omega - E_G \pm \hbar\omega_{fn})^2 \tag{1.181}$$

Şunu unutmayalımki; direk aralıktaki sc optik geçişinin; bir fononlu ve bir fotonlu bir elektrona, karşılaşan dolaylı aralıklı sc geçişininse bir fononlu bir elektronla karşılaşmaya ihtiyacı vardır. Saydam alt yüzeyde (kırıcılık indis) soğurucu ince filmin geçiş spektrumunu kullanarak, dalgaboyunun fonksiyonu ve filmin band aralığını olarak soğuruculuk katsayısı bulunur.

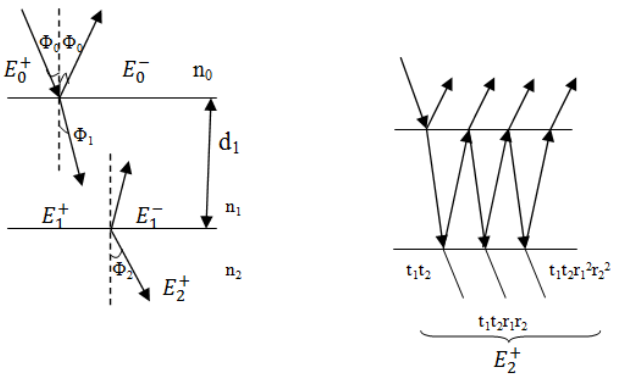
$$e = E\exp[j(\omega t - kr)] \tag{1.182}$$

e = Işık dalgasının elektrik alanı

$$k = \frac{\omega}{v} \quad \text{ve} \quad n = \frac{c}{v} \tag{1.183}$$

$\varphi_0 = \varphi_1 = \varphi_2 = 0$ için Fresnel katsayısı

$$t_1 = \frac{2n_0}{n_0+n_1},\ r_1 = \frac{n_0-n_1}{n_0+n_1} \text{ ve } t_2 = \frac{2n_1}{n_1+n_2},\ r_2 = \frac{n_1-n_2}{n_1+n_2} \tag{1.184}$$



Şekil 1.36 Sınır koşullarında kırılma ve yansıma değerleri

Fresnel yasası kırılan ve yansıyan dalga genlikleri hakkında sınır koşulları çerçevesinde bilgi verir: Elektrik ve manyetik alan değişimlerinin teğet bileşenlerinin z = 0 ve z = d_1 düzleminden geçişini ve yukarıdaki Fresnel katsayısı t_1, r_1, t_2 ve r_2 elde edilişini değiştirmez. Çoklu yansıma ve geçişleri değerlendirirsek, her iki kırılma ve geçiş genliği içinde aşağıdaki denklemler elde edilebilir;

$$\frac{E_0^-}{E_0^+} = r = \frac{r_1+r_2e^{-2i\delta_1}}{1+r_1r_2e^{-2i\delta_1}} = \text{yansınma katsayısı} \tag{1.185}$$

$$\frac{E_2^+e^{-ic_2d_1}}{E_0^+} = t = \frac{t_1t_2e^{-i\delta_1}}{1+r_1r_2e^{-2i\delta_1}} = \text{geçiş katsayısı} \tag{1.186}$$

$$\delta_1 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_1 d_1 \cos\phi_1 \text{ ve } c_2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_2 \cos\phi_2 \tag{1.187}$$

A) Soğurucu ince bir filmin sonsuz kalınlıkta saydam ara yüzeyde olduğunu farz edelim;

$$T = \frac{n_2}{n_0} tt^* = \text{geçiş şiddeti} \tag{1.188}$$

$$T = \frac{A^{"}x}{B^{"}-C^{"}x+D^{"}x^2} \tag{1.189}$$

ile $x = e^{-\alpha d_1}$ ve $\alpha = 4\pi k/\lambda =$ soğurma katsayısı

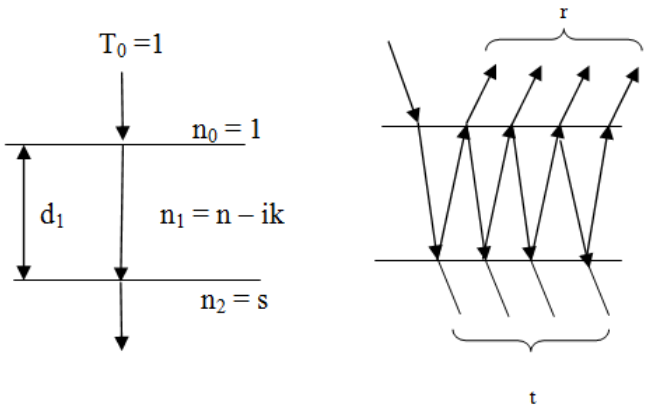
$$A^{"} = 16(n^2+k^2)s \tag{1.190}$$

$$B'' = [(n+1)^2 + k^2)][(n+s)^2 + k^2] \quad (1.191)$$

$$C'' = [(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2) - 4k^2 s]2\cos\phi - k[2(n^2 - s^2 + k^2) + 2s(n^2 - 1 + k^2)]\,2\sin\phi \quad (1.192)$$

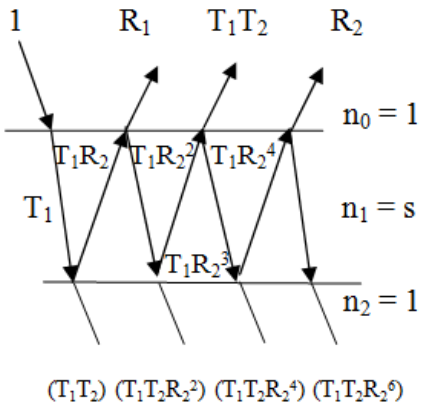
$$D'' = [(n-1)^2 + k^2)][(n-s)^2 + k^2] \quad (1.193)$$

$$\phi = 4\pi n d_1/\lambda \quad (1.194)$$



Şekil 1.37 Sonsuz kalınlıktaki saydam ara yüzeyli soğurucu ince film

B) Şimdi saydam ara yüzey tek başına ele alalım: Kalınlık çok büyük ve yüzeyin paralelliği mükemmel olmayabilir, çoklu ışık geçişi ve sadece şiddet arasındaki faz ilişkisi eklenmiştir.



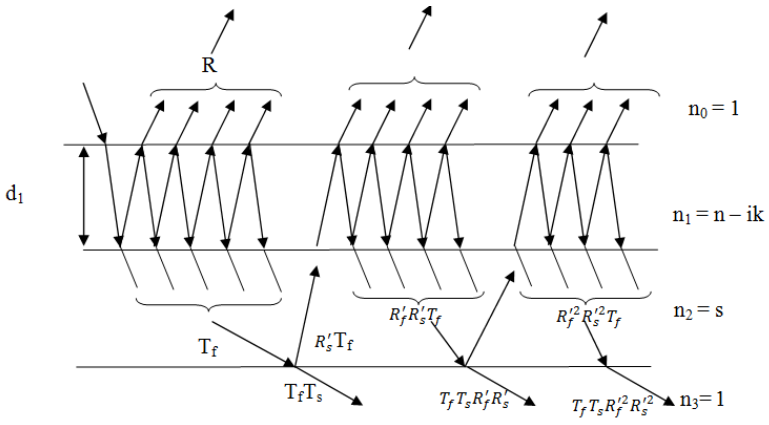
Şekil 1.38 Saydam arayüzeyin gösterimi

$$T_\Sigma = T_1T_2[1 + R_2^2 + R_2^4 + R_2^6 + \cdots] = \frac{T_1T_2}{1-R_2^2} \tag{1.195}$$

$$R_2 = {(S-1)^2}\Big/{(S+1)^2} \quad T_1 = T_2 = T_S = \frac{4s}{(S+1)^2} \qquad T_\Sigma = \frac{2S}{S^2+1} \quad S = \frac{1}{T_\Sigma} + \left[\frac{1}{{T_\Sigma}^2} - 1\right]^{1/2} \tag{1.196}$$

Saydam ara yüzeyin kırıcılık indisi hesaplanırken bu denklemler kullanılır.

C) Sonlu kalınlıktaki saydam ara yüzey için soğurucu ince filmlerin incelenmesi;

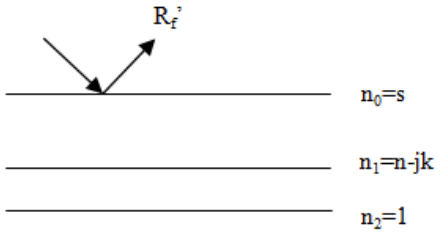


Şekil 1.39 Sonlu kalınlıktaki saydam ara yüzeyli soğurucu ince filmler

$$T_{fs} = T_fT_s[1 + R_f'R_s' + \left[R_f'R_s'\right]^2 + \left[R_f'R_s'\right]^3 + \cdots] \tag{1.197}$$

$$T_{fs} = \frac{T_fT_s}{1-R_f'R_s'}, \quad T_{fs} = \frac{A'x}{B'-C'x+D'x^2} \tag{1.198}$$

$$R_f' = r_f'r_f'^*, \quad r_f' = \frac{r_1'+r_2'e^{-2i\delta_1}}{1+r_1'r_2'e^{-2i\delta_1}} \tag{1.199}$$



Şekil 1.40 Farklı kırılma indisli ortamlarda tam yansıma

$$r_1' = \frac{s-n+jk}{s+n-jk} \; ; \; r_2' = \frac{n-jk-1}{n-jk+1} \tag{1.200}$$

$$T_s = \frac{s}{1}\left(\frac{2}{(1+s)}\right)^2 = \frac{4s}{(1+s)^2} \tag{1.201}$$

$$R_s' = \left(\frac{s-1}{s+1}\right)^2 \tag{1.202}$$

$$A^{"} = 16s(n^2 + k^2) \tag{1.203}$$

$$B^{"} = [(n+1)^2 + k^2)][(n+1)\,(n+s^2) + k^2] \tag{1.204}$$

$$C^{"} = [(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2) - 2k^2(s^2+1)]2\cos\phi - k[2(n^2 - s^2 + k^2) + (s^2+1)(n^2 - 1 + k^2)]\,2\sin\phi \tag{1.205}$$

$$D^{"} = [(n-1)^2 + k^2)][(n-1)(n-s)^2 + k^2] \tag{1.206}$$

$$\phi = 4\pi n d_1/\lambda \tag{1.207}$$

$$x = e^{-\alpha d_1} \tag{1.208}$$

$$\alpha = 4\pi k/\lambda \tag{1.209}$$

Spektrumun zayıf soğurucu bölgesi için, k çok küçük (k≈0) alınmalıdır. Sonuç olarak denklem (1.201);

$T \cong \frac{Ax}{B - Cx\cos\phi + Dx^2}$ halini alır. (1.210)

$$A = 16sn^2 \tag{1.211}$$

$$B = (n+1)^3(n+s^2) \tag{1.212}$$

$$C = 2(n^2-1)(n^2-s^2) \tag{1.213}$$

$$D = (n-1)^3(n-s^2) \tag{1.214}$$

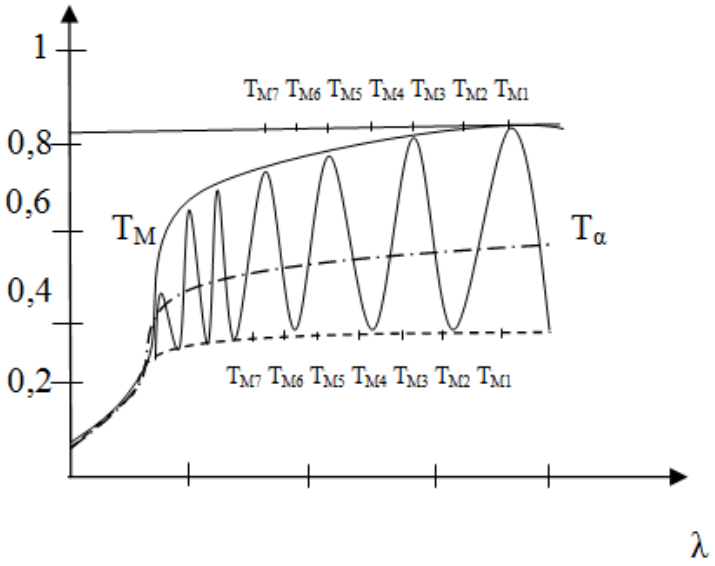
$\phi = 4\pi n d_1/\lambda$ ve $x = e^{-\alpha d_1}$ (1.215)

Arayüzey sınırı için basit denklem $2nd_1 = m\lambda$ ya da $\phi = m2\pi$

m = maksimum $\begin{bmatrix}\cos\phi = 1 \\ T = T_M\end{bmatrix}$değeri için tam sayıdır.

m = minimum $\begin{bmatrix}\cos\phi = -1 \\ T = T_m\end{bmatrix}$değeri için tam sayıdır.

$$T_M = \frac{Ax}{B-Cx+Dx^2} \;;\; T_m = \frac{Ax}{B-Cx+Dx^2} \tag{1.216}$$



Şekil 1.41 n kırılma indisinin hesaplanması

Kırıcı n indisi hesabının nasıl yapıldığını incelersek; α=0 (ya da α=1) olduğu saydam bölgede;

$$T_{\mathrm{M}} = \frac{2S}{S^2+1} = T_{\Sigma} \tag{1.217}$$

s hesaplanmak içinde bu denklem kullanılabilir. Bu saydam bölgede (x=1), denklem (1.208)'de verilmiştir;

$$T_m = \frac{4n^2 s}{n^4-n^2(s^2+1)+s^2} \quad \text{ya da} \quad n = [N + (N^2 - S^2)^2]^{1/2} \tag{1.218}$$

Burada;

$$N = 2s\frac{T_M - T_m}{T_M T_m} + \frac{s^2+1}{2} = \frac{2s}{T_m} - \frac{s^2+1}{2} \quad (1.219)$$

1.3 Bulgular

Film kalınlığı hesaplanması

Eğer iki komşu maksimumda (ya da minımumda) λ_1 ve λ_2 de n_1 ve n_2 kırıcı indisi arayüzey sınır için temel denklemlerle çözülür;

$$2nd_1 = m\lambda \Longrightarrow d_1 = \lambda_1\lambda_2/2(\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1) \quad (1.220)$$

Soğurma katsayısı ve enerji aralığının hesaplanması:

x' deki (denklem 1.208) iki kuadratik denklemin ilkini kullanılırız ve x için çözeriz ve denlem 1.206'yı kullanmak bize

$$x = \frac{E_M - [(E_M^2 - (n^2-1)^3(n^2-s^4))]^{1/2}}{(n-1)^3(n-s^2)} \quad (1.221)$$

$$E_M = \frac{8n^2 s}{T_M} + (n^2-1)(n^2-s^2) \quad (1.222)$$

$\hbar\omega\alpha = G(\hbar\omega - E_G)^2$ dan E_G hesaplanabilir. Arayüzey – serbest geçişi T_α arayüzey sınırından maksimum ve komşu minimum arasında denklem (1.207)'nın integrali alınarak hesaplanabilir. (Diğer bir deyişle faz açıları 0 ve π arasında)

$$T_\alpha = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \frac{Ax}{B - Cx\cos\phi + Dx^2}\, d\phi = \sqrt{T_M T_m} \quad (1.223)$$

BÖLÜM 2

YAPISAL VE ELEKTRİKSEL ANALİZ YÖNTEMLERİ

2.1 a-Si:H Filmlerin Yapısal Analiz Araştırmalarının Teorik Özeti

2.1.1 UV-Visible Ölçümleri:

2.1.1.1 Optik Absorbsiyon

Eğer bir elektron dolu E enerji durumundan E+ ħω boş enerji durumuna uyarılırsa ω frekanslı bir foton yayınladığı gözlemlenir. Böylelikle absorbsiyon katsayısı α(ω) şu şekilde yazılabilir:

$$\alpha(\omega) = \frac{K}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \left|M\left(E\right)\right|^2 g\left(E\right) g\left(E+\hbar\omega\right) f\left(E\right)\left[1-g\left(E\right)+\hbar\omega\right] dE \qquad (2.1)$$

Burada M(E), E ve E+ħω arasındaki durumların momentumunun matris elemanı ve K sabittir. Eğer M(E) enerjinin hızlı değişen fonksiyonu değilse, α(ω) spektral değişimi g(E) nin değişiminden elde edilebilir.[11]

Kristal Silikonda, α hw'nin artışıyla aralık üzerinde yavaşça yükselir, çünkü aralık boyunca minumum enerji optik geçişi dolaylıdır[3]. Amorf silisyumda, momentum korunmadığından, tüm geçişler zorunlu olarak yönlendirilmiştir.

Durumun parabolik yoğunluğunun dolaşım sınırı çevresinde olduğunu farzedelim, her iki iletkenlik bandı $g_c(E)=A_c(E-E_c)^{1/2}$ ve iletkenlik bandı $g_v(E)=A_v(E-E_v)^{1/2}$ için kristal yarıiletkene benzerdir ,B'nin sabit ve $E_G=E_C-E_V$ olduğu durumda α(ω),

$$\alpha(\omega) = B\frac{(\hbar\omega - E_G)^2}{\hbar\omega} \quad (2.2)$$

halini alır.

$\hbar\omega$ nin fonksiyonu olan $(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ çizimi kullanılarak yukarıdaki denklem , α=0 için lineer ekstrapolasyon E_G aralığı verilmelidir.

Bazı durumlarda, tahmini optik aralık bir şekilde keyfidir. E_{opt} deki keyfi değerlerin derecesini indirge işlemi, $\alpha=10^4 cm^{-1}$ olan amorf silisyumdaki standart değer E_{opt} belirlemek için uygulanmıştır.

Buna ek olarak deneyler göstermektedirki optik absorbsiyon $a(\hbar\omega)$ optik aralığın hemen üzerinde eksponansiyel olarak, foton enejisi hw değerince azalır. Bu bölge yerelleşmiş band-tail durumu absopsiyonu ve diğer bandda uzatılmış durum arasındaki geçişe bağlıdır. Bu band tail durum bölgesinde, absopsiyon sabiti α denkleme uyar,

$$\alpha = \alpha_0 \exp\left(\frac{E-E_0}{E_V}\right) \quad (2.3)$$

Bu bölge boyunca g(E) nin $exp\left(\frac{E}{E_V}\right)$ olarak kabul edildiği valans band ve 25-50 meV iletkenlik bandı için $\alpha_0 = 10^6 cm^{-1}$, E_0=-2.2eV E_V=40-90meV olur. Bu α bölgesi çok hassas film hazırlama koşullarına ve düşük değerler için kesin ölçümlerin çok farklı olduğunu unutmayalım.

Özetle, UV-Visible ölçümleri katkılanmamış a-Si:H, n-a-Si:H ve p-a-Si:H filmlerde kırılma indisi (n), optik band aralığını, absorpsiyon sabitini (a) ve film kalınlığını elde etmek için sırasıyla uygulanmıştır.

2.1.1.2 Kızıl ötesi Absorpsiyon

Yapıdaki Si-Si ve Si-H bağlarının titreşimlerine bağlı olarak IR bölgesinde a-Si:H ışıma absorbsiyonu düşük enerjilidir. Bununla bereber titreşimsel spektroskopi analizi ile tanımlanmış yapıda hidrojen bütünlüğü ile birleştirilmiştir. Kö tamamlanmış tekniklerden biridir. Kö radyasyonu sadece titreşimsel örgüden kaynaklanan dipoller tarafından soğurulur.

Si atomunun kütlesi H atomundan çok büyüktür. a-Si:H filmlerde Si-H bandının titreşim modu Si-Si dan daha yüksek frekansta görülür. Böylelikle, Si-H titreşiminin absorbsiyon spektrumu bağımsızca elde edilebilir ve filmdeki atomların her iki yapı ve yoğunluğu belirlenebilir.

a-Si:H filmler için, üç absorpsiyon bölgesi $400cm^{-1}$-$24000cm^{-1}$ frekans aralığında gözlenmiştir. Bunlar, (i) sallantı ya da sallanma (ii) band bükülmesi, ve (iii) band uzamasıdır.

i) Bu mod 640 cm^{-1} çevresinde güçlü olarak belirlenir. Bileşim de 610, 640 and $680cm^{-1}$ olan üç ana frekans gözlemlendi. Bu modla örtüşen tüm tipteki SiH_x'den titreşimin absorbsiyonu oluşmaktadır.

ii) Bu mod $869cm^{-1}$ civarlarında zayıf şiddetlidir. $890cm^{-1}$ de SiH_2 ve $845cm^{-1}$de SiH_3 bu titreşimleri kapsar.

iii) Tüm SiHx yapılarından 1975 - $2150cm^{-1}$ frekansı civarlarından bu mod güçlü olarak gözlemlenir.

Özetle, a-Si:H filmlerin karakteristik titreşim modu ve bunların farklı bağlanma konfigürasyonlarındaki titreşim frekans yaklaşımları verilmiştir:

2.1.2 Elektriksel Karakterizasyon

Filmlerin elektriksel karakteristiği sandiviç yapısı ve düzlemsel form aracılığıyla elde edilişi bu bölümde açıklanmaktadır. Oda sıcaklığında elde edilen voltaj ve ölçülen akım kaynak ölçen ya da Keithley 6517A tip elektro metre ile erişilir.

Filmlerin üzerinde direncini saptamak için kullanılan düzlemsel elektrodlar vardır. Diğer bir taraftan, sandiviç konfigürasyonunda, Krom (Cr), Alüminyum (Al) ve indiyum ince oksit (ITO) gibi metaller tarafından Schottky bariyer boyunca a-Si:H filmlerin elektriksel özellikleri elde edilmiştir. Bu metaller bu durum için, fiziksel buhar biriktirme tekniği ile bırakıntılanmıştır elektron ışın buhalaştırması Cr için kullanılır, ve ITO biriktirmesi içinse püskürtme tekniği kullanılır. Düşük buharlaştırma sıcaklığına bağlı olarak, Al sıcaklık biriktirme methoduna göre büyür.

Cr kaplı cam ve ITO kaplı cam olarak iki çeşit substratların ohmik back kontaktı mevcuttur. Üretilen bu substratlar a-Si:H filmler üzerinde kalıntılanır.

B-1) Schottky yapısı. Bakır maskeli a-Si:H metallerde biriktirmeyle Schottky yapısı direk elde edilmektedir.

Schottky bariyer, metal-yarıiletken arayüzeylerin esas özellikleri ve şekilde gösterilen a-Si:H filmlerin oluşumudur.

Metal ve yarıiletkenler sıkı kontakt getirdiğinde, hizalanmış iki malzemenin Fermi enerjilerine kadar devam eder ve malzemenin iş fonksiyon farklılıkları arasında elektron değişimi meydana gelir.

Eğer nötral kütlenin elektron göreliliği için, uzay yük bölgesinde $\Psi(x)$, dc potansiyelini belirtir Poisson denklemi, $\Psi(x)$ yerel yük yoğunluğu $\rho(x)$ ile gösterilmektedir;

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{\rho(x)}{\epsilon_S} \tag{2.4}$$

Burada

$$\rho(x) = q\int[f(E,E_F,T) - f(E,E_F - q\Psi(x),T)]g(E)dE \tag{2.5}$$

a-Si:H filmde durum yoğunluğu g(E) ve f(E,E,T) Fermi fonksiyonudur. Düşük sıcaklık limiti gibi olduğunu göz önüne alarak basamak fonksiyon durumu f(E,T) kullanımı, f(x) sadeleştirmek için,

$$\rho\big(\Psi(x)\big) = q\int_{E_F-\Psi(x)}^{E_F} g(E)dE \tag{2.6}$$

$\Psi(x)$ de uzay yük yoğunluğuna bağlı olarak iterasyon methoduyla sadece deplasyon bölgesi çözülebilir ve Ψ_S yarıiletken yüzey potansiyeli herhangi bir dış gerilim yokken Schottky bariyerin oluşum potansiyeli olarak terimleşir.

2.1.3 Akım – Gerilim Karakteristiği

Potansiyel bariyeri genellikle ileri öngerilim akımı özellikleri ile karakterize edilir. Kristal silikon için geliştrilmiş formalizm a-Si:H içinde geçerlidir. Taşıyıcıların taşınması kanıtlanan potansiyel bariyerli oda sıcaklığında beklenen bir oluşumdur.

Bu bağlamda, ileri gerilim prosesi altında difüzyon ya da termoiyonik emilsyon sınırlandırması aşağıdaki gibi verilir;

$$I = I_0 exp\left[\frac{qV}{nkT}\right]\left[1 - exp\left(-\frac{qV}{nkT}\right)\right] \quad (2.7)$$

Burada I_0=ters gerilim akım saturasyonu, n=idealite faktörüdür. Eğer V>3kT/q, aşağıdaki denklem,

$$I = I_0 exp[AV],\ A = \frac{q}{nkT} \quad (2.8)$$

halini alır.

Eğer taşıyıcı iletimi her iki termoiyonik ya da difüzyon sınırlandırması tarafından oluşursa n neredeyse tekleşir. Eğer difüzyon mekanizması deplasyonu bölgesinde rekombinasyon aracılığıyla yer alıp, n 2 kadar büyük olabilmektedir.

Diğer bir taraftan termoiyonik model için satürasyon akımı I_0,

$$I_0 = A^* T^2 exp\left(-\frac{q\phi_b}{kT}\right) \quad (2.9)$$

Φ_b'nin etkin bariyer yüksekliği, A*'nın Richardson sabiti , q: basit yük ve T:sıcaklık olduğu.

Sınırlı difüzyon taşınması durumları için, F_S'nin a-Si:H yüzeylerde maksimum elektrik alan, N_C'nin iletim bandındaki etkin durum yoğunluğu, μ_e'nin a-Si:H filmlerde elektron devinirliğinin olduğu I_0 ;

$$I_0 = qN_C\mu_e F_S exp\left(-\frac{q\phi_b}{kT}\right) \quad (2.10)$$

$\ln(I/I_0)$ ve V engelleme eğrisinden, Φ_b diyodun n değeri çizimin eğiminden elde edilmiştir.

2.1.4 Admittans Karakteristiği

Kristalleşme durumuna zıt olarak a-Si:H'da ki Schottky bariyer bölgesi ile ilişkili belirgin bir ifade türetmek mümkün değildir. Bu durumda deplasyon potansiyeli Poisson denklemi $\rho(x)$ yük yoğunluğu boyunca $\Psi(x)$ kabul edilir ve $\Psi(x)$ bağlı hale gelir. Sonuç olarak aşağıdaki emprik denklem elde edilir;

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{\rho(x)}{\epsilon_S} \tag{2.11}$$

$$\rho[\Psi(x)] = q\int[f(E', E_F, T) - f(E', E_F - q\Psi(x), T)]g(E')dE' \tag{2.12}$$

Eğer kullanma fonksiyonu f basamak gibi düşük sıcaklık değerine yaklaştırılırsa , $\rho(x)$,

$$\rho[\Psi(x)] = q\int_{E_F - q\Psi(x)}^{E_F} g(E)dE \tag{2.13}$$

halini alır.

Eğer a-Si:H diyoda ω frekansına küçük değerili ac voltajı uygulanırsa, Fermi seviyesi çevresinde kullanılan yerelleşmiş durumların modülasyonu ilgili uzatılmış durum bandı kaynaklık edebildikçe ya da voltaj modulasyonu oranında serbest taşıyıcılar boşalttıkça uygundur.

Verilen ω frekans ve T sıcaklık çifti için, x_i deplasyon bölgesinde, $x>x_i$ gibi pozisyonu vardır. Karşı kütle için E_F civarında neredeyse tüm durumlar takip edilebilir modülasyonlardır, ve $x<x_i$ (karşı yüzey) için hiç bir durum takip edilmez. Sınır pozisyonu $x=x_i$ de, durum sadece kısmen modulasyonuna cevap verir ve aşağıdaki durum doymuştur:

$$\omega\tau_i = 1 \tag{2.14}$$

Termal salınım zamanının

$$\tau_i = \frac{1}{ln(x_i)+C_n(x_i)n(x_i)} \tag{2.15}$$

olduğu aşağıda gösterilen taşıyıcı değişimlerinin kinetiği tarafından E_F yerelleşmiş durumunun f_T fonksiyonu kullanımı için denge hesaplaması yapılmaktadır.

$$\frac{df_T}{dt} = -\frac{f_T}{\tau_i} + C_n(x_i)n(x_i) \tag{2.16}$$

e_n:elektron emisyon oranı, $C_n(=\sigma_i v_{th})$: yakalama katsayısı, v_{th}: band ile ifade edilen dışlanmış durum ile serbest elektron yoğunluğu,

$$n(x_i) = g(E_C)kTexp\left[-\frac{E_C(x_i)-E_F}{kT}\right] \tag{2.17}$$

Termal dengede f_T klasik Fermi-Dirac dağılımına indirgenir ve $e_n=c_nn$, $\omega\tau_i = 1\ldots.$ E_i olduğundan kaçış frekansına bağlı olarak (ph frekansı) $v_n\left(=\sigma_n v_{th} kTg(E_C)\right)$ ile

$$e_n(x_i) = \frac{1}{2\tau} = \upsilon_n exp\left[-\frac{E_C(x_i)-E_F}{kT}\right] \tag{2.18}$$

şekilde elde edilir.

$$E_C(x_i) - E_F \equiv E_i = q\Psi_S + E_C(\infty) - E_F = kTln\left(\frac{2\nu_n}{\omega_\nu}\right) \tag{2.19}$$

şeklinde bulunur. Asıl admitansı çözmek için, yüksek ve düşük frekans Schottky bariyerin eşdeğer devresinde sayılmıştır.

Yüksek frekans altında yüzey tarafındaki x_i pozisyonu boyunca yük modülasyonunun olmadığı dielektrik kapasitans C_1 halini alır.

$$C_1 = \frac{\epsilon_S}{x_i} \tag{2.20}$$

Yüklerin tamamının modülasyonlu olduğu xi pozisyonu ötesindeki bölge ile ilişkili kapasitansın bulmak için, bu bölgenin Q_2 toplam yükü tanımlanmalıdır. İlk önce aşağıdaki özdeşlik dikkate alınır,

$$\frac{d}{dx}\left[\frac{d\Psi}{dx}\right]^2 \equiv 2\frac{d\Psi}{dx}\frac{d^2\Psi}{dx^2} \tag{2.21}$$

x_i konumunda $d\Psi/dx = 0$ olduğu kütleden , bir (**) denkleminin integrali alınıp Possion denklemi göz önüne alınabilir. Bu nedenle elektrik alan kuvveti F_i ve sınır pozisyonu x_i deki Ψ_i potansiyeli arasındaki ilişki,

$$\frac{2}{\epsilon_S}\int_0^{\Psi_i}\rho(\Psi')d\Psi' = \left(\frac{d\Psi}{dx}\right)^2_{X=x_i} = F_i^2 \tag{2.22}$$

Dolayısıyla, toplam yük Q_2 ile bu bölgenin x_i'deki Gauss yasası terimlerinin F_i ve Ψ_i olduğu;

$$Q_2 = \epsilon_S F_i A = A\left[2\epsilon_S\int_0^{\Psi_i}\rho(\Psi')d\Psi'\right]^{1/2} \tag{2.23}$$

Dolayısıyla, C_2 kapasitansı (dc ya da düşük frekans kapasitans) ifade de verilen bölge 2'nin tamamı ile ilgilidir.

$$C_2 = \frac{dQ_2}{d\Psi_i} = \frac{\rho_i A}{F_i} \tag{2.24}$$

Sonuç olarak, toplam deplasyon katmanı kapasitansı C; C_1 ve C_2'nin seri bağlanması, kitle direncinin (R_B) ve kapasitansının (C_B) ihmal edilebilir olması koşuluyla;

$$C(\omega,T) = \frac{\rho_i\epsilon_S A}{\epsilon_S F_i + x_i\rho_i} \tag{2.25}$$

şeklinde ifade edilir. Diğer taraftan, ağırlıklı (ortalama) uzaklığın

$$< x >= \frac{\int_0^\infty x\rho(x)dx}{\int_0^\infty \rho(x)dx} \tag{2.26}$$

olduğu deplasyon bölgesi ile ilgili kapasitans,

$$C = \frac{\delta Q}{\delta V_R} = \frac{\epsilon_S A}{<x>} \tag{2.27}$$

Benzer olarak , yüzey potansiyeli

$$V_R + V_0 = \frac{1}{\epsilon_S}\int_0^\infty x\rho(x)dx = \frac{1}{\epsilon_S}\int_0^W xqNdx + \frac{1}{\epsilon_S}\int_W^\infty x\rho(x)\,dx \tag{2.28}$$

şeklinde ifade edilir.

Dolayısıyla, eklem kapasitansı $\alpha(\omega) \ll W$ olmak şartıyla

$$C = \frac{\epsilon_S}{<x>} = \frac{\epsilon_S A}{W+a(\omega)} \tag{2.29}$$

halini alır.

$$\frac{qNW^2}{2\epsilon_S} = V_R + V_0 - V_L \equiv V'_R \tag{2.30}$$

$$W^2 = \frac{2\epsilon_S V'_R}{qN} \tag{2.31}$$

$1/C_2$ sıfır olduğu ekstraposyondan elde edilen Vo' değeri düşük engelleyiciyi denklem (2.28) açıklar. Ve CSi gibi düzgün olması N akım voltaj ilişkisinin FiB bariyer yüksekliğine eşit olduğunu göstermektedir.

BÖLÜM 3

NUMUNELERİN HAZIRLANMASI

3.1 Taban (Altlık) Hazırlığı:

3.1.1 RCA Temizleme

Üretilen örneklerin niteliği çevrenin temizliğine bağlıdır. İyi örneklerin üretilebilmesi için temizleme reçetesi itinalı bir şekilde uygulanmalıdır. Üretimde kullanılan düzenek ile üzerlerine film büyütülecek tabanlar uygun kimyasallarla temizlenmelidir.

Bu çalışmada kristal silisyum pullar ve dilimlenmiş cam tabanlar elektrik ölçümleri için, kuvartz cam tabanlar ise optik ölçümler için kullanılmıştır. Silisyum pullar boron katkılanmış p-tipi, 12-18 Ω dirençli, 100 (Floating zone yöntemiyle büyütülmüş) doğrultusunda yönlendirilmiş ve 330±15 μm kalınlıklı kristallerdir. Bu malzemelerin kimyasal özellikleri birbirinden farklı olduğu için temizlemede de çeşitli kimyasalların ve metotların buna uygun olarak kullanılması gerekmektedir.

Silisyum pullar aşağıda belirtilen aşamalardan geçirilerek temizlenmektedir. İlk olarak örnekler tricloretilen içinde 5 dakika boyunca kaynatılmaktadır. İkinci aşamada, iyonlarından arındırılmış (DW) H_2O içinde bekletilip aynı anda ultrases ortamında çalkalanmıştır. Bu aşama birkaç kez tekrarlanır. Daha sonra, örnekler 1 /1 oranındaki HCl/H_2O_2 karışımında 10 dakika boyunca bekletilir. Dördüncü aşama, örneklerin 2 /1 oranında hazırlanan H_2SO_4/H_2O_2 karışımında 5 dakika bekletildiği bölümdür. Bu aşamadan sonra örnekler 2 dakika (DW) H_2O ile yıkanır. Devamında 1 /10 oranına

sahip HF / H_2O karışımında örnekler 30 saniye boyunca bekletilir. Son aşamada, bütün örnekler tekrar 2 dakika boyunca (DW) H_2O ile yıkanır.

Dilimlenmiş adi ve kuvartz camların temizliği için başka bir reçete takip edilmektedir. Bu örnekler KOH çözeltisi içinde 30 dakika boyunca ultrasese maruz bırakılır daha sonra ise (DW) H_2O ile yıkanır. Son aşamada ise tüm örnekler 1 /100 oranında seyreltilmiş HF çözeltisine batırılır ve sonra (DW) H_2O ile yıkanır. Örneklerin kirlenmesini engellemek için üretime temizleme aşamasından hemen sonra geçilmelidir.

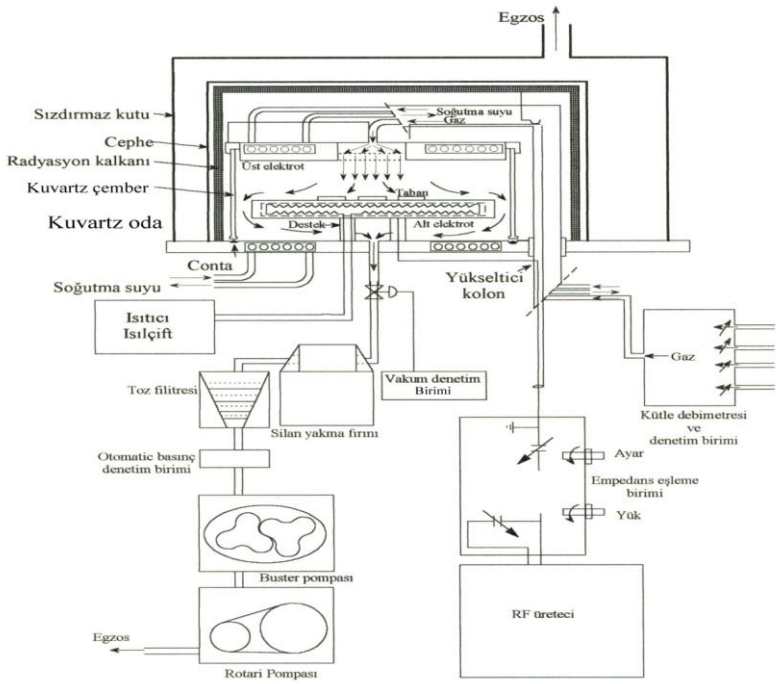
3.1.2 a-Si:H Filmlerinin PECVD Sistemiyle Büyütülmesi

a-Si:H filmler PECVD sistemi kullanılarak büyütülmektedir. Bu sistem plazma reaktörü ve gazların bulunduğu kabinlerden oluşmaktadır. Plazma reaktörünün şeması aşağıda verilmiştir. Bu sistemin çalışması basınç, sıcaklık, güç ve kaynak gazların akış oranı gibi büyütme parametrelerinin itinalı ve dikkatli bir biçimde kontrolünü gerektirir. Bu parametreler büyütülen filmin yapısal, elektronik ve optik özelliklerini tamamıyla etkilemektedir.

Plazma reaktörü, büyütmenin gerçekleştiği yerdir. Plazmanın güçü bu birimde kontrol edilmesi gereken en önemli parametredir. Güç, kuvartz kristal titreşimiyle, 13.56 MHz'lik radyo frekansında (RF) ve uygun katı hal elektroniğiyle azami seviyeye getirilir; 0 ile 300 W arasında gücü ayarlamak mümkündür. Reaktördeki elektrotların çapları 24 cm olduğundan, elektrotlara uygulanan en yüksek güç yoğunluğu 0.78 W/ cm^2 olur. Bu gücün transferinde empedans eşleme birimi gereklidir, çünkü jeneratörün çıkış empedansı reaktörünki ile eş değerde olmadığı zaman gücün bir kısmı geri yansıyabilmektedir.

Vakum, basıncın kontrolü için önemli bir parametredir. Reaktörü istenmeyen moleküllerden temizleyebilmenin yanı sıra, iyi bir büyütme için gereken vakum seviyesinin sağlanması da vakumun hassas bir biçimde kontrolüyle yapılabilmektedir. Buster ve mekanik pompaları ile vakum seviyesi 0.1 mTorr ile atmosfer basıncı arasında ayarlanabilmektedir. Vakum kontrolüyle beraber gazların akış hızı da ideal büyütme şartları için önemlidir. Reaktördeki gazlar istenilen yoğunluğa debimetreler ve kütle debi denetim birimi kullanılarak ayarlanabilmektedir. kütle debi denetim birimi,

gaz çeşidine bağlı olarak gaz akışını 1 ccm ile 200 ccm arasında ayarlayabilmektedir. Son olarak, sıcaklık plazma ve büyütülen filmin termodinamik özelliklerini belirlemesi açısından hayati bir rol oynar. Plazma reaktöründeki bölmede, ısıtıcı bobinler alt elektrotun alt kısmına yerleştirilmiştir ve 0 ile 400 K arasında sıcaklık sağlayabilmektedir.



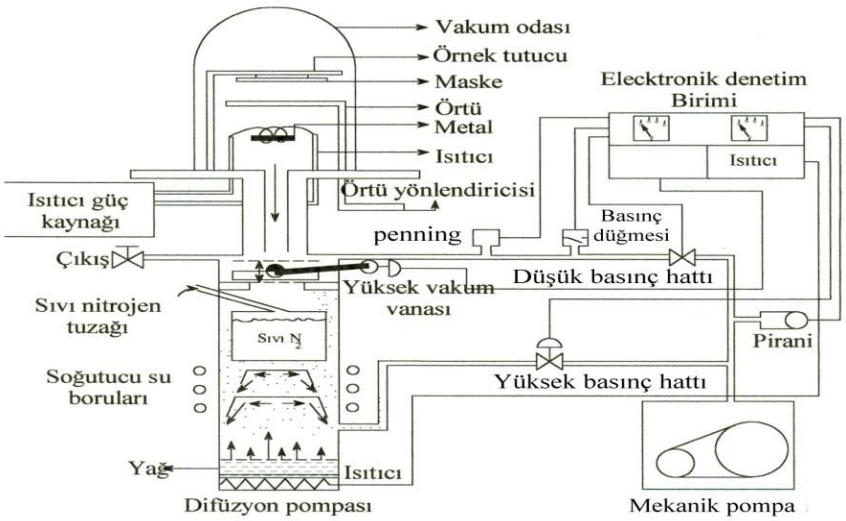
Şekil 3.1 PECVD sistemi.

3.1.2.1 Metal Kaplama Düzenekleri

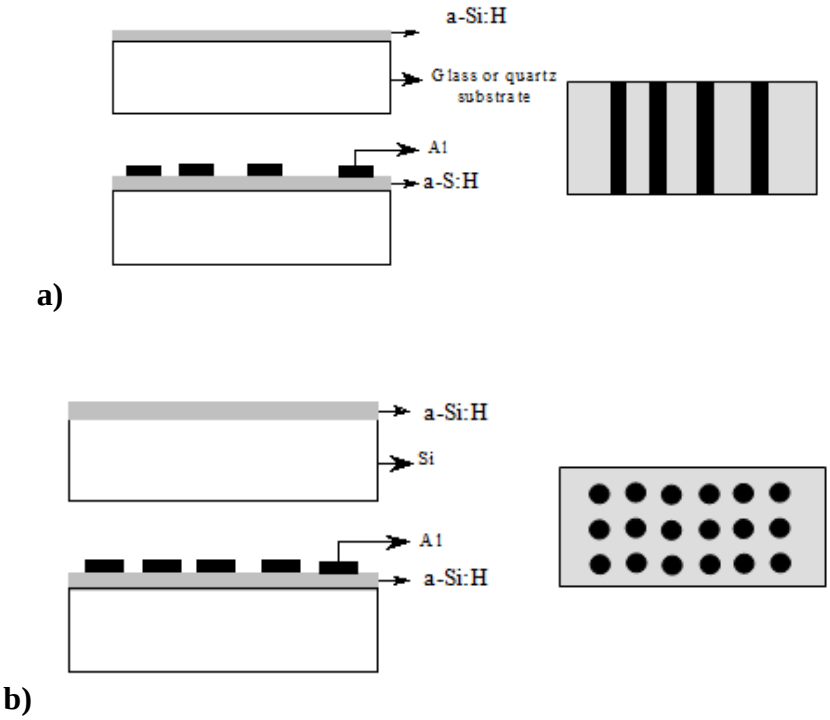
Üretilen örneklerin elektrik ve optik ölçümlerinin yapılabilmesi için yüzeylerine, uygun şekil ve büyüklüklerde çeşitli metaller (alüminyum, krom, ITO) elektrotlar büyütülmüştür. Alüminyum büyütme düzeneği şekil 2'deki gibidir.

Örmekler, maske ve alüminyum, fanusun içine yerleştirildikten sonra pompalar çalıştırılır. Öncelikle mekanik pompa çalışır ve düşük vakum vanasıyla fanusun içindeki havayı dışarı pompalar. Basınç 10^{-2} Torr mertebesine ulaşınca, otomatik olarak düşük vakum vanası kapanır ve yüksek vakum vanası açılarak difüzyon pompası havayı boşaltmaya başlar. Vakum 10^{-6} Torr seviyesine ulaşınca, ısıtıcıya voltaj uygulanarak alüminyumun buharlaşması sağlanır. Yeterli buharlaşma elde edilince kesici sapı kullanılarak çevrilir ve kaplama başlar. Kaplama işlemini sona erdirmek için voltaj

kaynağı kapatılır. Düzeneği boşaltma durumuna getirerek de vakum atmosfer basıncına getirilir.



Şekil 3.2 Metal Kaplama Düzeneği



Şekil 3.3 a) Adi ve kuvartz cam üzerine büyütülen a-SiC:H filmler için dört parmak, b) Si üzerine büyütülenler için ise nokta şeklinde alüminyum elektrotlar büyütülmüştür

3.1.2.2 İndiyum-Kalay-Oksit (ITO) Kaplama Düzeneği

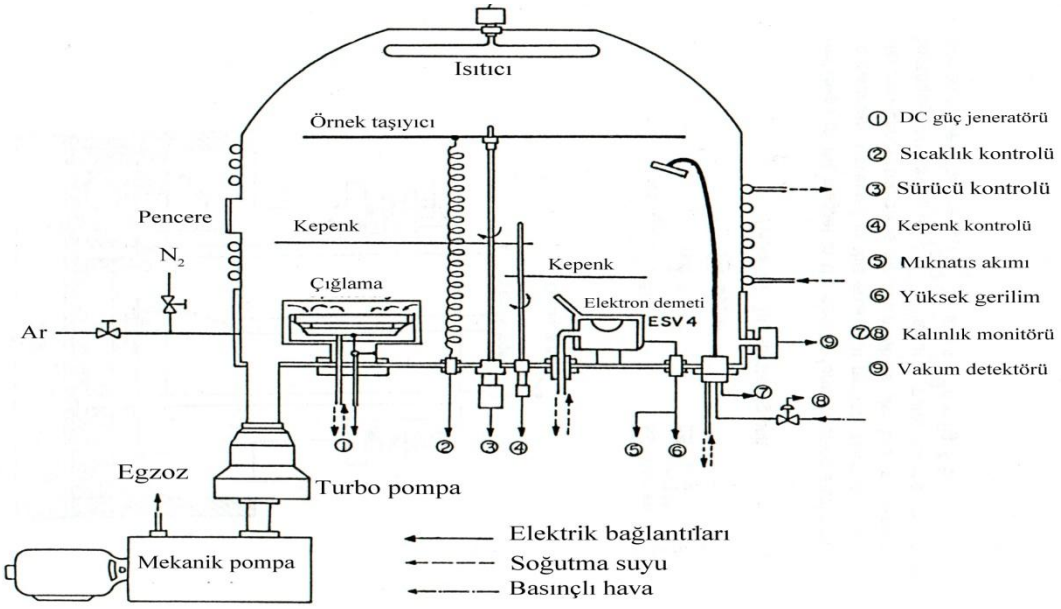
Üretilecek olan diyotların elektro ışıma özelliklerinin çözümlenebilmesi için ışığın ortaya çıkacağı diyot yüzeyinin saydam elektrotlarla kaplanması gerekir. İndiyum-kalay-oksit saydam olması dolayısıyla, bu tür elektrotların kaplanması için tercih edilmektedir. Üzerine diyot büyütülecek taban yüzeyine, diyotun alt elektrotunu oluşturmak için çığlama (Sputtering) sistemi kullanılarak ITO kaplanır.

Manyetik çığlama sisteminde, DC ve RF diyot çığlama tekniklerindeki elektrik alana ek olarak, hedef örneğin yüzeyine yakın ve paralel doğrultuda manyetik alan oluşturulur. Manyetik alanın, elektronları hedef yüzeyi yakınına yönlendirecek şekilde ayarlanmasıyla, çarpışarak iyonlaşan elektronların yüzdesi arttırılmış olur. Böylece hedefteki akım yoğunluğu magnetron olmayan düzeneklerdeki düşük değerinden (1 mA/cm^2) 10-100 mA/cm^2'ye kadar yükseltilebilinir.

Univex450 sistemi krom (Cr) ve ITO gibi metallerin fiziksel buhar biriktirme yöntemiyle kaplanmasını sağlar. Vakum odasının ana tabanı yassı kenarlarıyla turbo moleküler pompaya direk olarak yerleştirilebilir. Böylece çok hızlı ve yüksek düzeyde vakum ve kısa döngü zamanı elde edilmiş olur. Odanın içindeki bütün parçalar ve odanın duvarları pompalamayı etkileyen, yüzeyden gaz çıkmasını en aza indirebilmek için paslanmaz çelikten yapılmıştır. Bu ağır vakum odası bir asansör sistemiyle kaldırılıp indirilebilmektedir.

Pompalama sistemi mekanik ve turbo moleküler pompalardan oluşur. Mekanik pompa yardımcı pompa olarak görev yapmaktadır ve her iki pompa birlikte çalışmaya başlar (Şekil 3.4). Vakum seviyesi 1 torr'a gelene kadar mekanik pompa çalışarak, turbo moleküler pompanın, devreye girebilmek için ihtiyaç duyduğu, 45000 dd'lik dönme hızına ulaşılmasına yardımcı olur. Buna ek olarak, basıncın ilk değerleri turbo moleküler pompanın çalışabilmesi için çok yüksektir. Vakum odasındaki vakum seviyesi iki detektör ile yapılmaktadır. Bunlardan pirani detektörü 10^{-3} torr'a kadar, iyon detektörü ise daha düşük seviyeleri ölçebilir. Bu sistemle odanın basıncı 10^{-7} torr'a kadar düşürülebilir.

Büyütme işlemi XTC kalınlık monitörü ve kontrol ünitesi eşliğinde yapılmıştır. Filmin kalınlığı piezo elektrik bir kristalin rezonans frekansı yardımıyla ölçülebilmektedir. Fakat elde edilen kalınlık verisi, örnekle kristalin üzerinde büyüyen filmlerin kalınlıklarının farklı olabileceği göz önünde bulundurularak düzeltilmelidir.



Şekil 3.4. Vakum sisteminin genel şeması.

BÖLÜM 4

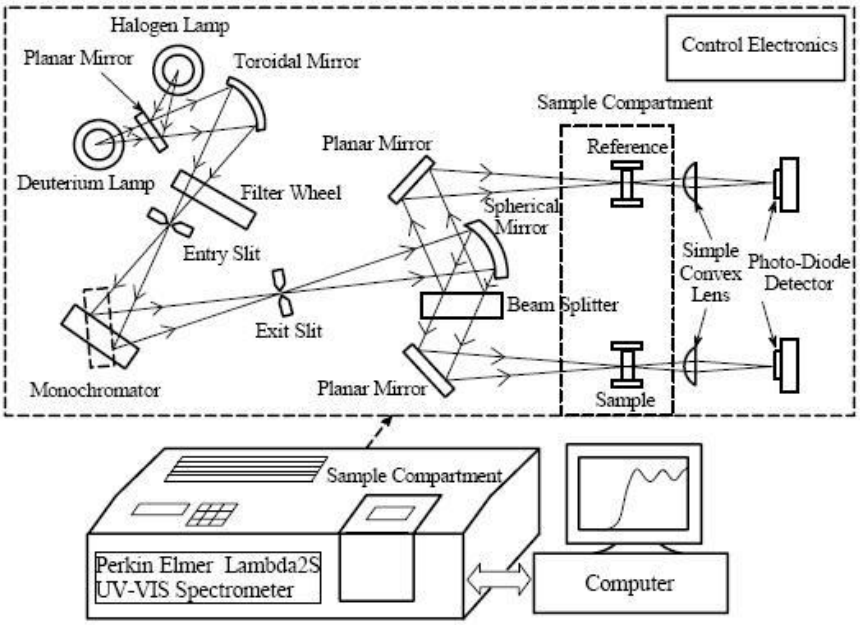
ÖLÇÜM SİSTEMLERİ

4.1 a-Si:H Filmlerin Optik Özellikleri

4.1.1 Morötesi – görünür bölge geçiş spektroskopisi

Morötesi-görünür bölge (UV-Visible) geçiş spektroskopisi filmin kalınlığını, kırıcılık indisini, soğurma katsayısını ve yasak enerji bandı aralığını belirlemede kullanılan bir optik analiz yöntemidir.

Optik geçiş spektroskopisi ölçümlerinde Perkin Elmer Lambda 2S - çift ışın demetli spektrometre kullanılır. Bu sistem 200 – 1100 nm dalga boyuna duyarlı 1053 şerit/mm holografik ızgara aralıklı içbükey bir monokromatör, fotodiyot dedektör ve bir bilgisayar içermektedir (Şekil 4.1). Işık kaynağı olarak döteryum ve tungsten-halojen lambalar kullanılır. Geçişler fotodiyot dedektörler tarafından algılanmaktadır.



Şekil 4.1 Morötesi – görünür bölge geçiş spektroskopisi sistemi.

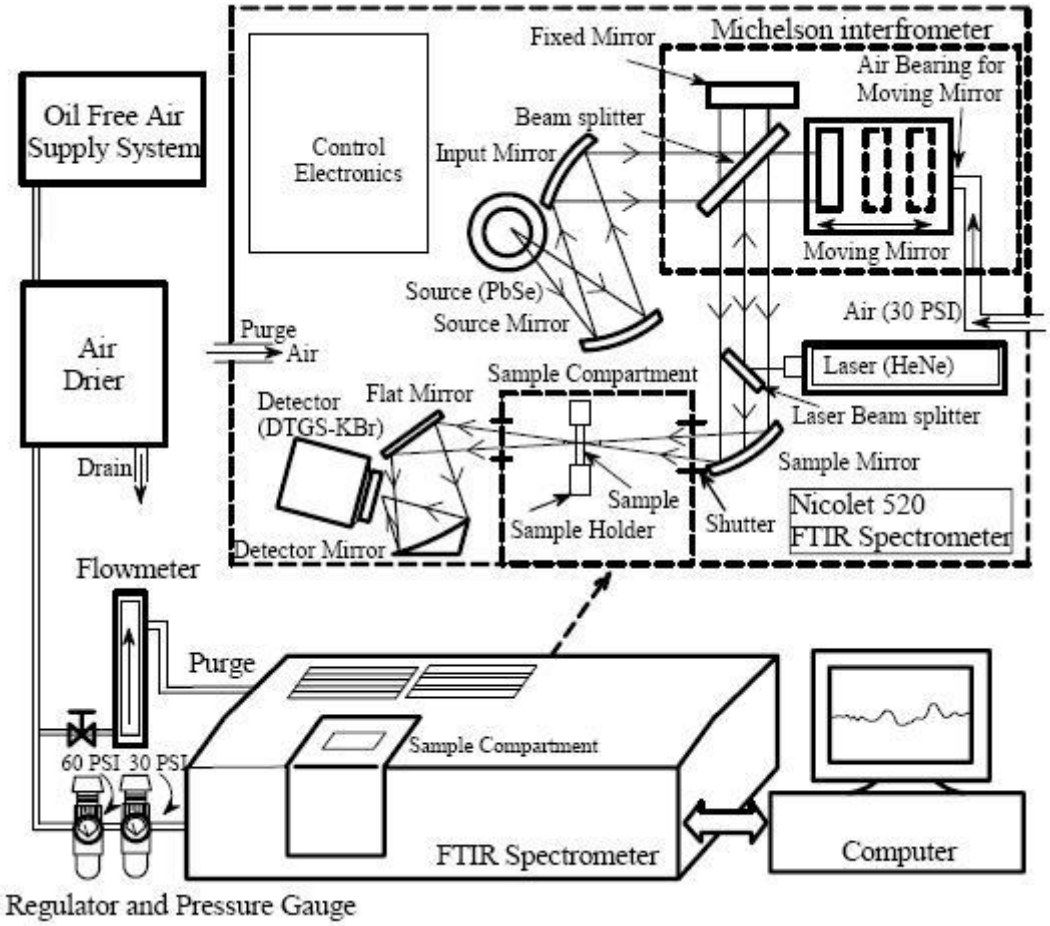
Spektroskopik ölçüm sonucu elde edilen ham veriler RS-232 seri port arabirimi ile bilgisayara aktarılarak optik analizler OptiChar© adı verilen program yardımıyla gerçekleştirilir. Analiz aşamasında OptiChar© tarafından kullanılan nümerik metotlar, film kalınlığı, kırıcılık indisi gibi parametreler için birden fazla olası sonuç verebilmektedir. Bu tür belirsizliklerden kaçınmak amacıyla, analiz yapılırken ek olarak zarf metodu (Swanepoel, 1983) kullanılmaktadır.

4.1.2 Fourier dönüşüm kızılötesi spektroskopi

Fourier dönüşüm kızılötesi spektroskopi (FTIR) filmin moleküler titreşim karakteristiklerini ve bağ yapısını analiz edebilme imkanı veren bir yöntemdir. FTIR sistemi, bir hava pompası, bir hava kurutma ünitesi, FTIR spektrometre ve bir bilgisayardan oluşmaktadır (Şekil 4.2).

Hava pompası ve kurutma ünitesinin görevi; sistemi su buharı, CO_2 ve uçucu solventlerden arındırmak ve spektrometre içerisinde bulunan hareketli ayna için gerekli hava yastığı bağlantısını kontrol etmektir. Hava veya azot kullanılarak sistemin arındırılmasıyla, su buharı ve CO_2 gibi istenmeyen gazların soğurulması engellenebilir. En iyi performans için hava yerine saf azot kullanılmalıdır.

FTIR spektroskopi ölçümleri Nicolet 520 spektrometre kullanılarak yapılır. FTIR spektrometre üç temel bileşenden oluşur: Işık kaynağı (PbSe), Michelson interferometresi ve dedektör (DTGS-KBr). Michelson interferometresi, sabit bir ayna, bir demet ayırıcı ve hareketli bir ayna içermektedir. Frekans değerlerinde sapma oluşturmadığı için geleneksel monokromatörün yerini almıştır. Sistemin kontrolü ve elde edilen verilerin işlenmesi bilgisayar tarafından yürütülür. Elde edilen tepe noktalarından soğurulan dalga boyu spektrumunun analizi için PeakFit© v4.12 programı kullanılmaktadır.



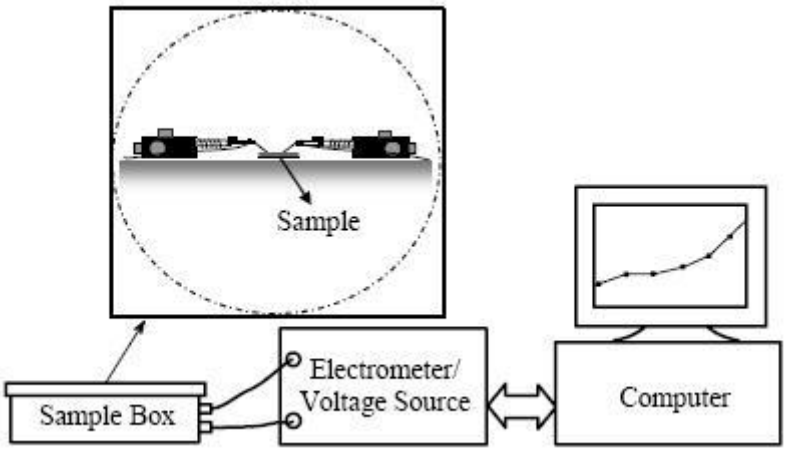
Şekil 4.2 Fourier dönüşüm kızılötesi spektroskopi (FTIR) sistemi.

4.2 Elektriksel Analiz

4.2.1 İletkenlik Ölçüm Sistemi

Filmlerin elektriksel karakteristiklerini belirlemede iletkenlik ölçümleri önem taşımaktadır. İki farklı iletkenlik ölçüm sistemi bulunur. Bunlardan ilki oda sıcaklığında iletkenlik ölçümleri için diğeri ise sıcaklık değişimine bağlı iletkenlik ölçümleri için kullanılmaktadır.

Oda sıcaklığında iletkenlik ölçümleri için kullanılan sistem, sıcaklığa bağlı ölçüm sistemine göre daha basittir. Pratik ve hızlı ölçümler alma olanağı sağlayan bu sistem, bir elektrometre/gerilim kaynağı (KEITHLEY 6517), örneğin yerleştirildiği bir kutu ve bir bilgisayardan oluşur (Şekil 4.3). İletkenlik ölçümü yapılacak örnek, kutu içerisinde üç boyutta hareket edebilen iğne şeklindeki kontaklar tarafından tutulur. İletkenlik verileri, LabVIEW© programı aracılığıyla kontrol edilen bilgisayar tarafından otomatik olarak alınır.

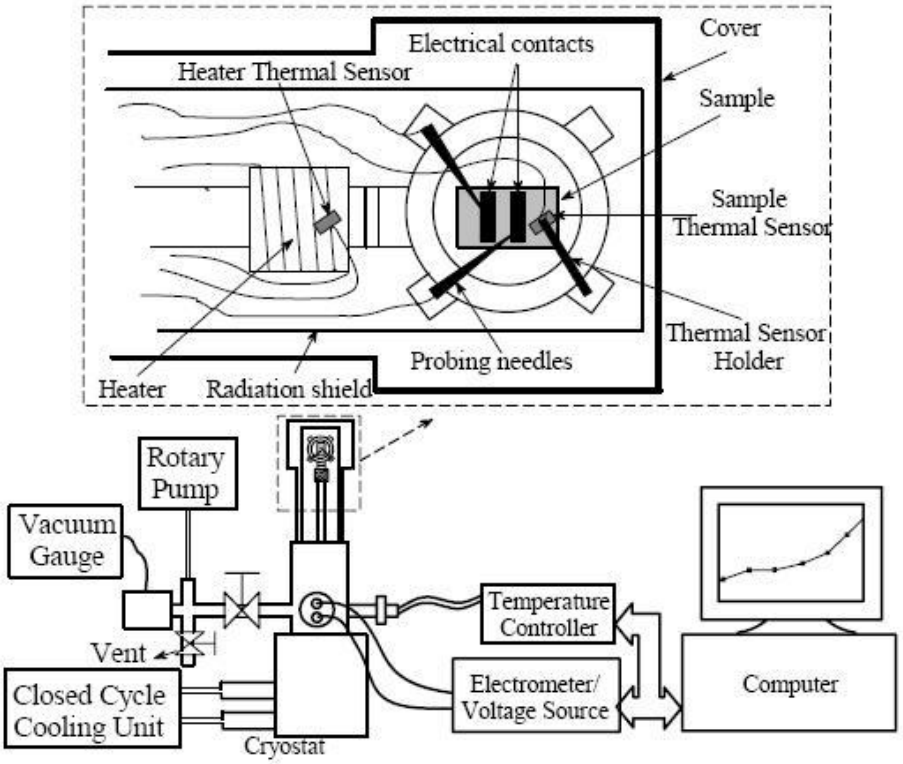


Şekil 4.3 Oda sıcaklığında (dc) iletkenlik ölçüm sistemi.

Sıcaklığa bağlı iletkenlik değişimlerinin ölçüldüğü sistem ise oda sıcaklığındaki iletkenlik ölçümlerinde kullanılan sisteme ilave bazı bileşenler içermektedir. Şekil

4.4'de örneğin konulduğu bölme ve sistemin kendisi görülmektedir. Sistemde soğutma için (ARS S204) kapalı döngü He sabit düşük sıcaklık kabı (cryostat) bulunmaktadır. Bu sayede örneğin sıcaklığı 13 – 450 K arasında istenilen değerde sabit tutulabilmektedir. Elektriksel ölçümler, düşük sıcaklık kabının (cryostat) ucunda bulunan iki iletken iğne kontakla yapılmaktadır. Sıcaklık ölçümleri ise ısıtıcının ve örneğin üzerinde konumlanmış olan sıcaklık sensörleri tarafından yapılır. Sıcaklık kontrolü, LakeShore 331 model sıcaklık kontrolcüsü tarafından, ısıtıcı üzerindeki sıcaklık sensöründen elde edilen verilerin denetlenerek ısıtıcı kazancının ayarlanmasıyla yapılmaktadır.

Örneğin bulunduğu bölme ışınım ve vakum muhafazalarıyla çevrilidir. Işınım muhafazası, siyah cisim ışınımını hapsederek daha düşük sıcaklıklara ulaşma imkanı ağlamaktadır. Düşük sıcaklık kabı üzerinde yer alan vakum muhafazası ise, düşük sıcaklıklarda gerekli olan vakum ortamını sağlamaktadır. Sistemdeki vakum, döner pompa (rotary pump) tarafından oluşturularak vakum seviyesi iyonizasyon vakum ölçer (Leybold model) ile tespit edilmektedir.



Şekil 4.4 Sıcaklığa bağlı (dc) iletkenlik ölçüm sistemi.

4.2.2 Admitans ölçüm sistemi

Üretilen filmlerin statik (dc) elektriksel özelliklerinin yanı sıra zamana göre değişen dinamik (ac) elektriksel karakteristiklerinin de belirlenmesi, yüklerin davranışının anlaşılabilmesinde önemlidir. Bu nedenle admitans ölçüm teknikleri kullanılmaktadır. Elektriksel empedans kavramı; bir devrenin ac akıma karşı gösterdiği direncin bir ölçüsüyken, elektriksel admitans kavramı empedansın tam zıddı olarak; bir devre veya sistemin, elektrik akımının akmasına hangi mertebede izin verdiğinin bir ölçüsüdür. Frekans uzayında yer alan ve karmaşık bir sayı olan admitans ifadesi kararlı durum akımları için gerçek iletkenlik kısmı ve dinamik sanal suseptans bileşenlerinden oluşmaktadır. Aşağıda eşitliklerde empedans ifadesinden admitansa nasıl geçildiği ve admitans sabitleri görülmektedir (Edminister ve Nahvi, 1995).

$$Z = R + jX \tag{4.1}$$

$$Y = Z^{-1} = \frac{1}{R + jX} = \left(\frac{R}{R^2 + X^2} \right) + j\left(\frac{-X}{R^2 + X^2} \right) \tag{4.2}$$

$$Y = G + jB \tag{4.3}$$

$$G = \Re(Y) = \left(\frac{R}{R^2 + X^2} \right) \tag{4.4}$$

$$B = \Im(Y) = \left(\frac{-X}{R^2 + X^2} \right) \tag{4.5}$$

Yukarıdaki eşitliklerde, Y: admitans ifadesi olmak üzere, SI sistemindeki birimi (Ω^{-1}) Siemens'dir. G: iletkenlik (Ω^{-1}) ve B: suseptans (Ω^{-1}) ifadelerini temsil etmektedir.

Dinamik yük karakteristiği incelenirken filmin elektriksel iletkenliği ve elektriksel kapasite özellikleri öne çıktığından, empedans ifadesindeki reaktans elemanının kapasitif bileşeni önem taşımaktadır. Dolayısıyla admitans ifadesinde suseptans elemanının kapasitif suseptansı temsil ettiği unutulmamalıdır.

Empedans ifadesindeki rezistif ve kapasitif bileşenler göz önüne alınarak admitans ifadesi yeniden düzenlenirse,

$$Z = R - jX_C \tag{4.6}$$

$$X_C = -\frac{1}{\omega C} \tag{4.7}$$

X_C : kapasitif reaktans olmak üzere, admitans ifadesi aşağıdaki hali alır:

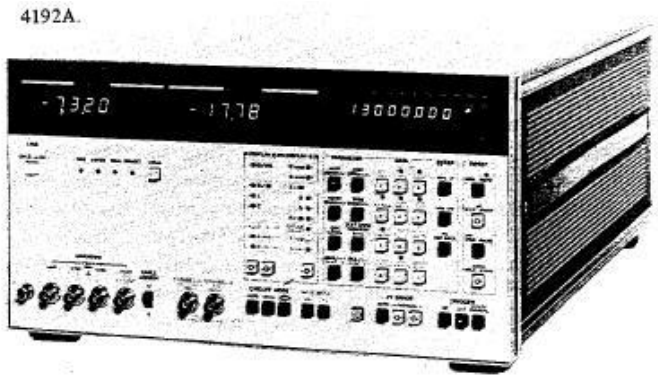
$$Y = Z^{-1} = G + jB_C \tag{4.8}$$

$$B_C = \omega C \tag{4.9}$$

$$Y = G + j\omega C \tag{4.10}$$

Sonuçta, Y : iletkenlik ve kapasitans bileşenlerini içeren admitans ifadesi, G : iletkenlik $\left(\Omega^{-1}\right)$ ve B_C : kapasitif suseptans $\left(\Omega^{-1}\right)$ ifadelerini göstermektedir.

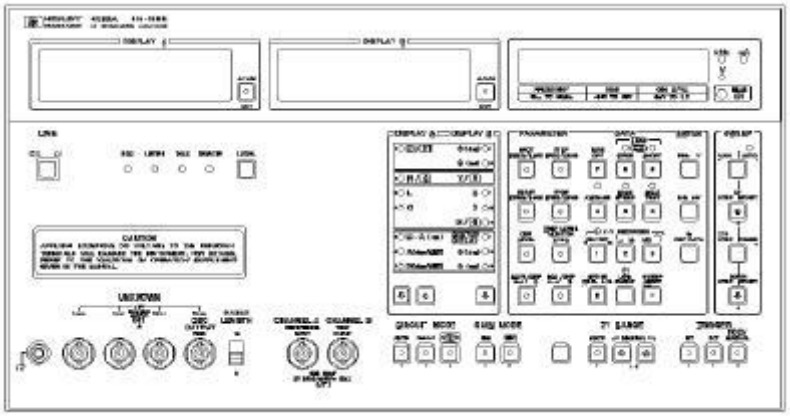
Filmin söz konusu dinamik elektriksel özelliklerinin incelenmesinde HP 4192A empedans analiz cihazı kullanılmaktadır (Şekil 4.5).



Şekil 4.5 HP 4192A empedans analiz cihazı.

Bölüm 1.5 iletkenlik analizi metotlarında değinildiği üzere, seri ve paralel modda okuma yapabilen bu cihaz yardımıyla sistemin elektriksel iletkenlik ve kapasitans özellikleri belirlenebilmektedir.

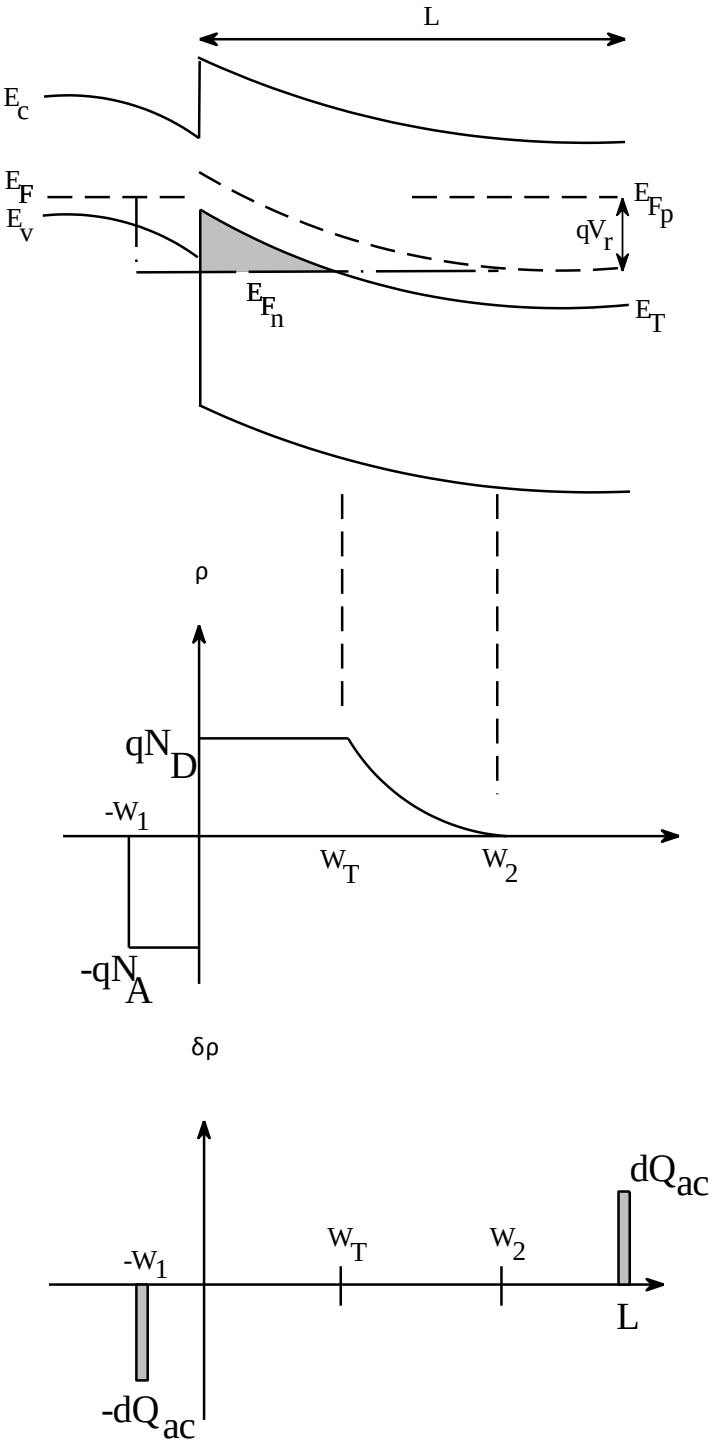
AC sinyal çıkış karakteristiği 5 Hz -13 MHz frekans aralığında 5mV – 1.1V(rms) genliğinde, DC sinyal çıkış karakteristiği ± 35 V olan cihaz, mutlak empedans $(|Z|)$, mutlak admitans $(|Y|)$, faz açısı (θ), rezistans (R), reaktans (X), iletkenlik (G), kapasitans (C), suseptans (B) ve endüktans (L) gibi pek çok empedans parametresinin ölçümüne izin vermektedir.[8]



Şekil 4.6 HP 4192A kontrol paneli.

Şekil 4.6'da görüldüğü üzere, cihazın ön panelinde yer alan fonksiyon tuşları yardımıyla ölçüm parametreleri belirlenebilmektedir. Admitans ölçümü alınacak örnek, uygun bir tutucuya yerleştirilir. Tutucu ve cihaz arasında düşük kapasitif özellikli BNC kablo bağlantıları tamamlandıktan sonra sisteme gönderilecek üstüste bindirilmiş (ac ve dc) karmaşık sinyalin (mixed signal) frekans ve genlik parametreleri ayarlanır. Analiz cihazından okunan admitans ifadesi $(Y_m = G_m + j\omega C_m)$, 7SEG displaylerden iletkenlik (G_m) ve kapasite (C_m) değerlerine ayrılmış olarak görülebilir.[9]

4.2.3 a-Si:H/c-Si Eklemlerde Kapasitans Voltaj karakteristiği



Şekil 4.7 Enerji Band diyagramları

Kapasitans ölçümlerinin; yüksek frekanslı olarak küçük ac voltajlarına cevaben ters öz gerilim (V_r) ve (dQ_{ac}) yüklerince üretilen uzay yüklerine sahip olduğu enerji band diyagramları Şekil 4.7 de gösterilmektedir. Deplasyon bölgesi ($0<x<W_2$) ve nötral bölge ($x>W_2$) arasındaki farklar;

- Fermi seviyesi (E_F) altındaki yerelleşmiş durumlarda elektronların tuzaklanıp tuzaklanmadığı ve
- İletkenlik bandındaki elektronların iletkenlik band uçlarında da olup olmadığına bağlıdır.

Bu yükler, a-Si:H deplasyon bölgesinde uzay yüklerinin varlığının sonuçlarıdır.

Karanlıkta a-Si:H iletkenliğinin (σ) 10^{-9} olduğu nötral bölgede ($x>W_2$), katkılanmamış a-Si:H'ın iletkenlik bandında elektron konsantrasyonu (n) 6 x 10^9 cm^{-3}olur ve

$$\sigma=q\ n\ \mu \tag{4.11}$$

olarak tanımlanır. Burada, q= basit yük (=1.6 x 10^{-19} C) ve μ= mobilite (= 1 $cm^2/V/s$) dir. Deplasyon bölgesindeki katkılanmamış a-Si:H için bu değer uzay yük yoğunluğundan daha küçük olduğundan (≥ 10^{15} cm^{-3}) uzay yüklerinin üretiminde iletkenlik bandındaki elektronların katkısı ihmal edilebilir.

Oda sıcaklığında iletkenlik band uçlarında (n_{BT}) elektron yoğunluğu tahmini olarak;

$$n_{BT} = \int_{Ef}^{Ec} f(E)\, N(E_c) e^{\left[-\frac{(E_C-E)}{E_{BT}}\right]} dE \tag{4.12}$$

Burada f(E)= Fermi-Dirac dağılım fonksiyonu, $N(E_c)$= iletim bandının tabanındaki yoğunluktur. $N(E_c)=10^{21}$ cm^{-3} eV^{-1} ve (E_c-E_F)= 0.73 eV ve E_{BT}= 50 meV olduğundan n_{BT} 2 x 10^{13} cm^{-3} sonucunu verir. Buna rağmen bu değerlerde ihmal edilebilmektedir.

Bu nedenle Fermi seviyesi üzerindeki yerelleşmiş durumlar, deplasyon bölgesinde temel olarak pozitif uzay yükü oluşumuna sebep olur. Bu yüzden bunların (ρ);

$$\rho[u(x)] = q \int_{E_F - u(x)}^{E_F} g(E)dE \qquad (4.13)$$

olarak ifade edilir.

Burada, u(x)= potansiyel dağılımı, g(E)= a-Si:H ve f(E) de basamak fonksiyonu olarak dikkate alınan durum yoğunluğu (DOS) dağılımıdır.

Deplasyon bölgesindeki iletim ve valans bandlarının taşıyıcı yoğunluklarını kuasi Fermi seviyeleri yönlendirir.

Şekil 4.7'de görüldüğü gibi a-Si:H'ın deplasyon bölgesi sınırı yakınındaki Fermi seviyesine doğru yükselir ve deplasyon katmanında elektronlar için kuasi Fermi seviyesi (E_{Fn}) neredeyse sabittir. E_{Fn}'nin E_T'nin altında olduğu $0<x\leq W_T$ bölgesinde, uzay yük yoğunluğu sabit kalır ve aşağıdaki şekilde ifade edilir;

$$\rho(u_T) = q \int_{E_T}^{E_F} g(E)dE \qquad (4.14)$$

ve $qN_D \equiv \rho(u_T)$ ile $u_T \equiv E_F - E_T$.

Termal dengede ($V_{app}= 0$), şayet a-Si:H için potansiyelde (V_{bi}) oluşum (E_F-E_T) değerinden daha büyük olursa, arayüzey yakınlarındaki ρ(x), Fermi seviyesi arayüzey yakınlarındaki E_T 'nin altındaki qN_D 'yi aşar. Arayüzey yakınındaki bu durum ters öz gerilimin uygulandığı uygulamalarada da aynı kalır.[10] Buna rağmen arayüzey yakınlarındaki fazlalık yüklerin katkısı arayüzey bölgesi yakınlarındaki yüklerin etkisi olarak yer alırlar.[16]

Elektronlar için u(x) potansiyeli Poisson's denkleminden hesaplanabilir:

$$\frac{d^2}{dx^2}\left[\frac{u(x)}{q}\right] = \frac{\rho}{\varepsilon_s} \qquad (4.15)$$

$W_T<x<W_2$ bölgesinde uzay yükü (Q_I) aşağıdaki şekilde verilmiştir.

$$Q_I = \left\{2\varepsilon_s \int_0^{u_T} \rho(u)du\right\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.16)$$

$x=W_T$'de elektrik alan E_1 aşağıdaki şekilde verilmiştir.

$$E_1 = \frac{Q_1}{\varepsilon_s} \quad (4.17)$$

$0<x<W_T$ bölgesinde, N_D bölgesinin sabit olduğu, $\rho=qN_D$ olduğunda $u(0)=u_T$ sınır koşulları ile Poisson's denklemi çözülmüştür. [14]

$$qN_AW_1=qN_DW_T+Q_I \quad (4.18)$$

ve ters öz gerilim, V_r, aşağıdaki ilişkiden hesaplanmıştır;

$$V_{bi} - V_r = \frac{u_0}{q} + \frac{qN_AW_1^2}{2\epsilon_s} \quad (4.19)$$

Son olarak yüksek frekanslı kapasitans aşağıdaki şekilde ifade edilebilir.

$$C = \frac{\epsilon_s A}{L+W_1} \quad (4.20)$$

Çünkü yük taşıyıcıları katkılanmamış a-Si:H filmlerdeki uzun dielektrik gevşeme zamanından (τ) dolayı W_1 ve L ye yüksek frekanslı ac voltajına cevap verir.[5] Özellikle, $\tau = \left(\frac{1}{2\pi\rho\epsilon}\right)^{-1}$. Çünkü $\rho= 10^9$ ohm cm, $\varepsilon=(11)\varepsilon_0$, τ^{-1} 150 Hz civarlarındadır. 150 Hz aşkın ac modülasyon frekansı için, a-Si:H filmlerden katkı gelmemektedir.

Bu koşullar altında, orta aralık durumu yoğunluğu (N_I) ile V_{bi} grafik olarak yüksek frekanslı kapasitans voltaj (C-V) ölçümlerinden hesaplanabilen deplasyon bölgelerinin her iki tarafına da deplasyon yaklaşımı adapte edilmektedir. Aşağıdaki ilişki elde edilmektedir; [15]

$$W_1^2 = \left[\epsilon_s \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{C_2}\right)\right]^2 \tag{4.21}$$

$$W_1^2 = \frac{2\epsilon_s N_I (V_{bi} - V)}{q N_A (N_A + N_I)} \tag{4.22}$$

Burada C ölçülen kapasitans, C_2 geometrik olarak a-Si:H film kapasitansına eşit olan çok yüksek ileri öz gerilimde satüre edilmiştir. W_1^2-V ilişkisi sağlandıktan sonra N_I ve V_{bi} grafiğindeki eğim ve çizgilerin yatay konumdan hesaplanabilmektedir.[21]

BÖLÜM 5

SONUÇLAR VE ÖNERİLER

5.1 PECVD Yöntemiyle Büyütülmüş katkılı/katkısız a-Si:H filmlerin UV-Visible Ölçüm Sonuçları

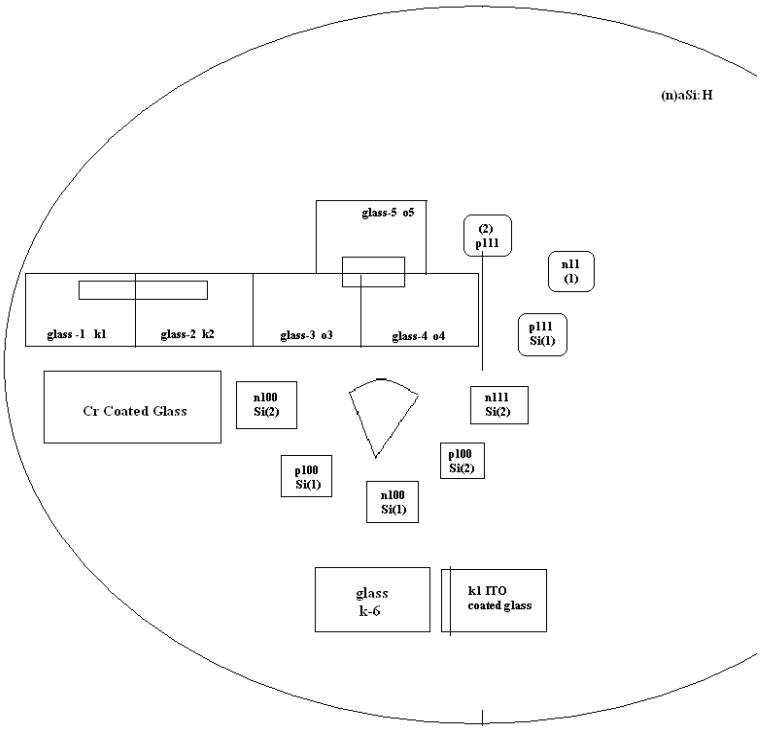
Plazma destekli kimyasal buharlaştırma yöntemiyle (PECVD) cam altlıklar üzerine büyütülmüş katkılı/katkısız amorf silisyum filmlerden alınan UV-Visible ölçüm sonuçları bu bölümde tartışılacaktır.

Bu çalışmada kullanılan PECVD sistemine ait reaktörde yapılan önceki çalışmalarda, kenardan merkeze doğru farklı konumlara yerleştirilmiş altlıklar üzerinde film kalınlık düzensizliği tespit edilmiştir [12]. Bu bilginin ışığında PECVD (MODELİ) sistemindeki plazma odacığında opak ve transparan türdeki altlıklar çeşitli konumlara yerleştirilmiş ve film büyütme işlemleri gerçekleştirilmiştir.

Hidrojenlemiş amorf silisyum filmler katkısız, n ve p tipli katkılı olacak şekilde üretilmiştir. n-tipi katkılanmış hidrojenlenmiş amorf silisyum üretim koşulları; 200°C altlık sıcaklığı, 0.5 Torr basınç ve 35mW/cm^2 (15W) RF gücü şeklindedir. Filmler 30 dakika boyunca SiH_4, PH_3 akış hızları sırasıyla 10 ve 100 sccm olacak şekilde gönderilerek büyütülmüştür.

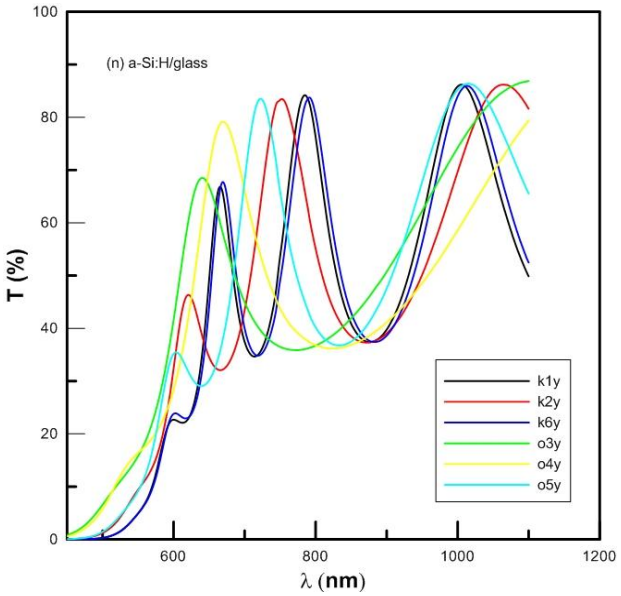
Filmlerin plazma odacığındaki konumları kenardan merkeze doğru olacak şekilde yerleştirilmiş, k1 en kenarı o5 de merkeze en yakın konumu belirtir. (Aslında o3 daha merkez gibi duruyor notlarınıza bakınca). Altlıkların plazma odacığındaki konumları Şekil 5.1'de gösterilmiştir. Cam altlıklar üzerine büyütülmüş a-Si:H filmlerden alınan

UV-Visible ölçüm sonuçları Şekil 5.2'de sunulmuştur. ITO kaplı cam üzerine büyütülmüş a-Si:H filmler bir sonraki bölümde incelenecektir. Ölçümler esnasında Perkin 44 Elmer Lambda 2S Spektrometre cihazı kullanılarak 200-1100nm dalgaboyu bölgesi taranmıştır. Sonuçlar; OptiChar programı kullanılarak filmin yapısal özellikleri olan kırma indisi (n), söndürme katsayısı (k) ve soğurma katsayısı (α) geçirgenlik verisinden belirlenmiştir. Türetilmiş söndürme katsayısından, (n)a-Si:H için yasak enerji aralığı (E_G) Tauc yöntemi kullanılarak bulunmuştur. Ayrıca, filmlerin kalınlığı hem UV-Visible ölçümlerinden hem de mekanik kanlınlık ölçüm sistemi (Ambios XP2) ile belirlenmiştir.



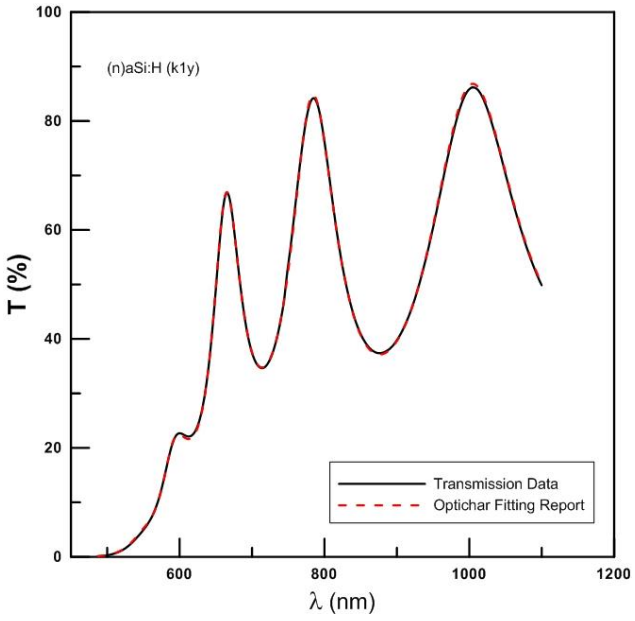
Şekil 5.1- (n)a-Si:H üretilmek üzere taşıyıcıların PECVD sistemindeki yerleşiminin şematik görünümü.

Kenardan merkeze doğru ilerledikçe PECVD ile üretilmiş filmlerin geçirgenlik desenleri Şekil 5.2'de verilmiştir. Beklendiği üzere merkezden radyal doğrultuda aynı mesafeye konulmuş k1 ve k6 numunelerinin benzer geçirgenlik değişimleri gözlenmektedir (Şekil 5.2).



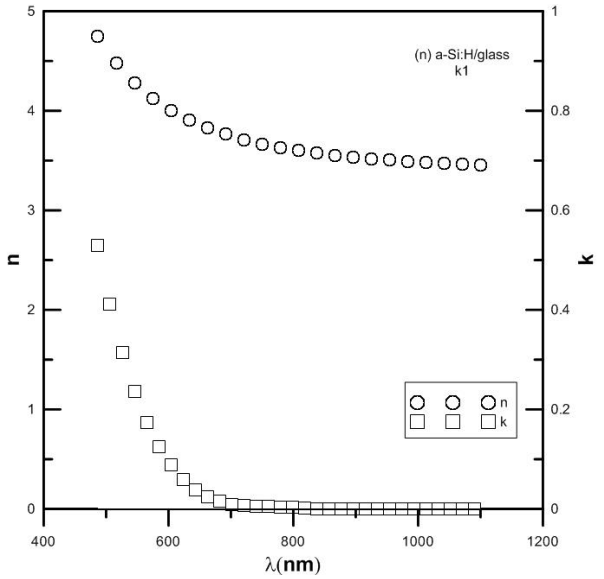
Şekil 5.2. PECVD yöntemiyle cam altlıklar üzerine büyütülen (n)a-Si:H filmlerin reaktör içindeki konumlarına göre geçirgenlik ölçümleri.

Geçirgenlik ölçümlerinin optichar programı ile türetilmiş geçirgenlik verileri Şekil 5.3'de k1 örneği için gösterilmiştir. Programdan elde edilen deneysel ölçümler geçirgenlik değerleriyle uyum içerisindedir.



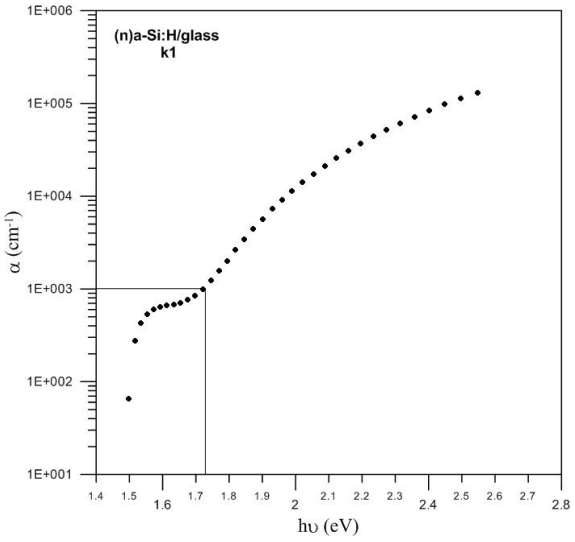
Şekil 5.3 UV-Visible ile alınan geçirgenlik ölçümleri ile optichar programı ile türetilmiş geçirgenlik değerlerinin karşılaştırılması.

Optichar programı ile elde edilen kırılma indisi ve söndürme katsayısının dalgaboyuna göre değişim grafiği Şekil 5.4'de gösterilmektedir.



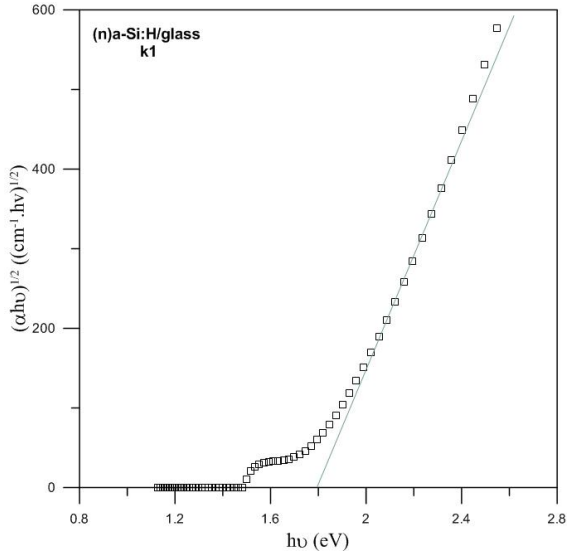
Şekil 5.4. Dalgaboyuna göre Optichar programı ile elde edilen kırma indisi ve söndürme katsayısı değerleri.

Yüksek dalgaboyu bölgesindeki değeri 5.5 iken, k beklendiği üzere çok küçüktür. Soğurma katsayısıyla (α) söndürme katsayısı (k) arasındaki ilişki $\alpha=4\pi k/\lambda$ şeklindedir. Dolayısıyla türetilen k değerleri eşitlikte yerleştirildiğinde α'nın dalga boyuna (enerji) göre değişimi elde edilir ve bu değişim (n)a-Si: için Şekil 5.5'de sergilenmiştir. Soğurma katsayısı hesaplandıktan sonra filmin yasak band aralığı da hesaplanabilir. Yasak enerji band aralığının belirlenmesi için farklı yaklaşımlar bulunmaktadır. Bunlardan bir tanesi, α vs hν çizilerek, α'nın 10^3-10^4 (cm^{-1}) bölgesine gelen enerji değeridir. Bir diğeri de Tauc yöntemi olarak bilinen düzensiz yapılarda k-seçme kuralının kaybını hesaba katarak dolaylı optik geçiş fikrini kullanan yöntemdir. Şekil 5.5'e göre filmin sembolik yasak enerji aralığı 1.73eV olarak ilk yaklaşıma göre tespit edilmiştir. Bu değer (n)a-Si:H için literatürde bilinen optik band aralığı değeridir.



Şekil 5.5. Foton enerjisine karşılık soğurma katsayısı grafiği.

$\alpha \cong 10^{-3} cm^{-1}$ değeri için optik band aralığı 1.73 eV civarındadır. Optik band aralığının belirlenmesi için kullanılan diğer yöntem Tauc yöntemidir ve iki temel esasa dayanır; (1) optik geçişlerin, valans bandının yayılmış durumları ile durum yoğunluğunun foton enerjisiyle karekök bağımlılığına sahip olduğu iletim bandları arasında gerçekleştiği, (2) Momentum matris elemanının sabi olduğudur. [22]. Bu yönteme göre $(\alpha h\upsilon)^{1/2}$-hυ değişim grafiğinin doğrusal bölgesinin enerji eksenini kestiği nokta yasak enerji aralığıdır. Buna göre Şekil 5.6'da görüldüğü gibi (n)a-Si:H filmin yasak enerji aralığı 1.8eV olarak bulunmuştur.



Şekil 5.6 Foton enerjisine göre $(\alpha h\upsilon)^{1/2}$ değerlerinin değişimi ve E_G'nin belirlenmesi

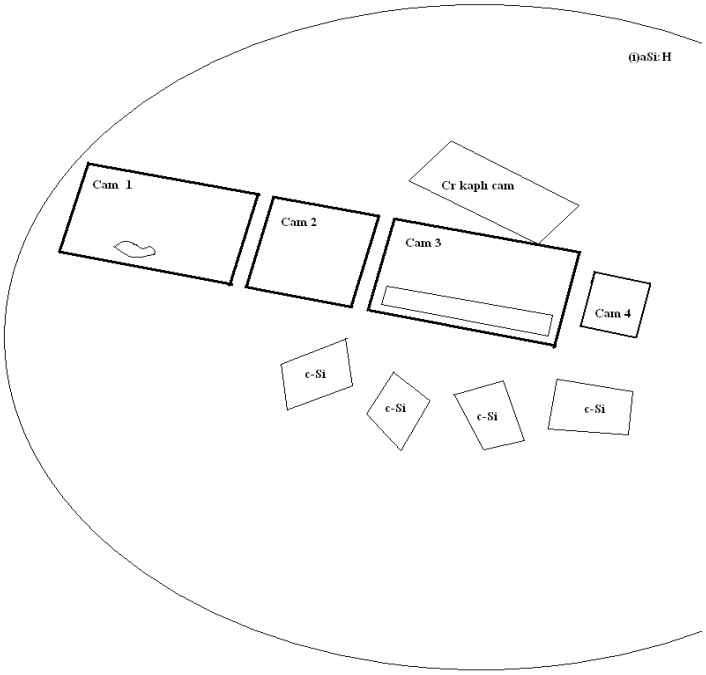
Burada gösterilen sistematiğe göre diğer numunelerin analizleri yapılmış ve Çizelge 5.1'de sergilenmiştir.

	n	d (nm)	E_G ($\alpha \sim 10^3$-10^4) (eV)	E_G (Tauc Plot) (eV)	E_0 (ev)
K1	3.36	433	1.73	1.8	72
K2	3.35	308	1.95	1.8	105
O3	3.32	161	1.96	1.8	142
O5	3.33	291	1.8	1.8	117

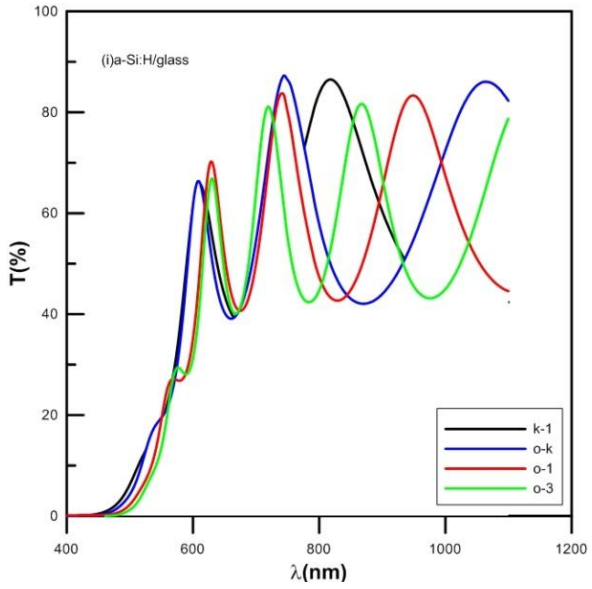
Çizelge 5.1. Plazma odacığında farklı konumlardaki cam altlıklar üzerine büyütülen (n)a-Si:H filmlerin optik özellikleri

Çizelge 5.1 incelendiğinde, farklı konumlarda büyütülen n-tipi katkılanmış amorf silisyum filmlerin kırma indislerinin birbirine çok yakın değerlerde olduğu, ancak film kalınlıklarının plazma odacığının merkezinden kenarlarına doğru gidildikçe arttığı görülmektedir. Bu kalınlık farkı plazma odacığının geometrisi ve gazların akış yolu göz önünde bulundurulduğunda beklenen bir sonuçtur. Farklı konumlara yerleştirilen altlıklar üzerine büyütülen (n)a-Si:H filmlerin Tauc yöntemiyle elde edilen optik band aralığı her numune için aynı değerde olduğu (1.8 eV) tespit edilmiştir.

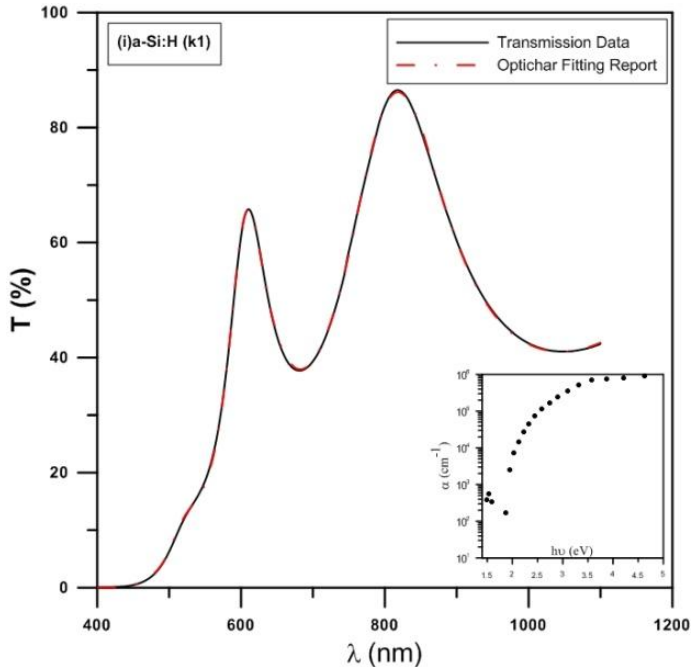
Aynı sistemle katkılanmamış amorf silisyum (i-a-Si:H) filmleri üretmek için cam taşıyıcıların plazma odacığındaki konumlandırılmaları Şekil 5.7'de gösterilmiştir. PECVD sisteminde (i)a-Si:H filmlerin büyüme parametreleri, 200°C taşıyıcı sıcaklığı, 0.5 Torr basınç ve 35mW/cm^2 (15W) RF gücü olarak ayarlanmıştır. Silan gazının akış hızı 26.9 sccm iken, H_2:SiH_4 hidrojen ile seyreltme oranı 2:6 olacak şekilde 10 dakika boyunca film büyütme işlemi gerçekleştirilmiştir.



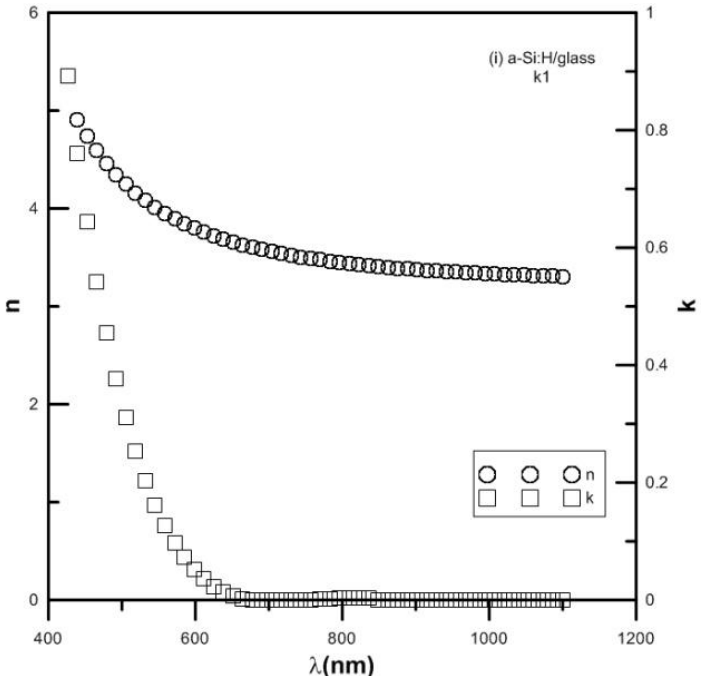
Şekil 5.7. (i)a-Si:H üretilmek üzere taşıyıcıların PECVD sistemindeki yerleşiminin şematik görünümü.



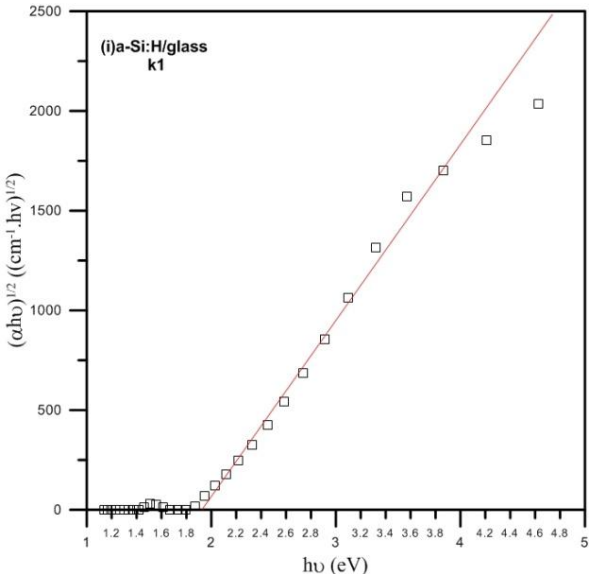
Şekil 5.8 (i) a-Si:H/cam T – λ grafiği



Şekil 5.9 (i) a-Si:H/cam (k1) T – λ grafiği



Şekil 5.10 (i) a-Si:H/cam (k1) n/k – λ grafiği



Şekil 5.11 (i) a-Si:H/cam (k1) $(\alpha h\upsilon)^{1/2}$ – hυ grafiği

n-tipi katkılanmış amorf silisyum filmler için yapılan analizlerin benzerleri katkılanmamış amorf silisyum örnekler için de yapılarak üç farklı konuma yerleştirilen tiaşıyıcılar üzerine büyütülen filmlerin optik özellikleri Çizelge 5.2'de sunulmuştur.

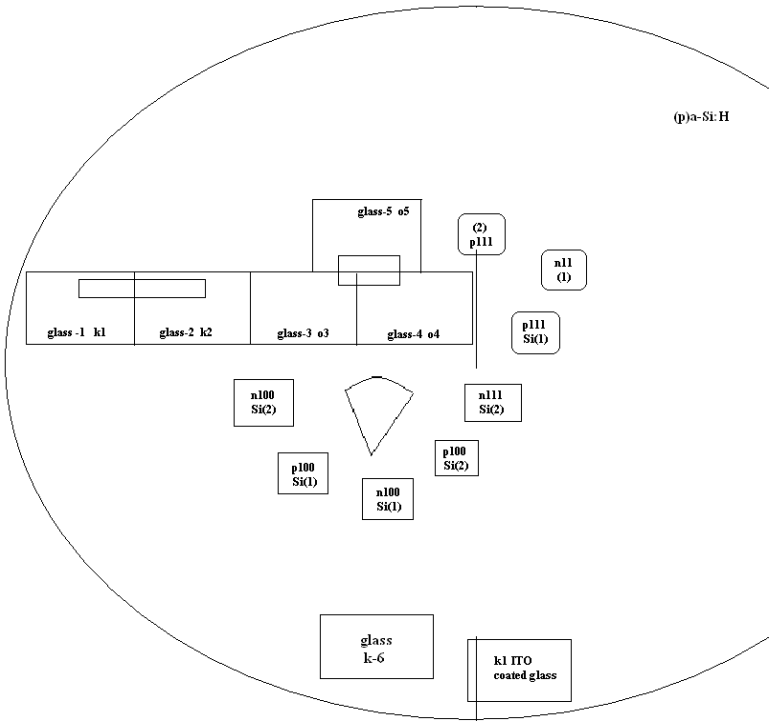
	n	d (nm)	E_G (α~10^3-10^4) (eV)	E_G (Tauc Plot) (eV)	E_0 (ev)
K1	3.21	239	1.90	1.90	89
O-k	3.11	333	1.90	1.85	63
O-1	3.09	542	1.80	1.80	116

Çizelge 5.2. Plazma odacığında farklı konumlardaki cam altlıklar üzerine büyütülen (i)a-Si:H filmlerin optik özellikleri

Çizelge 5.2'de görüldüğü üzere, katkılanmamış amorf silisyum filmlerin kalınlıkları, plazma odacığının merkezine doğru gittikçe, (n)a-Si:H örneklerin kalınlık değişiminin

aksine, artmaktadır. Bu numuneler için Tauc yöntemiyle hesaplanan yasak enerji aralığı ise 1.85±0.05 eV olarak bulunmuştur.

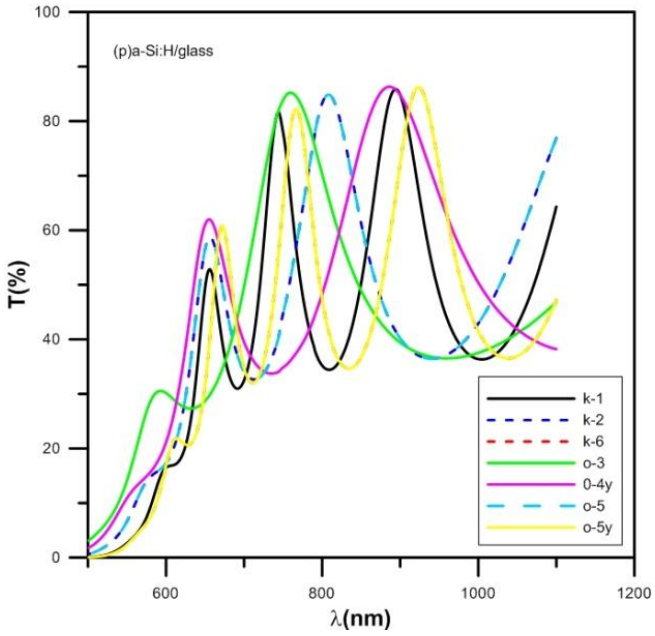
Son olarak silan gazıyla beraber diboran gazının gönderilmesiyle, p-tipi a-Si:H filmler; PECVD sisteminde, yine taşıyıcılar farklı konumlara yerleştirilerek, 200°C taşıyıcı sıcaklığı, 0.5 Torr basınç ve 35mW/cm^2 (15W) RF gücü ile SiH_4 akış hızı 10sccm ve B_2H_6 akış hızı ise 100sccm olacak şekilde ayarlanarak 30 dakika boyunca büyütülmüştür. Taşıyıcıların plazma odacığındaki yerleşimi Şekil 5.8'de gösterilmektedir.



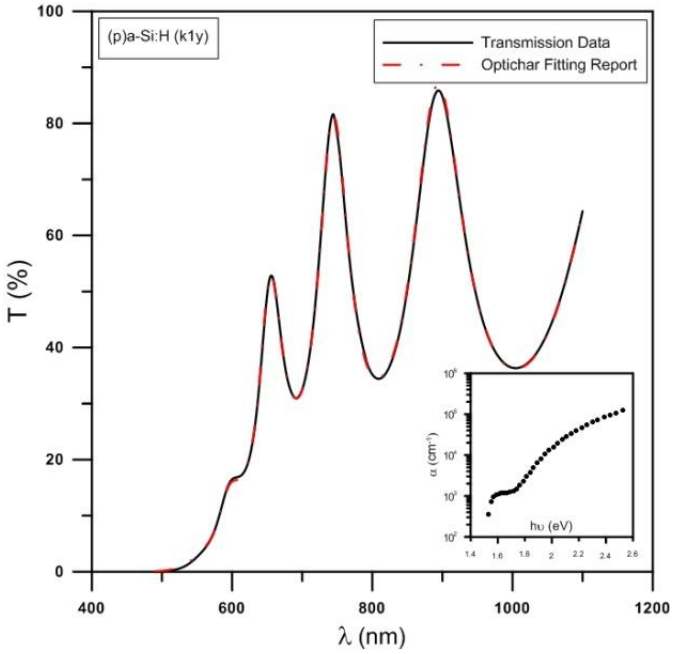
Şekil 5.12 (p)a-Si:H üretilmek üzere taşıyıcıların PECVD sistemindeki yerleşiminin şematik görünümü.

Geçirgenlik ölçümleri ve optichar programı ile elde edilen optik özellikler farklı konumlarda büyüyen (p)a-Si:H filmler için elde edilerek çizelge 5.3'de sergilenmiştir. Çizelge incelendiğinde, kırma indisinin yine taşıyıcı konumuyla çok önemli bir değişim göstermeyerek, (p)a-Si:H filmler için 3.40 civarı bir değere sahip olduğu görülmektedir. Film kalınlığı ise yine odacığın merkezinden uzaklaştıkça düzenli olarak artış göstermektedir (o5 istisna sanırım). Burada önemli olan başka bir gözlem de plazma odacığına hemen hemen aynı yarıçap üzerinde bulunan k1 ve k6 örneklerinin

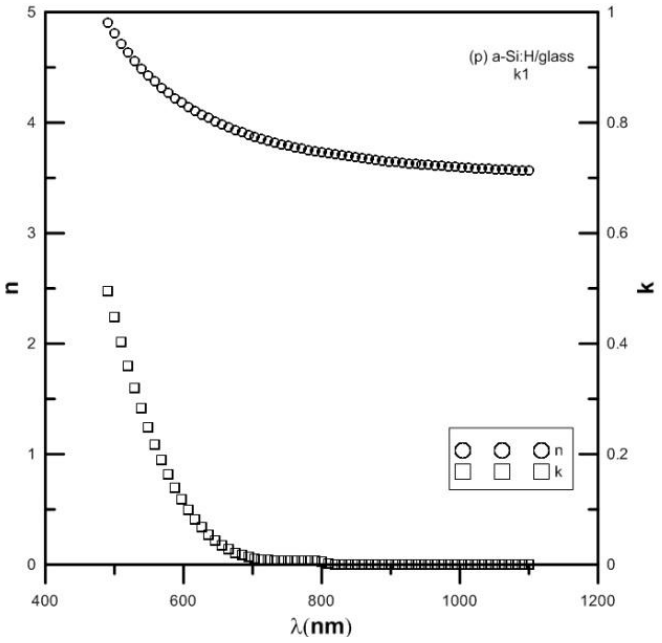
kalınlıklarının da çok yakın değerlere sahip olmasıdır. Tauc yöntemiyle elde edilen yasak enerji aralığı değerleri de 1.75-1.80 eV olarak bulunmuştur.



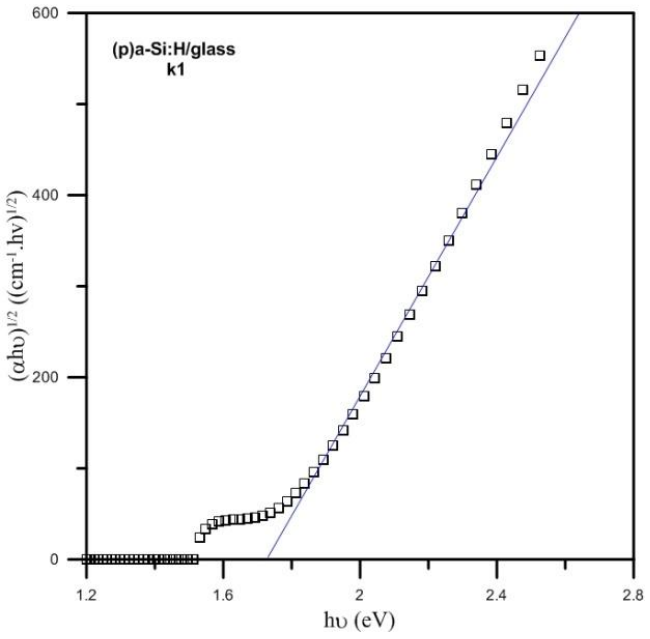
Şekil 5.13 (p)a-Si:H/cam T – λ grafiği



Şekil 5.14 (p)a-Si:H/cam (k1y) T – λ grafiği



Şekil 5.15 (p)a-Si:H/cam (k1) n/k – λ grafiği



Şekil 5.16 (p)a-Si:H/cam (k1) $(\alpha h\upsilon)^{1/2}$ – hυ grafiği

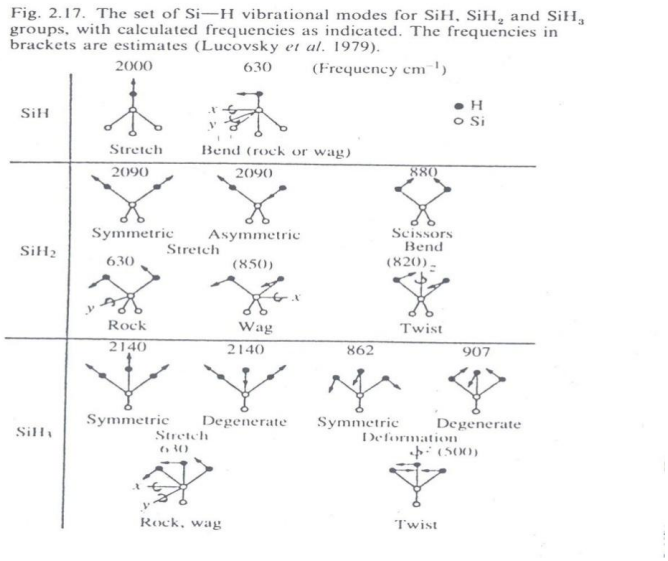
	n	d (nm)	E_G (α~10^3-10^4) (eV)	E_G (Tauc Plot) (eV)	E_0 (ev)
K1	3.46	488	1.60-1.95	1.75	109
K2	3.42	329	1.60-1.92	1.75	117
K6	3.46	509	1.66-1.94	1.75	106
O3	3.40	203	..-1.90	1.80	119
O4	3.45	242	1.70-1.90	1.80	76.9
O5	3.40	213	1.7-1.92	1.80	63.6

Çizelge 5.3. Plazma odacığında farklı konumlardaki cam altlıklar üzerine büyütülen (p)a-Si:H filmlerin optik özellikleri

5.2 PECVD'de Büyütülmüş Katkılı/Katkısız a-Si:H İnce Filmlerin FTIR Analizi

a-Si:H daki hidrojen bağlanma durumunun ve konsantrasyonunun a-Si:H filmlerin yapısal ve elektriksel özellikleri üzerinde ortalama yapısal düzensizliklerin varyasyonu, her iki bağ uzunluğu ve band açısı derecesi sapmaları, optik aralık ve bırakıntılanmış film üzerindeki hidrojen miktarı ile sarkık bağların yoğunluğu gibi temel etkileri vardır. Prensipte hidrojen a-Si:H'daki faklı bağlanma konfigürasyonlarının sayısı olarak gösterilebilir [1-8]. Tarihsel olarak, titreşimsel spektroskopi, kızılötesi (IR) ya da Raman (R) dan biri ya da her ikisi, a-Si:H filmlerdeki hidrojenin araştırılmasında kullanılan en yaygın deneysel methodlardır. Deneysel olarak, IR absorbsiyonu a-Si:H ince filmlerde birleştirilmiş bağlanma konfigürasyonları ve miktarlarını karakterize eden en etkili methoddur. IR H-atom (kısmen negatif yüklenmiş) ve komşu silikon atomları (kısmen pozitif yüklenmiş) arasındaki elektronegativite farklılıklarından üretilen yerel titreşim dipolünü ölçer. Harmonik osilatör resminde, kızılötesi fotonu yükselmiş tireşimsel değere sahip daha büyük dinamik momentli bir sonraki daha yüksek titreşimsel duruma uyarılan osilatör tarafından absorbe edildiğinde bu Si-H

dinamik dipol momenti değişir. Bu nedenle başlangıç ve bitiş durumları ve bağlamış hidrojen atomları sayısı arasındaki dinamik dipol moment değişimi özgül spektral çizginin sınırladığı kızılötesi absorbsiyon şiddetine bağlıdır.



Şekil 5.17 SiH, SiH2 ve SiH3 için Si - H titreşimsel modları çizimleri

Şekil 5.9'da bağlanma konfigürasyonlarının titreşimsel modlarının karaktesitiği gösterilmektedir. Dahası, trihidrür ($Si-H_3$), polisilan($(Si-H2)_N$), arayer moleküler hidrojen (H_2) gibi diğer konfigürasyonlar büyüme koşulları ve şekil 5.10 da gösterilen şematik gösterime bağlı olarak genelde a-Si:H da geçerlidir.

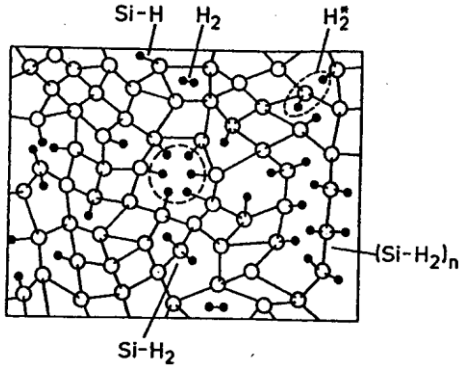


FIGURE 1 Possible structural configurations of isolated and clustered hydrogen in a-Si:H: monohydride (Si-H), dihydride ($Si-H_2$), polysilane ($(Si-H_2)_n$), interstitial molecules (H_2 and H_2*), and hydrogenated voids (dashed circle).

Şekil 5.18 a-Si:H olası yapısal konfigürasyonları

Oda sıcaklığı ya da üzerinde gerçekleşen ölçümler için a-Si:H filmde bu bağlanma konfigürasyonlarının titreşimsel modlarına bağlı olan karakteristik titreşimsel frekansları çizelge 5.4'te verilmiştir.

Titreşimsel Mod	Dalga numarası (cm^{-1})	IR	R
Resonant ('piggy back')	210	X!	X
Si-H bend	640	X!	X
Si-H_2 rock ve wag	640	X	X
Si-H_2 twist	640		X
$(Si-H_2)_N$ rock	640	X	X
$(Si-H_2)_N$ wag	845	X	X
Si-H_3 bend	860	X	X
Si-H_2 scissors	880	X	X
$(Si-H_2)_N$ scissors	890	X	X
Si-H_3 wag	910	X	X
Si-H stretch (bulk) Si-H stretch (surface)	2000 2090	X! X	X! X
Si-H_2stretch (sym. & asym.)	2095	X	X
$(Si-H_2)_N$ stretch	2090-2140	X	X
Si-H_3 stretch	2120-2150	X	X
H_2	4150		X
H_2 (collision-induced)	4000-5400	X	

Çizelge 5.4. IR ve Raman a-Si:H filmlerde farklı hidrojen bağlanma konfigürasyonlarında aktif titreşimsel frekansları.

Çizelge 5.4'teki X! a-Si:H filmlerin malzeme kalitesini gösterir. Çizelgede görüldüğü gibi, 800-900 cm^{-1} deki modlar Si-H_2 ya da Si-H_3 bağlarının konfigürasyonundan kaynaklanmaktadır. Çeşitli Si-H konfigürasyonlarının tüm modları için hesaplanan frekansların şekil 5.9 de gösterilmiştir. Salınım modlarından önemli derecede yüksek frekansa sahip bükülme modları sallanma ve burkulma olarak etiketlenmiştir. Si-H_2 ve

$Si-H_3$ yapısı kapsamından oluşan modlar 800-900 cm^{-1} ve 2100 cm^{-1} iken Si-H konfigürasyonlarının sonuçları en iyi 630 cm^{-1} ve 2000 cm^{-1} modunda belirlenmiştir.

Yeniden özetlenmek gerekirse; plazma ile geliştirilen kimyasal buhar biriktirme yöntemi (PECVD) ile büyütülen katkılı ve katkısız a-Si:H filmlerin FTIR özellikleri bu çalışmanın tartışmasıdır.

a-Si:H filmler 100 ve 111 yönlendirmeli n ve p tipli kristal silikon waferlarda büyütülmüştür. Öncelikle a-Si:H deposition RCA temizleme prosedürü uygulanmıştır. Hemen arkasından, örnekler PECVD sistem çemberine yerleştirilmiştir. İntrinsic (i) a-Si:H film birikintileri için, 20.9 sccm SiH_4 (silan) gazı 0.5 basınçlı çemberin bulunduğu reaktöre verilmiştir. RF (Radyo frekansı) gücü 35 mW ve substratlar sabit sıcaklıkta ısıtıldı (200 ^oC). Birikintileme zamanı 10 dakikadır. n ve p tipi a-Si:H 10 sccm fosfin (PH_3) ve 10 sccm diboran (B_2H_6) gazı 100 sccm SiH_4 gazına ek olarak sisteme verildi. RF gücü, basınç ve substrat sıcaklığı (i) a-Si:H ile aynı ayarlandı. Birikintileme zamanı 30 dakikadır.

IR absorbsiyonu Perkin Elmer 1450 tipi çift ışınlı diferansiyel spektrometresi kullanılarak uygulandı. Işınlardan biri substrat ve filmin içinden geçerken, diğer ışın referans ışını olarak sadece substrat içinden geçer. Bileşke absorbsiyon sinyali ise sinyaller arasındaki farklılıktır.

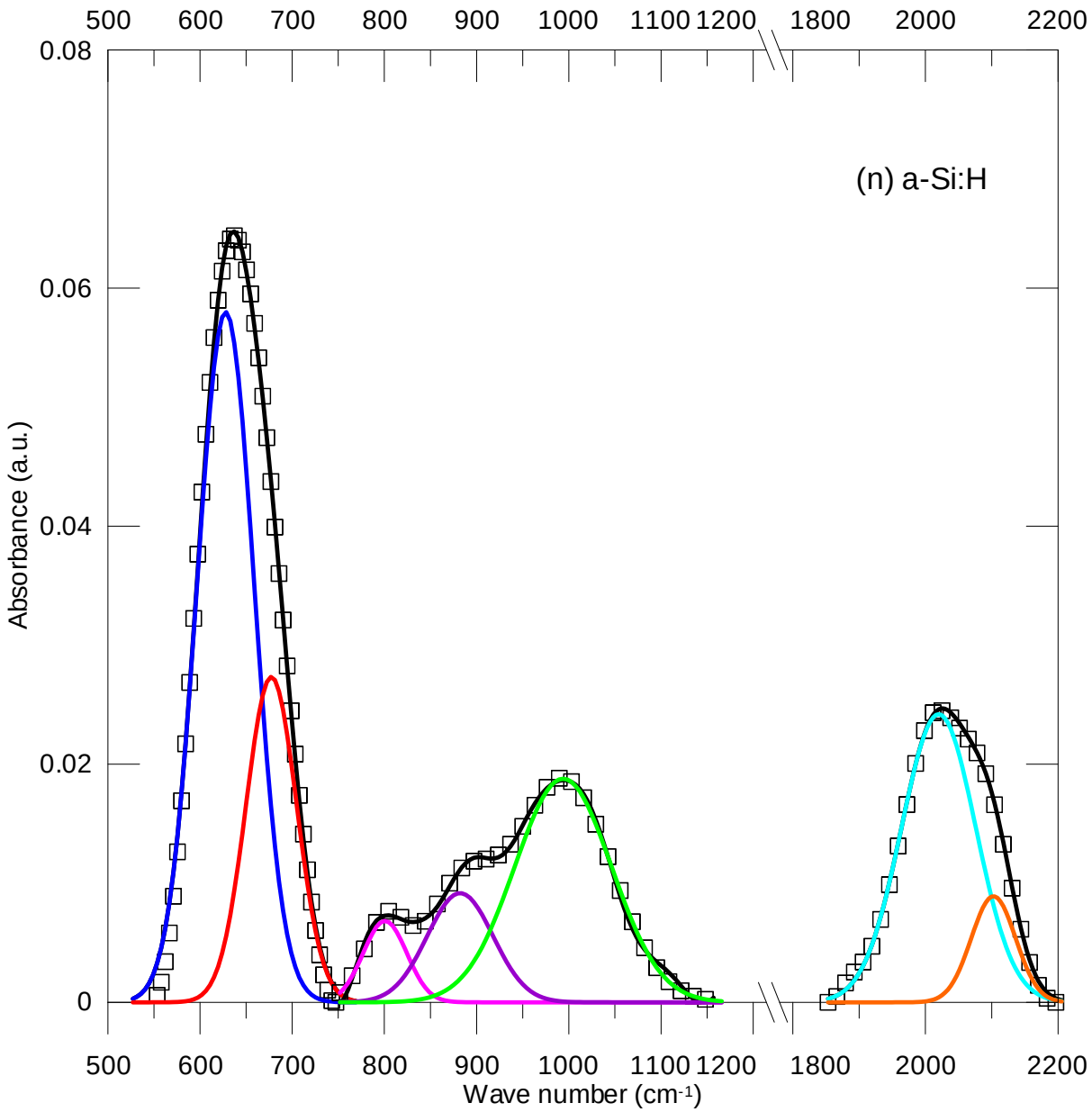
(i)a-Si:H ve n ve p tipi katkılı a-Si:H filmler için FTIR spektrumları şekil 5.11'de tarif edilmiştir. Beklendiği gibi, salınım yapma ya da sallanma modu 640 cm^{-1} civarında gözlemlendi. Ayrıca, sırasıyla bağ bükülme modu 860-890 cm^{-1} civarında ve bağ gerilme modu 2000-2100 cm^{-1} civarında gözlemlendi. Dahası (100) ve (111) yönlendirmeli n/p-Csi waferlı katkılı/katkısız a-Si:H filmlerin FTIR özelliklerinde kayda değer bir değişim gözlemlenmedi.

Bağ tipi ve uygun frekans sorunlarını çözmek için, PEAKFIT programı kullanıldı ve sonuçlar katkısız ve n/p katkılı a-Si:H filmler için şekil 5.14 - şekil 5.16 a-b-c gösterilip toparlanmıştır. Dahası aynı a-Si:H filmler için ilgili modlar ve uygun frekanslar çizelge 5.5'de gösterilmişir.

Films	[Si-Si] (430)	[Si-H] [$Si-H_2$] (630-640)	[Si-H] [$Si-H_2$] (rock &wag &twist)	[Si-O] (775-830) (bend)	[$Si-H_2$] (880) (scissors)	[Si-O] (960-1000)	[H_2O]	[Si-H] (2000) (stretch)	[Si-H] [$Si-H_2$] [$Si-H_2]_N$ [$Si-H_3$]
i-a-Si:H	445.19	636.19	-	803.09	878.91	1008.5	-	2014.9	2080
n-a-Si:H	-	627.81	677.39	800.65	882.13	993.86	-	2020	2102.6
p-a-Si:H	-	624.53	673.98	814.99	878.99	993.92	1597.7	2001.4	2083.3

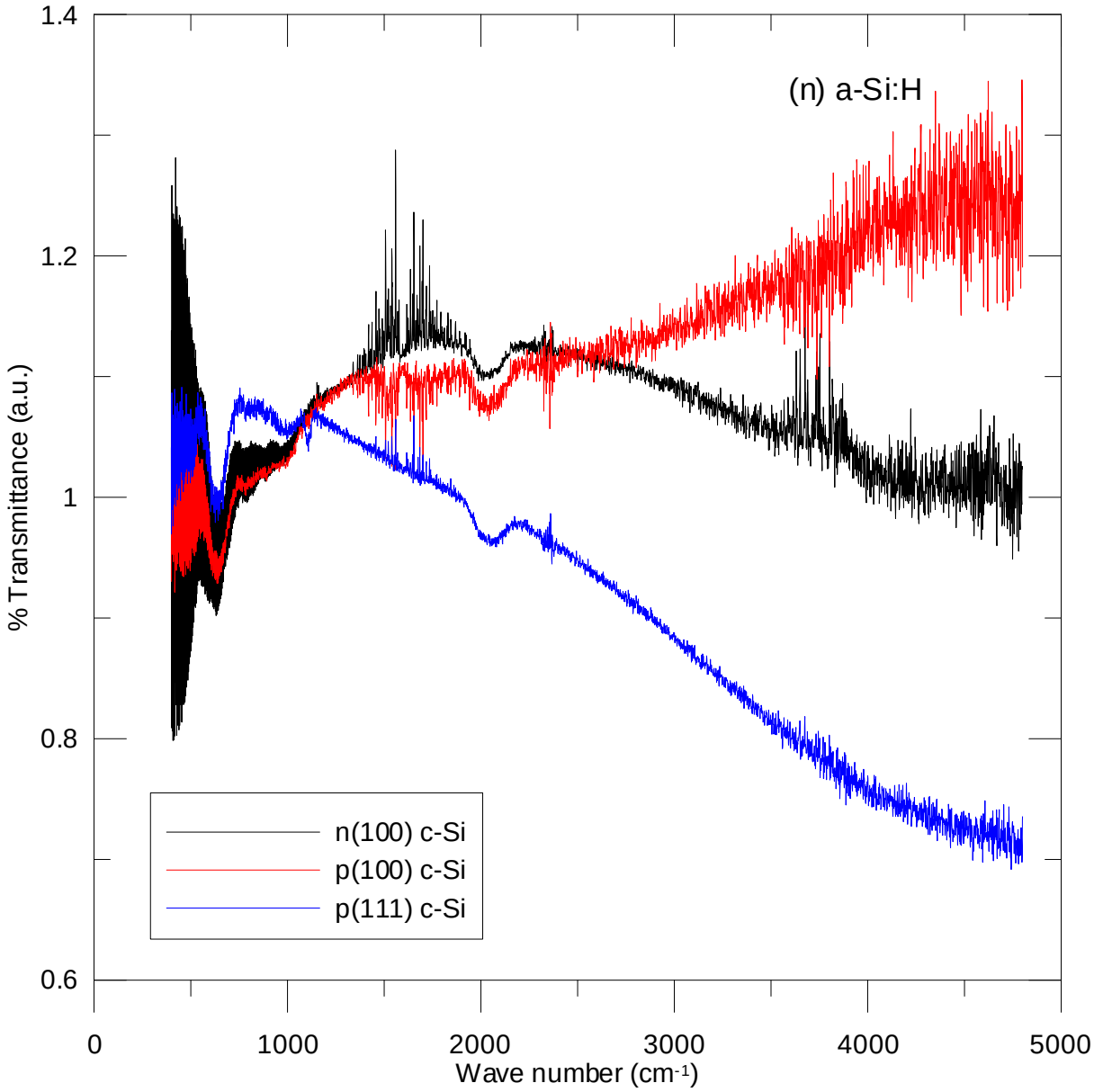
Çizelge 5.5 a-Si:H filmler için ilgili modlar ve uygun frekanslar

Katkılanmış ve katkılanmamış a-Si:H filmlerdeki FTIR analizleri filmlerin substrat üzerinde mükemmel bir şekilde bırakıtılandığını göstermektedir. Ne yazık ki, büyütülen filmler substrat ve film arayüzeyleri arasında doğal yalıtıcı katman (özellikle silikon dioksit, SiO_2) içermektedir.

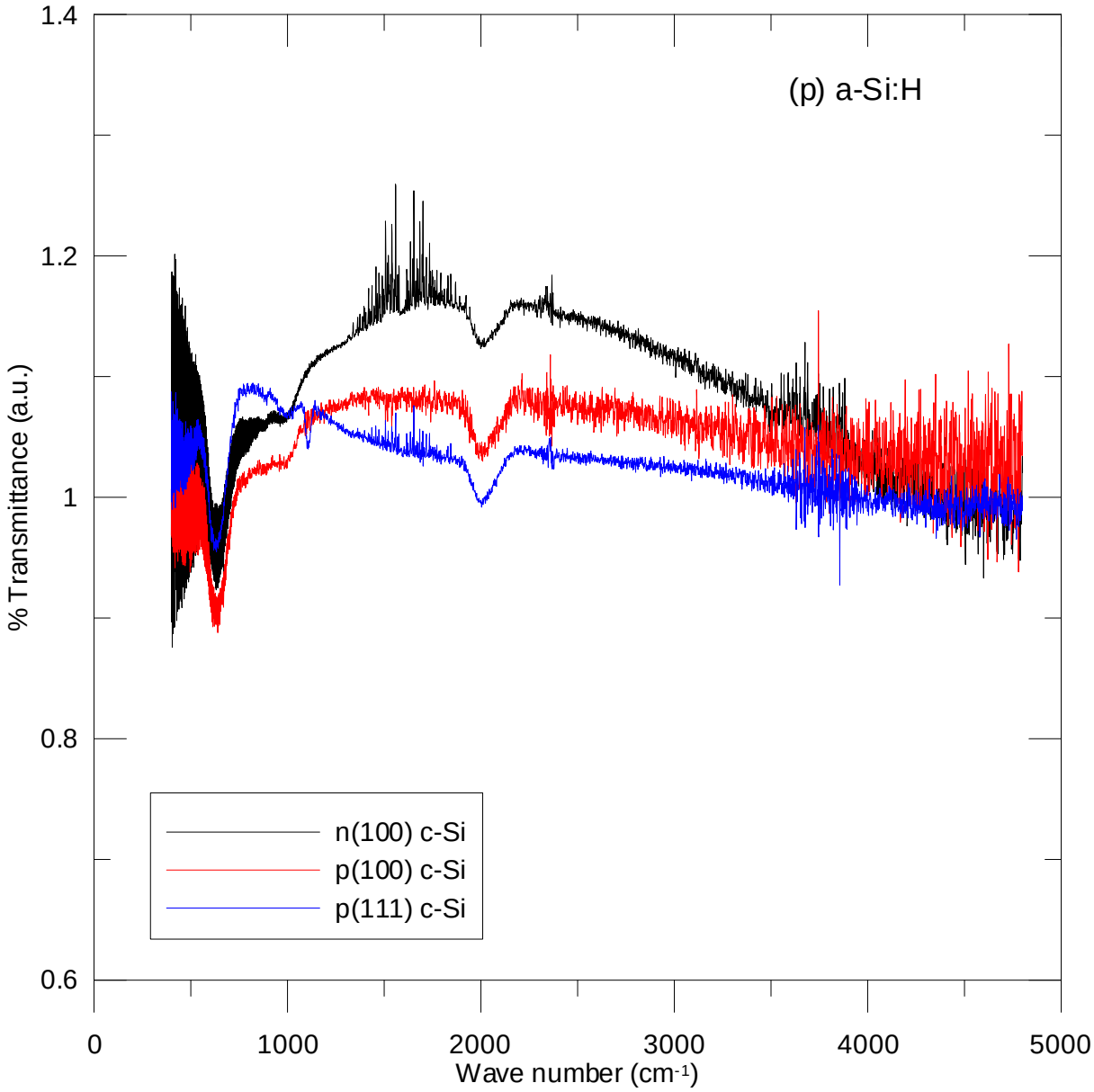


Şekil 5.19 (n)a-Si:H Soğurganlık – dalga sayısı grafiği

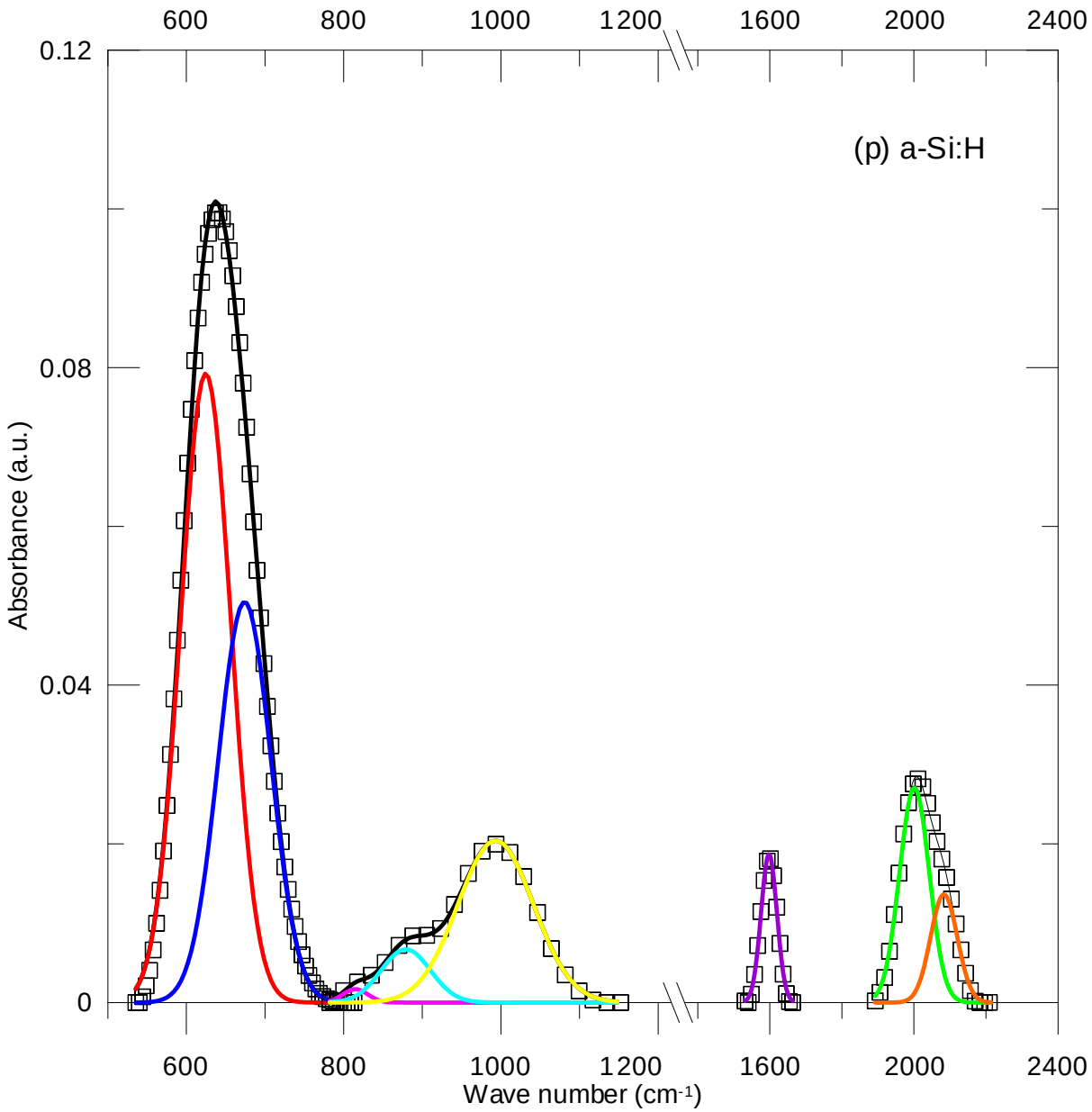
Şekil 5.15 n (100) C-Si arayüzeydeki (Şekil 5.14) i-aSi:H (Şekil 5.15) n-aSi:H ve (Şekil 5.16) p-aSi:H filmlerin FTIR spektrumlarının ters sarımıdır. Grafikte semboller FTIR datalarını ve Gauss sinyali şeklindeki katı çizgilerin herbiri a-Si:H bağlarını temsil etmektedir.



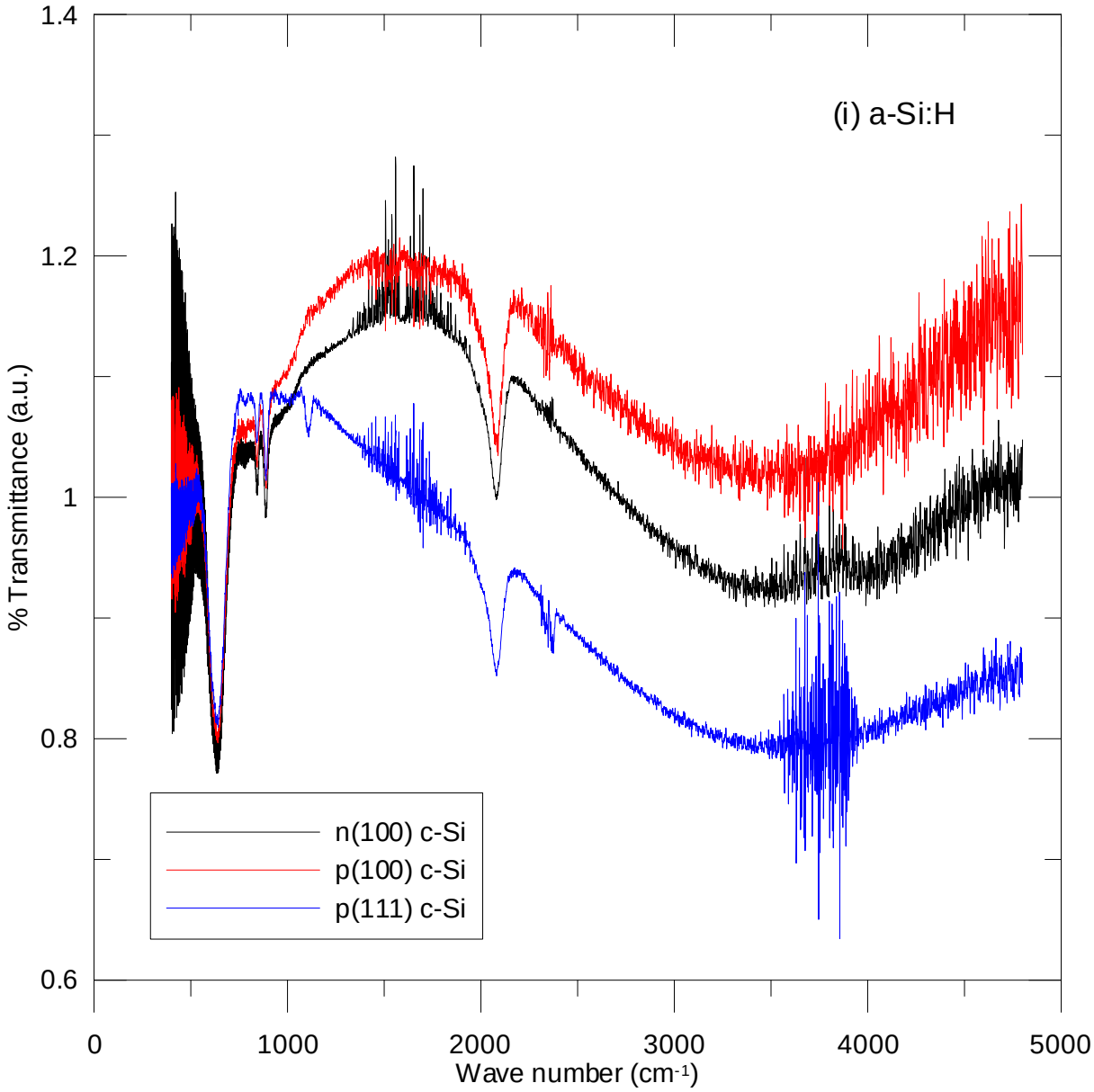
Şekil 5.20 (n)a-Si:H Transmitans – dalga sayısı grafiği



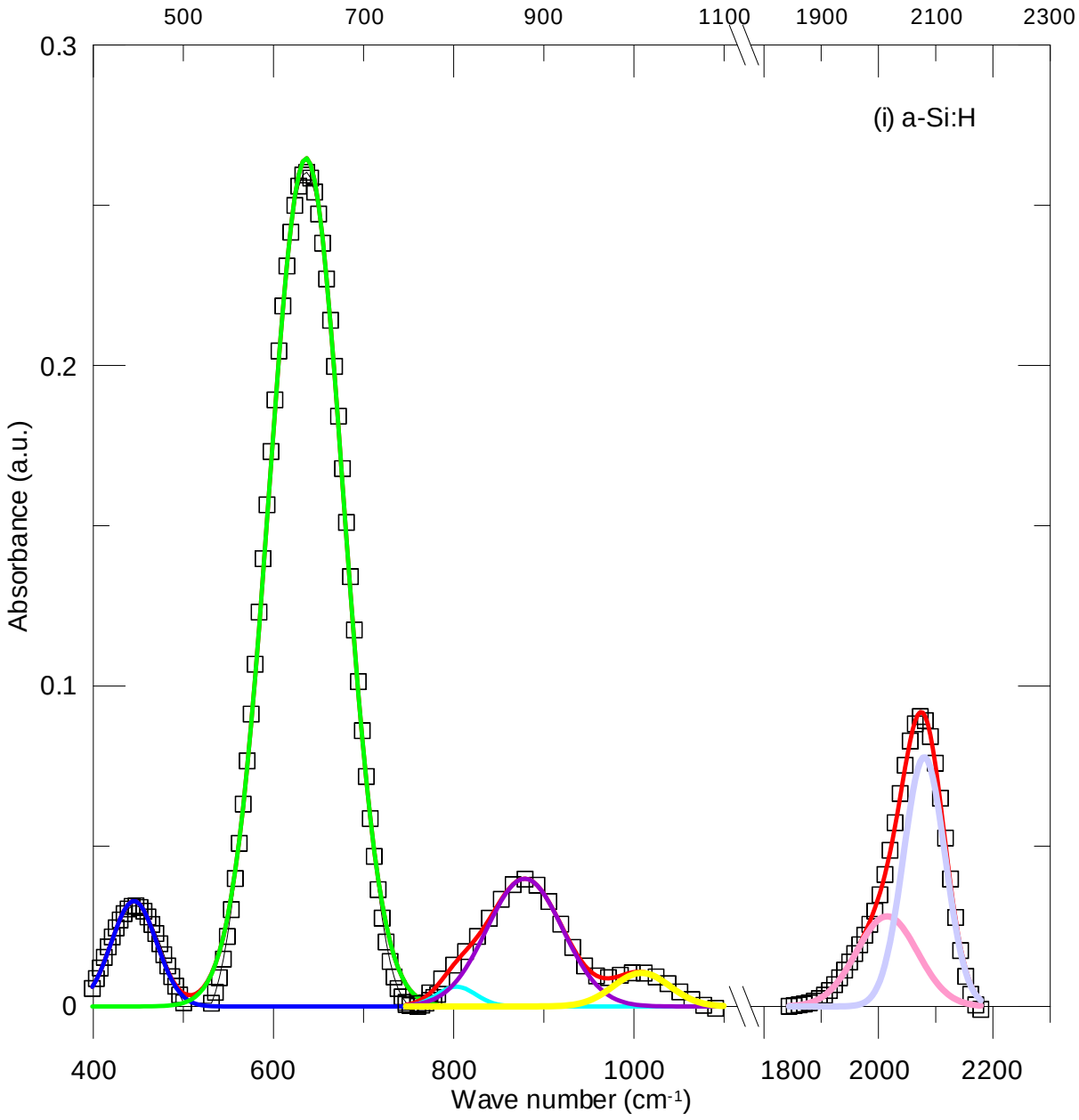
Şekil 5.21 (p)a-Si:H Transmitans – dalga sayısı grafiği



Şekil 5.22 (p)a-Si:H Soğurganlık – dalga sayısı grafiği



Şekil 5.23 (i)a-Si:H Transmitans – dalga sayısı grafiği

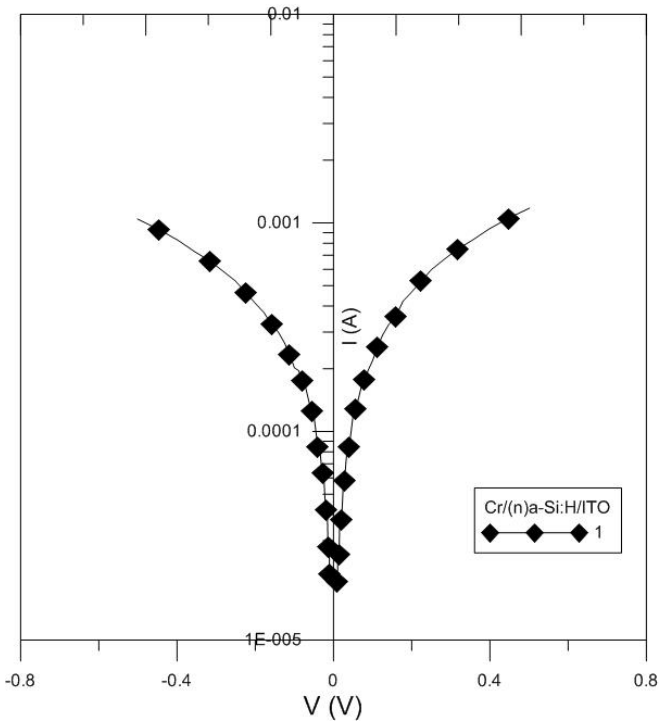


Şekil 5.24 (i)a-Si:H Soğurganlık – dalga sayısı grafiği

5.3 Akım Voltaj Ölçümleri

Metal/katkısız yada katkılı a-Si:H/metal yapısından elde edilen akım gerilim değişimleri aşağıdaki şekillerde verilmiştir. Grafiklerin belirgin özelliği, ön ve arka elektrodun krom yada ITO olmasından bağımsız bir şekilde aynı akım değerlerine aynı gerilimlerde ulaşması şeklindedir. Bu tespit de, ön ve arka elektrodların yükleri bloke etmediği aksine film içine enjekte ettiği yargısını kuvvetlendirir. Gerçekten de uygulanan gerilime göre simetrik bir desenler gözlenmektedir. Öte yandan, altlığın silisyum olduğu durumlarda durum farklılık gösterir. Şöyle ki, akımda bir yönlenme gözlenmektedir. Ters ve düz besleme durumlarında bu yönlenme 10^2-10^4aralığındadır. Metal elektrodun (Al ve/veya ITO) bariyer yüksekliğine bağlı olarak akımdaki yönlenmenin iyileştiği anlaşılmıştır. Bununla birlikte, hesaplanan bariyer yükseklikleri hem literatür ile hem de bir sonraki bölümler sunulacak C-V eğrilerinden elde edilen oluşma potansiyelleriyle uyumludur.

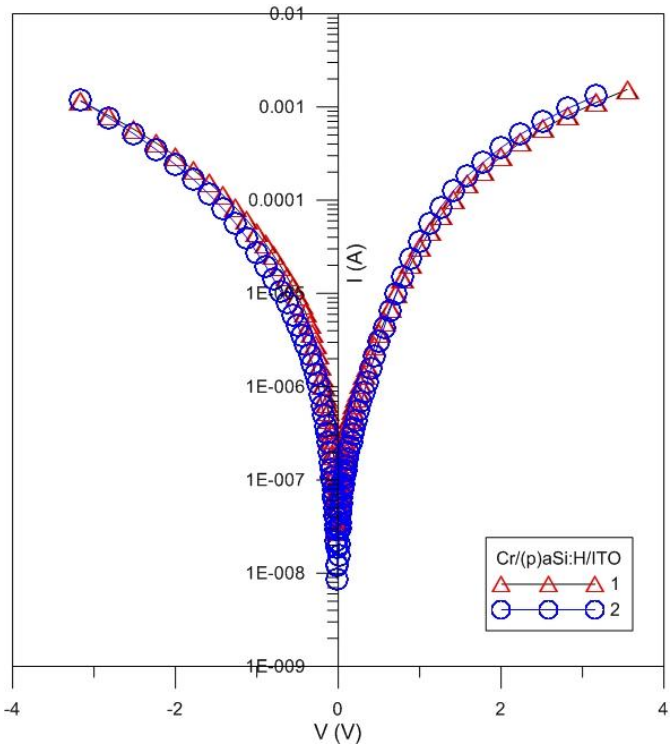
Schottky diyotların:



Şekil 5.25 Cr/(n)a-Si:H/ITO

Cr / (n)a-Si:H / ITO	Direnç
1	400

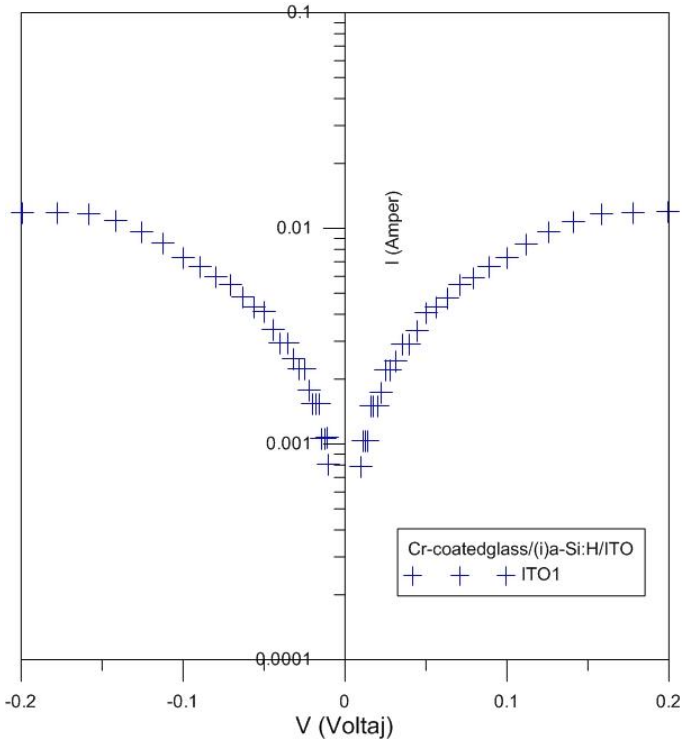
Çizelge 5.6 Cr/(n)a-Si:H/ITO direnç hesapları



Şekil 5.26 Cr/(p)a-Si:H/ITO

Cr / (p)a-Si:H / ITO	Direnç
1	562
2	500

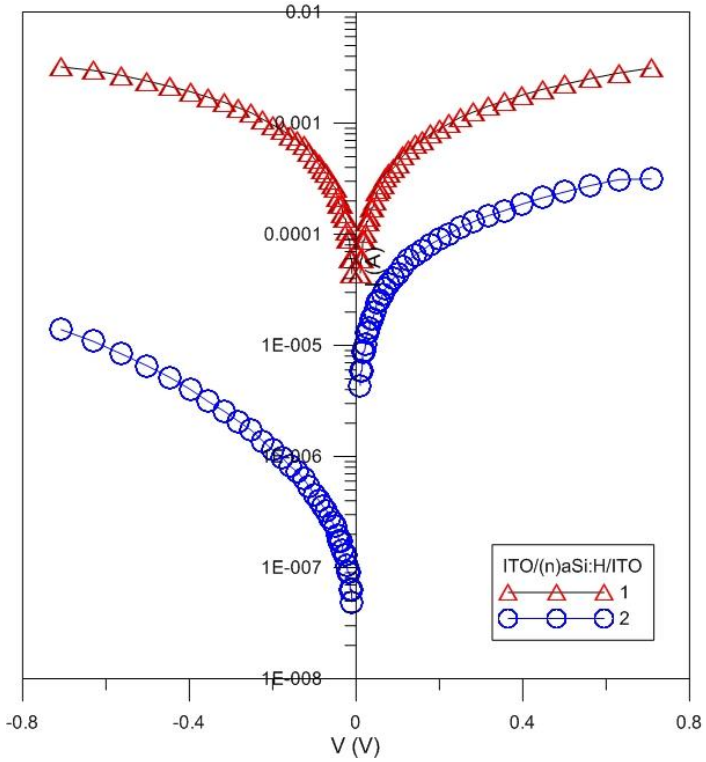
Çizelge 5.7 Cr/(p)a-Si:H/ITO direnç hesapları



Şekil 5.27 ITO/(i)a-Si:H/Cr

ITO / (i)a-Si:H / Cr	Direnç
1	12,5

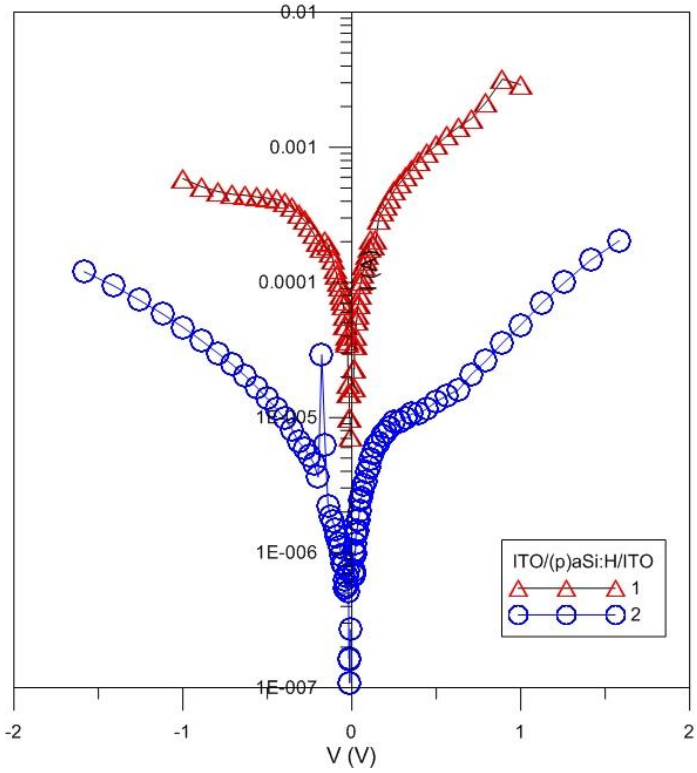
Çizelge 5.8 ITO/(i)a-Si:H/Cr direnç hesapları



Şekil 5.28 ITO/(n)a-Si:H/ITO

ITO / (n)a-Si:H / ITO	Direnç
1	225
2	1600

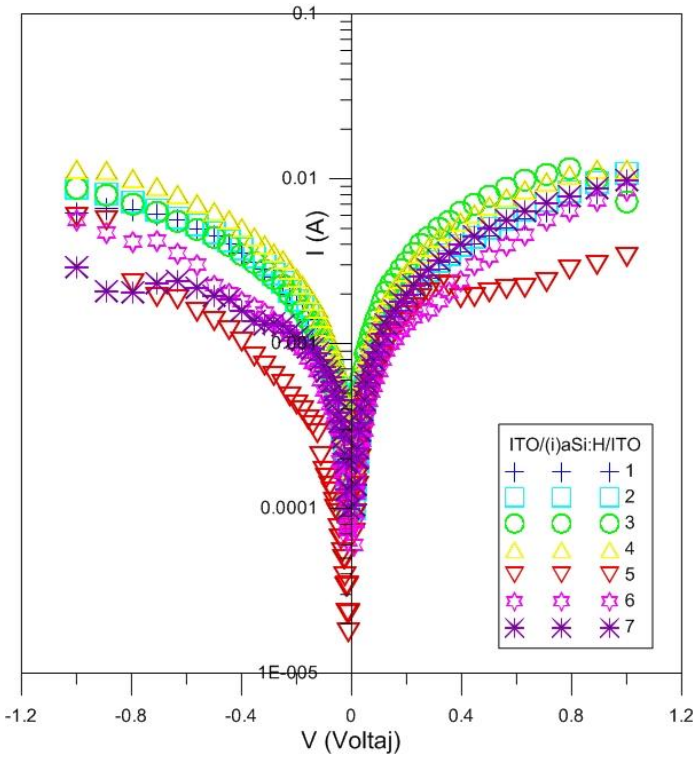
Çizelge 5.9 ITO/(n)a-Si:H/ITO direnç hesapları



Şekil 5.29 ITO/(p)a-Si:H/ITO

ITO / (p)a-Si:H / ITO	Direnç
1	400
2	80

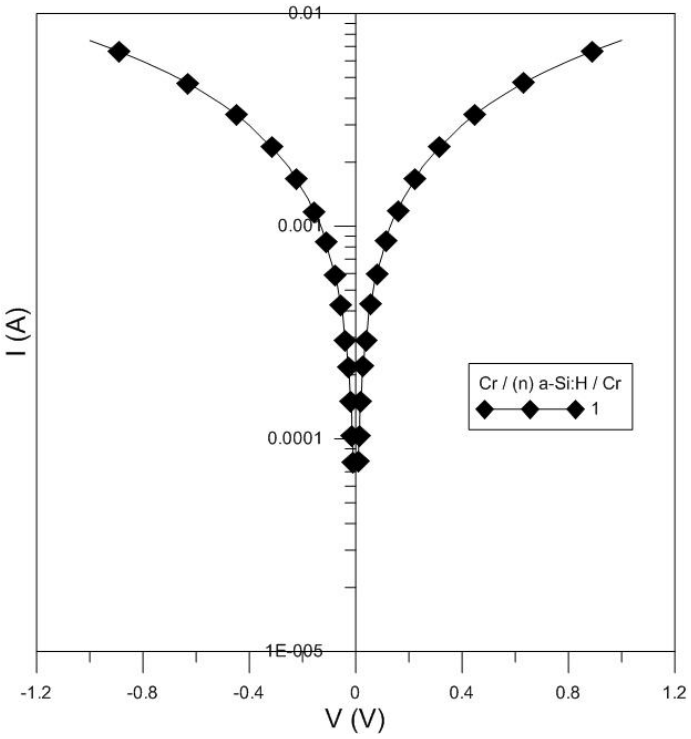
Çizelge 5.10 ITO/(p)a-Si:H/ITO direnç hesapları



Şekil 5.30 ITO/(i)a-Si:H/ITO

ITO / (i)a-Si:H / ITO	Direnç
1	112,5
2	102,5
3	52,5
4	75
5	400
6	175
7	100

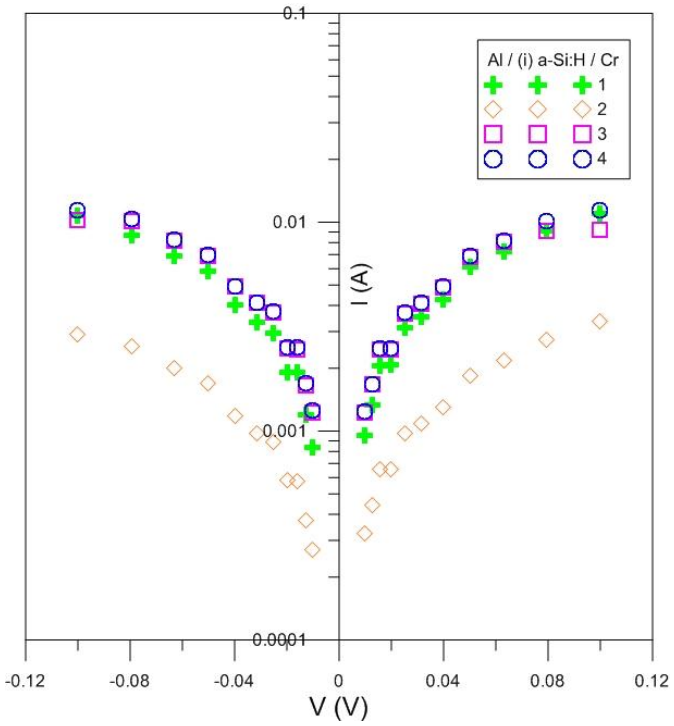
Çizelge 5.11 ITO/(i)a-Si:H/ITO direnç hesapları



Şekil 5.31 Cr/(n)a-Si:H/Cr

Cr / (n)a-Si:H / Cr	Direnç
1	150

Çizelge 5.12 Cr/(n)a-Si:H/Cr direnç hesapları

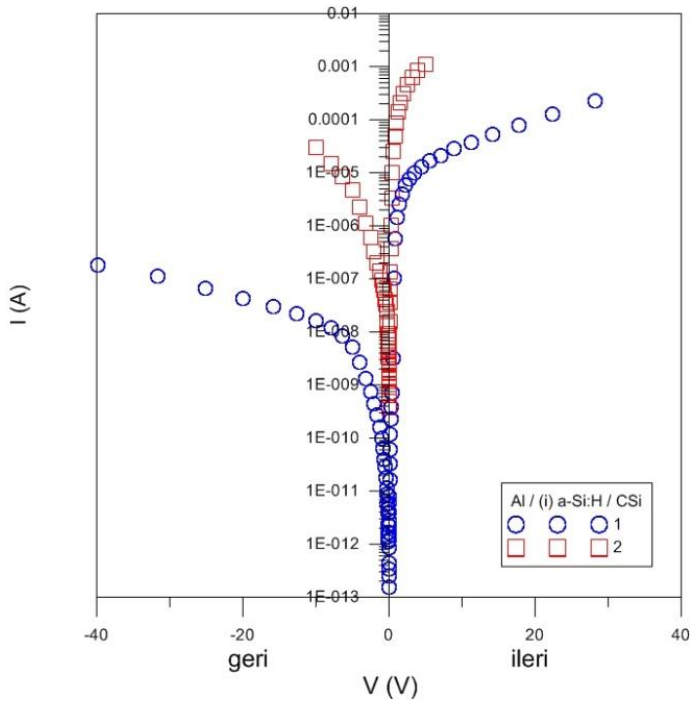


Şekil 5.32 Al/(i)a-Si:H/Cr

Al/ (i)a-Si:H / Cr	Direnç
1	32
2	30
3	8
4	8

Çizelge 5.13 Al/(i)a-Si:H/Cr direnç hesapları

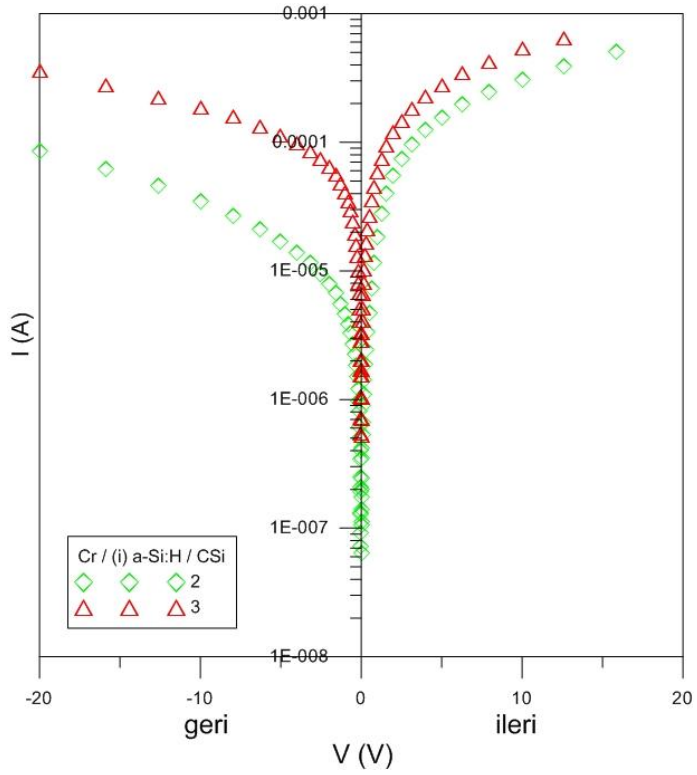
p-n eklemler:



Şekil 5.33 Al/(i)a-Si:H/CSi-n100

Al/ (i)a-Si:H / CSi-n100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	24,535	1,5751	-27,6	0,001	3,14E-6	90	0,799
2	30,852	1,2526	-20,9	0,001	3,14E-6	90	0,880

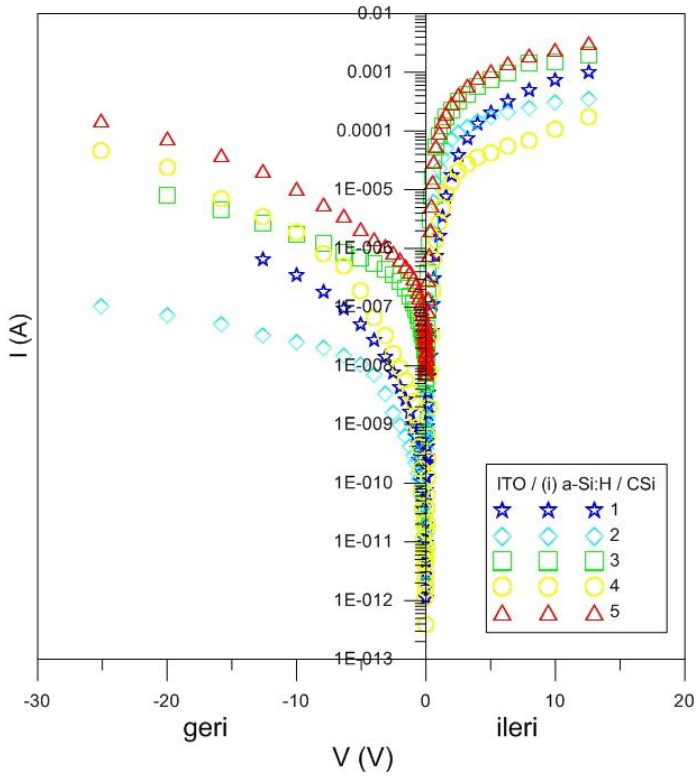
Çizelge 5.14 Al/(i)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.34 Cr/(i)a-Si:H/CSi-n100

Cr / (i)a-Si:H / CSi-n100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
2	23,4	1,65	-16,2	0,0005	7,85E-7	90	0,4689
3	23,8	1,61	-14,2	0,0005	7,85E-7	90	0,4158

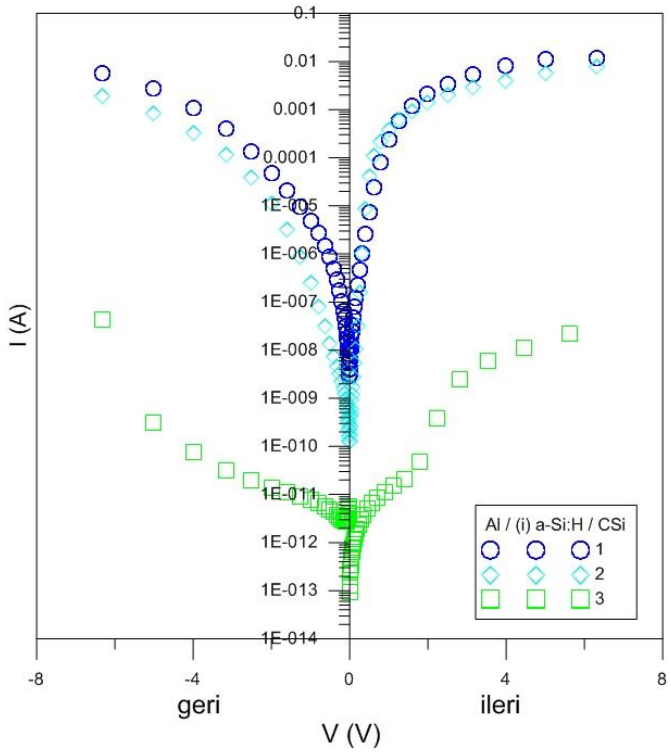
Çizelge 5.15 Cr/(i)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.35 ITO/(i)a-Si:H/CSi-n100

ITO / (i)a-Si:H / CSi-n100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	18,809	2,05	-22,5	0,0005	7,85E-7	90	0,631
2	19,976	1,93	-21,5	0,0005	7,85E-7	90	0,606
3	25,767	1,49	-19,3	0,0005	7,85E-7	90	0,549
4	28,04	1,37	-26,6	0,0005	7,85E-7	90	0,738
5	23,276	1,66	-19	0,0005	7,85E-7	90	0,540

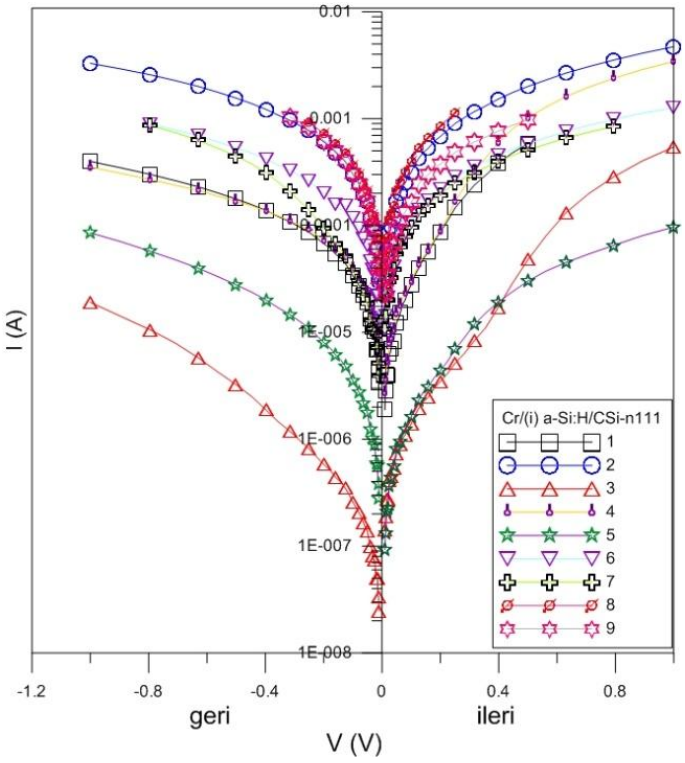
Çizelge 5.16 ITO/(i)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.36 Al/(i)a-Si:H/CSi-n111

Al / (i)a-Si:H / CSi-n111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	25,92	1,49	-19,1	0,001	3,14E-6	90	0,579
2	27,07	1,42	-22,3	0,001	3,14E-6	90	0,660
3	23,24	1,66	-29,5	0,001	3,14E-6	90	0,848

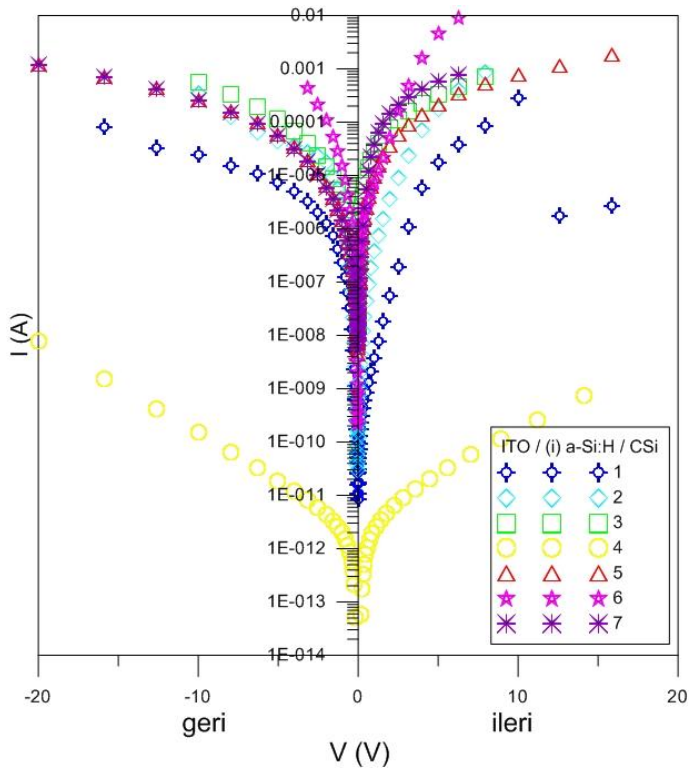
Çizelge 5.17 Al/(i)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.37 Cr/(i)a-Si:H/CSi-n111

Cr / (i)a-Si:H / CSi-n111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	27,129	1,42	-12,7	0,0005	7,85E-7	90	0,377
2	19,517	1,98	-9,76	0,0005	7,85E-7	90	0,300
3	15,547	2,48	-14,9	0,0005	7,85E-7	90	0,435
4	21,372	1,80	-12,2	0,0005	7,85E-7	90	0,365
5	20,970	1,84	-15,1	0,0005	7,85E-7	90	0,440
6	20,88	1,850	-11,1	0,0005	7,85E-7	90	0,335
7	20,17	1,916	-11,1	0,0005	7,85E-7	90	0,336
8	24,32	1,589	-9,90	0,0005	7,85E-7	90	0,304
9	41,04	0,94	-10,4	0,0005	7,85E-7	90	0,318

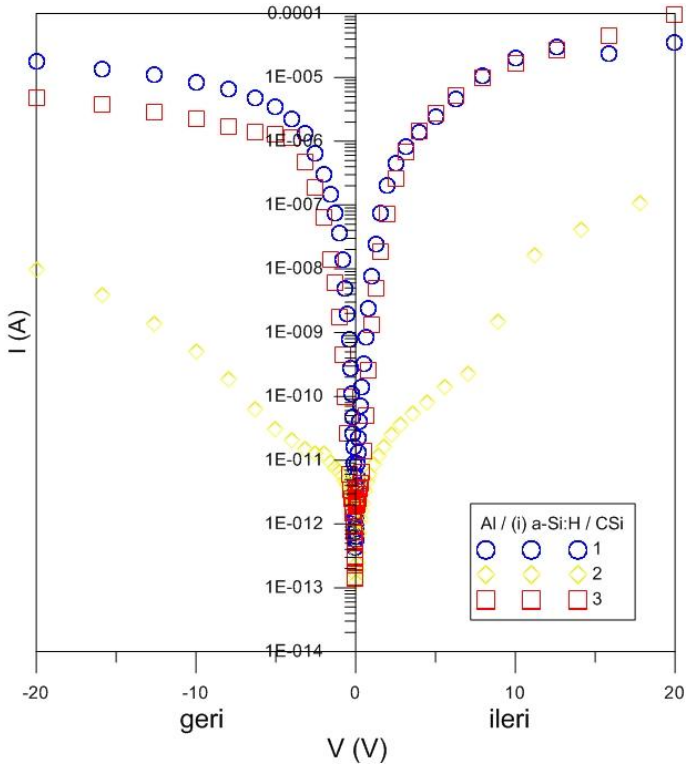
Çizelge 5.18 Cr/(i)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.38 ITO/(i)a-Si:H/CSi-n111

ITO / (i)a-Si:H / CSi-n111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	25,57	1,51	-25,2	0,0005	7,85E-7	90	0,7
2	25,12	1,53	-22,6	0,0005	7,85E-7	90	0,633
3	31,76	1,21	-17,7	0,0005	7,85E-7	90	0,508
4	20,56	1,87	-34,4	0,0005	7,85E-7	90	0,94
5	23,21	1,66	-18	0,0005	7,85E-7	90	0,515
6	27,29	1,41	-17,1	0,0005	7,85E-7	90	0,49
7	25,49	1,51	-18,6	0,0005	7,85E-7	90	0,53

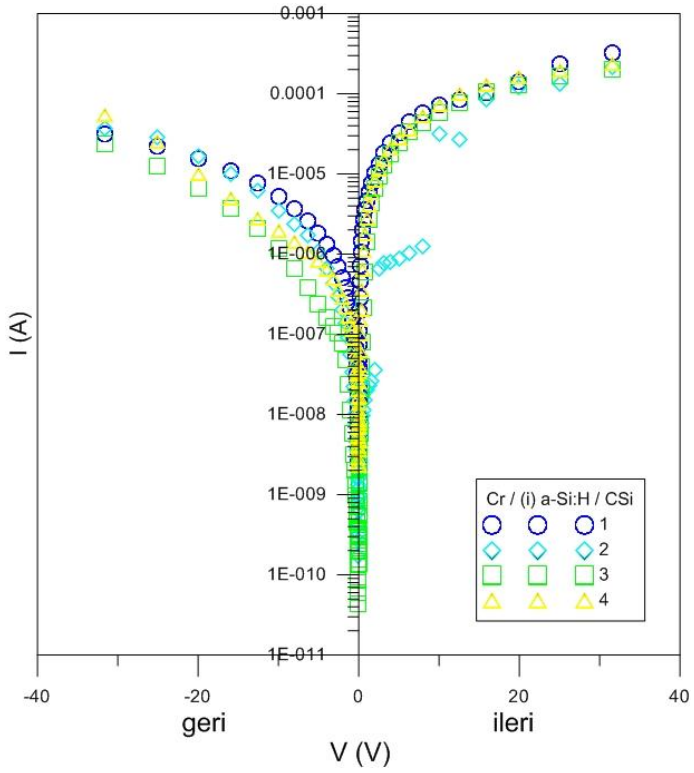
Çizelge 5.19 ITO/(i)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.39 Al/(i)a-Si:H/CSi-p100

Al / (i)a-Si:H / CSi-p100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	25,62	1,50	-28,2	0,001	3,14E-6	90	0,81
2	24,46	1,58	-31,2	0,001	3,14E-6	90	0,89
3	10	3,86	-30	0,001	3,14E-6	90	0,86

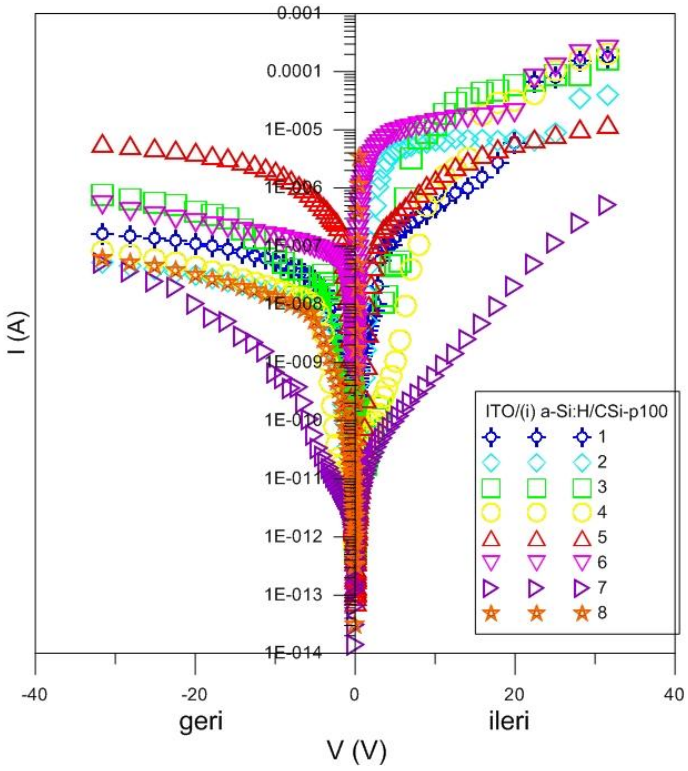
Çizelge 5.20 Al/(i)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.40 Cr/(i)a-Si:H/CSi-p100

Cr / (i)a-Si:H / CSi-p100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	35,02	1,10	-19,1	0,0005	7,85E-7	90	0,54
2	22,28	1,73	-21,6	0,0005	7,85E-7	90	0,60
3	32,45	1,19	-22,4	0,0005	7,85E-7	90	0,62
4	26,73	1,44	-19,6	0,0005	7,85E-7	90	0,55

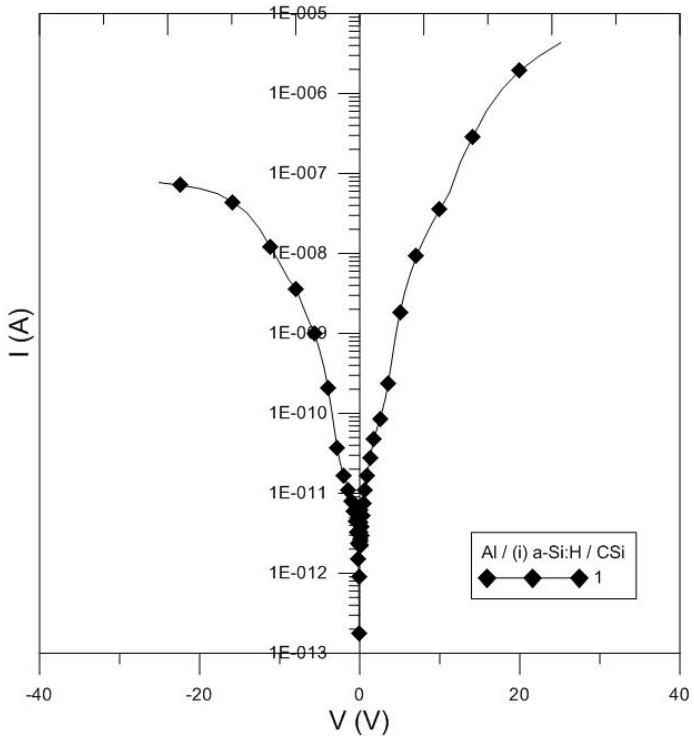
Çizelge 5.21 Cr/(i)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.41 ITO/(i)a-Si:H/CSi-p100

ITO / (i)a-Si:H / CSi-p100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	26,48	1,45	-24,9	0,0005	7,85E-7	90	0,69
2	10,09	3,83	-32,2	0,0005	7,85E-7	90	0,88
3	22,21	1,74	-29,1	0,0005	7,85E-7	90	0,80
4	20,98	1,84	-27,1	0,0005	7,85E-7	90	0,74
5	22,83	1,69	-30	0,0005	7,85E-7	90	0,82
6	29,83	1,29	-20,9	0,0005	7,85E-7	90	0,58
7	39,92	0,96	-31,6	0,0005	7,85E-7	90	0,86
8	30,20	1,25	-30,1	0,0005	7,85E-7	90	0,82

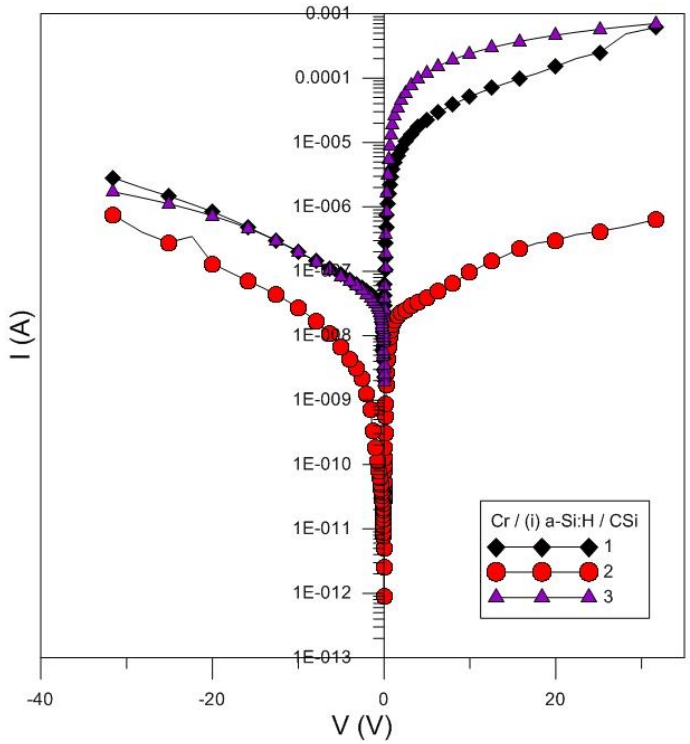
Çizelge 5.22 ITO/(i)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.42 Al/(i)a-Si:H/CSi-p111

Al / (i)a-Si:H / CSi-p111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	27,49	1,40	-25,7	0,001	3,14E-6	90	0,75

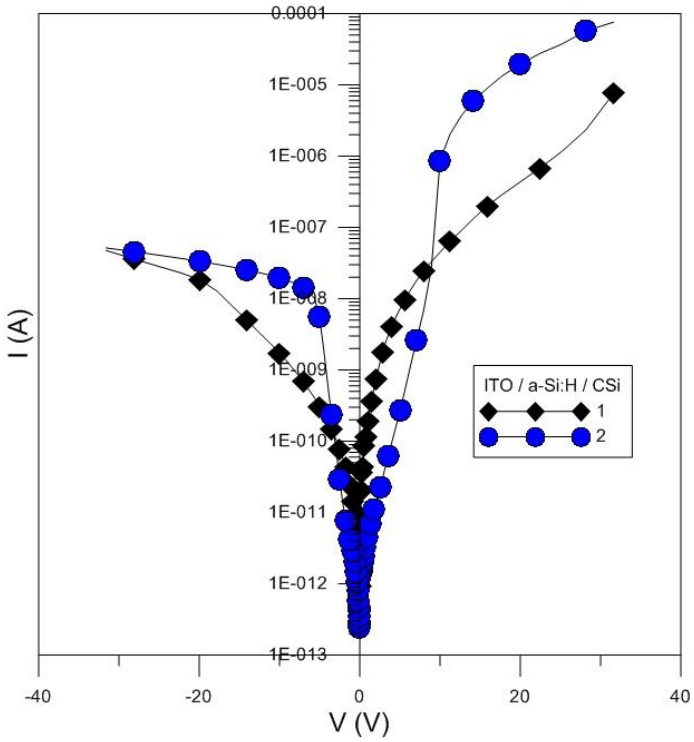
Çizelge 5.23 Al/(i)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.43 Cr/(i)a-Si:H/CSi-p111

Cr / (i)a-Si:H / CSi-p111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	32,17	1,18	-19,4	0,0005	7,85E-7	90	0,55
2	22,10	1,74	-24,5	0,0005	7,85E-7	90	0,68
3	35,10	1,10	-19,7	0,0005	7,85E-7	90	0,55

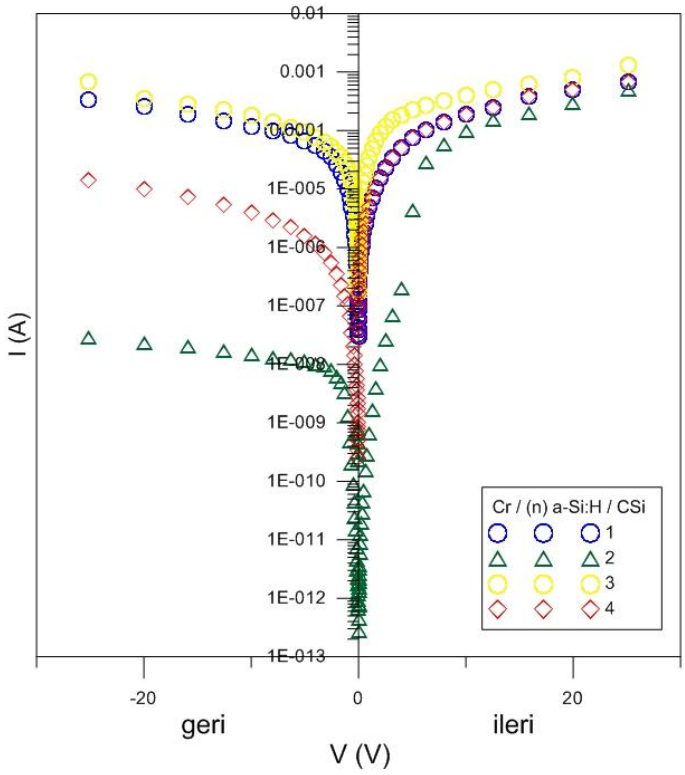
Çizelge 5.24 Cr/(i)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.44 ITO/(i)a-Si:H/CSi-p111

ITO / (i)a-Si:H / CSi-p111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	8,84	4,37	-26,3	0,0005	7,85E-7	90	0,72
2	10,9	3,54	-26,4	0,0005	7,85E-7	90	0,73

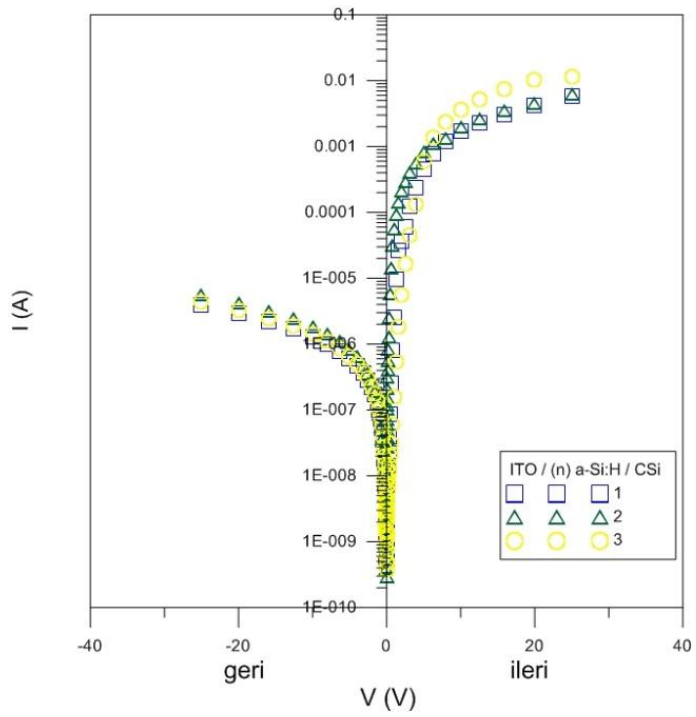
Çizelge 5.25 ITO/(i)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.45 Cr/(n)a-Si:H/CSi-n100

Cr / (n)a-Si:H / CSi-n100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	34,14	1,13	-17,3	0,0005	7,85E-7	120	0,50
2	38,12	1,01	-28,6	0,0005	7,85E-7	120	0,79
3	22,41	1,72	-14,9	0,0005	7,85E-7	120	0,44
4	24,18	1,59	-21,8	0,0005	7,85E-7	120	0,62

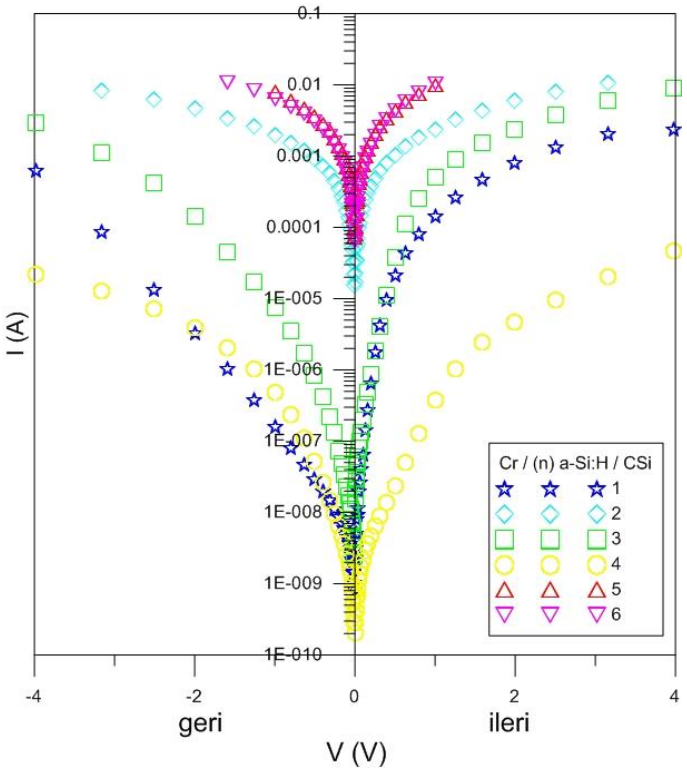
Çizelge 5.26 Cr/(n)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.46 ITO/(n)a-Si:H/CSi-n100

ITO / (n)a-Si:H / CSi-n100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	23,94	1,61	-21,3	0,0005	7,85E-7	120	0,60
2	25,01	1,54	-17,5	0,0005	7,85E-7	120	0,50
3	23,85	1,62	-21,4	0,0005	7,85E-7	120	0,61

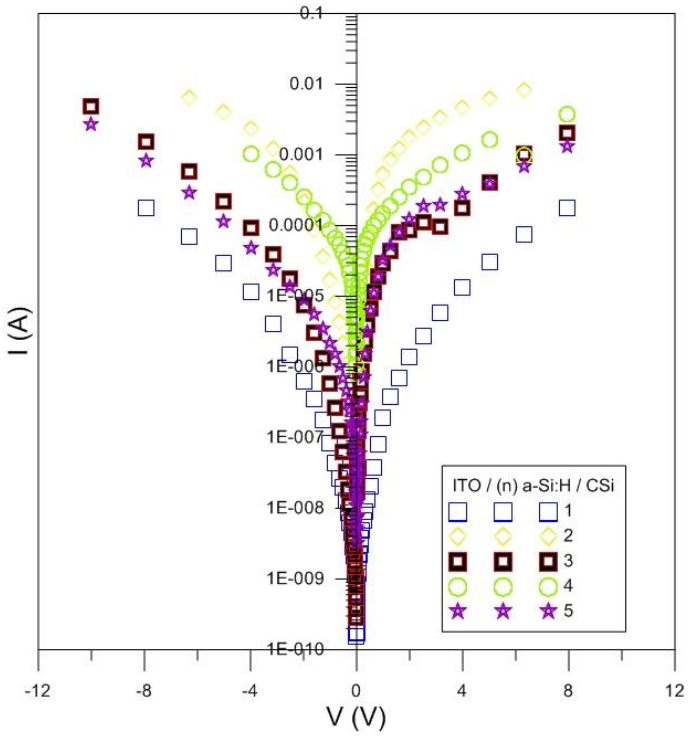
Çizelge 5.27 ITO/(n)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.47 Cr/(n)a-Si:H/CSi-n111

Cr / (n)a-Si:H / CSi-n111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	35,81	1,07	-19,7	0,0005	7,85E-7	120	0,53
2	25,04	1,54	-10,7	0,0005	7,85E-7	120	0,33
3	22,03	1,75	-17,4	0,0005	7,85E-7	120	0,50
4	24,72	1,56	-22	0,0005	7,85E-7	120	0,62
5	23,61	1,63	-9,01	0,0005	7,85E-7	120	0,28
6	24,73	1,56	-9,42	0,0005	7,85E-7	120	0,29

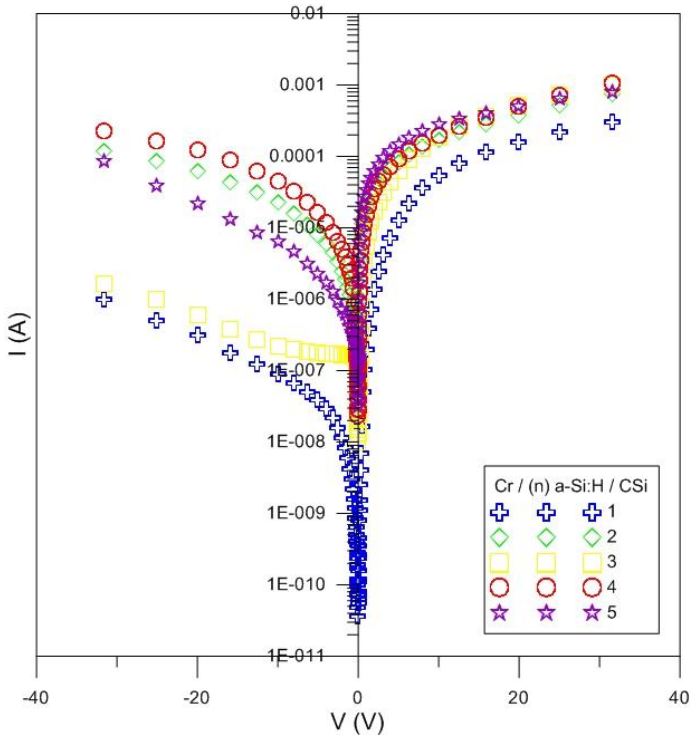
Çizelge 5.28 Cr/(n)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.48 ITO/(n)a-Si:H/CSi-n111

ITO / (n)a-Si:H / CSi-n111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	28,04	1,37	-22,3	0,0005	7,85E-7	120	0,63
2	28,56	1,35	-18,9	0,0005	7,85E-7	120	0,54
3	31,68	1,21	-18,5	0,0005	7,85E-7	120	0,53
4	24,40	1,58	-13	0,0005	7,85E-7	120	0,39
5	30,45	1,26	-17,7	0,0005	7,85E-7	120	0,51

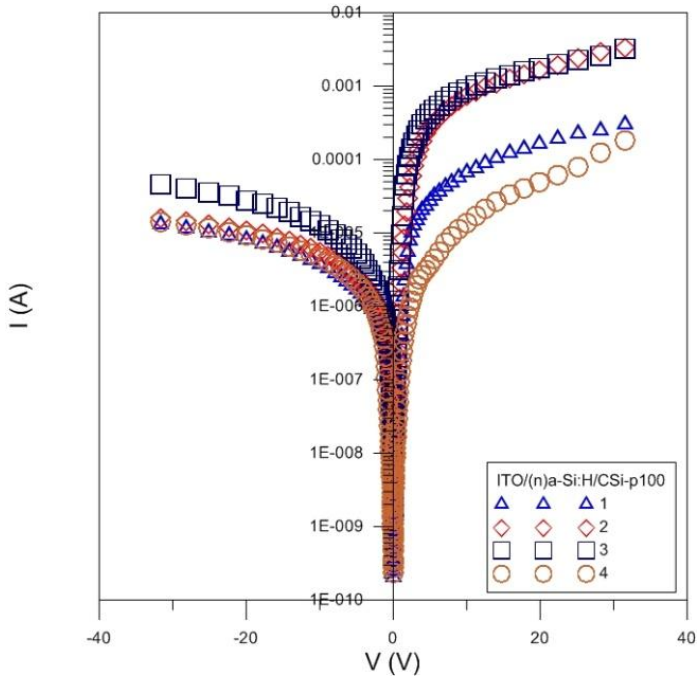
Çizelge 5.29 ITO/(n)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.49 Cr/(n)a-Si:H/CSi-p100

Cr / (n)a-Si:H / CSi-p100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	29,24	1,32	-23,7	0,0005	7,85E-7	120	0,67
2	32,36	1,19	-16,5	0,0005	7,85E-7	120	0,48
3	15,94	2,42	-18,1	0,0005	7,85E-7	120	0,52
4	32,65	1,19	-17,2	0,0005	7,85E-7	120	0,50
5	34,8	1,11	-16,9	0,0005	7,85E-7	120	0,49

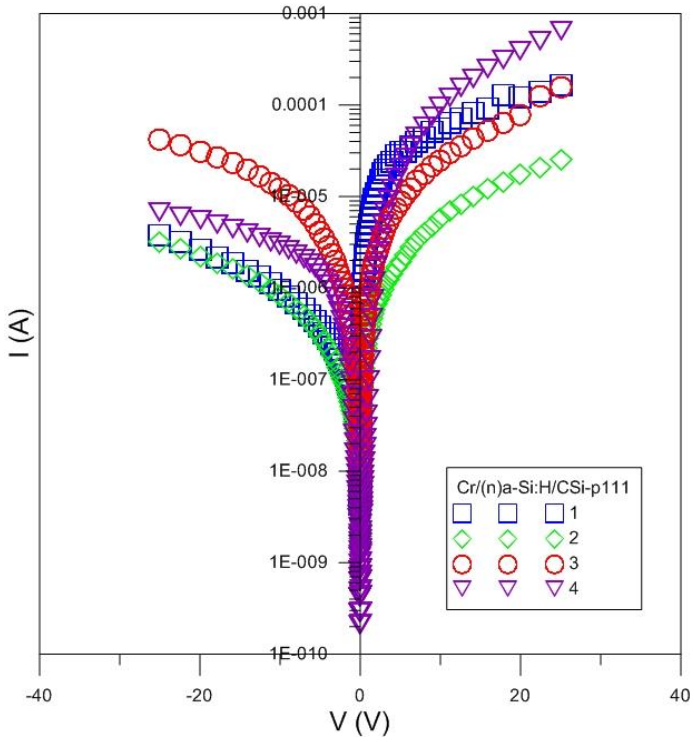
Çizelge 5.30 Cr/(n)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.50 ITO/(n)a-Si:H/CSi-p100

ITO / (n)a-Si:H / CSi-p100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	20,75	1,86	-21,8	0,0005	7,85E-7	120	0,61
2	19,55	1,97	-19	0,0005	7,85E-7	120	0,54
3	22,07	1,75	-19,7	0,0005	7,85E-7	120	0,56
4	24,85	1,55	-21,7	0,0005	7,85E-7	120	0,61

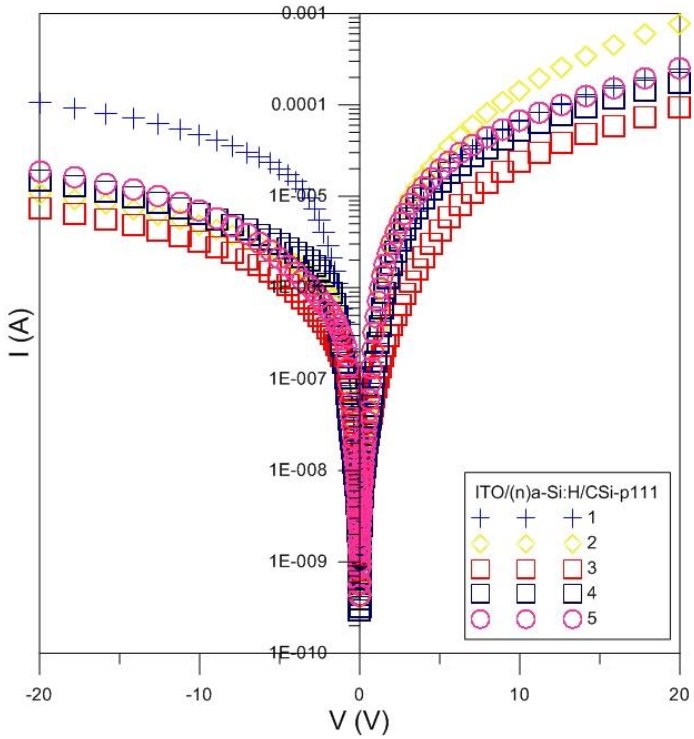
Çizelge 5.31 ITO/(n)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.51 Cr/(n)a-Si:H/CSi-p111

Cr / (n)a-Si:H / CSi-p111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	28,13	1,37	-18,7	0,0005	7,85E-7	120	0,54
2	27,1	1,41	-19,8	0,0005	7,85E-7	120	0,56
3	25,81	1,49	-18,9	0,0005	7,85E-7	120	0,54
4	24,62	1,56	-21,9	0,0005	7,85E-7	120	0,62

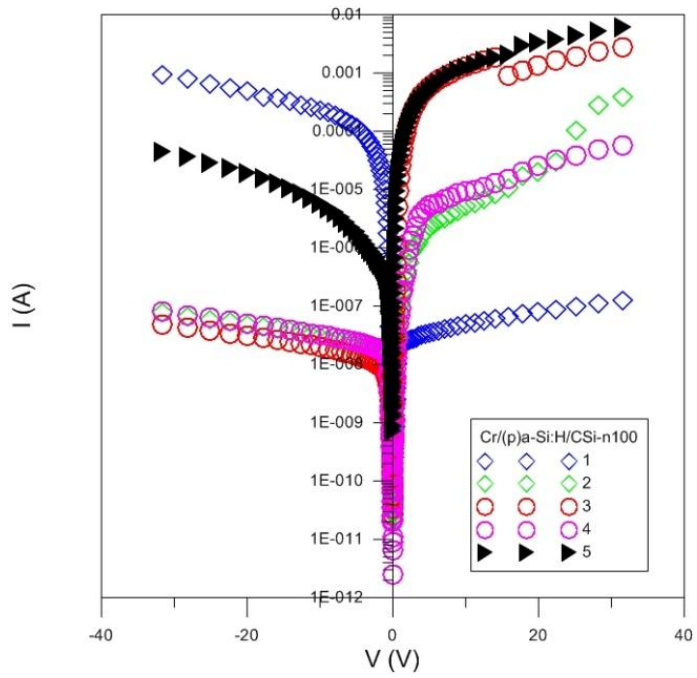
Çizelge 5.32 Cr/(n)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.52 ITO/(n)a-Si:H/CSi-p111

ITO / (n)a-Si:H / CSi-p111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	27,33	1,41	-21,1	0,0005	7,85E-7	120	0,60
2	24,99	1,54	-21,3	0,0005	7,85E-7	120	0,60
3	21,35	1,81	-20,6	0,0005	7,85E-7	120	0,59
4	24,68	1,56	-21,6	0,0005	7,85E-7	120	0,61
5	24,75	1,56	-21,3	0,0005	7,85E-7	120	0,60

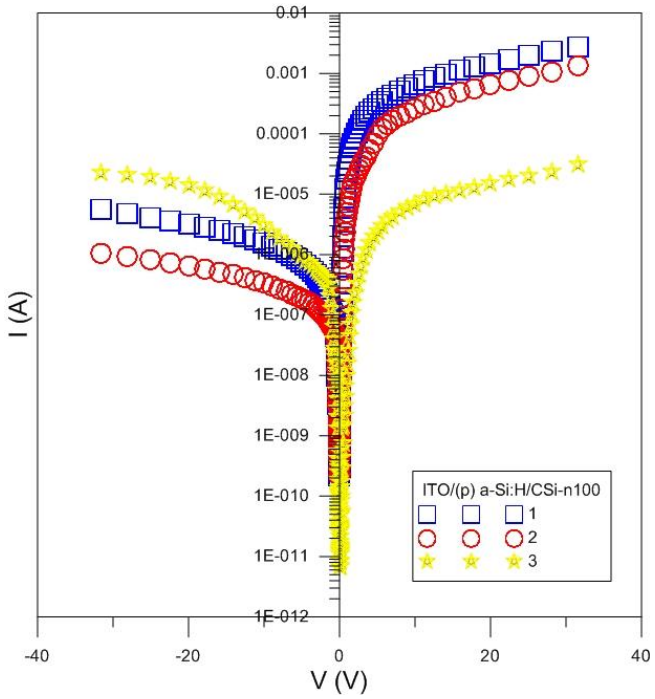
Çizelge 5.33 ITO/(n)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.53 Cr/(p)a-Si:H/CSi-n100

Cr / (p)a-Si:H / CSi-n100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	33,72	1,14	-24,1	0,0005	7,85E-7	30	0,64
2	21,66	1,78	-24,2	0,0005	7,85E-7	30	0,64
3	22,48	1,71	-20,5	0,0005	7,85E-7	30	0,55
4	24,24	1,59	-23,8	0,0005	7,85E-7	30	0,63
5	24,75	1,32	-19,6	0,0005	7,85E-7	30	0,52

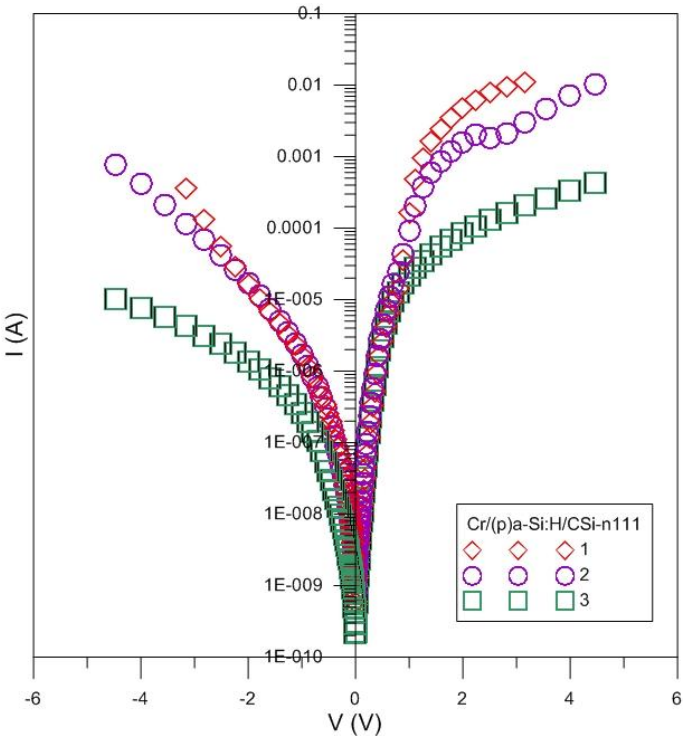
Çizelge 5.34 Cr/(p)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.54 ITO/(p)a-Si:H/CSi-n100

ITO / (p)a-Si:H / CSi-n100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	30,81	1,25	-21,7	0,0005	7,85E-7	30	0,58
2	29,81	1,29	-22	0,0005	7,85E-7	30	0,58
3	19,89	1,94	-25,5	0,0005	7,85E-7	30	0,68

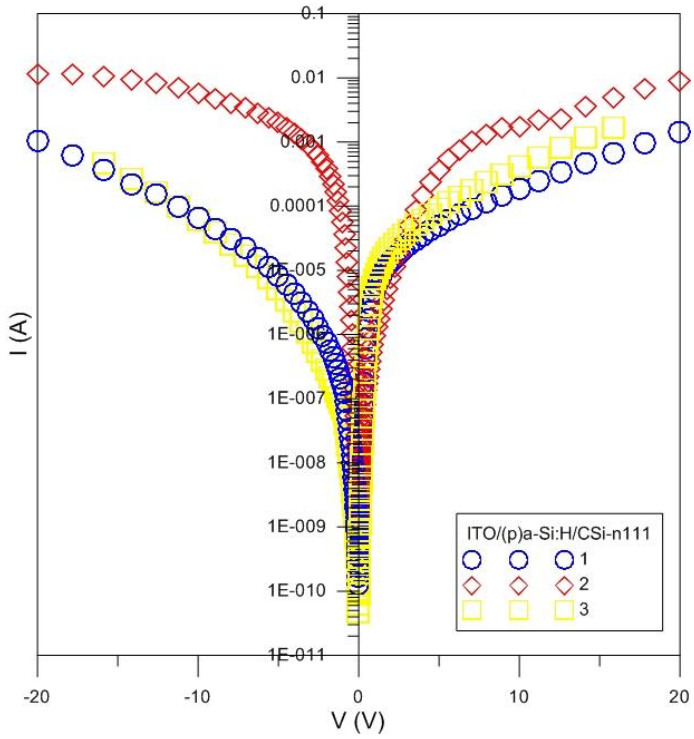
Çizelge 5.35 ITO/(p)a-Si:H/CSi-n100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.55 Cr/(p)a-Si:H/CSi-n111

Cr / (p)a-Si:H / CSi-n111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	38,38	1	-20,9	0,0005	7,85E-7	30	0,56
2	30,77	1,25	-21,1	0,0005	7,85E-7	30	0,56
3	22,83	1,69	-21,9	0,0005	7,85E-7	30	0,58

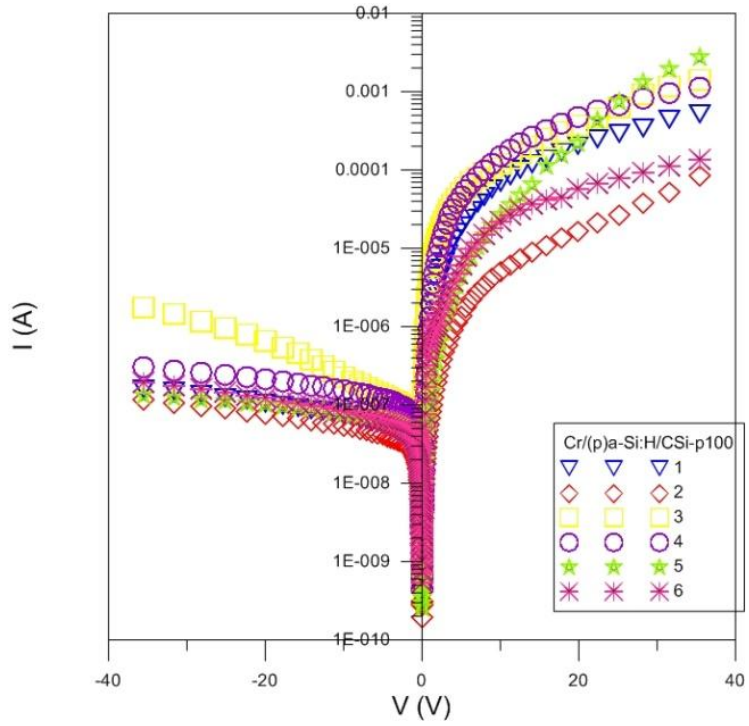
Çizelge 5.36 Cr/(p)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.56 ITO/(p)a-Si:H/CSi-n111

ITO / (p)a-Si:H / CSi-n111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	33,9	1,14	-22,1	0,0005	7,85E-7	30	0,59
2	37,2	1,03	-20,1	0,0005	7,85E-7	30	0,54
3	32,5	1,18	-22,9	0,0005	7,85E-7	30	0,61

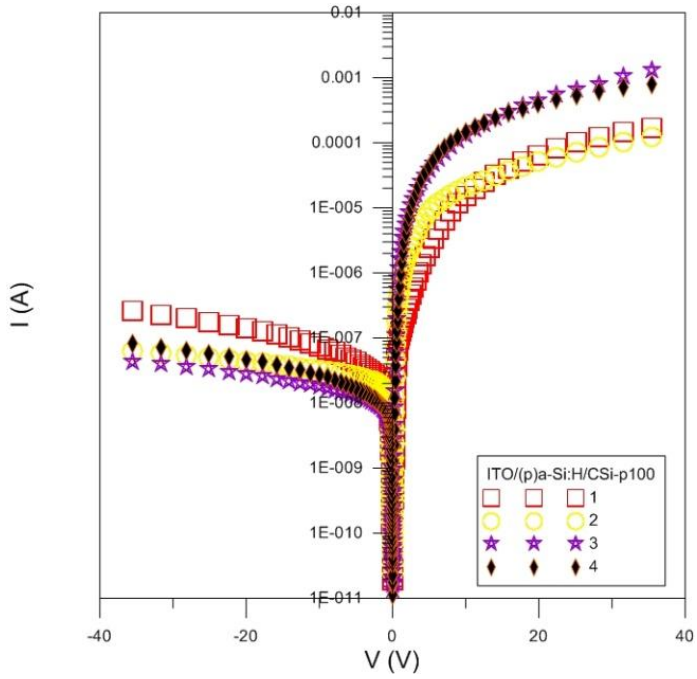
Çizelge 5.37 ITO/(p)a-Si:H/CSi-n111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.57 Cr/(p)a-Si:H/CSi-p100

Cr / (p)a-Si:H / CSi-p100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	25,9	1,49	-21,1	0,0005	7,85E-7	30	0,56
2	23,9	1,61	-21,6	0,0005	7,85E-7	30	0,57
3	37,82	1,02	-20,7	0,0005	7,85E-7	30	0,55
4	22,65	1,7	-21,2	0,0005	7,85E-7	30	0,56
5	23,07	1,67	-21,6	0,0005	7,85E-7	30	0,57
6	24,19	1,59	-21	0,0005	7,85E-7	30	0,56

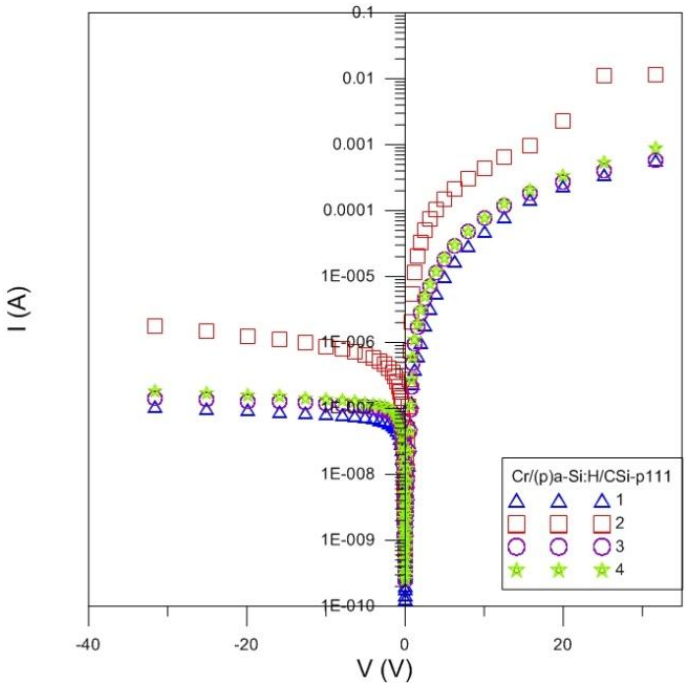
Çizelge 5.38 Cr/(p)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.58 ITO/(p)a-Si:H/CSi-p100

ITO / (p)a-Si:H / CSi-p100	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	31,3	1,23	-24,3	0,0005	7,85E-7	30	0,64
2	24,75	1,56	-24,2	0,0005	7,85E-7	30	0,64
3	23,13	1,67	-24,6	0,0005	7,85E-7	30	0,65
4	27,68	1,39	-24,9	0,0005	7,85E-7	30	0,66

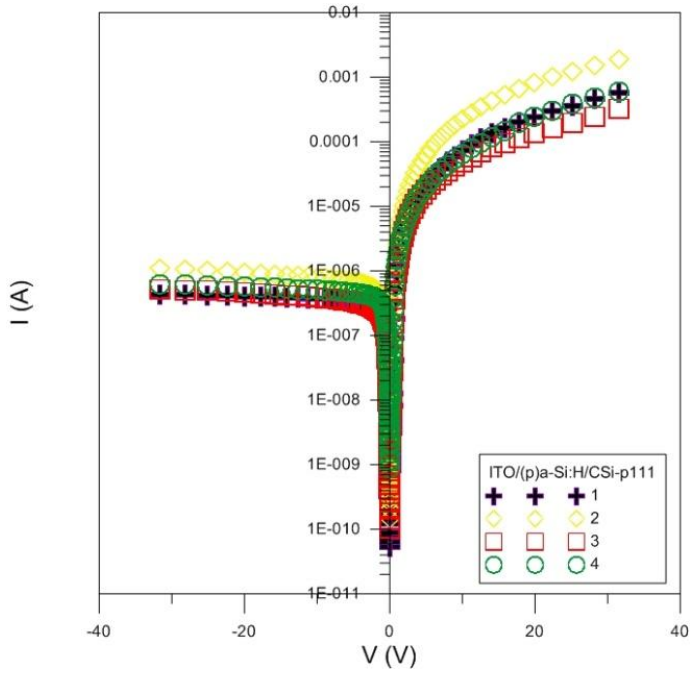
Çizelge 5.39 ITO/(p)a-Si:H/CSi-p100 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.59 Cr/(p)a-Si:H/CSi-p111

Cr / (p)a-Si:H / CSi-p111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	29.08	1,32	-22,5	0,0005	7,85E-7	30	0,60
2	23,17	1,66	-20,7	0,0005	7,85E-7	30	0,55
3	23,35	1,65	-21,7	0,0005	7,85E-7	30	0,58
4	22,9	1,68	-21,8	0,0005	7,85E-7	30	0,58

Çizelge 5.40 Cr/(p)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları



Şekil 5.60 ITO/(p)a-Si:H/CSi-p111

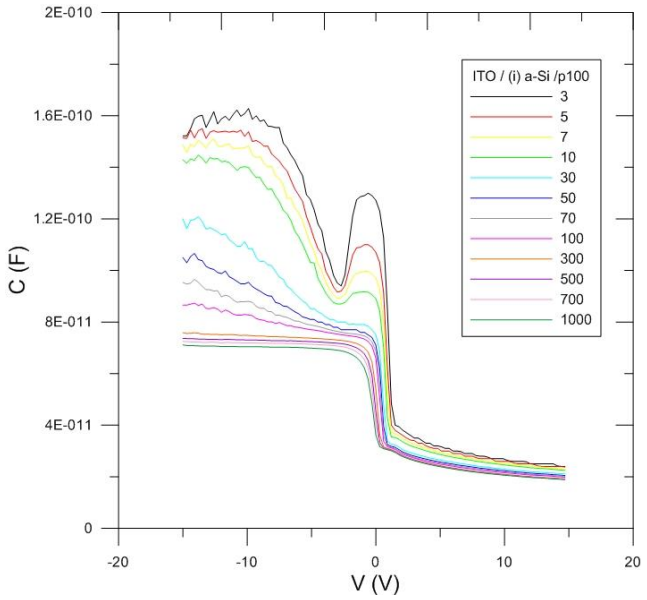
ITO / (p)a-Si:H / CSi-p111	Eğim	İdealite	Ln I_0	Yarıçap	Alan	A**	Bariyer Yüksekliği
1	25,81	1,49	-23,3	0,0005	7,85E-7	30	0,62
2	25,25	1,53	-22,3	0,0005	7,85E-7	30	0,59
3	23,99	1,61	-22	0,0005	7,85E-7	30	0,58
4	23,50	1,64	-20,5	0,0005	7,85E-7	30	0,55

Çizelge 5.41 ITO/(p)a-Si:H/CSi-p111 bariyer yüksekliği ve idealite hesapları

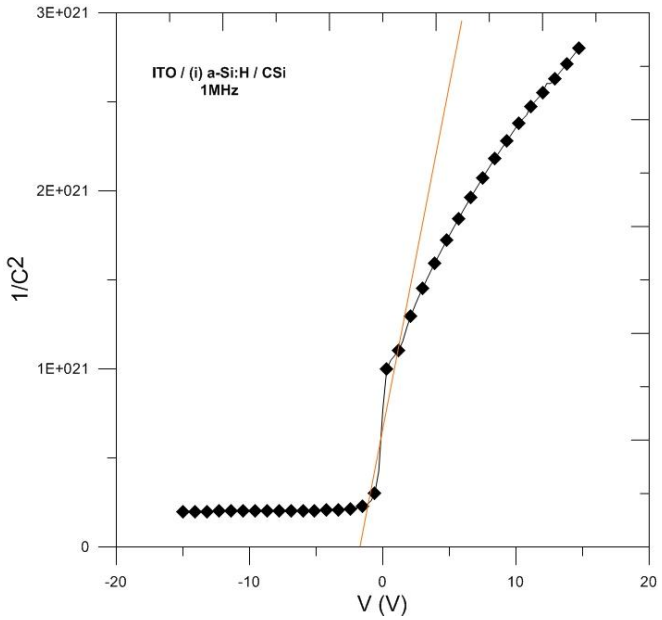
5.4 Kapasitans Voltaj Ölçümleri

(i) a-Si:H/p-c-Si ve (i) a-Si:H/n-c-Si eklemlerindeki modülasyon frekansı 1kHz-1MHz frekans aralığı için C-V karakteristiği Şekil 5.61'de gösterilmektedir. Bu grafik sırasıyla

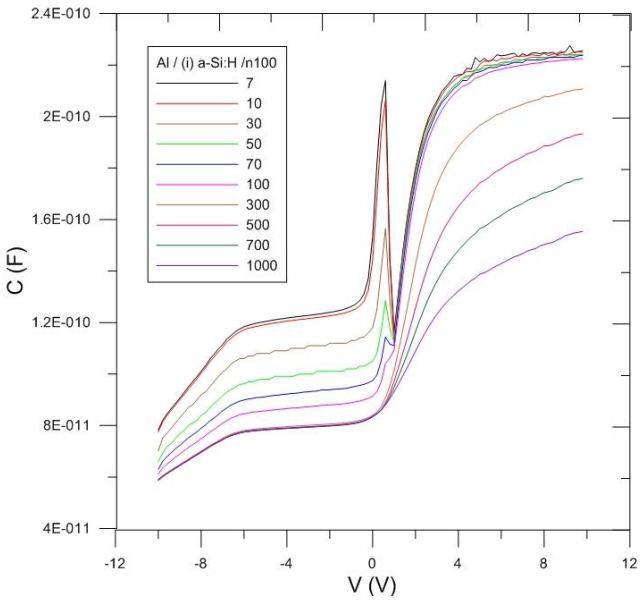
(i) a-Si:H/n-c-Si için pozitif özgerilim tarafındayken, (i)a-Si:H/p-c-Si eklemler için negatif özgerilim voltajının frekans dağılımını göstermektedir.



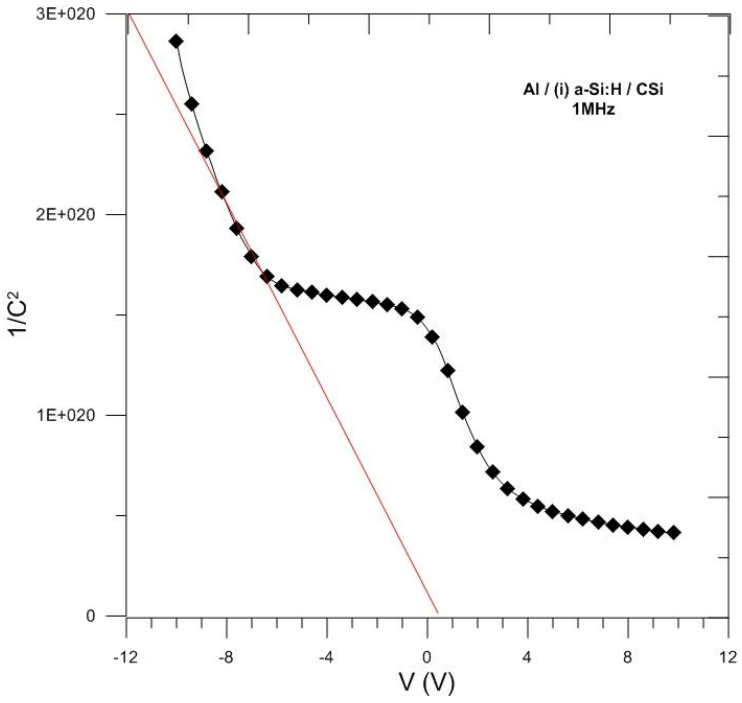
Şekil 5.61 ITO3/(i) a-Si:H/p(100) CSi C-V grafiği



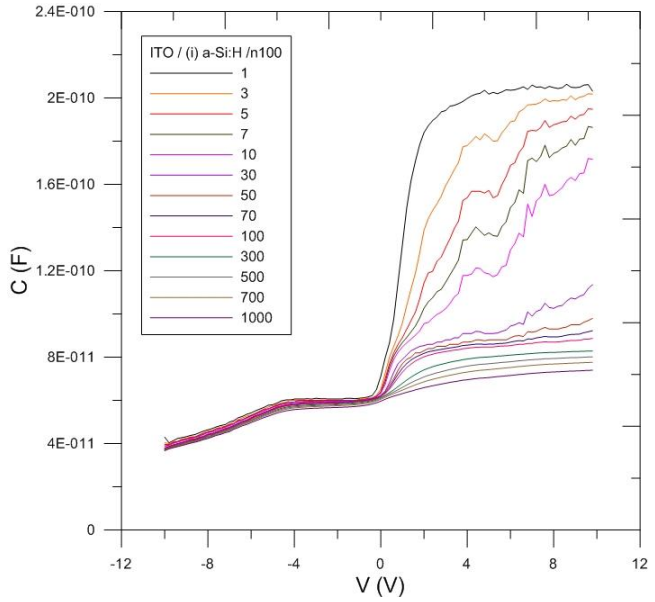
Şekil 5.62 ITO3/(i) a-Si:H/p(100) c-Si $1/C^2$-V grafiği



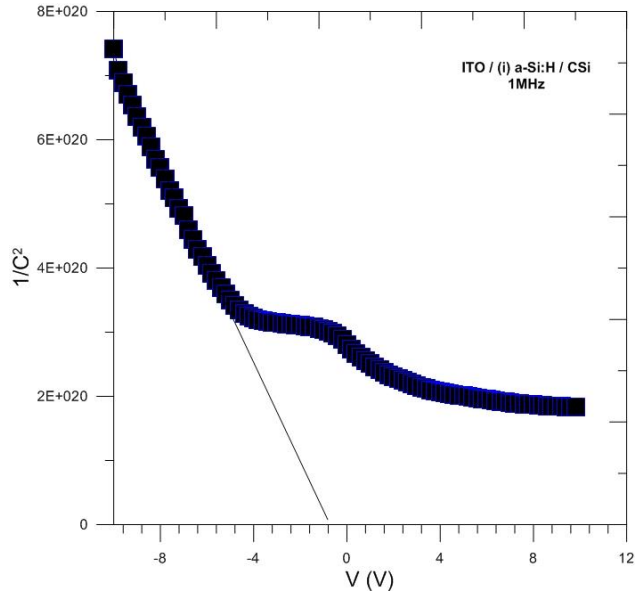
Şekil 5.63 Al1/(i)a-Si:H/n(100)c-Si C-V grafiği



Şekil 5.64 Al1/(i)a-Si:H/n(100)c-Si $1/C^2$-V grafiği



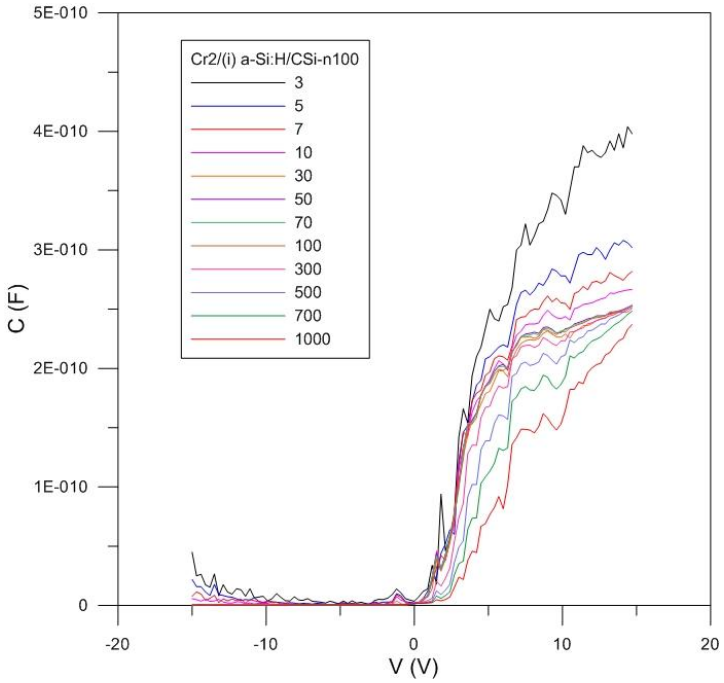
Şekil 5.65 ITO2/(i)a-Si:H/n(100)c-Si $1/C^2$-V grafiği



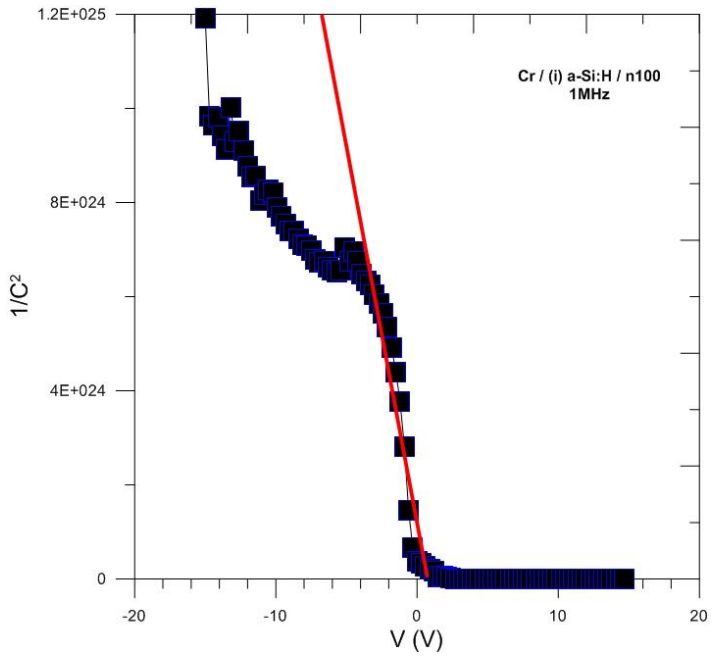
Şekil 5.66 ITO2/(i)a-Si:H/n(100)c-Si $1/C^2$-V grafiği

Ön elektrod olarak ITO'ya sahip küçük elektrodlu ITO2/(i)a-Si:H/n(100)c-Si N_I ve V_{bi}'yı belirleyen en yüksek frekansın (1MHz) C-V karakteristiği seçilmiş ve W_1^2-V_r özelliklerinin gösterildiği şekil 5.63 birim alan başına kapasitans değerini ifade ederken şekil 5.62 da ispat edilmiştir. Sırasıyla V yatay konumda durdurucudan ve eğimden

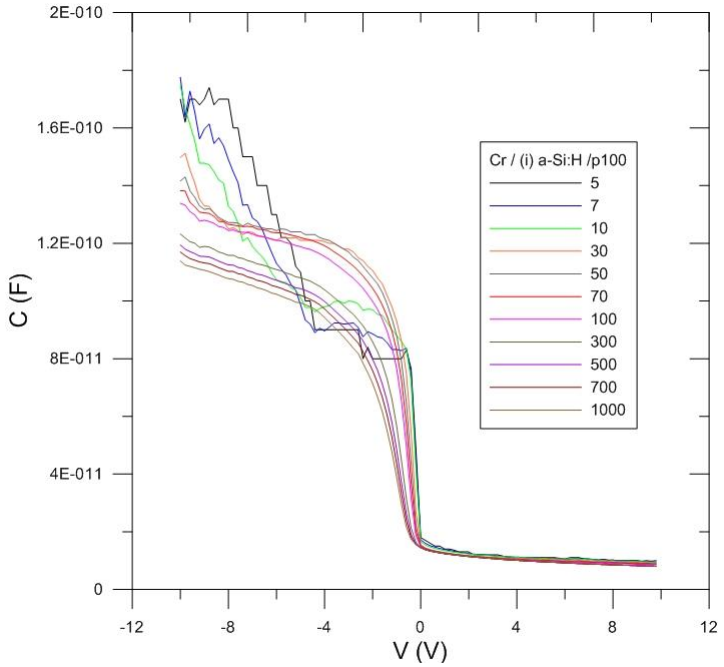
belirlenen N_I ve V_{bi} den dolayı ve şimdiki sistem için uygulanabilir olur ve p-n eklem türü analizleri olarak lineer ilişkilerin hesaplanması kesindir.



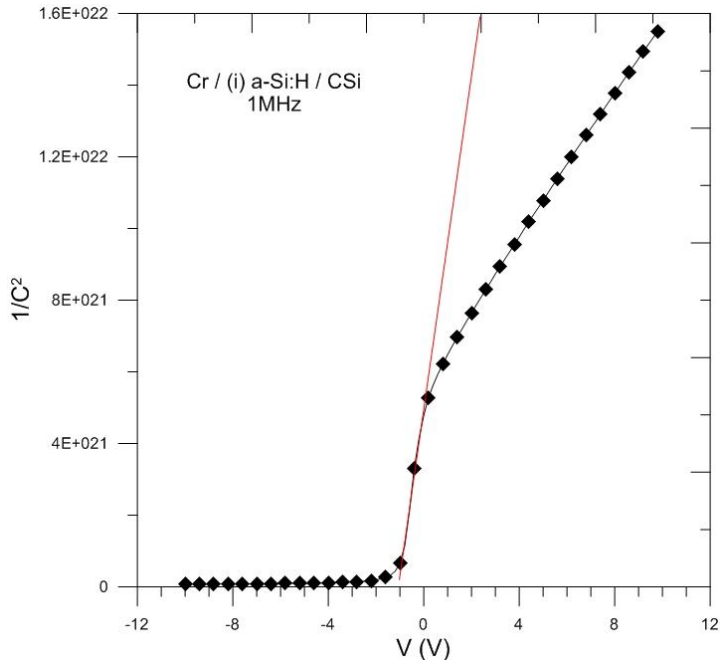
Şekil 5.67 Cr/(i)a-Si:H/n100 C-V grafiği



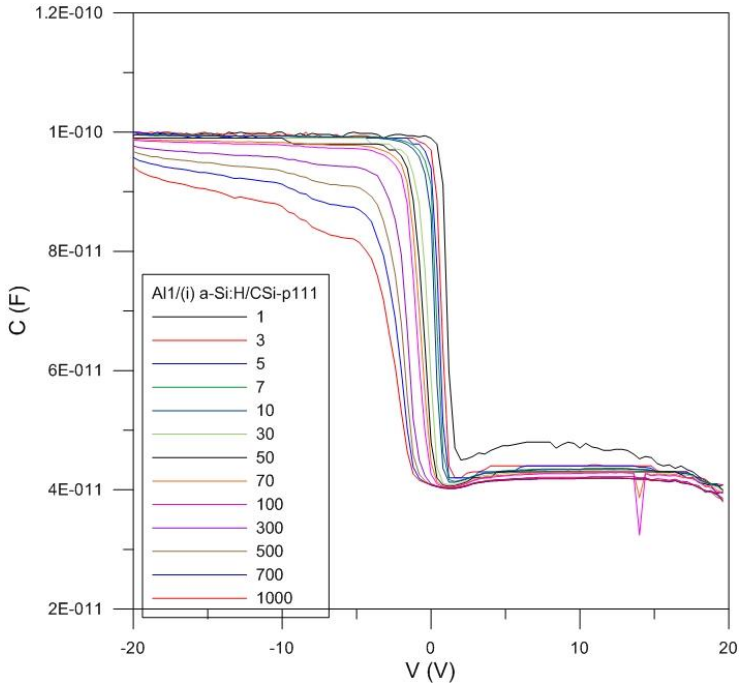
Şekil 5.68 Cr/(i)a-Si:H/n100 $1/C^2$-V grafiği



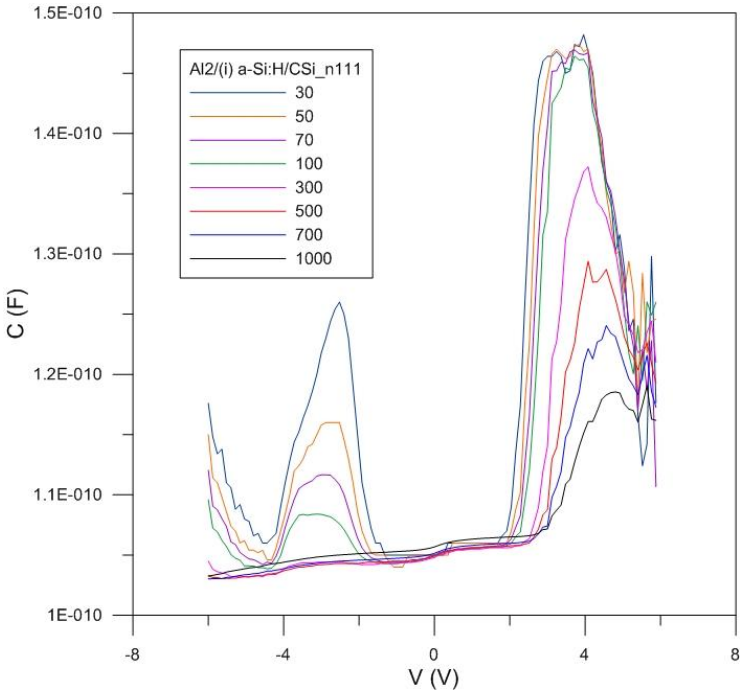
Şekil 5.69 Cr/ (i) a-Si:H /p100 C-V grafiği



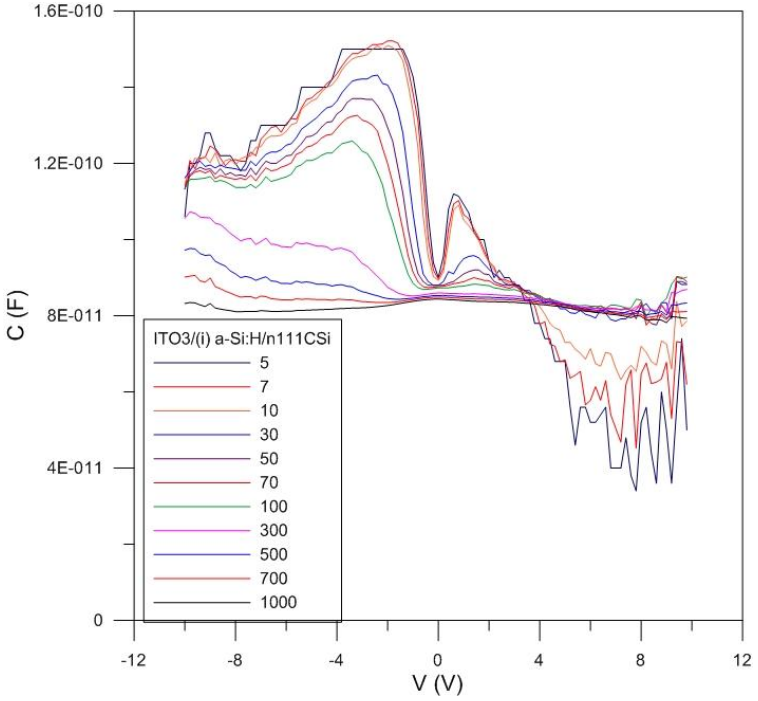
Şekil 5.70 Cr/ (i) a-Si:H /p100 $1/C^2$-V grafiği



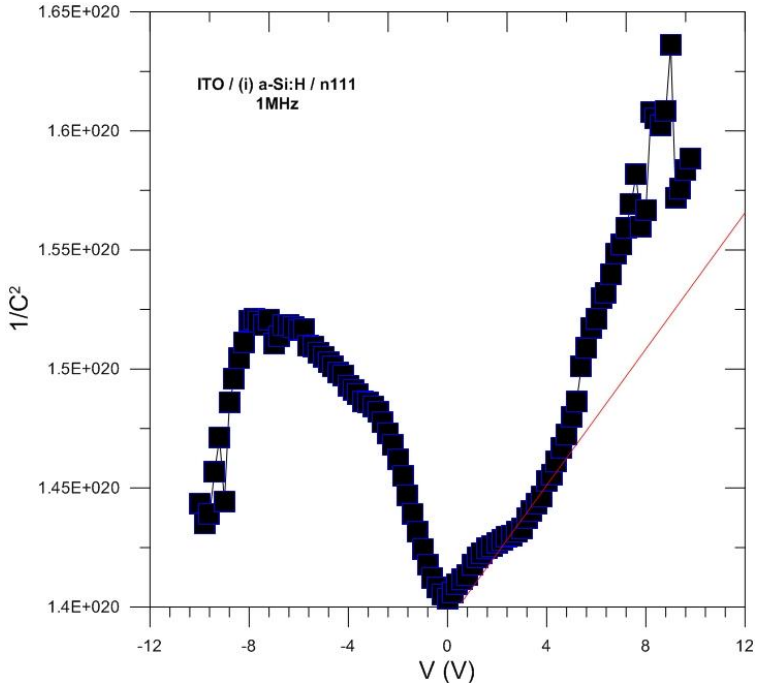
Şekil 5.71 Al / (i)a-Si:H /p111 C-V grafiği



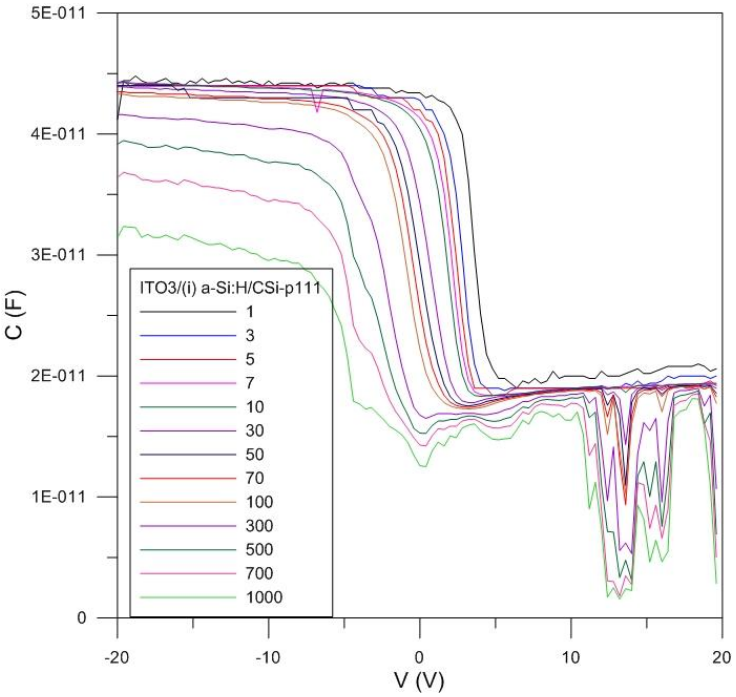
Şekil 5.72 Al/ (i) a-Si:H /n111 C-V grafiği



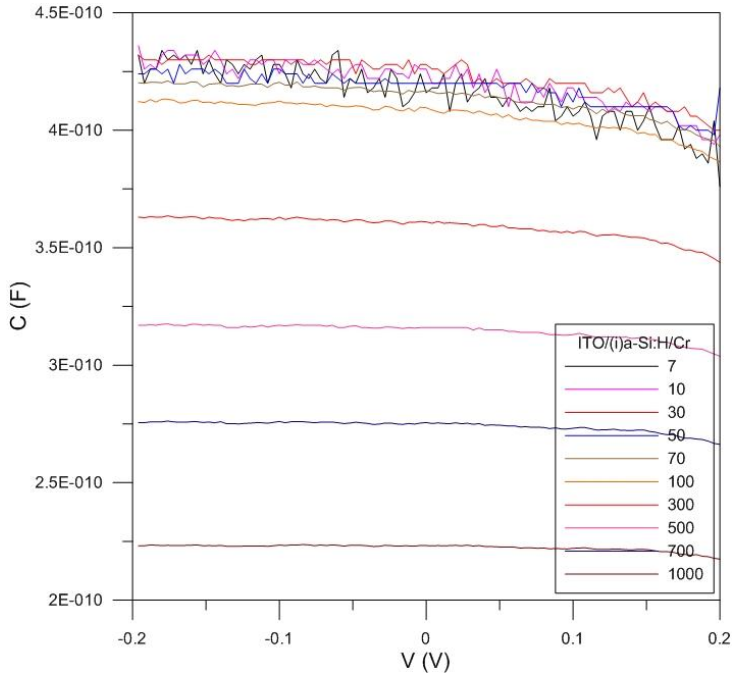
Şekil 5.73 ITO/ (i) a-Si:H/ n111 C-V grafiği



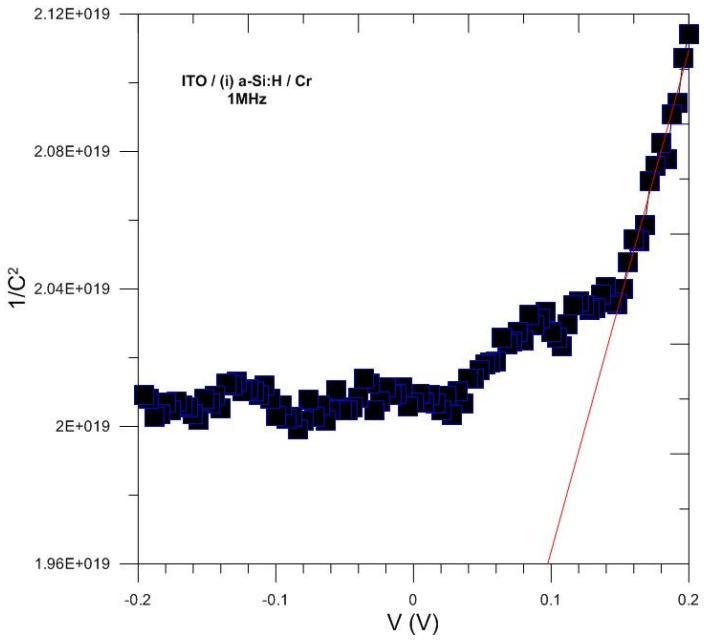
Şekil 5.74 ITO/ (i) a-Si:H / n111 $1/C^2$-V grafiği



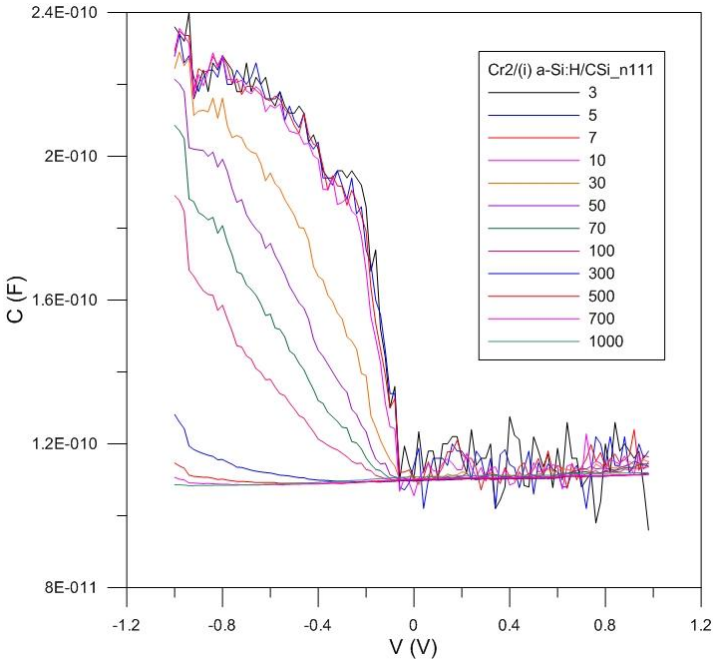
Şekil 5.75 ITO / (i) a-Si:H / p111 C-V grafiği



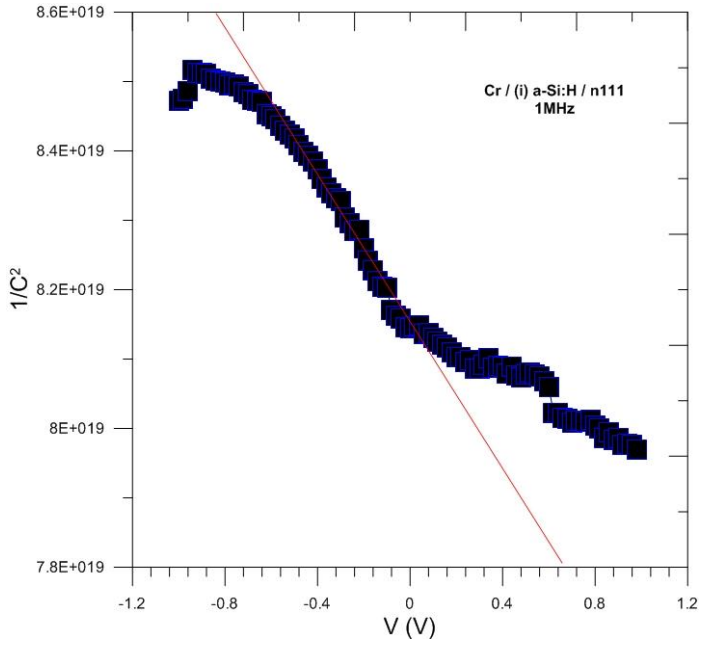
Şekil 5.76 ITO / (i) a-Si:H / Cr C-V grafiği



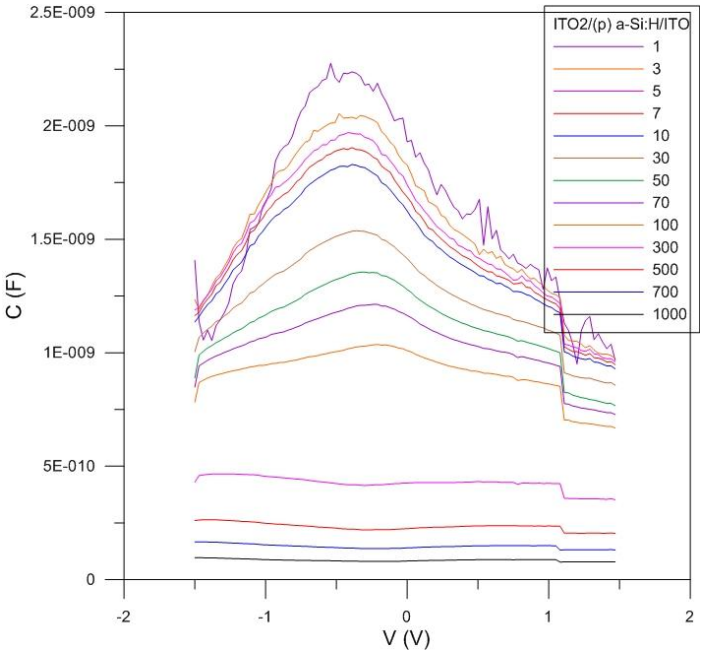
Şekil 5.77 ITO / (i) a-Si:H / Cr $1/C^2$-V grafiği



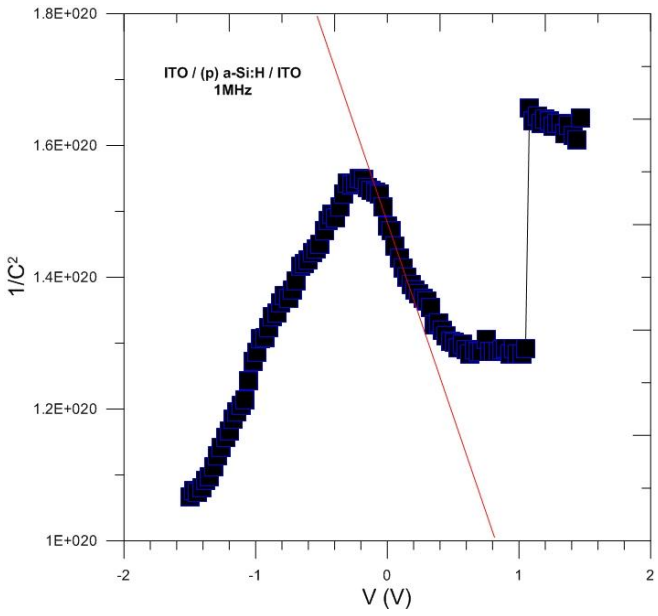
Şekil 5.78 Cr / (i) a-Si:H / n111 C -V grafiği



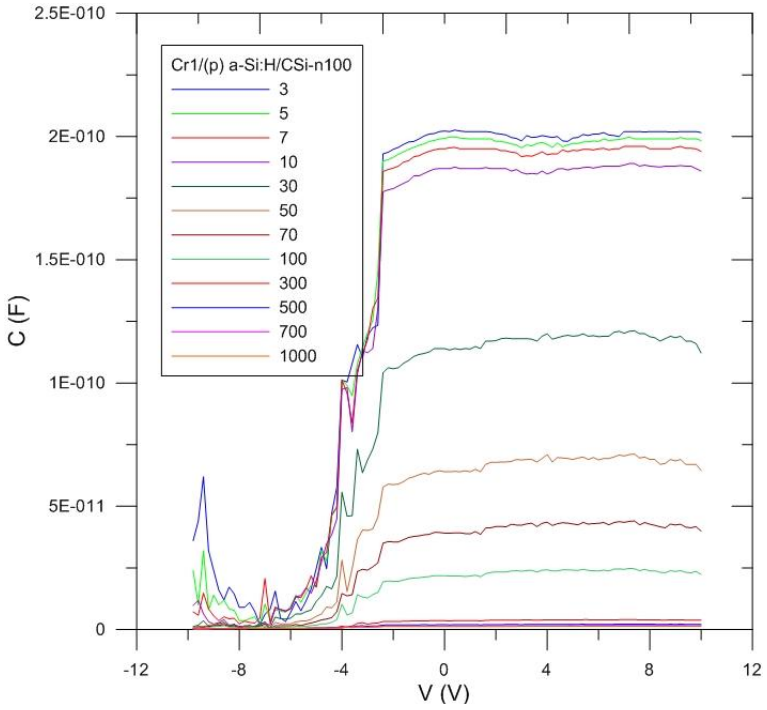
Şekil 5.79 Cr / (i) a-Si:H / n111 $1/C^2$ -V grafiği



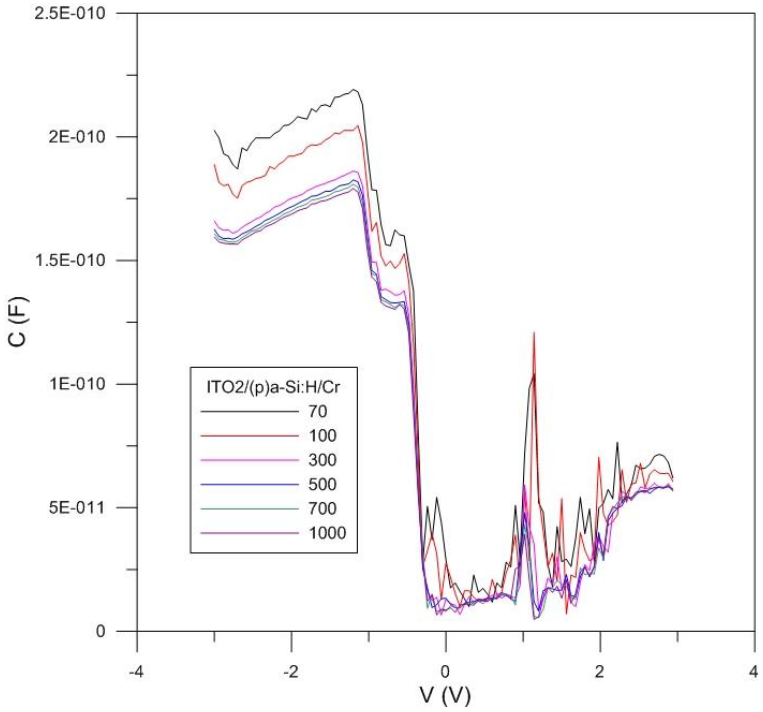
Şekil 5.80 ITO / (p) a-Si:H / ITO C-V grafiği



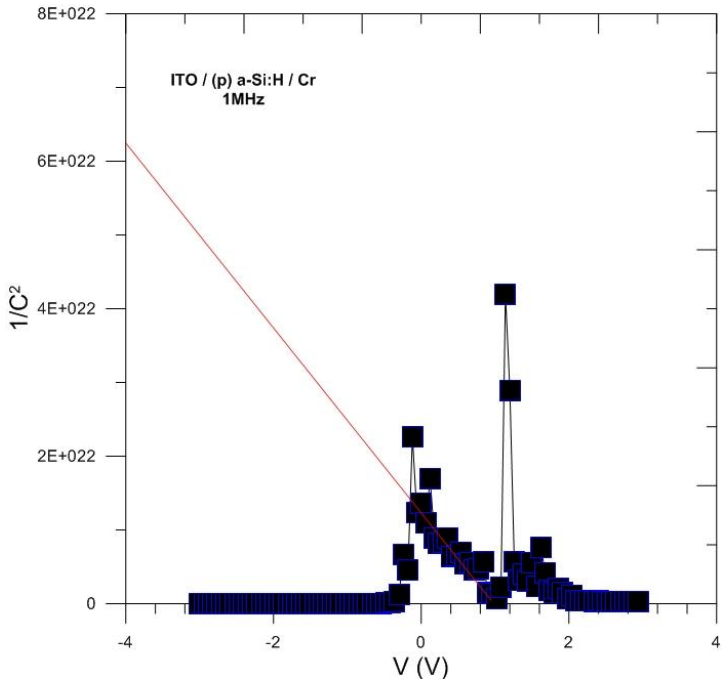
Şekil 5.81 ITO / (p)a-Si:H / ITO $1/C^2$-V grafiği



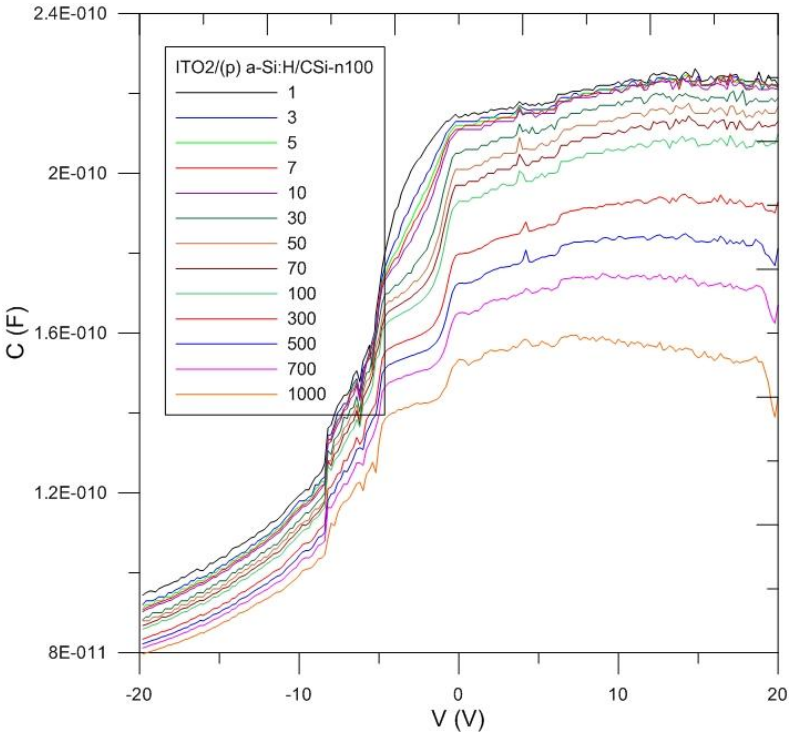
Şekil 5.82 Cr / (p) a-Si:H / n100 C-V grafiği



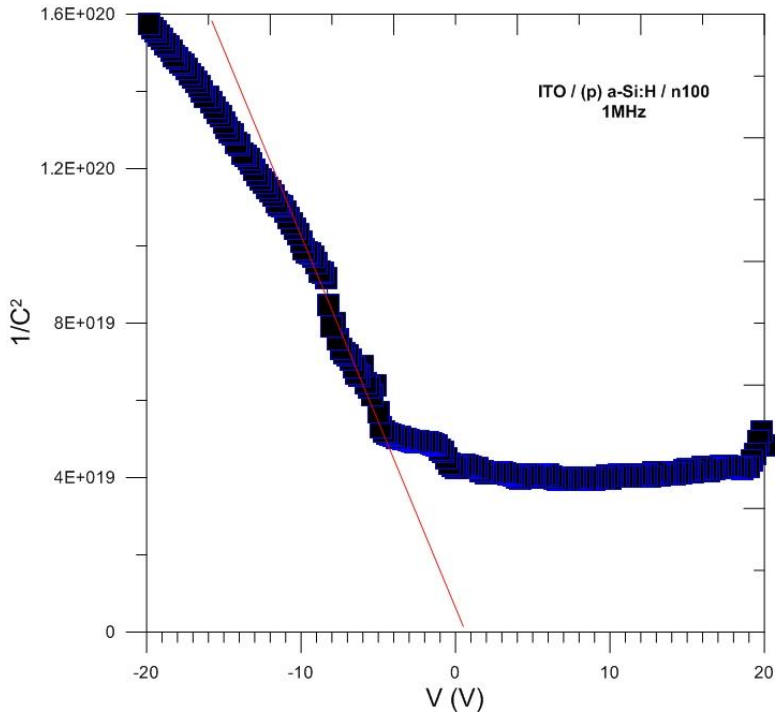
Şekil 5.83 ITO / (p) a-Si:H / Cr C-V grafiği



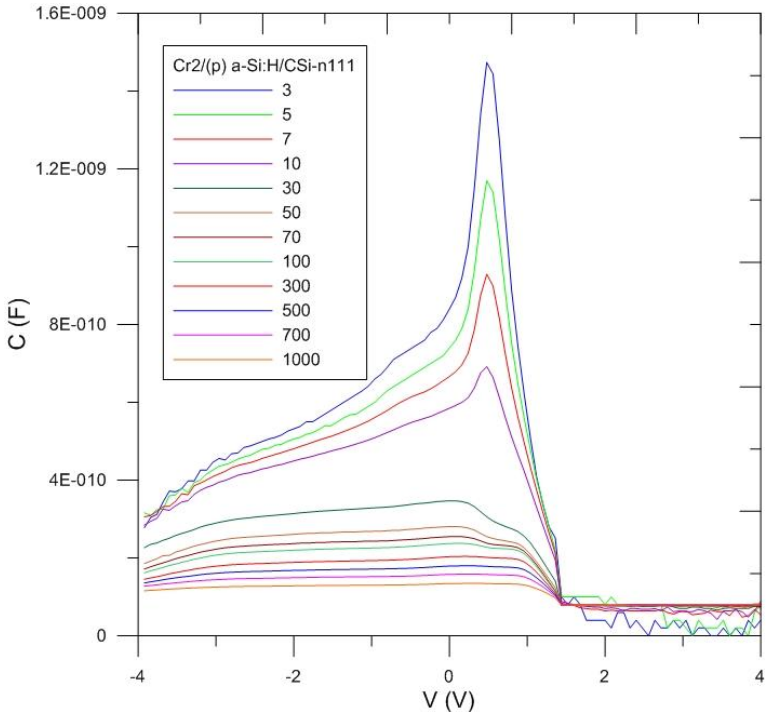
Şekil 5.84 ITO / (p)a-Si:H / Cr $1/C^2$-V grafiği



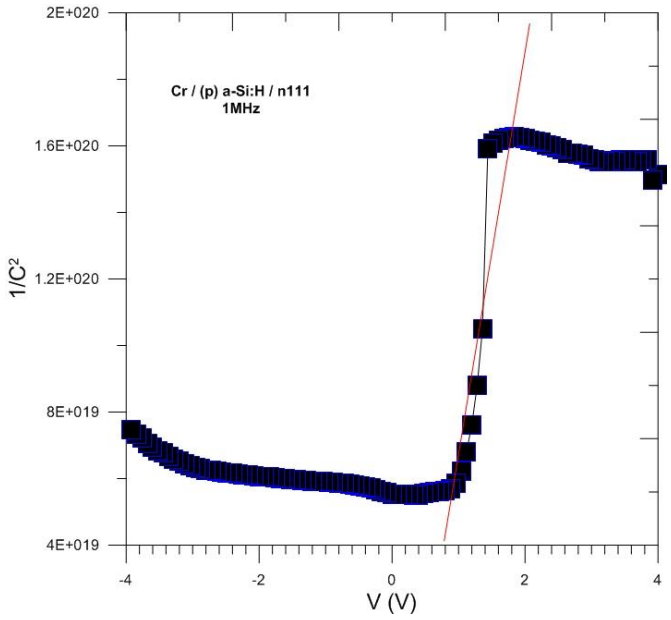
Şekil 5.85 ITO / (p) a-Si:H / n100 C-V grafiği



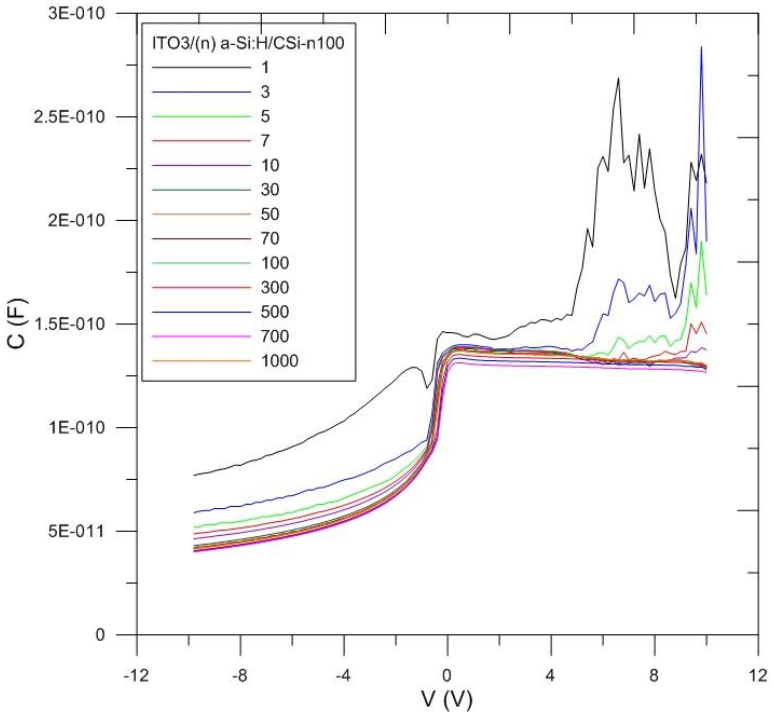
Şekil 5.86 ITO / (p) a-Si:H / n100 $1/C^2$-V grafiği



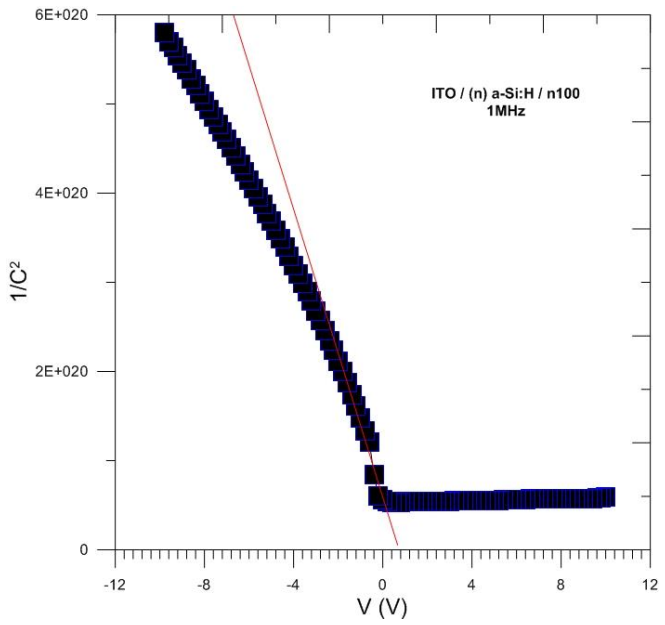
Şekil 5.87 Cr / (p) a-Si:H / n111 C-V grafiği



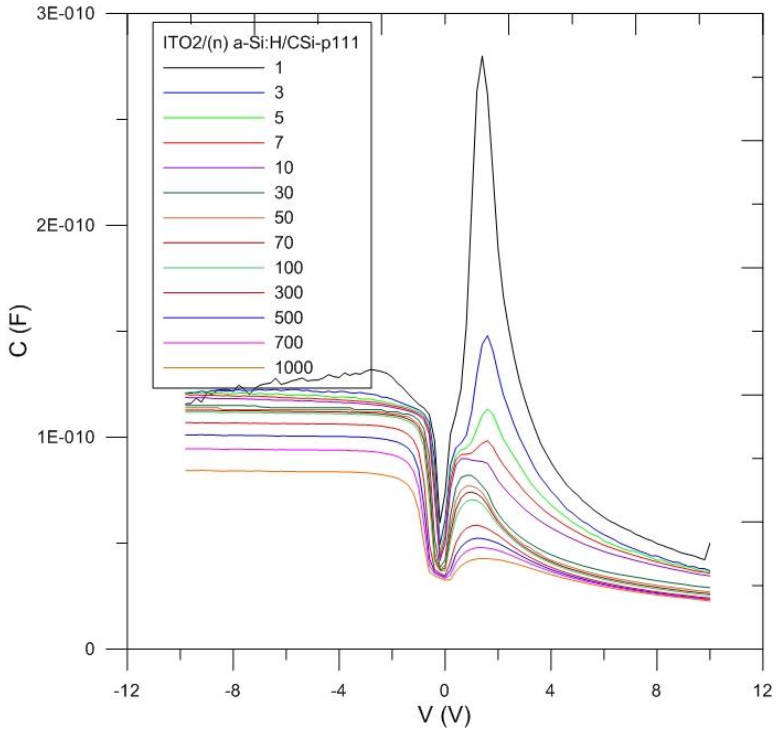
Şekil 5.88 Cr / (p) a-Si:H / n111 $1/C^2$-V grafiği



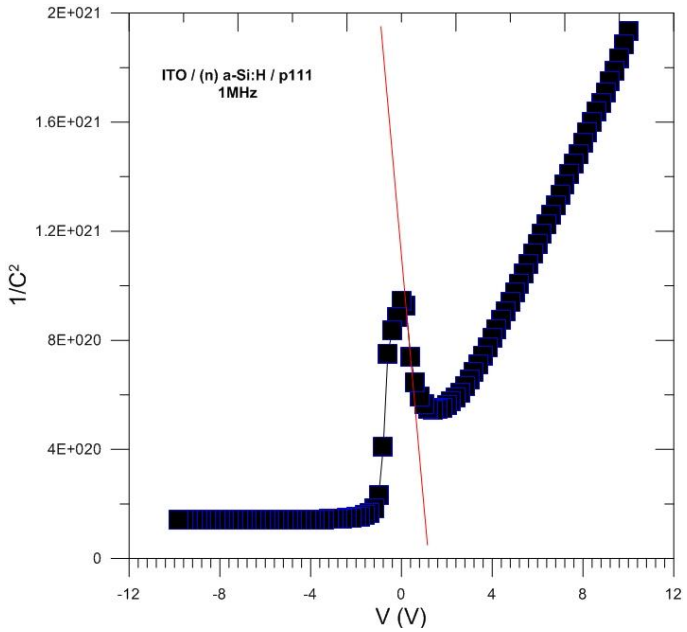
Şekil 5.89 ITO / (n) a-Si:H / n100 C-V grafiği



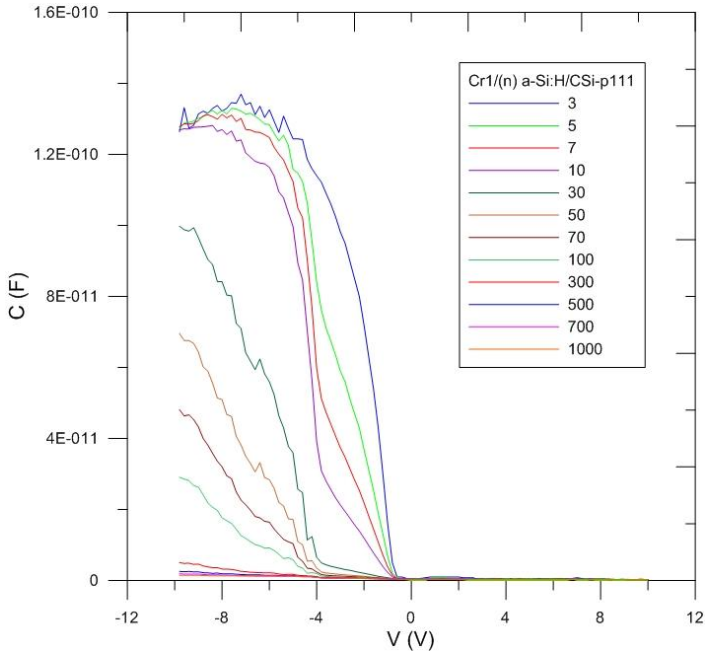
Şekil 5.90 ITO / (n)a-Si:H / n100 $1/C^2$-V grafiği



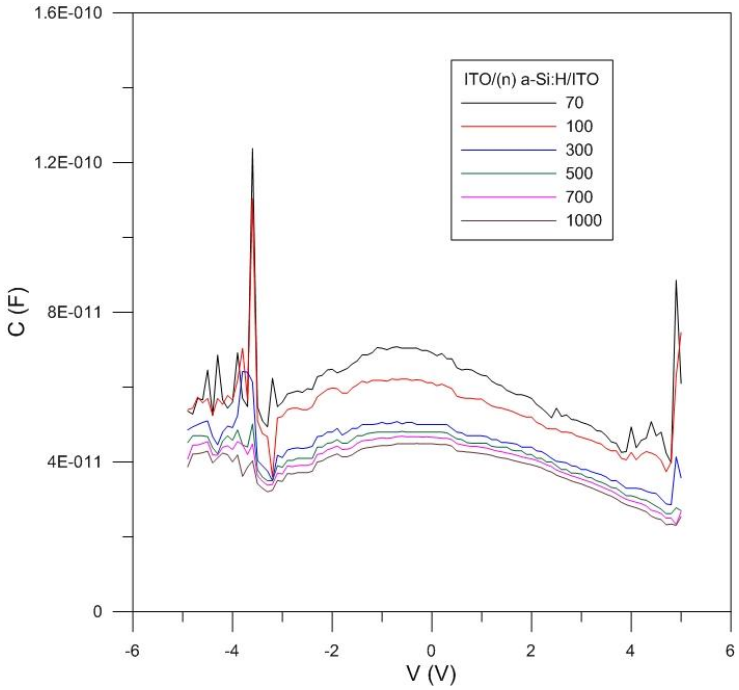
Şekil 5.91 ITO / (n) a-Si:H / p111C-V grafiği



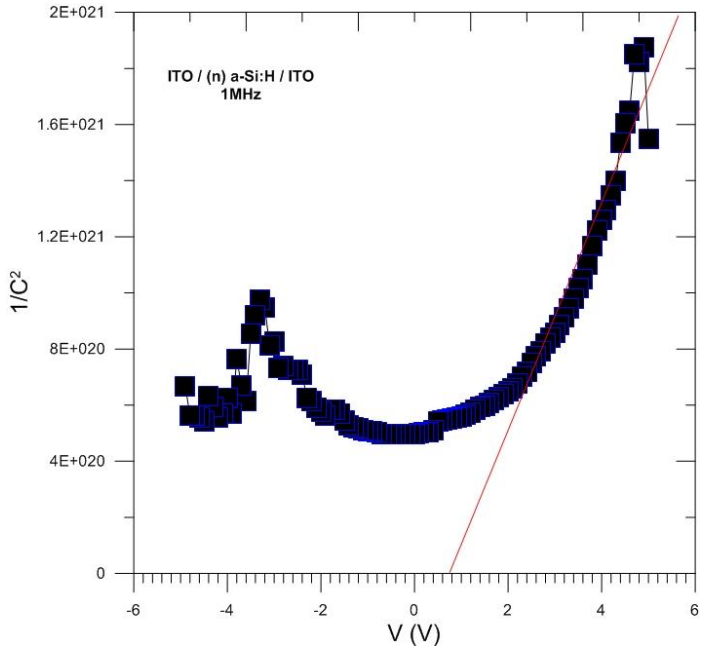
Şekil 5.92 ITO / (n)a-Si:H / p111 $1/C^2$-V grafiği



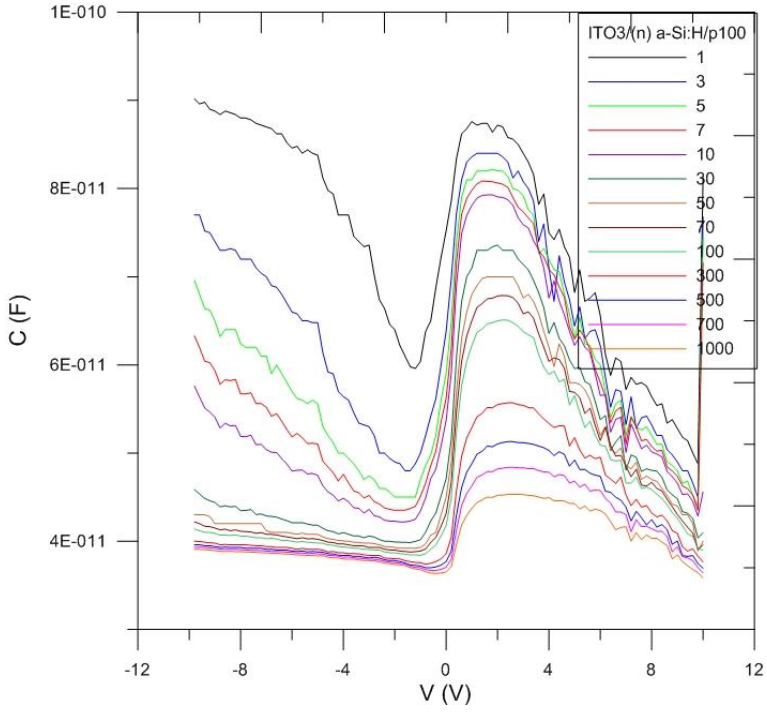
Şekil 5.93 Cr / (n) a-Si:H / p111 C-V grafiği



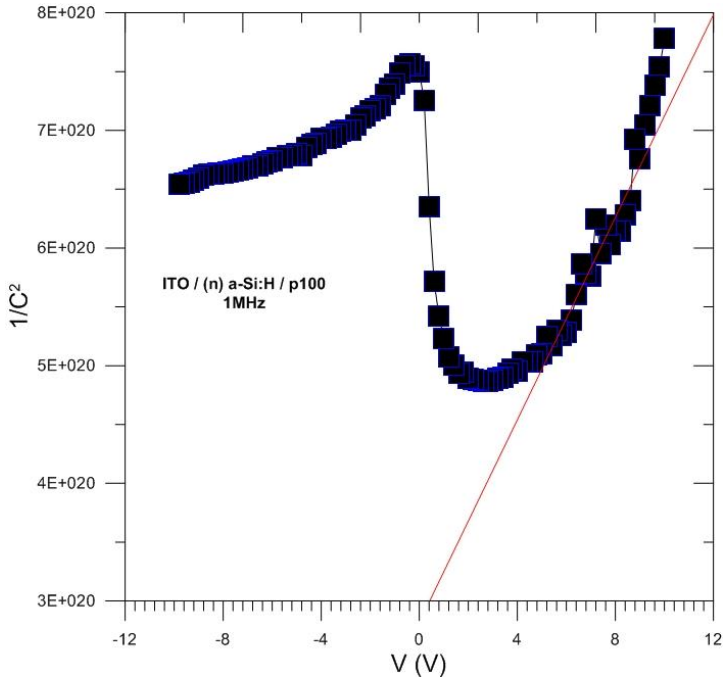
Şekil 5.94 ITO / (n) a-Si:H / ITO C-V grafiği



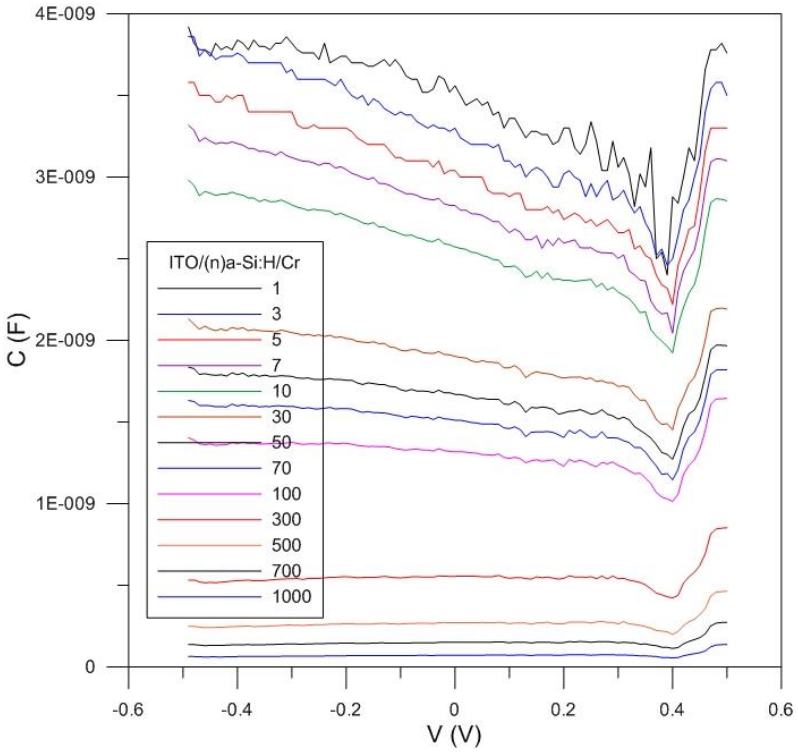
Şekil 5.95 ITO / (n)a-Si:H / ITO $1/C^2$-V grafiği



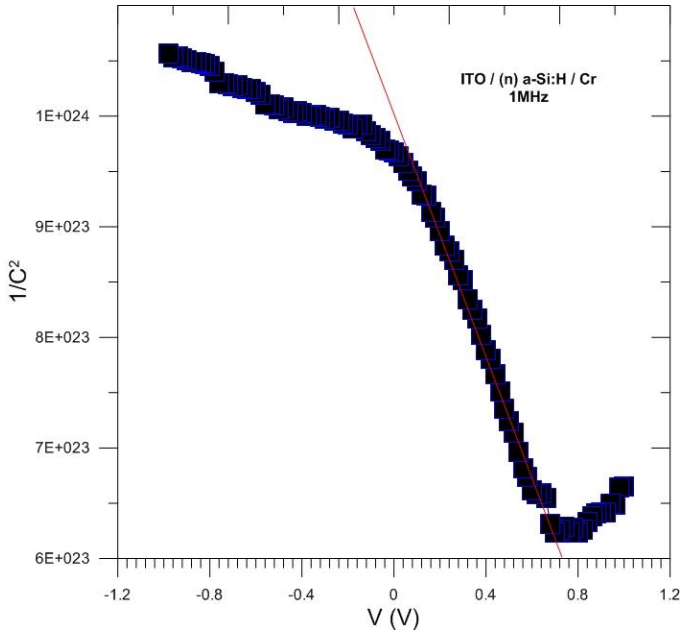
Şekil 5.96 ITO / (n) a-Si:H / p100 C-V grafiği



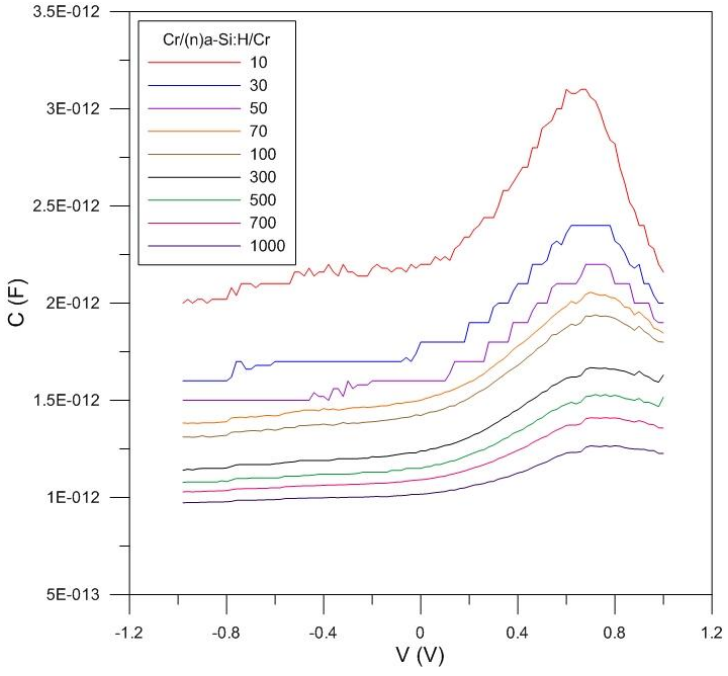
Şekil 5.97 ITO / (n) a-Si:H / p100 $1/C^2$-V grafiği



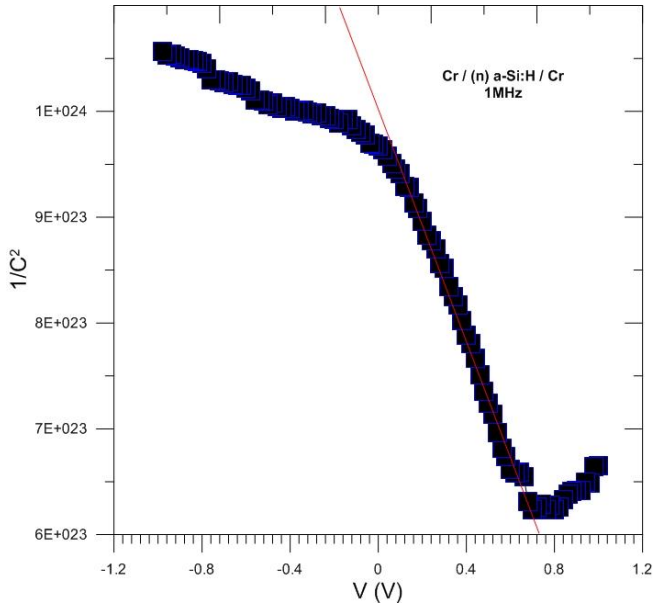
Şekil 5.98 ITO / (n) a-Si:H / Cr C-V grafiği



Şekil 5.99 ITO / (n) a-Si:H / Cr $1/C^2$-V grafiği



Şekil 5.100 Cr / (n) a-Si:H / Cr C-V grafiği



Şekil 5.101 Cr / (n) a-Si:H / Cr $1/C^2$-V grafiği

ÖRNEK	V_{bi}	$d(C^{-2})/dV$	Φ_B
Al/ (i)a-Si:H / p100	0,65	$2,38x10^{19}$	0,86
Cr/ (i)a-Si:H /n100	0,85	$4,80x10^{24}$	0,46
ITO/ (i)a-Si:H /n111	0,45	$1,30x10^{19}$	0,48
ITO/ (i)a-Si:H /Cr	0,10	$2,12x10^{20}$	0,45
Cr/ (i)a-Si:H /n111	0,65	$6,32x10^{19}$	0,76
ITO/ (p)a-Si:H /ITO	0,80	$1,95x10^{20}$	0,88
ITO/ (p)a-Si:H /Cr	0,90	$1,25x10^{22}$	0,65
ITO/ (p)a-Si:H /n100	0,89	$1,01x10^{19}$	0,57
Cr/ (p)a-Si:H /n111	0,80	$1,25x10^{20}$	0,64
ITO/ (n)a-Si:H /n100	0,80	$9,37x10^{19}$	0,7
ITO/ (n)a-Si:H /p111	0,90	$2,20x10^{21}$	0,77
ITO/ (n)a-Si:H /ITO	0,75	$3,85x10^{20}$	0,46
ITO/ (n)a-Si:H /p100	0,40	$6,90x10^{19}$	0,68
ITO/ (n)a-Si:H /Cr	0,78	$2\ x10^{24}$	0,76
Cr/ (n)a-Si:H /Cr	0,76	$1,42x10^{24}$	0,45

Çizelge 5.42 Eğim, bariyer yüksekliği ve oluşum potansiyeli tablosu.

KAYNAKLAR

[1] Street, R.A., (2005). "Hydrogenated Amorphous Silicon", second edition, Cambridge University Press, Cambridge.

[2] R.C. Chhtick, J.H. Alexander, H.F. Sterling, (1969). J. Electrochem. Soc, (USA).

[3] W.E. Spear ve P.G. Le Comber, (1975). Solid State Commun., (USA).

[4] J. Kakalios ve W. Jackson, (1988). in Amorphous Silicon and Related Materials Ed. H. Fritzche, World Scientific Publishing Company.

[5] J.I. Pankove (Ed.), (1984). Semicond. Semimet, (USA).

[6] W. Luft ve Y.S. Tsuo. Hydrogenated Amorphous Silicon Deposition Processes Ed. A.M.

[7] Hermann, (1993). Marcel Dekker Inc., New York.

[8] P. Hess, (1992). J. Vac. Sd. Technol. B, (USA).

[9] J. Perrin. in Plasma Deposition of Amorphous Silicon Based Materials Eds G. Bruno, P.

[10] Capezzuto ve A. Madan, (1995). Academic Press.

[11] H. Keppner, U. Kroll ve J. Meier, A. Shah. in Hydrogenated Amorphous Silicon Ed. H.N.

[12] Aeschbacher, (1995). Solid State Phenomena, Scitec Publications.

[13] P. Roca i Cabarrocas, (1993). J. Non-Cryst. Solids (Netherlands).

[14] J. Perrin, P. Roca i Cabarrocas, B. Allain ve J.M. Friedt, (1988). Jpn. J. Appl. Phys. (Japan).

[15] A. Madam ve SR. Ovshinsky, E. Benn, (1979). Philos. Mag. B (UK).

[16] I.S. Osbome, N. Hata ve A. Matsuda, (1995). Appl. Phys. Lett. (USA).

[17] A. Matsuda, K. Yagii, T. Kaga ve K. Tanaka, (1984). Jpn. J. Appl. Phys (Japan).

[18] JPM. Schmitt, (1983). J. Non-Cryst. Solids (Netherlands).

[19] R. Robertson ve A. Gallagher, (1986). J. Appl. Phys. (USA).

[20] J. Perrin, (1991). J. Non-Cryst. Solids (Netherlands).

[21] S. Veprek ve M. Heintze, (1990). Plasma Chem. Plasma Process (USA).

[22] J. Kanicki, Amorphous and Microcrysttaline Semiconductor Devices, (1992). Materials and Device Physics, Artech House ve referanslar.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Gizem ÇELİKOK

Doğum Tarihi ve Yeri : 1984 - İzmit

Yabancı Dili : İngilizce, Almanca

E-posta : gcelikok@gmail.com

ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Alan	Okul/Üniversite	Mezuniyet Yılı
Lisans	Fizik	Yıldız Teknik Üniversitesi	2008
Lise	Fen Bilimleri	Gölcük İhsaniye Anadolu Lisesi	2003

İŞ TECRÜBESİ

Yıl	Firma/Kurum	Görevi
2011	Acar Patent Kalite Ltd. Şti.	Patent Uzmanı
2010	Fen Bilimleri Dershanesi	Fen bilgisi öğretmeni
2009	Yıldız Teknik Üniversitesi	Öğrenci asistanlığı
2005	Brisa A.Ş	Stajyer

YAYINLARI

Bildirim

1. Seçkin GÜNAY, Gizem ÇELİKOK, İsmet Can KOLTUK **"**Computer simulation of life at low reynolds number" TFD Uluslararası fizik kongresi, Malatya, 2007

2. Seçkin GÜNAY, Gizem ÇELİKOK, İsmet Can KOLTUK **"**Computer simulation of life at low reynolds number" 5th International Student Conference of the Balkan Physical Union (ISCBPU-5), Bodrum, 2007

3. Seçkin GÜNAY, Gizem ÇELİKOK, İsmet Can KOLTUK **"**Computer simulation of life at low reynolds number" BPU 1. Uluslarası Fizik Sempozyumu ve Festivali & Üniversiteler arası Fizik Proje Yarışması, Bodrum, 2007

4. Uğur Deneb MENDA, Gizem ÇELİKOK, Orhan ÖZDEMİR, "Investigation of a-Si:H/c-Si Interface for HIT Solar Cell ", SolarTR1, ODTÜ-ANKARA/TÜRKİYE, 51, 2010.

5. U.Deneb MENDA, Gizem ÇELİKOK, Okan YILMAZ, Alp Osman KODOLBAŞ, Orhan ÖZDEMİR,Kubilay KUTLU, "Characterizaton of Doped Amorphous and Crystalline Silicon Interface for HIT Solar Cell", SuNEC- Sun New Energy Conference, Sicilya-İtalya, -, 2011.