

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

128705

CAM İÇİNDE CdTe KUANTUM NOKTALARININ
BÜYÜME KİNETİĞİ

Fizikçi Çağdaş ALLAHVERDİ

F.B.E Fizik Anabilim Dalında Hazırlanan

YÜKSEK LİSANS TEZİ

T.C. YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
DOKÜMANTASYON MERKEZİ

Hikmet Yükselici

Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Hikmet YÜKSELİCİ (YTÜ)

128705

Üye

Prof. Dr. Emel GINCI

[Signature]

Üye

Doç. Dr. Hilmi Ünlü

[Signature]

İSTANBUL, 2002

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ	iv
KISALTMA LİSTESİ.....	v
ŞEKİL LİSTESİ.....	vi
ÇİZELGE LİSTESİ.....	vii
ÖNSÖZ.....	viii
ÖZET.....	ix
ABSTRACT.....	x
1. GİRİŞ	1
2. KURAMSAL ALT YAPI	5
2.1 Bir Kuantum Noktasının Enerji Düzeylerinin Bulunması	5
2.2 Yayınım	8
2.3 Işığın Soğurulması ve Mie Saçılma Kuramı	12
3. DENEY DÜZENEGİ	14
3.1 Deney Düzenegini Oluşturan Elemanlar	14
3.1.1 Monokromatör	15
3.1.2 Işık Kaynağı	19
3.1.3 Silikon Fotodedektör	19
3.1.4 İnce Mercekler	21
3.1.5 Monokromatöre Gelen Işık Gücünün Hesaplanması	23
4. NUMUNELERİN HAZIRLANMASI	24
5. OPTİK SOĞURMA SPEKTRUMLARI	26
5.1 Optik Soğurma Spektrumlarının Değerlendirilmesi	36
5.1.1 Şekil 5.1 ve Şekil 5.2'nin Değerlendirilmesi	36
5.1.2 Şekil 5.3 ve Şekil 5.4'ün Değerlendirilmesi	36
5.1.3 Şekil 5.5 ve Şekil 5.6'nın Değerlendirilmesi	37
5.1.4 Şekil 5.7 ve Şekil 5.8'in Değerlendirilmesi	38
5.1.5 Şekil 5.9 ve Şekil 5.10'un Değerlendirilmesi	39
6. EKSİTON ENERJİ DÜZEYLERİNİN DENEYSEL OLARAK BELİRLENMESİ.....	40
7. MALZEMENİN AKTİVASYON ENERJİSİNİN HESABI	43

8. SONUÇLAR ve ÖNERİLER..... 45

KAYNAKLAR 46

ÖZGEÇMİŞ 47



SİMGE LİSTESİ

C	Konsantrasyon
D	Yayınım katsayısı
E_g	Yasak Enerji aralığı
f	Odak uzaklığı
$F/\#$	F sayısı
$\hbar$	Haşbar
H	Hamiltoniyen operatörü
I	Işık şiddeti
j_ℓ	Küresel Bessel fonksiyonu
J	Yayınım akısı
k	Dalga sayısı
m_e^*	İndirgenmiş elektronun kütlesi
m_h^*	İndirgenmiş deliğin kütlesi
Q_d	Aktivasyon enerjisi
$\Re$	Evrensel gaz sabiti
α	Soğurma katsayısı
X	Küresel Bessel fonksiyonunun kökü
χ	Duyarlılık
λ	Işığın dalgaboyu
Ψ	Dalga fonksiyonu
$\vec{\nabla}$	Nabla operatörü

KISALTMA LİSTESİ

DTA	Differential Thermal Analysis
MATLAB	Matrix Laboratory
NEP	Noise Equivalent Power
TEM	Trasmission Elektron Microscopy
XRF	X Ray Diffraction



ŞEKİL LİSTESİ

	Sayfa
Şekil 1.1	Kuantum noktalarının cam malzeme içerisinde oluşumu 1
Şekil 1.2	Yarıiletken katkılı bir cam içerisinde kuantum noktalarının yarıçap dağılımı 4
Şekil 2.1	CdTe-cam potansiyel kuyusu..... 5
Şekil 2.2	Atomların yayılım mekanizmaları 8
Şekil 2.3	Küresel bir β parçacığının etrafındaki yayılım alanı 11
Şekil 2.4	Işığın soğurulması..... 13
Şekil 3.1	Deney düzeneğinin şematik gösterimi 14
Şekil 3.2	Deney düzeneğinde kullanılan monokromatörün iç yapısı..... 15
Şekil 3.3	Yansıtmalı bir kırınım ağına monokromatik ışığın gelmesi ve yansıması..... 15
Şekil 3.4	Silikon fotodiyotun yapısı..... 20
Şekil 3.5	Silikon fotodedektörün spektral yanıtı..... 20
Şekil 3.6	Deney düzeneğinde kullanılan silikon fotodiyotun açık modda açık devre işletimi..... 21
Şekil 3.7	Işık kaynağının r yarıçaplı ince mercek yüzeyini gördüğü $d\Omega$ katı açısı..... 23
Şekil 5.1	575 °C'de ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin enerji- α^2 soğurma spektrumu..... 26
Şekil 5.2	575 °C'de ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin enerji- α soğurma spektrumu 27
Şekil 5.3	600 °C'de ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin enerji- α^2 soğurma spektrumu..... 28
Şekil 5.4	600 °C'de ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin enerji- α soğurma spektrumu 29
Şekil 5.5	625 °C'de ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin enerji- α^2 soğurma spektrumu..... 30
Şekil 5.6	625 °C'de ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin enerji- α soğurma spektrumu 31
Şekil 5.7	650 °C'de ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin enerji- α^2 soğurma spektrumu..... 32
Şekil 5.8	650 °C'de ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin enerji- α soğurma spektrumu 33
Şekil 5.9	675 °C'de ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin enerji- α^2 soğurma spektrumu 34
Şekil 5.10	675 °C'de ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin enerji- α soğurma spektrumu 35
Şekil 6.1	Yarıçapın zamanın karekökü ile değişimi 42
Şekil 7.1	$\ln[A_{1,0} / (E_{1,0} - E_g) - R_0^2] - 1000 / T$ grafiği..... 44

ÇİZELGE LİSTESİ

	Sayfa
Çizelge 2.1	Bessel fonksiyonunun ilk beş kökü..... 8
Çizelge 3.1	Deney düzeneğinde kullanılan monokromatörün modeli ve temel özellikleri 19
Çizelge 3.2	Deney düzeneğinde kullanılan dedektörün modeli ve temel özellikleri..... 21
Çizelge 6.1	Türev programı ile bulunmuş olan birinci eksiton enerji düzeyleri..... 41
Çizelge 6.2	Modelleme ile bulunmuş olan ortalama parçacık yarıçapları 41
Çizelge 8.1	CdTe kuantum noktalarının kısa zaman büyüme kinetiği sonuçları..... 45



ÖNSÖZ

Büyüklüğü nanometre mertebesinde olan yarıiletken parçacıkların (kuantum noktaları) elektronik, optik, kristal titreşim ve termodinamik özelliklerinin incelenmesi son yıllarda önemli bir araştırma konusu olmuştur. Kuantum noktalarının doğrusal olmayan özelliklerinin büyük olması bu malzemelerin yakın bir gelecekte doğrusal olmayan optik devre elemanı olarak kullanılmasını gündeme getirmiştir. Bu yapıların cam içinde aşırı doymuş katı çözültiden hazırlanması uzun yıllar araştırmacıların kullandığı yollardan biridir. Ancak kuantum noktalarının yarıçapları ortalama bir değer etrafında bir dağılım göstermektedir. Teknolojik uygulamalar bu dağılımın azaltılmasına bağlıdır. Bu nedenle, cam içinde kuantum noktalarının hazırlanmasında ortalama parçacık yarıçapını ve yarıçap dağılımını kontrol eden büyüklüklerin diğer büyüklüklere (ısıtım işlem sıcaklığı, ısıtım işlem süresi, kullanılan yarıiletkenin cinsi, camın bileşenleri vb.) bağlı olarak nasıl değiştiğinin belirlenmesi çok önemlidir.

Bu tezde, cam içinde CdTe (Kadmiyum tellür) kuantum noktalarının ortalama yarıçapının ısıtım işlem süresi ve ısıtım işlem sıcaklığına bağlı olarak nasıl değiştiği araştırılmıştır. Kuantum noktaları ile ilgili temel kavramlar verildikten sonra, CdTe kuantum noktalarının önemli bir büyüme kinetiği parametresi olan aktivasyon enerjisi hesaplanmıştır. Aktivasyon enerjisinin hesaplanmasında Mie saçılma kuramı, kuvvetli hapis durumunda küresel kuyu içindeki eksiton için Schrödinger denkleminin çözümü ve Arrhenius bağıntısından faydalanılmıştır. Cam içerisinde CdTe kuantum noktalarının büyüme kinetiği üzerine yapılan araştırmalar henüz çok yeni olup, yapılan araştırmanın bu konu ile ilgili yapılacak araştırmalara ışık tutacağına inanıyorum.

Bu çalışmanın yapılmasında, 20-01-01-01 numaralı proje kapsamında maddi desteği sağlayan Yıldız Teknik Üniversitesi Araştırma Fonuna, malzemeleri kesen TÜBİTAK-UME'de Ali EROĞLU'na, malzemelere X ışınları analizi uygulayan TÜBİTAK-MAM'da Dr. Esin GÜNAY'a, malzemelerin parlatılmasında ve eritilmesinde yardımcı olan Yıldız Teknik Üniversitesi Kimya Metalurji Bölümü'nde teknisyen Şevki ŞAHİN'e, malzemelere ısıtım işlem uygulanmasında yardımcı olan TÜBİTAK-UME Süperiletkenlik ve Manyetizma Laboratuvarı'nda Uğur TOPAL'a, çalışmamda bana yardımcı olan Doç. Dr. Çetin TAŞSEVEN, Arş. Gör. Ünsal ÇİMEN ve diğer Yıldız Teknik Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü öğretim görevlilerine, İTÜ'de Yrd. Doç. Dr. Levent Ovacık'a, Ali Veysel Tunç'a, çalışmalarında benden manevi desteğini esirgemeyen aileme, tezimi hazırlamamda bana her türlü yardımı gösteren, çalışmalarında beni yönlendiren ve yol gösteren Sayın Hocam Yrd. Doç. Dr. Hikmet YÜKSELİCİ'ye teşekkürü bir borç bilirim.

ÖZET

İçerisinde az miktarda CdTe yarıiletken katkı bulunan cam, elmas testere ile 10x10x1.5 mm boyutlarında numunelere kesilmiş ve her bir numune 1000 °C'de ~10 dakika eritilip oda sıcaklığına hızlı bir şekilde soğutulmuştur. Eritilmiş numunelere 575 °C-675 °C sıcaklıkları arasında değişik sürelerde ısıtım işlemi uygulanarak, numuneler içerisinde nanometre mertebesinde CdTe yarıiletken parçacıkları (kuantum noktaları) elde edilmiştir. Isıtım işleminden sonra, her bir numuneye zımparalama ve parlatma işlemi uygulanmış ve numunelerin kalınlığı ~0.5 mm'ye düşürülmüştür. Numuneler içerisinde elde edilen CdTe kuantum noktalarının, ısıtım işlem sıcaklığı ve süresine bağlı olarak yayılım (difüzyon) yolu ile büyümesi optik yöntemlerle incelenmiştir.

Cam içerisindeki CdTe kuantum noktalarının büyüme kinetiğinin araştırılması için bilgisayar kontrollü optik deney düzeneği kurulmuş ve bu düzenekte numunelerin optik soğurma spektrumları elde edilmiştir. Numunelerin optik soğurma spektrumları incelendiğinde, CdTe kuantum noktalarının cam malzemedeki az sayıda oluştuğu belirlenmiştir. CdTe kuantum noktalarının az sayıda oluşumunun tellürün (Te) okside olmasından ve CdTe kuantum noktalarının eritme işlemi sırasında buharlaşmasından kaynaklandığı sanılmaktadır. Bu nedenle, CdTe kuantum noktalarının cam içinde oksijen kontrollü bir atmosferde oluşturulması ile sayılarının artırılması düşünülebilir.

Optik soğurma spektrumlarından yararlanılarak numunelerin eksiton enerji düzeyleri belirlenmiştir. Eksiton enerji düzeylerinin belirlenmesinde MATLAB 6.0'da hazırlanan sayısal türev alma programı ve Hikmet Yükselici tarafından QBasic'de hazırlanmış model program kullanılmıştır. Model program ile numuneler içerisindeki ortalama kuantum noktası yarıçapları belirlenmiştir. Yarıçapların ısıtım işlem süresiyle değişim grafiği elde edilmiş ve bu grafikten yararlanılarak ısıtım işlem uygulanmadan önce, eritme işlemi ile numuneler içerisinde oluşan ortalama kuantum noktası yarıçapı ~1.6 nm bulunmuştur. Mie saçılma kuramı, kuvvetli hapis durumunda küresel kuyu içerisinde eksiton için Schrödinger denkleminin çözümü ve Arrhenius eşitliğinden yararlanılarak önemli bir büyüme kinetiği parametresi olan aktivasyon enerjisi, yayılımı sınırlayan bileşen için ~170 kJ/mol hesaplanmıştır.

ABSTRACT

The glass doped with a little amount of CdTe semiconducting material, was cut with diamond saw at 10×10×1.5 mm dimensions, and each specimen was melted at about 1000 °C for ~10 minutes and quenched quickly to the room temperature. Nanometer size CdTe semiconducting particles (quantum dots) were obtained by applying heat treatment to the quenched specimens between 575 °C and 675 °C for different times. After heat treatment, sandpapering and polishing were applied to each specimen and thicknesses of the specimens were decreased to ~0.5 mm. Depending upon heat treatment temperature and time, CdTe quantum dots obtained in the specimens were investigated by optical methods.

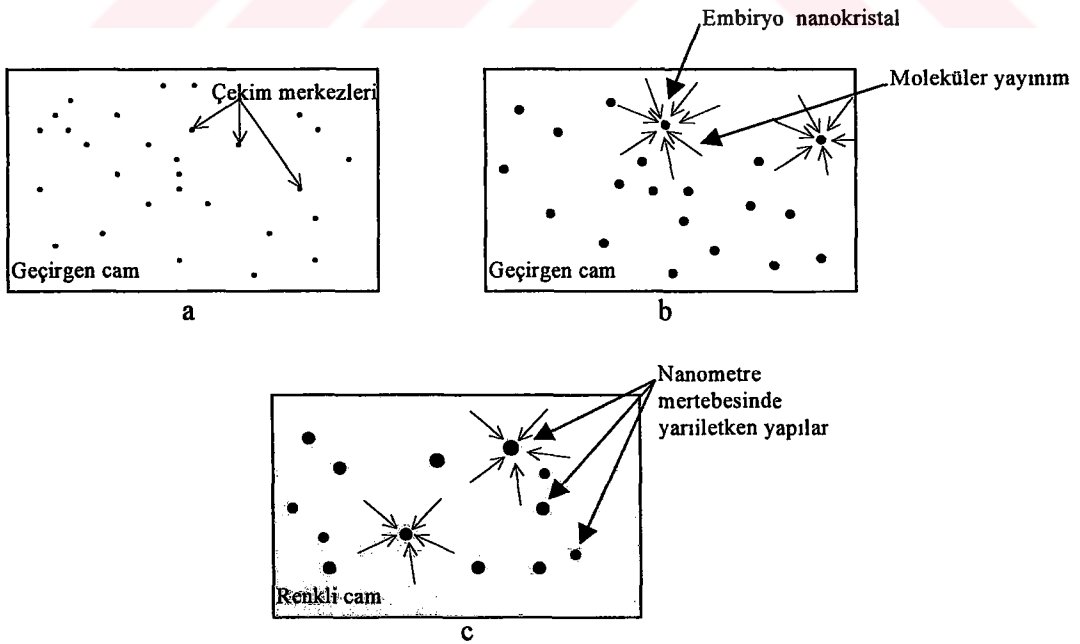
Optical setup controlled by computer was established to investigate the growth kinetics of CdTe quantum dots in the glass and the number of optical absorption spectra were obtained. When the absorption spectra were studied, CdTe quantum dots in the glass was very low. It is assumed that low number of particles is arising from Te's oxidation and evaporation of CdTe quantum dots during the melting process. In view of this, the number of particles can be possible if an oxygen controlled atmosphere is present during growth.

Using the optical absorption spectra, specimens' exciton energy levels were determined. For determining specimens' exciton energy levels, numerical derivative program prepared at MATLAB 6.0 and model program prepared at QBasic by Hikmet Yükselici were used. Average radius of quantum dots in the specimens were determined by the model program. Radius versus heat treatment time variation graphic was obtained and using this graphic, average radius of quantum dots in the specimens before applying heat treatment was found to be ~1.6 nm. Using Mie scattering theory, solving of Schrödinger equation in a spherical well for an exciton in the case of strong confinement and Arrhenius equation, activation energy which is an important growth kinetics parameter was calculated to be ~170 kJ/mol for diffusion limited reactant.

1. GİRİŞ

SiO_2 , Na_2O , B_2O_3 gibi temel bileşenlere sahip olan cam, yaklaşık 1400°C 'de eritilirken cam içine az miktarda ($\sim 1\%$) yarıiletken malzeme katılır. Cam, bu yüksek sıcaklığa nazaran oda sıcaklığı gibi düşük bir sıcaklığa hızlı bir şekilde soğutulur. Cama, camın kristalleşme ve geçiş sıcaklıkları arasında ($\sim 550^\circ\text{C} - 750^\circ\text{C}$), farklı sürelerde ısıtım işlem uygulanır. Bu işlemlerden sonra, cam malzemede nanometre mertebesinde yarıiletken yapıların ortaya çıktığı görülür. Bu yapılara kuantum noktaları denebildiği gibi nanoparçacıklar, süper atomlar veya yapma atomlar da denir. Nanometre mertebesinde yarıiletken yapıların oluşturulduğu bu camlara ise yarıiletken katkılı camlar denir (Şekil 1.1).

Yarıiletken katkılı camlar, doğrusal olmayan optik özellikleri nedeniyle yirmi yılı aşkın bir süredir ayrıntılı bir şekilde incelenmektedir. Yarıiletken katkılı camlar üzerinde yapılan incelemelerde, bu malzemelerde üçüncü harmonik üretiminden sorumlu üçüncü mertebeden doğrusal olmayan duyarlılığın $3 \cdot 10^{-24} \text{ m}^2\text{V}^{-2}$ büyüklüğünde olduğu görülmüştür. Yarıiletken katkılı camlarda 10^{-11} sn altında yanıt zamanı elde edilmiştir. Yanıt zamanı, malzemenin malzeme üzerine düşürülen lazer ışığına vermiş olduğu tepkinin (kırılma indisindeki değişme gibi) süresidir. Yanıt zamanının yarıiletken katkılı camlarda düşük olması bu malzemelerin optik açıp-kapamada verimli bir şekilde kullanılabileceğini göstermiştir (Banfi vd., 1998).



Şekil 1.1 Kuantum noktalarının cam malzeme içerisinde oluşumu : a) $\sim 1400^\circ\text{C}$ 'de eritilmiş ve oda sıcaklığına soğutulmuş cam b) $\sim 550^\circ\text{C} - 750^\circ\text{C}$ 'de ısıtım işlem c) Isıtım işlemin sürmesi ve camın renklenmesi

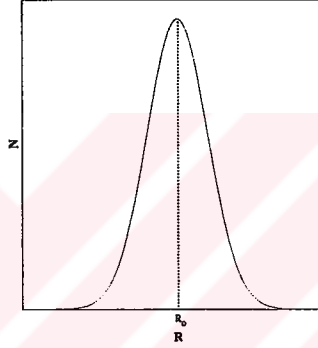
Yarıiletken katkılı camlara ısıtma işlemi uygulanması yarıiletken parçacıkların çekirdeklenmesini ve büyümesini sağlar. Çekirdeklenme ve büyüme aşamaları, kuantum noktalarının malzemede oluşma ve gelişme aşamalarıdır. Kuantum noktaları, çekim merkezlerinde çekirdeklenme sonucu embriyo kristal yapılar olarak oluşurlar ve cam ortamından alınan, yayılım ile ilerleyen atom ve moleküllerin embiryonun yüzeyine katılımı ile büyürler (Şekil 1.1). Bu aşamalar sonucunda, kuantum noktalarının malzemede oluşturmuş oldukları yeni ortalama yarıçap malzemenin optik özelliklerinin değişmesine neden olur. A. I. Ekimov, Al. L. Efros ve A. A. Onuschenko, CdS (Kadmiyum sülfür) ve CuCl (Bakır klorür) kuantum noktalarının büyüme kinetiklerini optik yöntemlerle incelemişlerdir. Çeşitli sıcaklıklarda ve farklı sürelerde ısıtma işlemi uygulanmış numuneler üzerinde yapılan küçük açı X ışını saçılması deneylerinden, her bir numune içerisindeki kuantum noktalarının ortalama yarıçapını belirlemişlerdir. Ortalama yarıçapın ısıtma süresiyle değişimini incelemişler ve her bir numunenin optik soğurma spektrumunu elde etmişlerdir. Elde edilen verilerin ayrıntılı bir şekilde incelenmesi sonucu, numuneler içerisindeki kuantum noktalarının ortalama yarıçapları küçüldükçe soğurma spektrumlarının da kısa dalgalılarına kaydıklarını görmüşlerdir. Soğurma spektrumlarındaki kaymaların ayrıntılı incelenmesi sonucunda bu sistemlerde kuantum büyüklük etkisi görülmüştür. Numunenin soğurma spektrumu alınırken, numune üzerine düşürülen ışık demeti numune içindeki kuantum noktalarının değerlik bandındaki elektronlarını iletkenlik bandına uyarır. Böylece, kuantum noktaları içerisinde eksitonlar (elektron-delik çiftleri) meydana gelir. Eksitonlar, yarıiletken ve camın birlikte oluşturmuş oldukları potansiyel engel yüzünden kuantum noktaları içerisinde hapis olmuşlardır. Bu durum, malzemenin enerji düzeylerinin, malzemede bulunan kuantum noktalarının ortalama yarıçapına bağlı olarak kesikli değerler almasını sağlamıştır. Ortalama yarıçapın enerji düzeylerine olan etkisine kuantum büyüklük etkisi denir. Kuantum büyüklük etkisi üç durumda incelenebilmektedir. İlk durum, kuantum noktasının yarıçapının (R) eksiton yarıçapından (a_{eksiton}) büyük olduğu durumdur ($R > a_{\text{eksiton}}$). Bu durumda, elektron ile delik arasındaki Coulomb etkileşme enerjisi ($\sim e^2 / (\epsilon_r a_{\text{eksiton}})$) hapis enerjisinden ($\sim \hbar^2 / (m_{e,h} R^2)$) daha büyüktür. Bu nedenle, zayıf hapis olarak adlandırılır. İkinci durum, kuantum noktasının yarıçapının eksiton yarıçapından küçük, elektron Bohr yarıçapından (a_{elektron}) ve delik Bohr yarıçapından (a_{delik}) büyük olduğu durumdur ($a_{\text{eksiton}} > R > a_{\text{elektron}}$ ve $a_{\text{eksiton}} > R > a_{\text{delik}}$). Bu durum orta hapis olarak adlandırılır. Üçüncü durum, kuantum noktasının yarıçapının elektron Bohr yarıçapından ve delik Bohr yarıçapından küçük olduğu durumdur ($a_{\text{elektron}} > R$ ve $a_{\text{delik}} > R$). Bu durum ise kuvvetli hapis olarak adlandırılır (Efros vd., 1985).

N. F. Borelli ve arkadaşları, kuantum büyüklük etkisini hem ticari camlarda hem de kendi ürettikleri deneysel camlarda incelemişlerdir. N. F. Borelli ve ekibi Corning firması tarafından sağlanan $\text{CdSe}_x\text{S}_{1-x}$ katkılı ticari filtre camların, $0.28 \leq x \leq 0.74$, üzerinde yaptıkları araştırmalar sonucunda bu camlarda kuantum büyüklük etkisine rastlamamışlardır. Bu camların soğurma grafiklerinden elde ettikleri soğurma başlangıcındaki kaymaların selenyumun x mol kesrindeki değişmelerden kaynaklandığını X ışınları kırınımı ile belirlemişlerdir. Kendi ürettikleri CdS ve CdSe (Kadmiyum selenyum) katkılı camlarda ise soğurma başlangıcındaki kaymaların kuantum büyüklük etkisinden kaynaklandığını görmüşlerdir. CdSe katkılı deneysel camları üzerinde TEM ölçümlerini yapmışlardır. TEM ölçümleri sonucunda, 600 °C'de 0.5 saat ısıtma işlemi uygulanan numunede ortalama parçacık yarıçapı 3 nm, 650 °C'de 0.5 saat ısıtma işlemi uygulanan numunede ortalama parçacık yarıçapı 4 nm, 700 °C'de 0.5 saat ısıtma işlemi uygulanan numunede ise 7.9 nm bulunmuştur (Borelli vd., 1987).

Yan Fuyu ve J. M. Parker, Cd(S,Se) katkılı camlar üzerine incelemelere devam etmişlerdir. Öncelikle, farklı sıcaklıklarda ve farklı sürelerde ısıtma işlemi uygulanmış numunelerin soğurma grafiklerini elde etmişlerdir. Elde ettikleri soğurma grafiklerinde çeşitli sıcaklıklardaki birinci eksiton enerji düzeyine karşılık gelen tepelerin, numunelere uygulanan ısıtma işlemi süresiyle gelişimini incelemişlerdir. Soğurma grafiklerinden ve Arrhenius eşitliğinden faydalanarak, Cd(S,Se) katkılı camlarda kuantum noktalarının büyüme evresi için aktivasyon enerjisini 329 kJ/mol hesaplamışlardır (Fuyu ve Parker, 1988).

Li-Chi Liu ve Subsahsh H. Rishbud, CdS ve CdSe katkılı camlar üzerine araştırmalarını yoğunlaştırmışlardır. Kuantum noktalarının ilk evrelerini oluşturan çekirdekleşme ve büyüme aşamalarını ayrıntılı olarak incelemişlerdir. DTA analizi sonuçlarından CdS katkılı cama uygulanması gereken en iyi ısıtma işlemi aralığının 577 °C - 735 °C arasında olması gerektiğini bulmuşlardır. Numunelere uygulanan TEM ölçümlerinden numuneler içerisindeki kuantum noktalarının ortalama yarıçaplarını belirlemişlerdir. CdS katkılı camlar için numuneye uygulanan ısıtma işlemi süresi ve ısıtma işlemi sıcaklığı ile numunede elde edilen ortalama kuantum noktası yarıçapı arasındaki ilişkiyi gösteren grafiği elde etmişlerdir. Ayrıca, bu grafikten CdS katkılı camlar için kuantum noktalarının büyüme evresinden sonra gelen, küçük olan kuantum noktalarının büyük olan kuantum noktalarını beslediği evre için aktivasyon enerjisini hesaplamışlardır. Büyüme evresi sonrası için aktivasyon enerjisi 345 kJ/mol hesaplanmıştır (Liu ve Rishbud, 1990).

L. C. Barbosa ve ekibi, CdTe (Kadmiyum tellür) katkılı camlar üzerine araştırmalar yapmışlardır. Yaptıkları araştırmalar sonucunda, CdTe katkılı camlara, ısıtım işlem uygulanarak kuantum noktaları oluşturulurken, bu parçacıkların bulunduğu atmosferin kontrol edilmesi gereğine dikkat çekmişlerdir. Aksi durumda, kontrol edilmeyen atmosferde tellür okside olacağı için kuantum noktalarının elde edilmesi zorlaşacaktır. Yarıiletken katkılı camlarda çift ısıtım işlem yaparak çekirdekleşme ve büyüme evrelerini kısmen ayırmışlardır. Çift ısıtım işlem yöntemi ile kuantum noktalarının cam içindeki yarıçap dağılımının genişliğini tek ısıtım işlemde elde edilene kıyasla azaltmayı başarmışlardır (Şekil 1.2). CdTe katkılı cama 460 °C'de 270 saat ısıtım işlem uygulandıktan sonra, 540 °C'de 300 dakika ısıtım işlem uygulanarak ortalama yarıçapı ~ 2.02 nm, yarıçap dağılımı % 8.4 olan kuantum noktalarını elde etmişlerdir (Barbosa vd., 1997).



Şekil 1.2 Yarıiletken katkılı bir cam içerisinde kuantum noktalarının yarıçap dağılımını göstermektedir. Grafiğin yatay ekseninde camdaki kuantum noktalarının yarıçapını, dikey ekseninde camdaki kuantum noktalarının sayısını gösterir. R_0 cam içindeki kuantum noktalarının oluşturmuş oldukları ortalama yarıçaptır.

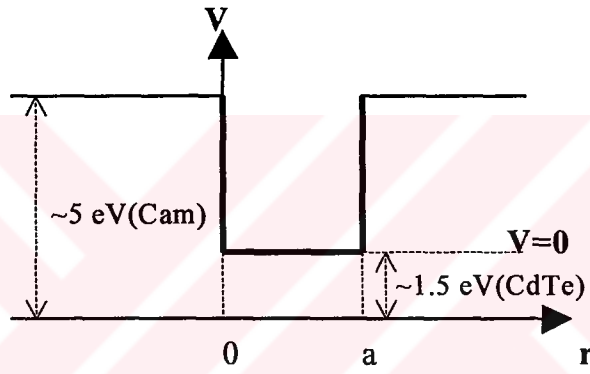
M. H. Yükselici ve arkadaşları, $Cd_{1-x}Zn_xS$ ve CdS_xSe_{1-x} katkılı camlar üzerine araştırmalar yapmıştır. M. H. Yükselici, çeşitli sıcaklıklarda ve farklı sürelerde ısıtım işlem uygulanmış $Cd_{1-x}Zn_xS$ ve CdS_xSe_{1-x} katkılı camların soğurma grafiklerini elde etmiştir. $Cd_{1-x}Zn_xS$ ve CdS_xSe_{1-x} katkılı camlarının Raman ölçümlerini yapmıştır. Elde ettiği Raman ölçümleri sonuçlarını değerlendirerek soğurma grafiklerindeki kaymaların kuantum büyüklük etkisinden kaynaklandığını saptamıştır. Bu malzemelerde kuantum noktalarının ilk evresi olan çekirdekleşmeyi ayrıntılı olarak incelemiştir. Soğurma grafiklerinden faydalananarak, $Cd_{1-x}Zn_xS$ ve CdS_xSe_{1-x} katkılı camlarında numuneye uygulanan ısıtım işlem süresi ve ısıtım işlem sıcaklığına bağlı olarak birinci eksiton enerji düzeyindeki kaymaların derecesini karşılaştırmıştır. Yaptığı incelemeler sonucunda, $Cd_{1-x}Zn_xS$ katkılı camlarında heterojen çekirdekleşmeyi, CdS_xSe_{1-x} katkılı camlarında ise homojen çekirdekleşmeyi belirlemiştir (Yükselici, 2001).

2. KURAMSAL ALT YAPI

2.1 Bir Kuantum Noktasının Enerji Düzeylerinin Bulunması

Bir kuantum noktasının enerji düzeylerinin bulunması, bir potansiyel kuyu içerisindeki eksitonun enerji düzeylerinin bulunması demektir. Potansiyel kuyu içerisindeki eksitonun enerji düzeylerinin bulunabilmesi için öncelikle eksitona ait hamiltoniyenin yazılması gerekir. Sistemin hamiltoniyei aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 + V_{(r_e)} + V_{(r_h)} + V_{(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|)} \quad (2.1)$$



Şekil 2.1 CdTe-cam potansiyel kuyusu

(2.1) eşitliğindeki terimler, sırasıyla, elektronun ve deliğin kinetik enerjisini, elektronun ve deliğin potansiyel enerjisini ve elektron ile delik arasındaki Coulomb potansiyel etkileşmesini ifade etmektedir. Eksitonun bulunduğu potansiyel kuyusunun sınırlarının yüksekliği sonsuz alınırsa eksitonun kuyu içindeki potansiyeli sıfır alınabilir (Şekil 2.1). Bu durumda (2.1) eşitliği aşağıdaki şekli alacaktır.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 \quad (2.2)$$

(2.2) eşitliğindeki hamiltoniye, elektronun ve deliğin kinetik enerjilerinin toplamından oluşmuş olup, elektronun ve deliğin potansiyel enerjisini ve elektron ile delik arasındaki etkileşmeyi ifade eden Coulomb potansiyel enerjisini içermez. Elektron ile delik arasındaki etkileşme dikkate alınmadığına göre (Numuneler içerisinde oluşturulan CdTe kuantum noktalarının yarıçapları 1.85 nm-2.9 nm aralığında olup yarıçap değerleri, 7.5 nm olan CdTe eksiton yarıçapından küçüktür; $R < a_{\text{eksiton}}$) (2.2) eşitliğindeki hamiltoniye iki parçaya aşağıdaki gibi ayrılabilir.

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 \quad (2.3)$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 \quad (2.4)$$

Sistemin enerji öz değeri, (2.3) ve (2.4) eşitliklerinin Schrödinger denkleminde yerlerine yazılması ile bulunacak enerji öz değerlerinin toplamı olacaktır

$$H\Psi_{nlm} = E\Psi_{nlm} \quad (2.5)$$

(2.5) eşitliği ile verilen Schrödinger denkleminde H sistemin hamiltoniyeni, Ψ_{nlm} sistemin dalga fonksiyonu ve E sistemin enerji özdeğeridir. (2.3) eşitliği için Schrödinger denkleminin küresel gözlem çerçevesindeki çözümü aşağıda verilmiştir. (2.5) eşitliğinde (2.3) kullanılırsa,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 \right] \Psi_{nlm} = E\Psi_{nlm} \quad (2.6)$$

(2.6) eşitliği elde edilir. Küresel gözlem çerçevesinde laplasyen (2.7) eşitliği ile verilir.

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (2.7)$$

$$\Psi_{nlm}(r) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.8)$$

(2.7) ve (2.8) eşitlikleri (2.6)'da yerlerine yazılarak Schrödinger denklemi radyal ve açısız kısımlara ayrılırsa elde edilen ifadenin radyal kısmı (2.9) denklemindeki gibi olacaktır.

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} E_1 - \frac{\ell_e(\ell_e + 1)}{r^2} \right] R_{nl}(r) = 0 \quad (2.9)$$

$$\rho = kr = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} E_1} r \quad (2.10)$$

(2.10) ile verilen dönüşüm (2.9) eşitliğine uygulanırsa,

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(1 - \frac{\ell_e(\ell_e + 1)}{\rho^2} \right) R = 0 \quad (2.11)$$

(2.11) eşitliği elde edilir. Bu diferansiyel denklem Bessel diferansiyel denklemi olup çözümü (2.12) ile verilen küresel Bessel fonksiyonudur (Goswami, 1992).

$$j_\ell(\rho) = \left(\frac{\pi}{2\rho} \right)^{1/2} J_{\ell+1/2}(\rho) \quad (2.12)$$

(2.11) diferansiyel denkleminin çözümü (2.13)'deki gibidir.

$$R(r) = C j_{\ell_e}(kr) \quad (2.13)$$

Daha önceden de belirtildiği gibi Schrödinger denkleminin çözümü sonsuz potansiyel kuyusu için arandığından potansiyel kuyusunun sınırlarında dalga fonksiyonu sıfır olmalıdır. Bu nedenle, Schrödinger dalga fonksiyonunun radyal kısmının potansiyel kuyunun sınırında sıfır olması gerekir ($R(r=a)=0$). (2.13) ifadesi kuyu sınırında (2.14) eşitliğini verir.

$$j_{\ell}(ka) = 0 \quad (2.14)$$

$$ka = X_{n_e, \ell_e} \quad (2.15)$$

(2.14) eşitliğinin çözümü küresel Bessel fonksiyonunun köklerini (X_{n_e, ℓ_e}) verir.

$$k = \frac{X_{n_e, \ell_e}}{a} \quad (2.16)$$

(2.16) eşitliği kullanılarak, E_1 (2.17)'deki gibi yazılabilir.

$$E_1 = \frac{\hbar^2 X_{n_e, \ell_e}^2}{2m_e^* a^2} \quad (2.17)$$

H_1 hamiltoniyenin enerji özdeğeri olan E_1 bulunduğuna göre benzer işlemler H_2 hamiltoniyenin enerji özdeğerini bulmak için yapılırsa, E_2 (2.18)'deki gibi bulunacaktır.

$$E_2 = \frac{\hbar^2 X_{n_h, \ell_h}^2}{2m_h^* a^2} \quad (2.18)$$

Sonsuz potansiyel kuyusu içerisindeki elektron ve delikten oluşan sistemin enerji özdeğeri (E), H_1 ve H_2 hamiltoniyenlerinin enerji özdeğerlerinin toplamı olacaktır.

$$E = \frac{\hbar^2 X_{n_e, \ell_e}^2}{2m_e^* a^2} + \frac{\hbar^2 X_{n_h, \ell_h}^2}{2m_h^* a^2} \quad (2.19)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2a^2} \left[\frac{X_{n_e, \ell_e}^2}{m_e^*} + \frac{X_{n_h, \ell_h}^2}{m_h^*} \right] \quad (2.20)$$

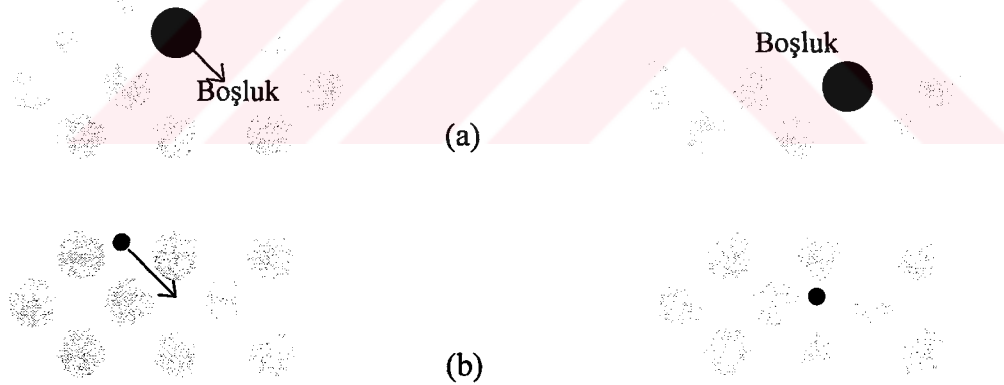
(2.20) eşitliği, elektron ile delik arasındaki Coulomb etkileşmesinin dikkate alınmadığı kuvvetli hapis durumu için bir kuantum noktasının enerji düzeylerini vermektedir. Çizelge 2.1'de Bessel fonksiyonunun ilk beş kökü verilmiştir.

Çizelge 2.1 Bessel fonksiyonunun ilk beş kökü

n/ℓ	$\ell = 0$	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$
n=1	3.14	4.49	5.76	6.99	8.18
n=2	3.14	4.49	5.76	6.99	8.18
n=3	3.14	4.49	5.76	6.99	8.18
n=4	3.14	4.49	5.76	6.99	8.18
n=5	3.14	4.49	5.76	6.99	8.18

2.2 Yayınım

Kristalleşme, katılaşma, faz geçişi gibi birçok işlem yayılım (difüzyon) ile gerçekleşmektedir. Yayılım, atomların malzemede ısı etkisiyle taşınması olayıdır. Yayılım olayı farklı tür malzemeler arasında olabileceği gibi saf malzemede de görülebilir. Yayılım olayı farklı tür malzemeler arasında görülüyorsa bu olay safsızlık yayılımı olarak adlandırılır. Saf malzemede görülen yayılım olayı ise öz yayılım olarak adlandırılmaktadır.



Şekil 2.2 Atomların yayılım mekanizmaları : (a) Boşluk yayılımı (b) Arayer yayılımı (Callister, 2000)

Yayılım olayı mekanizmaları açısından incelenirse yayılımın iki temel yolla gerçekleştiği görülür. Bu yollardan birincisi boşluk yayılımı ikincisi ise arayer yayılımıdır. Şekil 2.2’de görüldüğü gibi a şıkında siyah renkle gösterilen atom boş olan komşu örgü pozisyonuna geçmektedir. Bu yolla gerçekleşen yayılım boşluk yayılımı olarak adlandırılır. Boşluk yayılımının gerçekleşebilmesi için bir boşluğun var olması gerekir. Yayılım olayını gerçekleştiren atomlar ve boşluklar birbirleriyle yer değiştirdikleri için bir atomun hareketi boşluğun hareketine her zaman zıt yöndedir. Bu mekanizma ile hem öz yayılım hem de safsızlık yayılımı gerçekleşir. Şekil 2.2’nin b şıkında ise arayer yayılımı gösterilmektedir.

Ara pozisyonlara girmek için yeterince küçük olan atomların komşu boş arayerlere geçmesiyle oluşan yayınıma arayer yayını denir. Arayer yayını boşluk yayınına göre çok daha hızlıdır. Arayer yayınının boşluk yayınına göre daha hızlı olmasının nedeni arayer atomlarının daha küçük ve hareketli olmasıdır. Boş arayer konumları daha fazla olduğu için arayer yayınının gerçekleşme olasılığı da boşluk yayınına göre daha fazladır.

Yayını yöneten kurallar ilk defa 1855 yılında Adolf Fick tarafından verilmiştir. Bu kurallar, Fick'in birinci kuralı ve Fick'in ikinci kuralıdır. Fick'in birinci kuralı kütle akışının derecesini verir. Bir başka deyişle, birim zamanda birim alandan geçen parçacıkların sayısını verir. Birim zamanda birim alandan geçen parçacıkların sayısı J ($\text{kg/m}^2\text{sn}$) harfi ile temsil edilip yayınım akısı olarak adlandırılır. (2.21) bağıntısı Fick'in birinci kuralının matematiksel ifadesidir.

$$J = -D \frac{dC}{dx} \quad (2.21)$$

(2.21) bağıntısında D yayınım katsayısı, C malzemede yayınım ile taşınan atomların konsantrasyondur. Fick'in ikinci kuralı konsantrasyonun konum ve zamana bağlı olması durumunda uygulanır ve (2.22) bağıntısındaki gibi ifade edilir.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (2.22)$$

Yayınım katsayısı (D) malzemede konumdan bağımsız ise (2.22) bağıntısı (2.23) bağıntısına dönüşecektir.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.23)$$

Yayınım katsayısı sıcaklığa bağlı bir nicelikdir. (2.24) bağıntısında yayınım katsayısının sıcaklığa üstel olarak bağımlılığı açıkça görülebilir.

$$D = D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}} \quad (2.24)$$

(2.24) bağıntısında D_0 sıcaklıktan bağımsız bir katsayı, Q_d yayınının aktivasyon enerjisi, R evrensel gaz sabiti, T mutlak sıcaklıktır. (2.24) bağıntısında adı geçen aktivasyon enerjisi (Q_d) bir mol atomun yayınım hareketi yapabilmesi için gerekli olan enerji olarak düşünülebilir. Aktivasyon enerjisinin birimi olarak genellikle kJ/mol kullanılır (Callister, 2000).

Yayınım ile ilgili temel bilgiler verildikten sonra bir küresel parçacığın etrafındaki yayınım olayı incelenebilir. Bu olayın incelenebilmesi için Fick'in ikinci kuralı küresel gözlem

çerçevesinde yazılmalıdır. (2.25) eşitliğinde Fick'in ikinci kuralı, konsantrasyonun sadece radyal kısma bağlı olduğu, açısal gözlem çerçevesinden bağımsız olduğu düşünülerek yazılmıştır.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(D_\alpha r^2 \frac{\partial C}{\partial r} \right) \right] \quad (2.25)$$

Yayınım katsayısının sabit olduğu düşünülürse, (2.25) eşitliği (2.26)'daki gibi yazılabilir.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_\alpha \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad (2.26)$$

(2.26) ifadesinin basitleştirilebilmesi için (2.27) eşitliğindeki dönüşüm (2.26)'da yerine yazılıp gerekli düzenlemeler yapılırsa, (2.26) eşitliği (2.28) eşitliğine dönüşecektir.

$$C = \frac{u}{r} \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \quad (2.28)$$

Elde edilen (2.28) eşitliğine (2.29)'daki sınır şartları uygulanırsa (2.30) eşitliği elde edilir.

$$\begin{aligned} u &= C_\infty^\alpha r, t = 0, r > R \\ u &= C_\beta^\alpha R, t > 0, r = R \end{aligned} \quad (2.29)$$

(2.29) eşitliğiyle verilen sınır şartlarında C_∞^α küresel parçacıktan uzakta ev sahibi (ev sahibi terimiyle parçacıkların içinde oluşturulduğu ortam olan cam kastediliyor) içindeki konsantrasyonu, C_β^α küresel parçacığın dış yüzeyindeki konsantrasyonu, R küresel parçacığın yarıçapını ifade etmektedir (Şekil 2.3).

$$C^\alpha_{(r,t)} = \left(C_\beta^\alpha - C_\infty^\alpha \right) \frac{R}{r} \operatorname{erfc} \left(\frac{r-R}{2\sqrt{D_\alpha t}} \right) + C_\infty^\alpha \quad (2.30)$$

(2.30) eşitliğinin uzaysal türevi alınarak parçacık etrafındaki ev sahibi içindeki konsantrasyon gradyenti hesaplanabilir.

$$\frac{\partial C}{\partial r} = \left(C_\beta^\alpha - C_\infty^\alpha \right) \left[-\frac{R}{r^2} \operatorname{erfc} \left(\frac{r-R}{2\sqrt{D_\alpha t}} \right) - \frac{R}{r} \frac{1}{\sqrt{\pi D_\alpha t}} e^{-\left[\frac{(r-R)^2}{4D_\alpha t} \right]} \right] \quad (2.31)$$

(2.32) eşitliği kullanılarak, Fick'in birinci kuralından ev sahibi içindeki herhangi bir r noktasındaki atomların akısı,

$$J_{(r,t)} = -D_\alpha \frac{\partial C}{\partial r} \quad (2.32)$$

$$J_{(r,t)} = \frac{D_\alpha R}{r} (C_\beta^\alpha - C_\infty^\alpha) \left[\frac{1}{r} \operatorname{erfc} \left(\frac{r-R}{2\sqrt{D_\alpha t}} \right) + \frac{1}{\sqrt{\pi D_\alpha t}} e^{\left[-\frac{(r-R)^2}{4D_\alpha t} \right]} \right] \quad (2.33)$$

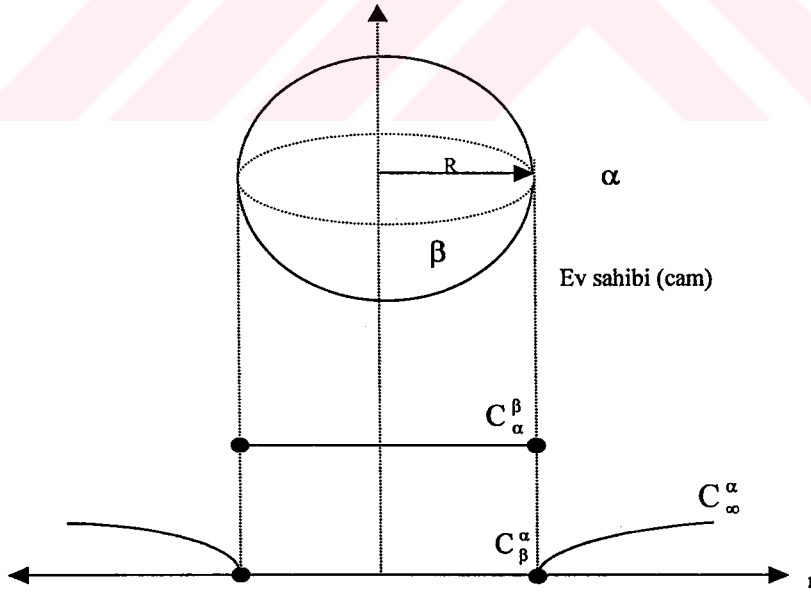
(2.33)'deki gibi yazılabilir. Ev sahibi içindeki parçacık öncesi yapılar α fazı ile ifade edilir. Ev sahibi içinde oluşturulmuş parçacıklar (kuantum noktaları) ise β fazını oluşturur. (2.33) eşitliği α - β ara yüzündeki akı için, $r = R$, (2.34) eşitliğine dönüşür.

$$J_{(R,t)} = \frac{D_\alpha (C_\beta^\alpha - C_\infty^\alpha)}{R} \left(1 + \frac{R}{\sqrt{\pi D_\alpha t}} \right) \quad (2.34)$$

Yayınım zamanı (t) kısa alınırsa (2.34) eşitliği (2.35) eşitliğine, uzun alınırsa (2.36) eşitliğine dönüşür.

$$J_{(R,t_{\text{kısa}})} \cong \sqrt{\frac{D_\alpha}{\pi t}} (C_\beta^\alpha - C_\infty^\alpha) \quad (2.35)$$

$$J_{(R,t_{\text{uzun}})} \cong \frac{D_\alpha (C_\beta^\alpha - C_\infty^\alpha)}{R} \quad (2.36)$$



Şekil 2.3 Küresel bir β parçacığı etrafındaki yayınım alanı (Glicksman, 1994)

Deneyde kullanılan ev sahibi cam içinde parçacıkları oluşturan Cd, CdO, Te parçacık öncesi yapıları cama göre çok az olduklarından cam sonsuz büyük alınabilir. Böyle bir sonsuz büyük ev sahibi içindeki küresel bir β parçacığının yavaş büyümesi göz önünde bulundurulursa bu parçacık için α - β ara yüzündeki akı,

$$J_{(R)} = -(C_{\alpha}^{\beta} - C_{\beta}^{\alpha}) \frac{dR}{dt} \quad (2.37)$$

(2.37)'deki gibi yazılabilir. (2.37) ve (2.36) eşitlikleri aynı akıyı ifade ettiklerinden, her iki ifadenin sağ tarafları birbirlerine eşitlenebilir.

$$-(C_{\alpha}^{\beta} - C_{\beta}^{\alpha}) \frac{dR}{dt} = \frac{D_{\alpha} (C_{\beta}^{\alpha} - C_{\alpha}^{\beta})}{R} \quad (2.38)$$

(2.38) eşitliği birinci mertebeden bir diferansiyel denklem olup, değişkenlere ayırma metoduyla kolayca çözülebilir. (2.38) diferansiyel denklemini çözülürse (2.42) elde edilir.

$$\int_{R_0}^R R' dR' = D_{\alpha} \left(\frac{C_{\beta}^{\alpha} - C_{\alpha}^{\beta}}{C_{\alpha}^{\beta} - C_{\beta}^{\alpha}} \right) \int_0^t dt' \quad (2.39)$$

$$R^2 = R_0^2 + 2 \left(\frac{C_{\beta}^{\alpha} - C_{\alpha}^{\beta}}{C_{\alpha}^{\beta} - C_{\beta}^{\alpha}} \right) D_{\alpha} t \quad (2.40)$$

$$C_1 = 2 \left(\frac{C_{\beta}^{\alpha} - C_{\alpha}^{\beta}}{C_{\alpha}^{\beta} - C_{\beta}^{\alpha}} \right) \quad (2.41)$$

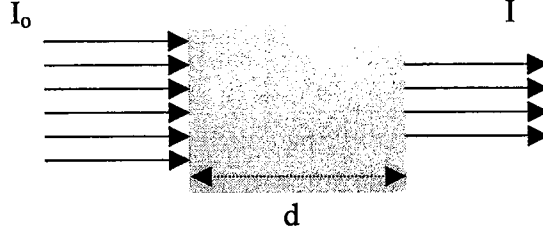
$$R^2 = R_0^2 + C_1 D_{\alpha} t \quad (2.42)$$

(2.42) eşitliğindeki R_0 $t=0$ anındaki parçacığın yarıçapıdır. Bir başka deyişle, numuneye ısıtıl işlem uygulanmadan önce numune içindeki parçacıkların ortalama başlangıç yarıçapıdır.

(2.42) eşitliğindeki C_1 bir katsayı, D_{α} yayılım katsayısı, t yayılım zamanıdır (Glicksman, 1994).

2.3 Işığın Soğurulması ve Mie Saçılma Kuramı

Şiddeti I_0 olan koştut ışık demetinin saydam ortam üzerine gönderildiği, saydam ortamdan çıkan ışığın şiddetinin de I olduğu düşünülür (Şekil 2.4). Sadyam ortama giren ışık için ışığın ortama girdiği ve çıktığı yüzlerde yansımanın çok küçük olduğu varsayılırsa ışığın bir kısmı saydam ortam içerisinde soğurulacağı için ($\alpha > 0$ durumu), çıkan ışığın şiddeti daha az olacaktır.



Şekil 2.4 Işığın soğurulması

Gelen ışığın şiddeti I_0 ve çıkan ışığın şiddeti I arasında, ışığın malzemedeki aldığı yol d olmak üzere (2.43) eşitliği yazılabilir.

$$I = I_0 e^{-\alpha d} \quad (2.43)$$

(2.43) eşitliğinde verilen α soğurma katsayısı olup, 1/uzunluk boyutundadır. (2.43) eşitliğinden görüldüğü gibi malzemenin kalınlığı arttıkça çıkan ışığın şiddeti azalacaktır. (2.43) bağıntısı ilk defa 1729 yılında Bouguer tarafından bulunduğu için Bouguer kanunu olarak adlandırılır. 1852’de Bouguer ve ondan bağımsız bir şekilde Beer tarafından bir çözeltide ışığın soğurulma katsayısının, o çözeltideki çözünmüş maddenin moleküler konsantrasyonu ile doğru orantılı olduğu açıklanmıştır. Bu nedenle (2.43) bağıntısı Bouguer-Beer kanunu olarak da adlandırılmaktadır.

Işığın soğurulması olayı kuantum mekaniğine dayanılarak açıklanırsa soğurulma olayı daha iyi anlaşılabilir. Kuantum mekaniğine göre atom ve moleküllerin enerjileri sürekli olmayıp kesiklidir. Malzemeye gelen ışık malzemedan geçerken ortamdaki atom ve molekülleri uyacaktır. Bir başka deyişle, atom ve moleküller daha üst kesikli enerji düzeylerine geçeceklerdir. Atom ve moleküllerin daha üst enerji düzeylerine geçmeleri sonucunda ışığın soğurulma olayı gerçekleşecektir.

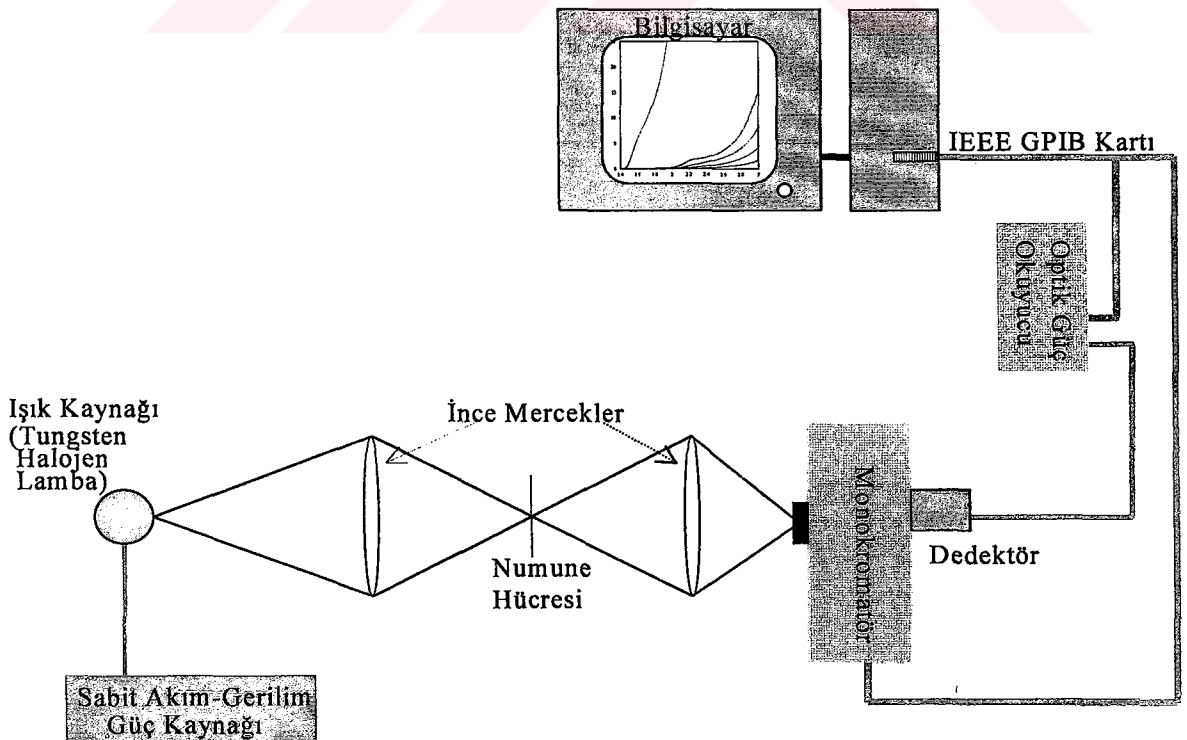
Mie saçılma kuramı, malzeme üzerine düşen ışık ile malzeme içerisindeki kuantum noktaları arasında iki önemli kabul yapar. Bu kabuller :

- Malzeme içerisinden geçen ışık malzemedeki bulunan kuantum noktalarından yansımaz.
- Malzemenin soğurması malzemedeki kuantum noktalarının sayısı ile doğru orantılıdır.

3. DENEY DÜZENEGİ

3.1 Deney Düzenegini Oluşturan Elemanlar

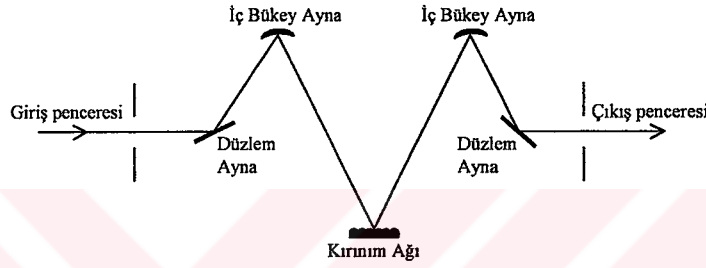
Optik ölçümlerin alındığı deney düzeneği bilgisayar kontrollüdür. Deney düzeneği sekiz temel kısımdan oluşmaktadır. Bu kısımlar sabit akım-gerilim güç kaynağı, tungsten halojen ışık lambası, ince mercekler, numune hücresi, monokromatör, silikon fotodedektör, optik güç okuyucu ve bilgisayardır. Öncelikle, sabit akım-gerilim güç kaynağı ışık kaynağının sabit bir ışık şiddeti vermesi için ayarlanır. Sabit bir ışık şiddeti veren ışık kaynağından çıkan ışınlar birinci ince mercek yardımıyla numune hücresine odaklanır ve numune hücresinden çıkan ışınlar ikinci ince mercek ile toplanarak monokromatörün girişine odaklanır. Monokromatörün çıkış penceresine gelen ışınlar dedektöre yönlendirilir. Dedektör gelen ışık ışınları saptar ve bu ışınları elektrik sinyallerine dönüştürür. Elektrik sinyalleri optik güç okuyucu tarafından algılanarak bilgisayar ortamına aktarılır. Elektrik sinyallerine dönüştürülen ve optik güç okuyucu tarafından algılanan ışığın dalga boyunun artırılması ise monokromatörün motorunun döndürülmesi ile sağlanır. Bilgisayarda bulunan IEEE kartı ile optik güç okuyucu ve monokromatör kontrol edilir. Işığın dalga boyu ve bu dalga boyundaki şiddetinin grafiği bilgisayar yazılımı ile ekranda görüntülenir (Şekil 3.1).



Şekil 3.1 Deney düzeneğinin şematik gösterimi

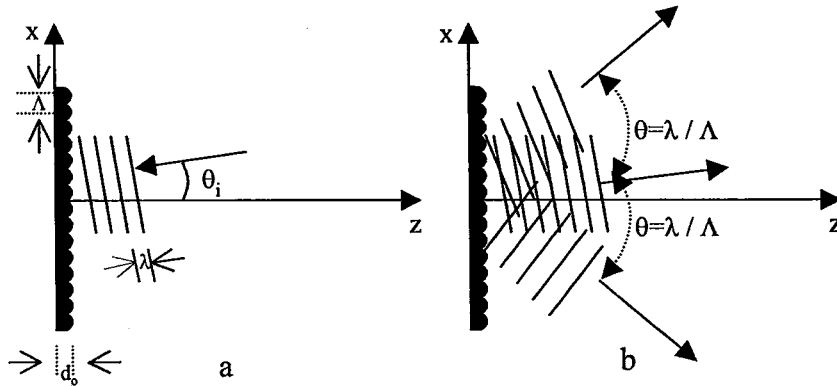
3.1.1 Monokromatör

Monokromatör giriş penceresine gelen geniş spektrumlu ışığı spektrumuna ayırarak, çıkış penceresine istenen tek dalgaboylu ışığı sağlayan bir aygıttır. Bu olay spektroskopide spektrum taranması olarak adlandırılır. Bir başka deyişle, monokromatörler spektrum taranmasını gerçekleştirebilen aletlerdir. Bir monokromatör temel olarak dört ana kısımdan oluşur. Bu kısımlar, sırasıyla, giriş penceresi, aynalar, kırınım ağı (optik ağ) ve çıkış penceresidir. Monokromatöre gelen ışınlar giriş penceresinden geçerek aynalar ile kırınım ağı üzerine düşürülür. Kırınım ağı ışınları dalga boylarına ayırır. Dalga boylarına ayrılan ışınlar aynalar ile çıkış penceresine odaklandırılır (Şekil 3.2).



Şekil 3.2 Deney düzeneğinde kullanılan monokromatörün iç yapısı

Kırınım ağılar gelen dalganın genlik ve fazını değiştirebilen optik parçalardır. Kırınım ağılar genel olarak iki sınıfa ayrılabilir. Birinci sınıf geçirgen kırınım ağılardır. İkinci sınıf ise yansıtıcı kırınım ağılardır. Geçirgen kırınım ağılar isminden de anlaşılacağı gibi ışığı geçirmesi için üzerine çok küçük mertebelerde yarıklar açılan kırınım ağılardır. Yansıtıcı kırınım ağılar ise çentikleme denilen işlem ile üzerine çok küçük mertebelerde oyuklar açılarak gelen ışığı bu oyuklardan yansıtan kırınım ağılardır.



Şekil 3.3 Yansıtıcı bir kırınım ağına monokromatik ışığın gelmesi ve yansıması (Saleh ve Teich, 1991)

$z=0$ düzlemine yerleştirilmiş yansıtmalı bir kırınım ağı düşünülür. Kırınım ağının kalınlığının x eksenini doğrultusunda Λ periyodu ile periyodik olarak değiştiği varsayılır (Şekil 3.3). Kırınım ağının kalınlığı (3.1) eşitliği ile verilsin.

$$d_{(x,y)} = \frac{1}{2}d_o \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi x}{\Lambda}\right) \right] \quad (3.1)$$

z eksenine göre küçük bir θ_i açısında, $\lambda \ll \Lambda$ olmak üzere λ dalgaboylu düzlem dalga kırınım ağına gönderilirsin. Bu kırınım ağının karmaşık yansıma genliği (3.2) eşitliğindeki gibi yazılır.

$$t_{(x)} = h_o e^{-jk_o [nd + (d_o - d)]} \quad (3.2)$$

(3.2) eşitliğindeki $j = \sqrt{-1}$, n kırınım ağının kırılma indisi, k_o gelen ışığın dalga sayısı, d kırınım ağının kalınlığı, $t_{(x)}$ kırınım ağının karmaşık yansıma genliğidir. (3.2) eşitliğinde (3.1) eşitliği kullanılır ve ifadede gerekli düzenlemeler yapılırsa,

$$t_{(x)} = e^{\left[-j\frac{1}{2}(n+1)k_o d_o \right]} \cdot e^{\left[-j\frac{1}{2}(n-1)k_o d_o \cos\left(\frac{2\pi x}{\Lambda}\right) \right]} \quad (3.3)$$

(3.3) bağıntısı elde edilir.

$$h_o = e^{\left[-j\frac{1}{2}(n+1)k_o d_o \right]} \quad (3.4)$$

$$t_{(x)} = h_o e^{\left[-j\frac{1}{2}(n-1)k_o d_o \cos\left(\frac{2\pi x}{\Lambda}\right) \right]} \quad (3.5)$$

(3.5) eşitliği ile verilen karmaşık yansıma genliği, kırınım ağından yansıyan düzlem dalganın kırınım ağına gelen düzlem dalgaya oranını temsil etmektedir. Aşağıda (3.5) eşitliği Fourier serisine açılmıştır.

$$u = \cos\left(\frac{2\pi x}{\Lambda}\right) \quad (3.6)$$

$$t_{(u)} = h_o e^{\left[-j\frac{1}{2}(n-1)k_o d_o u \right]} \quad (3.7)$$

$$t_{(u)} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} c_m e^{jmu} \quad (3.8)$$

(3.8) eşitliğindeki c_m katsayısı (3.9) eşitliği ile verilir.

$$c_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} t_{(u)} e^{-jmu} du \quad (3.9)$$

(3.9) eşitliğinde (3.7) ifadesi kullanılırsa,

$$c_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} h_o e^{-j\frac{1}{2}(n-1)k_o d_o u} \left[e^{-jmu} \right] du \quad (3.10)$$

(3.10) eşitliği elde edilir. (3.10) eşitliği düzenlenirse,

$$c_m = \frac{h_o}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-j\left[\frac{1}{2}(n-1)k_o d_o + m\right]u} du \quad (3.11)$$

(3.11) eşitliği elde edilir. (3.11) eşitliği diklik bağıntısı kullanılarak kolayca çözülebilir. Diklik bağıntısına göre (3.12) ifadesi sağlandığında (3.11) eşitliğindeki tümlevin değeri 2π 'ye eşit olacaktır.

$$m = \frac{1}{2}(1-n)k_o d_o \quad (3.12)$$

c_m katsayısı,

$$c_m = h_o \quad (3.13)$$

olarak bulunur. (3.8) eşitliğinde (3.13) eşitliği kullanılırsa,

$$t_{(u)} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} h_o e^{jmu} \quad (3.14)$$

(3.14) eşitliği elde edilir. (3.14) eşitliği x değişkenine bağlı olarak ifade edilirse,

$$t_{(x)} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} h_o e^{jm \cos\left(\frac{2\pi x}{\Lambda}\right)} \quad (3.15)$$

(3.15) eşitliği elde edilir. (3.15) ifadesi karmaşık yansıma genliğinin Fourier serisine açılımıdır. (3.15) eşitliğindeki $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ tamsayı değerlerini alabilir. Kırınım ağına gelen düzlem dalga ve kırınım ağından yansıyan düzlem dalga, sırasıyla, (3.16) ve (3.17) eşitlikleriyle verilir.

$$U_g = A e^{-j[k_o(\cos \theta_i)z + k_o(\sin \theta_i)x]} \quad (3.16)$$

$$U_y = B e^{-j[k_o(\cos \theta_q)z + k_o(\sin \theta_q)x]} \quad (3.17)$$

(3.16) ve (3.17) eşitliklerinde A ve B , sırasıyla, gelen ve yansıyan dalganın genliğidir. Kırınım ağına gelen düzlem dalganın kırınım ağına gelme açısı ve kırınım ağından yansıyan düzlem dalganın kırınım ağından yansıma açısı yeterince küçük olduğundan (3.16) eşitliği (3.18) eşitliğine, (3.17) eşitliği (3.19) eşitliğine dönüşür.

$$U_g = Ae^{-j[k_o z + k_o(\theta_i)x]} \quad (3.18)$$

$$U_y = Be^{-j[k_o z + k_o(\theta_q)x]} \quad (3.19)$$

(3.20) bağıntısında yansıyan düzlem dalganın, gelen düzlem dalganın ve karmaşık yansıma genliğinin açı ve konuma bağlı kısımları yazılabilir.

$$\frac{U_g}{U_y} = t_{(x)} \quad (3.20)$$

$$\frac{e^{-j[k_o z + k_o \theta_q x]}}{e^{-j[k_o z + k_o \theta_i x]}} = e^{-j(-m)\cos\left(\frac{2\pi x}{\Lambda}\right)} \quad (3.21)$$

(3.21) eşitliği düzenlenirse,

$$e^{-j[k_o(\theta_q - \theta_i)x]} = e^{-j(-m)\cos\left(\frac{2\pi x}{\Lambda}\right)} \quad (3.22)$$

(3.22) ifadesi elde edilir. (3.22) eşitliğinde $(-m)$ yerine q kullanılırsa, $q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ değerlerini alır. (3.22) eşitliğinin geçerli olabilmesi için eşitliğin her iki tarafındaki üslerin birbirlerine eşit olmaları gerekmektedir.

$$k_o(\theta_q - \theta_i)x = q \cos\left(\frac{2\pi x}{\Lambda}\right) \quad (3.23)$$

(3.23) eşitliğinde x 'in (3.24)'teki değeri kullanılır ve $\cos(1^\circ) \approx 1$ alınırsa (3.25) bağıntısı elde edilir.

$$x = \frac{\Lambda}{2\pi} \quad (3.24)$$

$$\theta_q = \theta_i + q \frac{\lambda}{\Lambda} \quad (3.25)$$

(3.25) eşitliğinde $q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ değerlerini alabilir ve kırınım derecesi olarak adlandırılır. Yansıyan düzlem dalgalar (3.25) eşitliğinde görüldüğü gibi birbirleriyle $\theta = \lambda / \Lambda$ açısı yaparlar. Bir monokromatör spektrum taranması yaparken kırınım ağını (optik ağ) ışınları dalga boylarına ayırabilmesi için döndürür. Kırınım ağının döndürülmesi vasıtasıyla ışının kırınım ağına geliş açısı (θ_i) ve kırınım ağından yansıma açısı (θ_q) değiştirilir. Geliş açısı ve yansıma açısı belirli olan ışın (3.25) eşitliğini sağlayan λ dalga boylu ışındır (Saleh ve Teich, 1991). Çizelge 3.1'de deney düzeneğinde kullanılan monokromatörün modeli ve temel özellikleri verilmiştir. Çizelge 3.1'de verilen $F/\#$ sayısı monokromatörün ışığı toplama gücünü ifade eder. Bir monokromatörün $F/\#$ sayısı ne kadar büyük ise o monokromatörün ışığı toplama gücü de o kadar küçüktür.

Çizelge 3.1 Deney düzeneğinde kullanılan monokromatörün modeli ve temel özellikleri

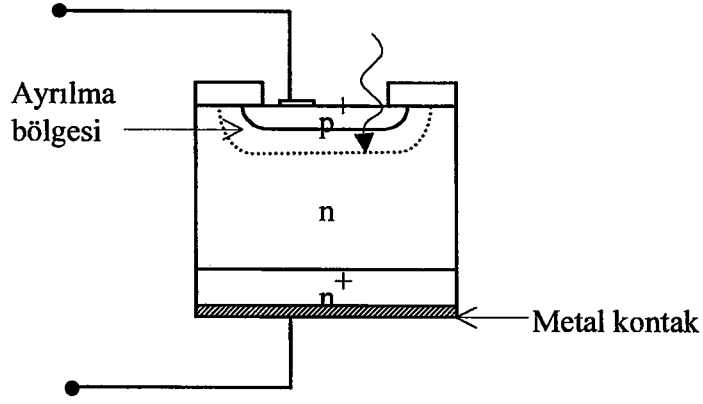
Model	F/#	mm'deki Yarık Sayısı	Kırınım Ağı
Oriel Cornerstone 130 1/8 m	3.7	1200	Yansıtımlı

3.1.2 Işık Kaynağı

Deney düzeneğinde ışık kaynağı olarak 50 watt gücünde 12 voltluk tungsten halojen lamba kullanılmıştır. Optik soğurma spektrumları alınırken (Bölüm 5) tungsten halojen lambadan ~ 400 nm-900 nm dalgaboyu arasında yararlanılmıştır. Tungsten halojen lambaların çalışma sıcaklıkları yüksek olduğu için (~3500 K) ampulün içindeki telde tungsten buharlaşır. Buharlaşan tungsten, lambanın içindeki halojen gazla birleşir. Oluşan bileşiğin molekülleri tele çarptıklarında bozunurlar ve bir miktar tungstenin tele geri dönmesine neden olurlar. Telden yüksek sıcaklık nedeniyle oluşan tungsten kaybı bir miktar tungstenin geri dönmesiyle azaltılmış olur. Bu olay halojen devri olarak adlandırılır. Tungsten halojen lambalarda halojen devri olduğu için, bu lambaların ömürleri tungsten lambalardan iki kat daha fazladır. Bu lambalardan kararlı bir ışık elde edilebilmesi için telden geçen akımın iyi bir şekilde kontrol edilmesi gerekir. Deney düzeneğinde (Şekil 3.1) kullanılan sabit akım-gerilim güç kaynağı telden geçen akımı sabit tutarak (4 amper) gereken kararlı ışığı sağlamıştır (Arthurs, 1989).

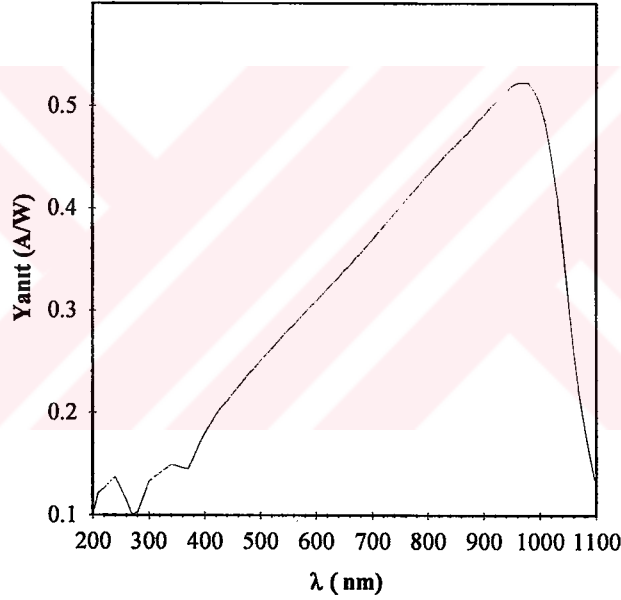
3.1.3 Silikon Fotodedektör

Silikon fotodedektörlerde (veya silikon fotodiyotlarda) kullanılan silikonun (Si) yasak enerji aralığı 1.14 eV'dir. Görünür bölgeyi 400 nm-700 nm dalgaboyu aralığında alırsak, bu dalga boyu aralığı 1.8 eV-3.1 eV enerji aralığına karşılık gelir. Bu enerji aralığı görünür bölgedeki bir fotonun enerjisinin en küçük değerinin yaklaşık olarak 1.8 eV olduğunu gösterir. Silikonun enerji aralığının değeri görünür bölgedeki bir fotonun enerjisinden daha küçük olduğu için görünür bölgede gelen fotonlar rahatlıkla silikon malzeme tarafından soğurulacaktır. Soğurulan her bir foton bir elektron ve bir delik oluşturacaktır. Oluşan elektronlar ve delikler uygun bir dış devre ile dış devrede akımın akmasına neden olur. Böylece, ışık sinyalleri elektrik sinyallerine çevrilir. Şekil 3.4'de silikon fotodiyotun yapısı görülmektedir.



Şekil 3.4 Silikon fotodiyotun yapısının gösterildiği yukarıdaki şekilde p⁺ zenginleştirilmiş p tipi maddeyi, n⁺ zenginleştirilmiş n tipi maddeyi göstermektedir (Arthurs, 1989).

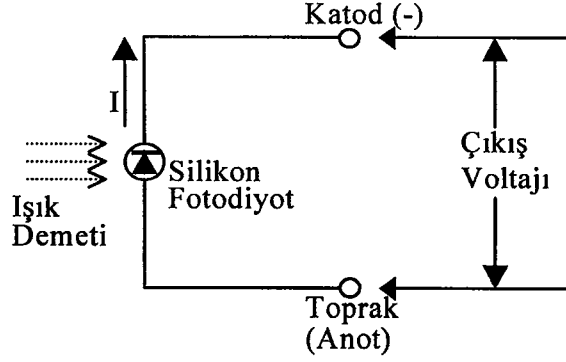
Şekil 3.5’de deney düzeneğinde kullanılan silikon fotodedektörün spektral yanıtı görülmektedir. Silikon fotodedektörün yanıtı dedektöre gelen fotonun gücü başına dedektör devresinden geçen akımın ölçüsüdür.



Şekil 3.5 Silikon fotodedektörün spektral yanıtı

Dış devrede herhangi bir emk kaynağı kullanılmazsa dedektör fotovoltajik modda çalıştırılıyor demektir. Eğer dış devrede bir emk kaynağı kullanılıyor ve bu emk kaynağı fotodiyota ters bias voltajı uyguluyorsa dedektör fotoiletken modda çalıştırılıyor demektir. Deneyde kullanılan dedektör fotovoltajik modda çalışmaktadır. Şekil 3.6’da deney düzeneğinde kullanılan silikon fotodiyotun açık modda açık devre işletimi verilmiştir. Bir dedektörün algılayabilirliği olan D, gürültü eşdeğer gücü NEP ile ters orantılıdır. NEP minimum tespit edilen sinyalin boyutunun bir göstergesidir. Fotovoltajik modda çalışan dedektörler düşük frekanslarda (100 kHz aşağısı) daha iyi bir NEP’e sahiptirler. Çizelge 3.2’de deney düzeneğinde kullanılan dedektörün modeli ve temel özellikleri verilmiştir. Çizelge 3.2’de

belirtilen kara akım gürültü kaynaklarından biridir. Kara akım değerlik bandındaki elektronların ısı olarak uyarılmasıyla meydana gelen gürültü kaynağıdır.



Şekil 3.6 Deney düzeneğinde kullanılan silikon fotodiyotun açık modda açık devre işletimi

Çizelge 3.2 Deney düzeneğinde kullanılan dedektörün modeli ve temel özellikleri

Model	Oriel 71580
Işığa Duyarlı Alan	100 mm ²
Spektral Aralık	190-1100 nm
Maksimum Yanıt	0.523 A/W
Maksimum Yanıtın Dalgaboyu	960 nm
Kara Akım	< 10 ⁻² nA

3.1.4 İnce Mercekler

Mercekler, bir sistemde gelen ışığı dağıtmak veya bir noktaya ışığı toplamak için kullanılırlar. Şekil 3.1’de kullanılan ince merceklerden birincisi ışığı numunenin bulunduğu numune hücresi üzerine odaklar. Numuneden geçen ışınlar ikinci bir ince mercek vasıtasıyla monokromatörün giriş penceresine odaklanır.

İnce merceklerin monokromatörün giriş penceresine maksimum ışık akısını toplayabilmesi için monokromatörün F/# sayısına göre deney düzeneğindeki konumları ayarlanmalıdır. Deney düzeneğinde kullanılan ince merceklerden birincisinin odak uzaklığı (Işık kaynağına yakın olan) 10 cm, ikincisinin odak uzaklığı (Monokromatöre yakın olan) 7 cm’dir (Şekil 3.1). Aşağıda, mercek denklemi kullanılarak numune hücresinin konumu belirlenmiştir.

$$\frac{1}{f_1} = \frac{1}{s_1} + \frac{1}{s_1'} \quad (3.26)$$

(3.26) eşitliğindeki f_1 birinci ince merceğin odak uzaklığı, s_1 ışık kaynağının birinci ince merceğe olan uzaklığı, s_1' numune hücresinin konulacağı yerdir. Işık kaynağının birinci ince merceğe olan uzaklığı 29.8 cm'dir. Numune hücresinin konulacağı yer (3.26) eşitliğinden,

$$\frac{1}{10} = \frac{1}{29.8} + \frac{1}{s_1'} \quad (3.27)$$

$$s_1' \cong 15.05 \text{ cm} \quad (3.28)$$

olarak bulunur. Numune hücresinin birinci ince merceğe olan uzaklığı yaklaşık olarak 15.05 cm olmalıdır.

$$\frac{1}{f_2} = \frac{1}{s_2} + \frac{1}{s_2'} \quad (3.29)$$

(3.29) eşitliğindeki f_2 ikinci ince merceğin odak uzaklığı, s_2 numune hücresinin ikinci ince merceğe olan uzaklığı, s_2' numuneden geçen ışınların toplanıp görüntüyü oluşturacağı yerdir. Numune hücresinin ikinci ince merceğe olan uzaklığı 19 cm'dir. Görüntünün oluştuğu yer (3.29) eşitliğinden,

$$\frac{1}{7} = \frac{1}{19} + \frac{1}{s_2'} \quad (3.30)$$

$$s_2' \cong 11.08 \text{ cm} \quad (3.31)$$

olarak bulunur. Monokromatörün ikinci ince merceğe olan uzaklığı yaklaşık olarak 11.08 cm olmalıdır. Numuneden geçen ışınların monokromatörün giriş penceresine odaklandırılmasında monokromatörün $F/\#$ sayısı da hesaba katılır. Deney düzeneğinde kullanılan ikinci ince merceğin $F/\#$ sayısı aşağıda verilmiştir.

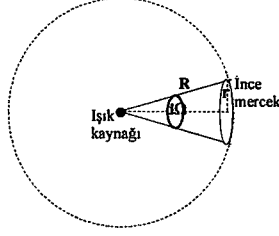
$$F/\# = \frac{s_2'}{D_2} \quad (3.32)$$

s_2' görüntünün ikinci ince merceğe uzaklığı olup 11.08 cm olarak hesaplanmıştır. D_2 ikinci ince merceğin çapı olup 3 cm'dir. (3.32) eşitliğinden yararlanarak ikinci ince merceğin $F/\#$ sayısı hesaplanırsa yaklaşık olarak 3.69 bulunur. Deney düzeneğinde kullanılan monokromatörün $F/\#$ sayısının ikinci ince merceğin $F/\#$ sayısına yakın olması gereklidir. Monokromatörün $F/\#$ sayısı 3.7 olup deney düzeneğinde kullanılan ikinci ince merceğin $F/\#$ sayısına yaklaşık olarak eşittir.

3.1.5 Monokromatöre Gelen Işık Gücünün Hesaplanması

Monokromatöre gelen ışık gücü, deney düzeneğinde birinci ince merceğe gelen ışık gücü ile hesaplanabilir (Şekil 3.1). Sabit akım-gerilim güç kaynağı ile tungsten halojen lambaya 4 amperlik, ~12 voltluk bir gerilim sağlanmıştır. Tungsten halojen lambanın gücü (3.33) eşitliği ile bulunur.

$$P_{\text{tungsten}} = V.I = 12.4 = 48 \text{ watt} \quad (3.33)$$



Şekil 3.7 Işık kaynağının r yarıçaplı ince merceği gördüğü $d\Omega$ katı açısı

Monokromatöre ulaşan ışığın gücü birinci ince merceğe gelen ışığın gücünden daha küçük olmalıdır. Deney sisteminde ışık kaynağının birinci ince merceğe olan uzaklığı (R) ince merceğin yarıçapından (r) yeterince büyük olduğu için ince merceğe gelen ışık gücü katı açı yardımıyla da hesaplanabilir. Aşağıda birinci ince merceğe gelen ışığın gücü katı açı yardımıyla hesaplanmıştır.

$$\cos \theta = \frac{\sqrt{R^2 - r^2}}{R} \quad (3.34)$$

$\cos \theta$ bir önceki bölümde verilen bilgilerden yaklaşık 0.9987 hesaplanır.

$$d\Omega = 2(1 - \cos \theta) \Big|_{\cos \theta \approx 0.9987} = 0.0026 \quad (3.35)$$

Katı açının dörtte biri ışık kaynağının gücü ile çarpılırsa birinci ince merceğe gelen güç hesaplanır.

$$P_{\text{mercek}} = \frac{d\Omega}{4} 48 \approx 0.03 \text{ watt} \quad (3.36)$$

Işık kaynağının (tungsten halojen lamba) çalışma bölgesinde monokromatöre gelen ışığın toplam gücü 0.03 watt'dan daha küçük olmalıdır.

4. NUMUNELERİN HAZIRLANMASI

Numuneler Schott firması tarafından üretilen CdTe katkılı RG850 tipi filtre camdan hazırlanmıştır. Numunelerin hazırlanacağı malzemenin bir parçasına X ışınları analizi (XRF) uygulanmıştır. X ışınları analizi sonucunda, malzemenin yaklaşık % 22.23 Silisyum (Si), % 18.31 Çinko (Zn), % 22.74 Potasyum (K) ve % 33.44 Oksijen (O₂) içerdiği bulunmuştur. Bu bilgilerden yararlanılarak malzemede bulunan maddelerin oksit miktarları hesaplandığında, malzemede yaklaşık olarak % 44.46 SiO₂, % 22.79 ZnO, % 27.39 K₂O bulunduğu görülmüştür. Kaynakçada RG850 tipi camın temel bileşenleri % 52 SiO₂, % 20 ZnO, % 20 K₂O, % 5 B₂O₃ olarak verilmiştir. X ışınları analizi sonucunda belirlenen oksit miktarları ile kaynakçada verilen değerler birbirleriyle karşılaştırıldığında bu değerlerin birbirleriyle uyumlu olduğu görülmüştür (X ışınları analizinde malzemedeki bor miktarı belirlenememiştir).

CdTe katkılı RG850 renkli filtre cam, elmas testere ile 10x10x1.5 mm boyutlarında numunelere kesilmiştir. Bu küçük numunelerden bazıları 1000 °C'de yaklaşık 10 dakika kadar bekletildikten sonra, oda sıcaklığına hızlı bir şekilde soğutulmuştur. Koyu kırmızı numuneler bu işlem sonucunda renksiz bir görünüm kazanmışlardır. Renksiz saydam numunelere 575 °C ve 675 °C sıcaklıkları arasında çeşitli sürelerde ısıtma işlemi uygulanmıştır. Numunelere uygulanan ısıtma işlemi ile numunelerin başlangıçta solgun sarı renk aldığı ve ısıtma işlemin sürmesiyle sırasıyla açık portakal, kahverengi ve kırmızı bir renk kazandığı görülmüştür. Bu işlemlerin tümünde, numuneler platinyum levha üzerine birbirlerine değmeyecek şekilde dizilmişlerdir. Platinyum levha numunelerin seramik malzeme ile temas etmesini engelleyerek, oda sıcaklığına hızlı soğutma esnasında numunelerin saydam bir renk almasını sağlar.

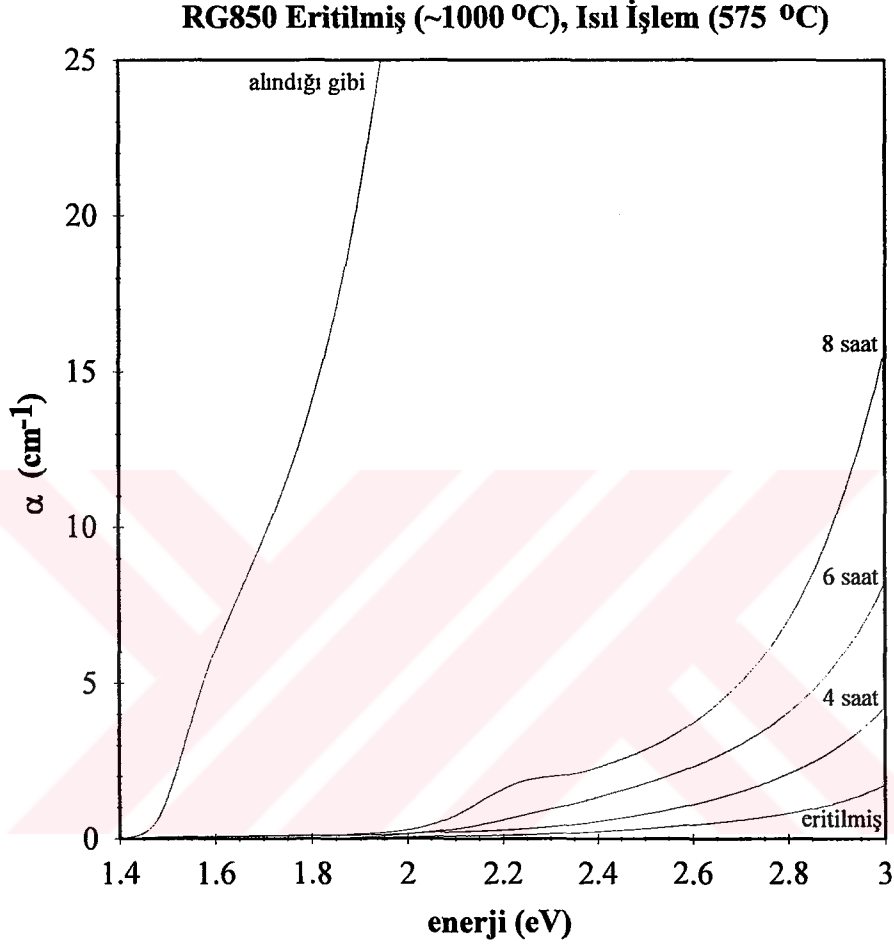
Optik ölçümlerin alınabilmesi için öncelikle numunelerin her iki yüzü de P60d'lik kalın zımparadan başlanarak, sırasıyla, 120c, 180c, 220c, 320c, 400c, 600c, 800c'lik zımparalarla zımparalanmıştır. Zımparalama işlemi numunenin kalınlığının azaltılmasına yardımcı olduğu gibi, parlatma işlemi öncesi de bir hazırlık basamağıdır. Parlatma işleminin gerçekleştirilebilmesi için öncelikle temiz çuha üzerine 7 mikronluk elmas pasta (elmas macunu) sürülmüştür. Daha sonra numunelerin her iki yüzeyi de dikkatli bir şekilde çuhanın takıldığı parlatma makinesi ile parlatılmıştır. Parlatma işlemi ise numune yüzeyinden olan yansımaları mümkün olduğu kadar azaltmak için çok dikkatli bir şekilde yapılmalıdır. Zımparalama ve parlatma işlemi biten numuneler alkol içinde bir süre bekletilmiştir. Alkolden

ıkarılan numuneler kurutulduktan sonra kalınlıkları eřitli yerlerinden dijital kompas ile ölölerek 0.5 mm civarında kalınlıęa sahip olup olmadıklarına bakılmıřtır. Yeterli kalınlıęa gelmemiř olan numuneler iin yukarıdaki zımparalama ve parlatma iřlemleri tekrarlanmıřtır. Yeterli kalınlıęa gelmiř numuneler numaralandırılarak optik ölümler alınması iin hazır hale getirilmiřtir.



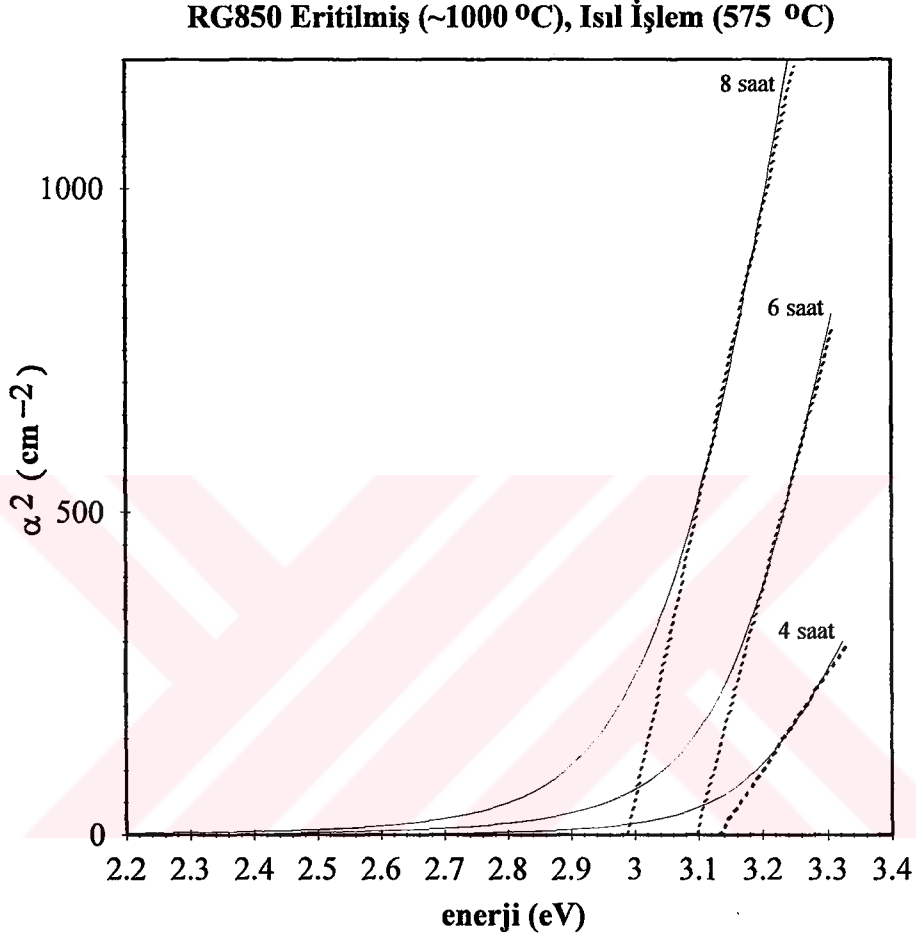
5. OPTİK SOĞURMA SPEKTRUMLARI

Bu bölümde, yapılan bir çok ölçüm sonucunda elde edilen optik soğurma spektrumları ve bu spektrumların değerlendirilmesi verilmiştir*.

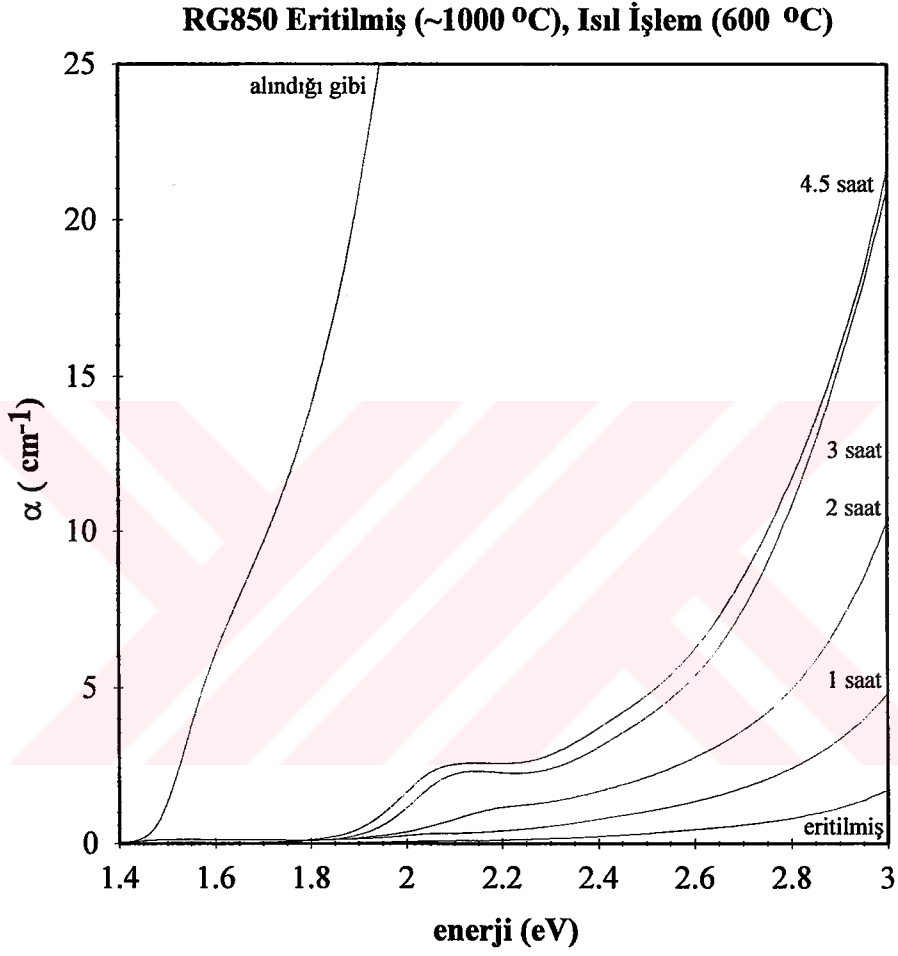


Şekil 5.1 1000 °C’de ~10 dakika eritilmiş numune eritilmiş, 1000 °C’de ~10 dakika eritilip 575 °C’de 4 saat, 6 saat ve 8 saat ısıl işlem uygulanmış numuneler, sırasıyla, 4 saat, 6 saat, 8 saat ve herhangi bir işlem uygulanmamış numune alındığı gibi kısaltmaları ile yukarıdaki şekilde verilmiştir.

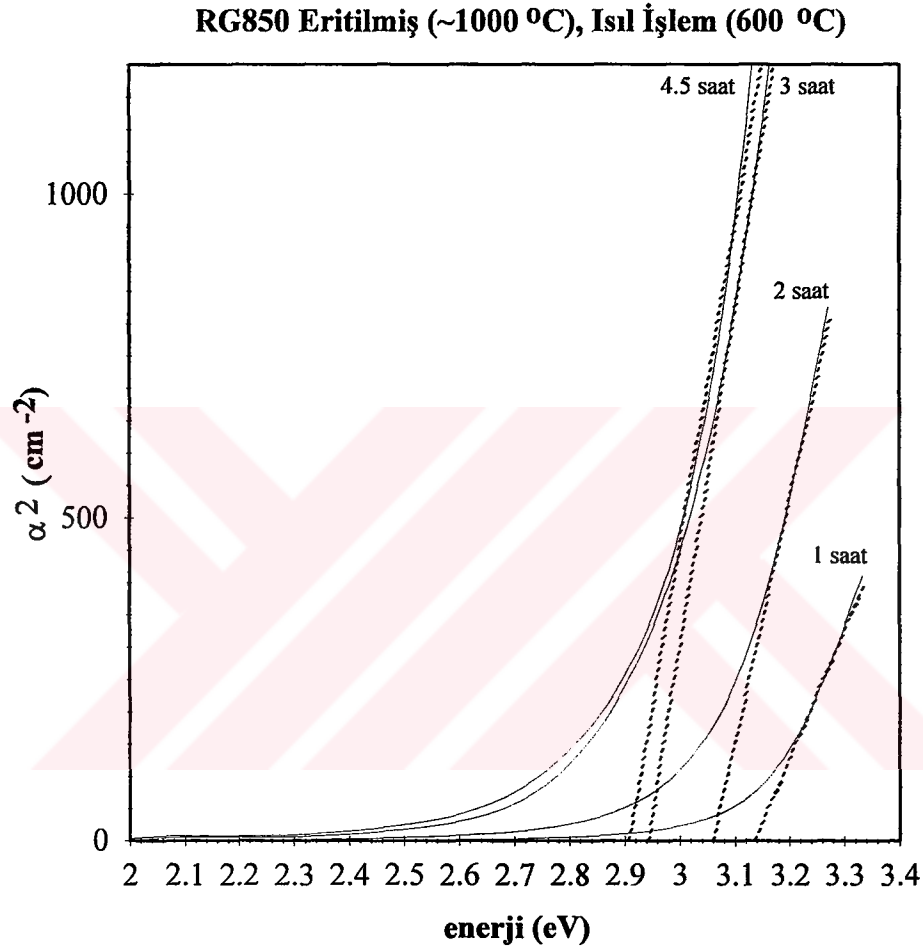
* Optik soğurma grafikleri Stanford Graphics programı ile hazırlanmıştır.



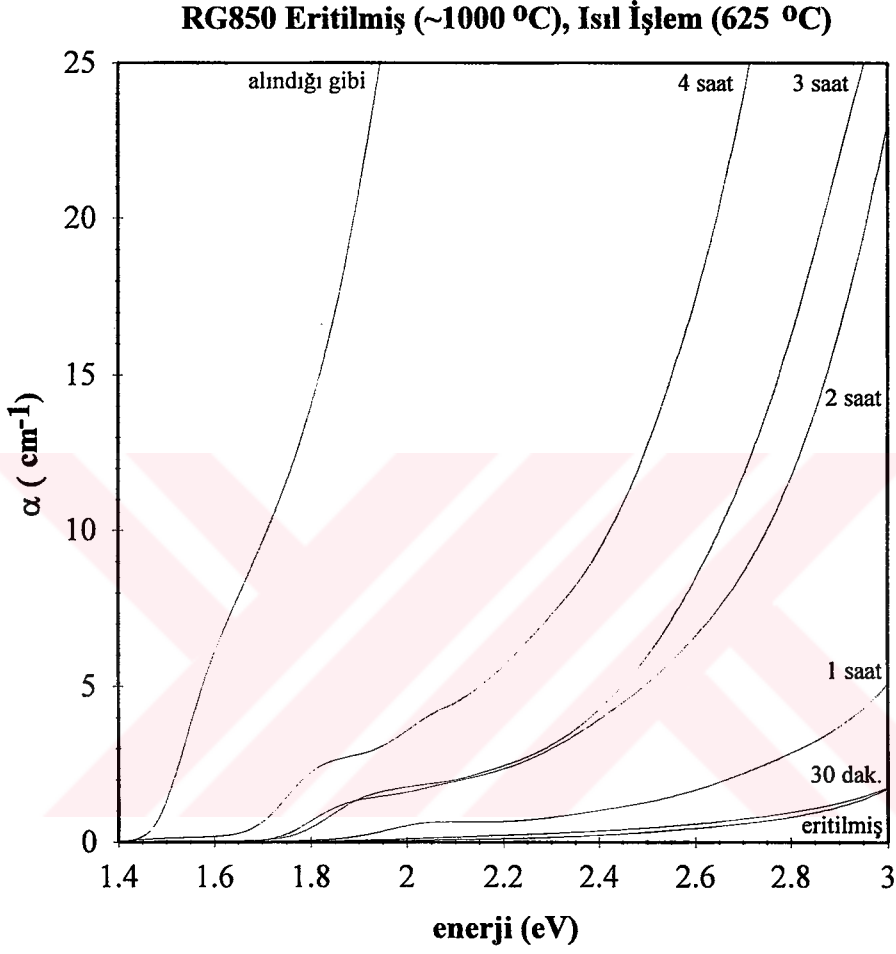
Şekil 5.2 1000 °C’de ~10 dakika eritilip 575 °C’de 4 saat, 6 saat ve 8 saat ısıtılma işlemi uygulanmış numunelerin birbirlerine göre soğurma sınırlarının kaymaları yukarıdaki şekilde gösterilmiştir.



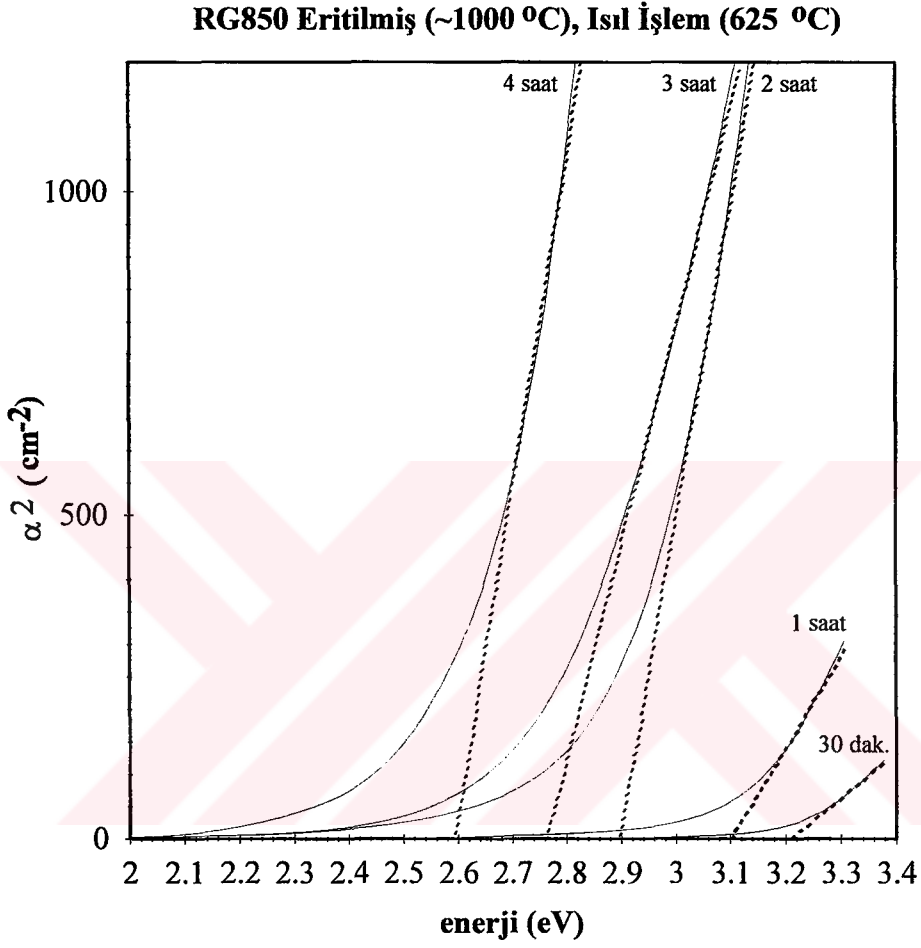
Şekil 5.3 1000 °C’de ~10 dakika eritilmiş numune eritilmiş, 1000 °C’de ~10 dakika eritilip 600 °C’de 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4.5 saat ısıl işlem uygulanmış numuneler, sırasıyla, 1 saat, 2 saat, 3 saat, 4.5 saat ve herhangi bir işlem uygulanmamış numune alındığı gibi kısaltmaları ile yukarıdaki şekilde verilmiştir.



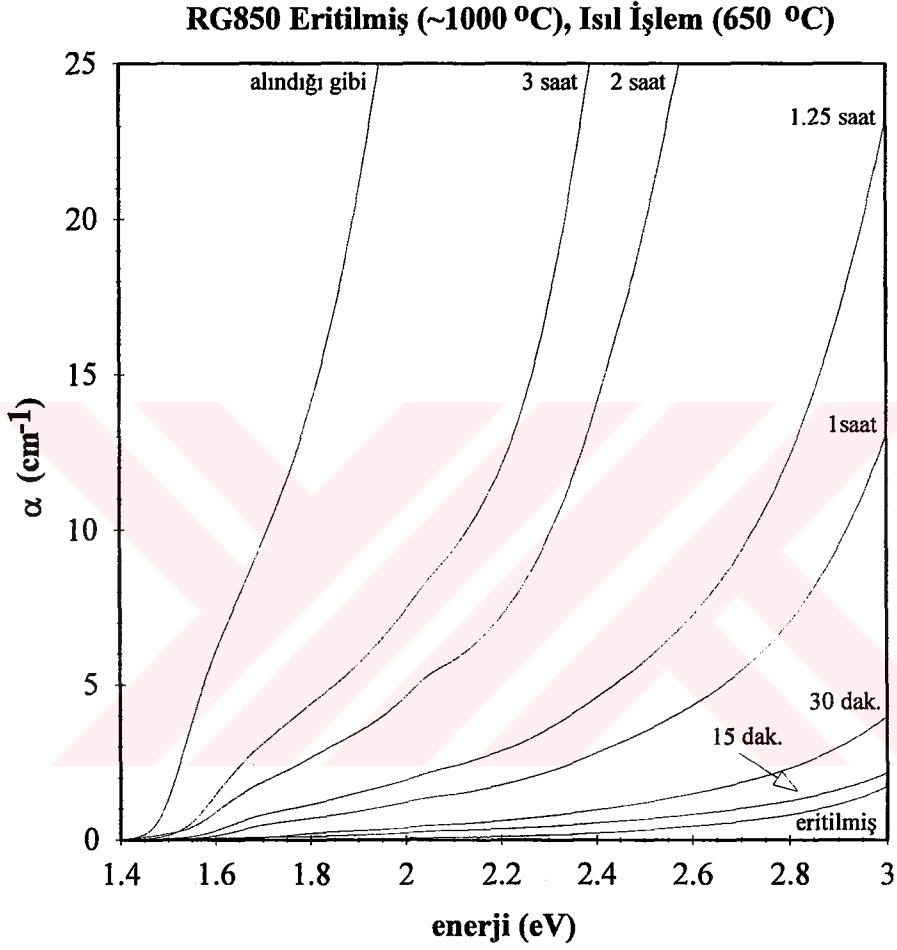
Şekil 5.4 1000 °C'de ~10 dakika eritilip 600 °C'de 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4.5 saat ısıtılmış numunelerin birbirlerine göre soğurma sınırlarının kaymaları yukarıdaki şekilde gösterilmiştir.



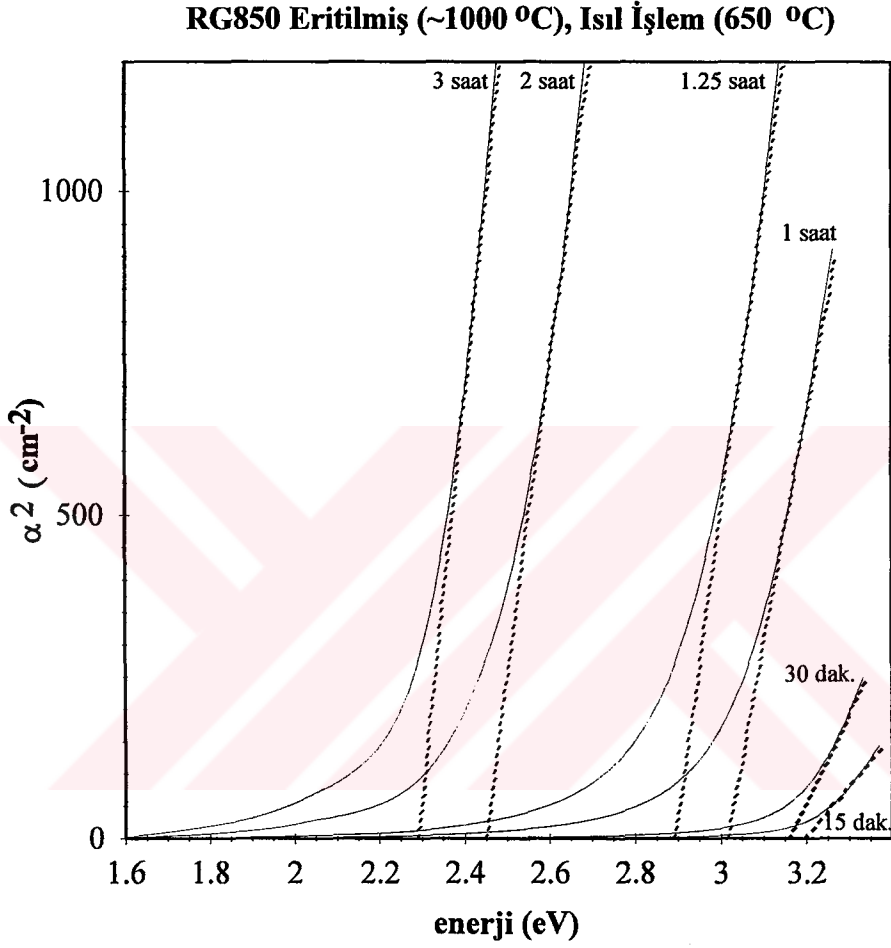
Şekil 5.5 1000 °C’de ~10 dakika eritilmiş numune eritilmiş, 1000 °C’de ~10 dakika eritilip 625 °C’de 30 dakika, 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4 saat ısıtılma işlemi uygulanmış numuneler, sırasıyla, 30 dak., 1 saat, 2 saat, 3 saat, 4 saat ve herhangi bir işlem uygulanmamış numune alındığı gibi kısaltmaları ile yukarıdaki şekilde verilmiştir.



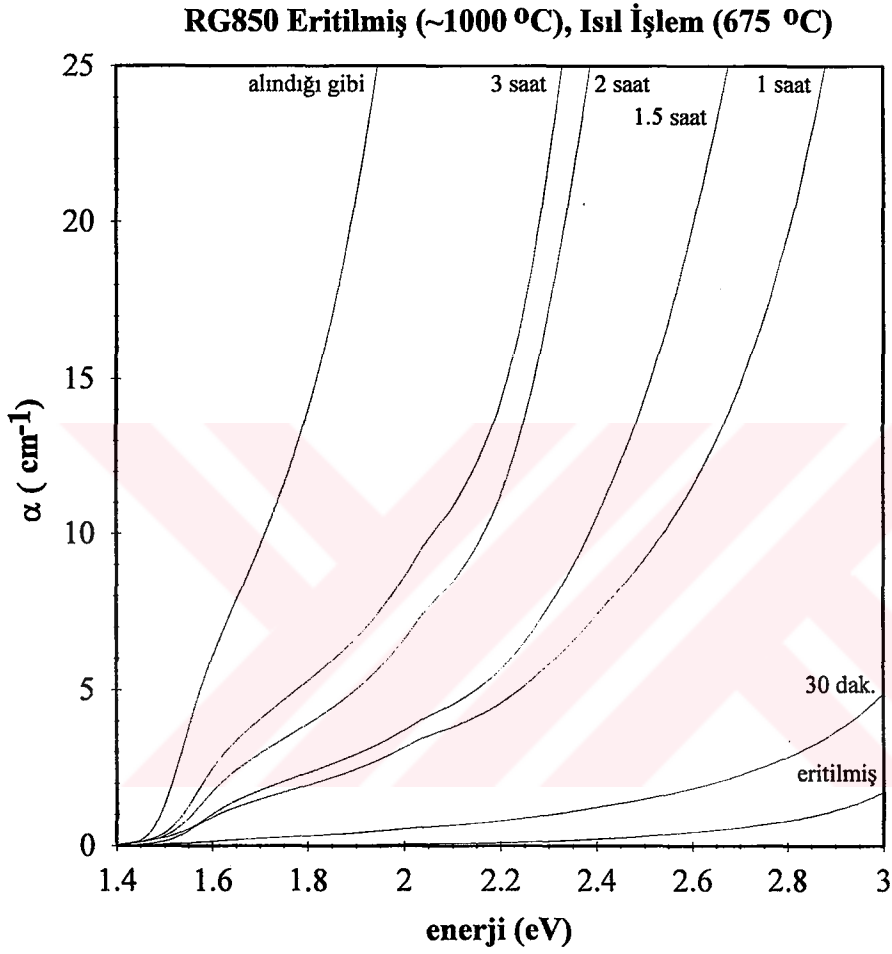
Şekil 5.6 1000 °C’de ~10 dakika eritilip 625 °C’de 30 dakika, 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4 saat ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin birbirlerine göre soğurma sınırlarının kaymaları yukarıdaki şekilde gösterilmiştir.



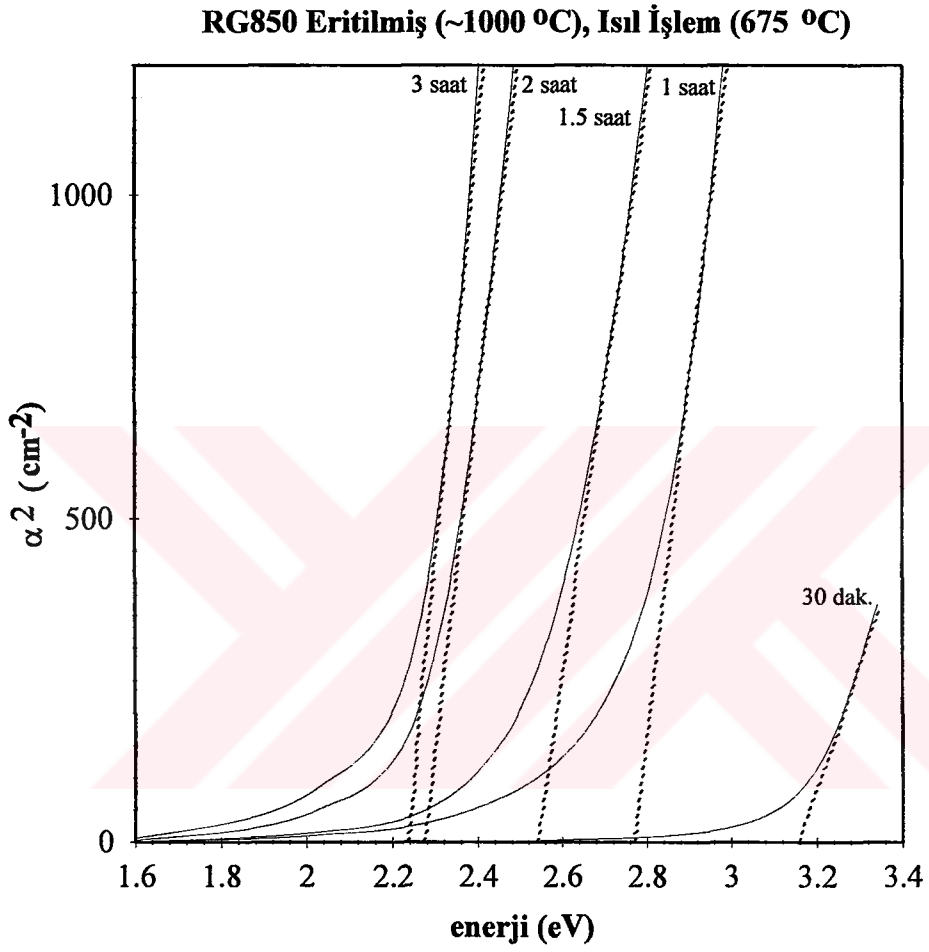
Şekil 5.7 1000 °C’de ~10 dakika eritilmiş numune eritilmiş, 1000 °C’de ~10 dakika eritilip 650 °C’de 15 dakika, 30 dakika, 1 saat, 1.25 saat, 2 saat ve 3 saat ısıtım uygulanmış numuneler, sırasıyla, 15 dak., 30 dak., 1 saat, 1.25 saat, 2 saat ve 3 saat ve herhangi bir işlem uygulanmamış numune alındığı gibi kısaltmaları ile yukarıdaki şekilde verilmiştir.



Şekil 5.8 1000 °C’de ~10 dakika eritilip 650 °C’de 15 dakika, 30 dakika, 1 saat, 1.25 saat, 2 saat ve 3 saat ısıl işlem uygulanmış numunelerin birbirlerine göre soğurma sınırlarının kaymaları yukarıdaki şekilde gösterilmiştir.



Şekil 5.9 1000 °C’de ~10 dakika eritilmiş numune eritilmiş, 1000 °C’de ~10 dakika eritilip 675 °C’de 30 dakika, 1 saat, 1.5 saat, 2 saat ve 3 saat ısıtılma uygulanmış numuneler, sırasıyla, 30 dak., 1 saat, 1.5 saat, 2 saat, 3 saat ve herhangi bir işlem uygulanmamış numune alındığı gibi kısaltmaları ile yukarıdaki şekilde verilmiştir.



Şekil 5.10 1000 °C’de ~10 dakika eritilip 675 °C’de 30 dakika, 1 saat, 1.5 saat, 2 saat ve 3 saat ısıtılma uygulanmış numunelerin birbirlerine göre soğurma sınırlarının kaymaları yukarıdaki şekilde gösterilmiştir

5.1 Optik Soğurma Spektrumlarının Değerlendirilmesi

5.1.1 Şekil 5.1 ve Şekil 5.2'nin Değerlendirilmesi

Şekil 5.1'de 1000 °C'de ~10 dakika eritilip 575 °C'de 4 saat, 6 saat ve 8 saat ısıtılma işlemi uygulanmış üç numunenin, 1000 °C'de ~10 dakika eritilip herhangi bir ısıtılma işlemi uygulanmamış numunenin (eritilmiş) ve hiçbir işlem uygulanmamış numunenin (alındığı gibi) enerji- α optik soğurma spektrumu verilmiştir. Eritilmiş numunenin soğurma katsayısı 3 eV'ye kadar çok yavaş artmış olup, 3 eV'de soğurma katsayısı $\sim 1.75 \text{ cm}^{-1}$ 'dir. 1.4 eV-3 eV arasında, soğurma spektrumunda numuneye uygulanan ısıtılma süresinin artmasıyla numunenin soğurması artmış olup, eritilmiş numunenin soğurması en düşük soğurma, hiçbir işlem uygulanmamış numunenin soğurması en yüksek soğurmadır. Soğurma spektrumunda 8 saat ısıtılma işlemi uygulanmış numune $\sim 2.25 \text{ eV}$ 'de yumuşak bir tepe vermiştir. 8 saat ısıtılma işlemi uygulanmış numunenin soğurma spektrumunda verdiği tepenin soğurma katsayısı $\sim 1.75 \text{ cm}^{-1}$ 'dir.

Şekil 5.2'de 1000 °C'de ~10 dakika eritilip 575 °C'de 4 saat, 6 saat ve 8 saat ısıtılma işlemi uygulanmış üç numunenin enerji- α^2 soğurma spektrumu verilmiştir. Isıtılma işlemi uygulanmış numunelerin soğurma spektrumlarının doğrusal kısmına ekstrapolasyon yapılmıştır. Ekstrapolasyon sonucu elde edilen doğruların enerji eksenini kestiği ($\alpha^2 = 0$) noktalar her bir numune için soğurma sınırını verir. 4 saat, 6 saat ve 8 saat ısıtılma işlemi uygulanmış numunelerin soğurma sınırları incelendiğinde, numuneye uygulanan ısıtılma süresinin artması ile numunenin soğurma sınırının $\sim 3.14 \text{ eV}$ 'den başlayıp $\sim 2.98 \text{ eV}$ 'ye ilerlediği görülür. Enerji- α^2 soğurma spektrumları arasında küçük enerjiye doğru ilerlemenin en düşük hızlı olduğu spektrumdur.

5.1.2 Şekil 5.3 ve Şekil 5.4'ün Değerlendirilmesi

Şekil 5.3'de 1000 °C'de ~10 dakika eritilip 600 °C'de 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4.5 saat ısıtılma işlemi uygulanmış dört numunenin, 1000 °C'de ~10 dakika eritilip herhangi bir ısıtılma işlemi uygulanmamış numunenin (eritilmiş) ve hiçbir işlem uygulanmamış numunenin (alındığı gibi) enerji- α optik soğurma spektrumu verilmiştir. 1.4 eV-3 eV arasında, soğurma spektrumunda numuneye uygulanan ısıtılma süresinin artmasıyla numunenin soğurması artmış olup, eritilmiş numunenin soğurması en düşük soğurma, hiçbir işlem uygulanmamış numunenin

soğurması en yüksek soğurmadır. Soğurma spektrumunda 2 saat, 3 saat ve 4.5 saat ısıtım işlem uygulanmış numuneler 2 eV-2.2 eV arasında yumuşak bir tepe vermişlerdir. 2 saat, 3 saat ve 4.5 saat ısıtım işlem uygulanmış numunelerin soğurma spektrumunda verdikleri tepelerin enerji değerleri karşılaştırıldığında, numuneye uygulanan ısıtım süresinin artmasıyla numuneye ait tepenin enerji değerinin daha küçük enerjilere doğru ilerlediği görülür. Soğurma spektrumunda 2 saat, 3 saat ve 4.5 saat ısıtım işlem uygulanmış numunelere ait tepelerin soğurma katsayıları sırasıyla, $\sim 1 \text{ cm}^{-1}$, $\sim 2.25 \text{ cm}^{-1}$ ve $\sim 2.5 \text{ cm}^{-1}$ 'dir.

Şekil 5.4'de 1000 °C'de ~ 10 dakika eritilip 600 °C'de 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4.5 saat ısıtım işlem uygulanmış dört numunenin enerji- α^2 soğurma spektrumu verilmiştir. Isıtım işlem uygulanmış numunelerin soğurma spektrumlarının doğrusal kısmına ekstrapolasyon yapılmıştır. Ekstrapolasyon sonucu elde edilen doğruların enerji eksenini kestiği ($\alpha^2 = 0$) noktalar her bir numune için soğurma sınırını verir. 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4.5 saat ısıtım işlem uygulanmış numunelerin soğurma sınırları incelendiğinde, numuneye uygulanan ısıtım süresinin artması ile numunenin soğurma sınırının $\sim 3.14 \text{ eV}$ 'den başlayıp $\sim 2.9 \text{ eV}$ 'ye ilerlediği görülür.

5.1.3 Şekil 5.5 ve Şekil 5.6'nın Değerlendirilmesi

Şekil 5.5'de 1000 °C'de ~ 10 dakika eritilip 625 °C'de 30 dakika, 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4 saat ısıtım işlem uygulanmış beş numunenin, 1000 °C'de ~ 10 dakika eritilip herhangi bir ısıtım işlem uygulanmamış numunenin (eritilmiş) ve hiçbir işlem uygulanmamış numunenin (alındığı gibi) enerji- α optik soğurma spektrumu verilmiştir. 1.7 eV-1.9 eV arasında 2 saat ısıtım işlem uygulanmış ve 3 saat ısıtım işlem uygulanmış numunenin soğurma spektrumu karşılaştırıldığında, 2 saat ısıtım işlem uygulanmış numunenin soğurması 3 saat ısıtım işlem uygulanmış numunenin soğurmasından daha büyüktür. Bu durum dışında, 1.4 eV-3 eV arasında soğurma spektrumunda numuneye uygulanan ısıtım süresinin artmasıyla numunenin soğurması artmış olup, eritilmiş numunenin soğurması en düşük soğurma, hiçbir işlem uygulanmamış numunenin soğurması en yüksek soğurmadır. Soğurma spektrumunda 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4 saat ısıtım işlem uygulanmış numuneler 1.75 eV-2.05 eV arasında yumuşak bir tepe vermişlerdir. 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4 saat ısıtım işlem uygulanmış numunelerin soğurma spektrumunda verdikleri tepelerin enerji değerleri karşılaştırıldığında, numuneye uygulanan ısıtım süresinin artmasıyla numuneye ait tepenin enerji değerinin daha küçük enerjilere doğru ilerlediği görülür. Soğurma spektrumunda 1 saat, 2 saat, 3 saat ve

4 saat ısıtım işlem uygulanmış numunelere ait tepelerin soğurma katsayıları sırasıyla, $\sim 0.5 \text{ cm}^{-1}$, $\sim 1.25 \text{ cm}^{-1}$, $\sim 1.25 \text{ cm}^{-1}$ ve $\sim 2.25 \text{ cm}^{-1}$ 'dir.

Şekil 5.6'da 1000°C 'de ~ 10 dakika eritilip 625°C 'de 30 dakika, 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4 saat ısıtım işlem uygulanmış beş numunenin enerji- α^2 soğurma spektrumu verilmiştir. Isıtım işlem uygulanmış numunelerin soğurma spektrumlarının doğrusal kısmına ekstrapolasyon yapılmıştır. Ekstrapolasyon sonucu elde edilen doğruların enerji eksenini kestiği ($\alpha^2 = 0$) noktalar her bir numune için soğurma sınırını verir. 30 dakika, 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4 saat ısıtım işlem uygulanmış numunelerin soğurma sınırları incelendiğinde, numuneye uygulanan ısıtım işlem süresinin artması ile numunenin soğurma sınırının $\sim 3.22 \text{ eV}$ 'den başlayıp $\sim 2.58 \text{ eV}$ 'ye ilerlediği görülür.

5.1.4 Şekil 5.7 ve Şekil 5.8'in Değerlendirilmesi

Şekil 5.7'de 1000°C 'de ~ 10 dakika eritilip 650°C 'de 15 dakika, 30 dakika, 1 saat, 1.25 saat, 2 saat ve 3 saat ısıtım işlem uygulanmış altı numunenin, 1000°C 'de ~ 10 dakika eritilip herhangi bir ısıtım işlem uygulanmamış numunenin (eritilmiş) ve hiçbir işlem uygulanmamış numunenin (alındığı gibi) enerji- α optik soğurma spektrumu verilmiştir. 1.4 eV - 3 eV arasında, soğurma spektrumunda numuneye uygulanan ısıtım işlem süresinin artmasıyla numunenin soğurması artmış olup, eritilmiş numunenin soğurması en düşük soğurma, hiçbir işlem uygulanmamış numunenin soğurması en yüksek soğurmadır. Soğurma spektrumunda 2 saat ve 3 saat ısıtım işlem uygulanmış numuneler $\sim 1.65 \text{ eV}$ 'de yumuşak bir tepe (omuz) vermiştir. 2 saat ve 3 saat ısıtım işlem uygulanmış numunelerin soğurma spektrumunda verdikleri tepelerin soğurma katsayıları sırasıyla $\sim 1.5 \text{ cm}^{-1}$ ve $\sim 2.5 \text{ cm}^{-1}$ 'dir.

Şekil 5.8'de 1000°C 'de ~ 10 dakika eritilip 650°C 'de 15 dakika, 30 dakika, 1 saat, 1.25 saat, 2 saat ve 3 saat ısıtım işlem uygulanmış altı numunenin enerji- α^2 soğurma spektrumu verilmiştir. Isıtım işlem uygulanmış numunelerin soğurma spektrumlarının doğrusal kısmına ekstrapolasyon yapılmıştır. Ekstrapolasyon sonucu elde edilen doğruların enerji eksenini kestiği ($\alpha^2 = 0$) noktalar her bir numune için soğurma sınırını verir. 15 dakika, 30 dakika, 1 saat, 1.25 saat, 2 saat ve 3 saat ısıtım işlem uygulanmış numunelerin soğurma sınırları incelendiğinde, numuneye uygulanan ısıtım işlem süresinin artması ile numunenin soğurma sınırının $\sim 3.2 \text{ eV}$ 'den başlayıp $\sim 2.3 \text{ eV}$ 'ye ilerlediği görülür.

5.1.5 Şekil 5.9 ve Şekil 5.10'un Değerlendirilmesi

Şekil 5.9'da 1000 °C'de ~10 dakika eritilip 675 °C'de 30 dakika, 1 saat, 1.5 saat, 2 saat ve 3 saat ısıtıl işlem uygulanmış beş numunenin, 1000 °C'de ~10 dakika eritilip herhangi bir ısıtıl işlem uygulanmamış numunenin (eritilmiş) ve hiçbir işlem uygulanmamış numunenin (alındığı gibi) enerji- α optik soğurma spektrumu verilmiştir. 1.4 eV-1.6 eV arasında 1 saat ısıtıl işlem uygulanmış ve 1.5 saat ısıtıl işlem uygulanmış numunenin soğurma spektrumu karşılaştırıldığında, 1 saat ısıtıl işlem uygulanmış numunenin soğurması 1.5 saat ısıtıl işlem uygulanmış numunenin soğurmasından daha büyüktür. Bu durum dışında, 1.4 eV-3 eV arasında soğurma spektrumunda numuneye uygulanan ısıtıl işlem süresinin artmasıyla numunenin soğurması artmış olup, eritilmiş numunenin soğurması en düşük soğurma, hiçbir işlem uygulanmamış numunenin soğurması en yüksek soğurmadır. Soğurma spektrumunda 2 saat ve 3 saat ısıtıl işlem uygulanmış numuneler 1.6 eV-1.65 eV arasında yumuşak bir tepe (omuz) vermişlerdir. 2 saat ve 3 saat ısıtıl işlem uygulanan numunelerin soğurma spektrumunda verdikleri tepelerin soğurma katsayısı 1.75 cm^{-1} - 3.25 cm^{-1} arasındadır. Hiçbir işlem uygulanmamış numunenin (alındığı gibi) soğurma spektrumuna verilen spektrumlar içinde en fazla bu spektrumda 3 saat ısıtıl işlem uygulanmış numune ile yaklaşmıştır.

Şekil 5.10'da 1000 °C'de ~10 dakika eritilip 675 °C'de 30 dakika, 1 saat, 1.5 saat, 2 saat ve 3 saat ısıtıl işlem uygulanmış beş numunenin enerji- α^2 soğurma spektrumu verilmiştir. Isıtıl işlem uygulanmış numunelerin soğurma spektrumlarının doğrusal kısmına ekstrapolasyon yapılmıştır. Ekstrapolasyon sonucu elde edilen doğruların enerji eksenini kestiği ($\alpha^2 = 0$) noktalar her bir numune için soğurma sınırını verir. 30 dakika, 1 saat, 1.5 saat, 2 saat ve 3 saat ısıtıl işlem uygulanmış numunelerin soğurma sınırları karşılaştırıldığında, numuneye uygulanan ısıtıl işlem süresinin artması ile numunenin soğurma sınırının ~3.16 eV'den başlayıp ~2.24 eV'ye ilerlediği görülür. Enerji- α^2 soğurma spektrumları arasında küçük enerjiye doğru ilerlemenin en yüksek hızlı olduğu spektrumdur.

6. EKSİTON ENERJİ DÜZEYLERİNİN DENEYSEL OLARAK BELİRLENMESİ

Yapılan optik ölçümler sonucunda elde edilen optik spektrumlar 5. Bölüm’de verilmişti. 575 °C’den başlayan ve 675 °C’ye kadar 25 °C aralıklarla devam eden optik spektrumlar dikkatli bir şekilde incelendiğinde, Şekil 5.1’de 8 saat ısı işlem uygulanan numunenin, Şekil 5.3’de 2 saat, 3 saat ve 4.5 saat ısı işlem uygulanan numunelerin, Şekil 5.5’de 1 saat, 2 saat, 3 saat ve 4 saat ısı işlem uygulanan numunelerin, Şekil 5.7’de 2 saat ve 3 saat ısı işlem uygulanan numunelerin, Şekil 5.9’da 2 saat ve 3 saat ısı işlem uygulanan numunelerin soğurma grafiklerinde yumuşak bir tepe verdiği görülmüştü. Bu tepelere karşılık gelen enerji değerlerini bulmak için MATLAB 6.0’da hazırlanan sayısal türev alma programı ve H. Yükselici tarafından daha önceden QBASIC’de hazırlanmış olan bir model programı kullanılmıştır. Sayısal türev alma programından yararlanılarak tüm eğrilerin türevleri alınmıştır. Türevi alınan eğrilerin minimumları, soğurma grafiklerinde tepe veren eğrilerin maksimumlarına karşılık gelen enerji değerlerini vermiştir (Çizelge 6.1). Model programın kullanılması ile tepe veren eğrilerin maksimumlarının enerji değerleri daha büyük duyarlılıkla hesaplanmıştır. Bulunan enerji değerleri numunelerin içindeki kuantum noktalarının eksiton enerji düzeylerini vermektedir. Ayrıca, model programı numuneler içindeki kuantum noktalarının yarıçap dağılımı ve ortalama yarıçapı hakkında da bilgi vermektedir (Çizelge 6.2).

Bölüm 2.2’de bir kuantum noktasının enerji düzeyleri bulunmuştu. (2.19) eşitliğine yarı iletkenlere özgü olan yasak enerji aralığının değerinin de eklenmesi gerekir. Böylece, bir kuantum noktasının enerji düzeyi yarıçapına bağlı olarak (6.1) eşitliği ile verilebilir.

$$E_{(R)} = E_g + \frac{\hbar^2}{2R^2} \left[\frac{X_{n_e, \ell_e}^2}{m_e^*} + \frac{X_{n_h, \ell_h}^2}{m_h^*} \right] \quad (6.1)$$

(6.1) bağıntısında E_g yasak enerji aralığı, R kuantum noktasının yarıçapıdır. Çizelge 6.1’deki veriler incelendiğinde birinci eksiton enerji düzeylerinin, numuneye uygulanan ısı işlem sıcaklığı ve ısı işlem süresiyle değiştiği görülür. Isı işlem sıcaklığı ve süresi numune içerisindeki kuantum noktalarının ortalama yarıçapını değiştirecektir (Çizelge 6.2). Ortalama yarıçapın değişmesi ise (6.1) bağıntısı gereği eksiton enerji düzeylerinin değişmesine yol açacaktır.

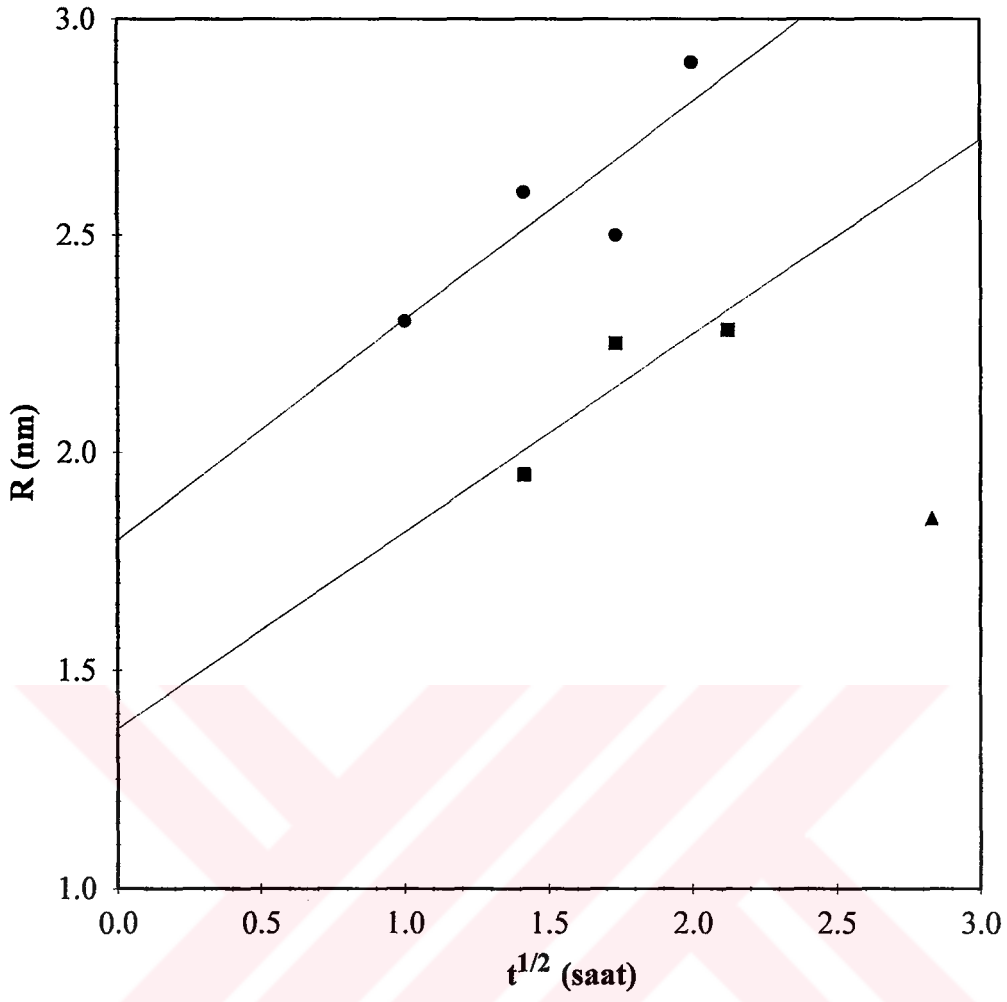
Çizelge 6.1 Türev programı ile bulunmuş olan birinci eksiton enerji düzeyleri

	575 °C	600 °C	625 °C	650 °C	675 °C
15 dakika	—	—	—	—	—
30 dakika	—	—	—	—	—
60 dakika	—	—	2 eV	—	—
75 dakika	—	—	—	—	—
90 dakika	—	—	—	—	—
120 dakika	—	2.2 eV	1.9 eV	1.7 eV	1.6 eV
180 dakika	—	2.1 eV	1.9 eV	1.7 eV	1.6 eV
240 dakika	—	—	1.8 eV	—	—
270 dakika	—	2.1 eV	—	—	—
360 dakika	—	—	—	—	—
480 dakika	2.2 eV	—	—	—	—

Çizelge 6.2 Modelleme ile bulunmuş olan ortalama parçacık yarıçapları

	575 °C	600 °C	625 °C
60 dakika	—	—	2.3 nm
120 dakika	—	1.95 nm	2.6 nm
180 dakika	—	2.25 nm	2.5 nm
240 dakika	—	—	2.9 nm
270 dakika	—	2.28 nm	—
480 dakika	1.85 nm	—	—

Çizelge 6.2’deki bilgilerden yararlanılarak numuneye ısıtılma işlemi uygulanmadan önce numune içinde oluşmuş kuantum noktalarının ortalama yarıçapı, yarıçapın zamanla değişim grafiğinden elde edilir. Yarıçapın zamanın karekökü ile değişimini gösteren Şekil 6.1’den yararlanılarak ısıtılma işlemi uygulanmadan önce numune içinde oluşmuş kuantum noktalarının ortalama yarıçapı ~1.6 nm bulunmuştur.



Şekil 6.1 Yarıçapın zamanın karekökü ile değişimini göstermektedir. Grafikteki siyah daireler 625 °C'yi, siyah kareler 600 °C'yi, siyah üçgen 575 °C'yi temsil etmektedir.

7. MALZEMENİN AKTİVASYON ENERJİSİNİN HESABI

(7.1) eşitliği daha önceden (6.1) eşitliği ile verilmişti.

$$E = E_g + \frac{\hbar^2}{2R^2} \left[\frac{X_{n_e, \ell_e}^2}{m_e^*} + \frac{X_{n_h, \ell_h}^2}{m_h^*} \right] \quad (7.1)$$

$$A = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{X_{n_e, \ell_e}^2}{m_e^*} + \frac{X_{n_h, \ell_h}^2}{m_h^*} \right] \quad (7.2)$$

$$E = E_g + \frac{A}{R^2} \quad (7.3)$$

(7.3) eşitliğinde R^2 yerine (2.42) ifadesi yazılırsa,

$$E = E_g + \frac{A}{R_0^2 + C_1 D t} \quad (7.4)$$

(7.4) eşitliği elde edilir. (7.4) eşitliğindeki D yayılım katsayısı yerine (2.24) bağıntısı yazılıp gerekli düzenlemeler yapılırsa,

$$E = E_g + \frac{A}{R_0^2 + C_1 \left(D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}} \right) t} \quad (7.5)$$

$$E - E_g = \frac{A}{R_0^2 + C_1 \left(D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}} \right) t} \quad (7.6)$$

$$R_0^2 + C_1 \left(D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}} \right) t = \frac{A}{E - E_g} \quad (7.7)$$

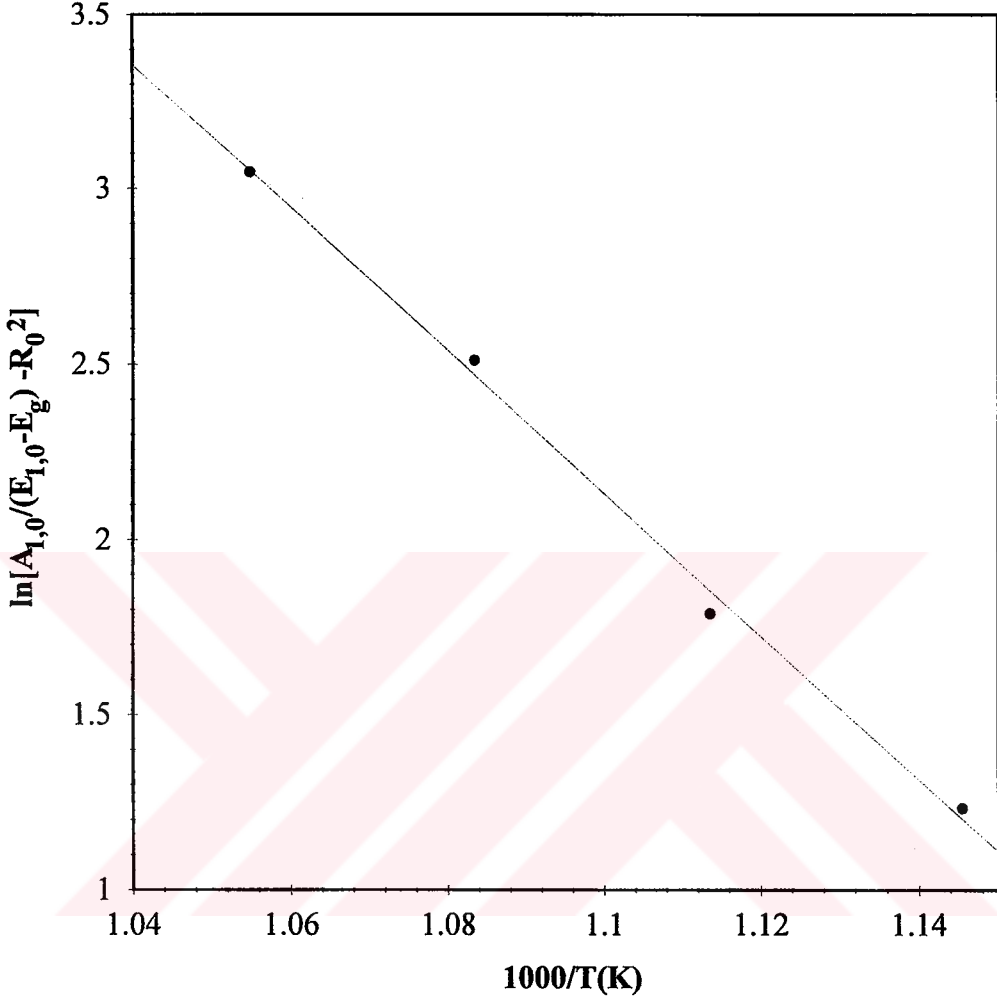
$$\frac{A}{E - E_g} - R_0^2 = C_1 \left(D_0 e^{-\frac{Q_d}{RT}} \right) t \quad (7.8)$$

(7.8) eşitliği elde edilir. (7.8) ifadesinin her iki tarafının doğal logaritması alınır,

$$\ln \left(\frac{A}{E_{n_e, \ell_e} - E_g} - R_0^2 \right) = -\frac{Q_d}{RT} + \ln(C_1 D_0 t) \quad (7.9)$$

(7.9) eşitliği elde edilir.

Elde edilen (7.9) bağıntısına dayanarak, C_1 sabit kabul edilirse ifadenin sol kısmının $1000/T$ 'ye göre grafiği çizildiğinde eğrinin eğiminden aktivasyon enerjisi (Q_d) kJ/mol cinsinden hesaplanabilir.



Şekil 7.1 $\ln[A_{1,0}/(E_{1,0}-E_g) - R_0^2]$ 'nin $1000/T$ 'ye göre grafiği.

Elde edilen verilerden yararlanılarak Şekil 7.1'deki grafik elde edilmiştir. Şekil 7.1'deki eğrinin eğiminden cam içine katkılı CdTe yarıiletken kuantum noktalarının aktivasyon enerjisi hesaplanabilir. Eğrinin eğimi -20.397 hesaplanmıştır. Eğim evrensel gaz sabiti ($R = 8.31 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$) ile çarpılırsa malzemenin aktivasyon enerjisi $\sim 170 \text{ kJ/mol}$ bulunur.

8. SONUÇLAR ve ÖNERİLER

1000 °C'de ~10 dakika eritilip, 575 °C'de 8 saat ısıtıl işlem uygulanmış CdTe katkılı cam solgun sarı renk almıştır. Bu renk, ısıtıl işlem süresinin veya ısıtıl işlem sıcaklığının artması ile sırasıyla açık portakal, kahverengi ve kırmızı bir renge dönüşmüştür. 1000 °C'de eritilip, ısıtıl işlem uygulanmamış camda CdTe kuantum noktalarının ortalama yarıçapı ~1.6 nm bulunmuştur. Ortalama kuantum noktası yarıçapının, ısıtıl işlem süresinin veya ısıtıl işlem sıcaklığının artması ile arttığı görülmüş ve en büyük ortalama kuantum noktası yarıçapı 625 °C'de 4 saat ısıtıl işlem uygulanmış numunede 2.9 nm bulunmuştur. Ortalama kuantum noktası yarıçapının ısıtıl işlem süresi veya ısıtıl işlem sıcaklığı ile artması, optik soğurma spektrumlarında kırmızıya kaymaya yol açmıştır.

Tüm ısıtıl işlemlerde, birinci eksiton tepesinin değeri 3 cm⁻¹'in altında kalmıştır. Birinci eksiton tepelerinde, soğurma katsayısının küçük olması numune içerisinde az sayıda CdTe kuantum noktasının oluştuğunu göstermektedir. Az sayıda CdTe kuantum noktasının oluşma nedeni Te'nin okside olması ve 1000 °C'de eritme işlemi sırasında erime noktası 1092 °C olan normal büyüklükteki CdTe parçacıklarına göre, yüzey gerilimlerinden dolayı daha düşük bir erime noktasına sahip CdTe kuantum noktalarının buharlaşma olasılığının yüksek olmasıdır. Te'nin okside olmasını engellemek için numunelere oksijen kontrollü bir atmosferde ısıtıl işlem uygulanması gerektiği görülmüştür. Ayrıca, numunelere uygulanacak çift ısıtıl işlem numunelerdeki kuantum noktalarının ortalama yarıçap dağılımının azalmasına katkıda bulunacaktır. Ortalama yarıçap dağılımının düşük olması malzemenin belirli bir dalgaboyundaki ışığa duyarlı olmasını sağlayacağı için teknolojik uygulamalar açısından önemlidir. 1000 °C'de eritilip, 575 °C - 675 °C arasında ısıtıl işlem uygulanmış CdTe katkılı camlarda Mie saçılma kuramı, kuvvetli hapis durumunda küresel kuyu içerisinde eksiton için Schrödinger denkleminin çözümü ve Arrhenius eşitliğinden yararlanılarak yayınımlı sınırlayan bileşen için aktivasyon enerjisi ~170 kJ/mol hesaplanmıştır (Çizelge 8.1).

Çizelge 8.1 CdTe kuantum noktalarının kısa zaman büyüme kinetiği sonuçları

Kuantum Noktası	Kısa Zaman Aktivasyon Enerjisi	En Küçük Kuantum Noktası Yarıçapı	Cam İçinde Kuantum Noktalarının Oluşması (Kontrollü Olmayan Atmosferde)
CdTe	170 kJ/mol	1.6 nm	Çok zayıf

KAYNAKLAR

- Arthurs, E. G. (1989), Light Sources Monochromators Detection Systems, Oriel Corporation, CT. (U.S.A.).
- Banfi, G., Degiorgio, V. ve Ricard, D. (1998), "Nonlinear Optical Properties of Semiconductor Nanocrystals", 3(47):447-510.
- Barbosa, L. C., Reynosa, V. C. S., de Paula, A. M., de Oliveira, C. R. M., Alves, O. L., Craiveich, A. F., Marotti, R. E., Brito Cruz, C. H. ve Cesar, C. L. (1997), "CdTe Quantum Dots by Melt Heat Treatment in Borosilicate Glasses", Journal of Non-Crystalline Solids, 219:205-211.
- Borelli, N. F., Hall, D. W., Holland, H. J. ve Smith, D. W. (1987), "Quatum Confinement Effects of Semiconducting Microcrystallites in Glass", Journal of Applied Physics, 12(61):5399-5409.
- Callister, William D. JR. (2000), Materials Science and Engineering an Introduction, John Wiley&Sons, New York.
- Ekimov, A. I., Efros, A. L. ve Onushchenko, A. A. (1985), "Quantum Size Effect in Semiconductor Microcrystals", Solid State Communications, 11(56):921-924.
- Fuyu, Y. ve Parker, J.M. (1988), "Quantum Size Effects in Heat Treated Cd(S,Se) Doped Glasses", 7(6):233-237.
- Goswami, A. (1992), Quantum Mechanics, Wm. C. Brown Publishers, Virginia.
- Glicsman, M. E. (1994), Diffusion in Solids (Lecture notes at RPI, Troy, NY).
- Liu, L. C. ve Risbud S. H. (1990), "Quantum-Dot Size-Distribution Analysis and Precipitation Stages in Semiconductor Doped Glasses", 1(68):28-32.
- Saleh, B. E. A. ve Teich, M. C. (1991), Fundamentals of Photonics, John Wiley & Sons, New York.
- Yükselici, M. H. (2001), "Two Different Mechanisms of Formation of Quantum Dots in Borosilicate Glass", 13:6123-6131.

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi : 18.04.1978

Doğum yeri : Erzincan

Lise : 1992-1995

Tevfik Sırrı Gür Lisesi (İçel)

Lisans : 1995-1999

Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı, Fizik Programı

Yüksek Lisans : 2000-Devam ediyor

Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı, Fizik Programı

Çalıştığı kurum

2000-Devam ediyor

YTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Araştırma Görevlisi

