

**YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**β -FeSi₂ İNCE FİMLERİN ELDE EDİLMESİ VE FİZİKSEL
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

Yüksek Fizikçi Beyhan TATAR

**FBE Fizik Anabilim Dalında
Hazırlanan**

DOKTORA TEZİ

Tez Savunma Tarihi : 08.02.2008

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Kubilay KUTLU (YTÜ)

Jüri Üyeleri : Prof. Dr. Işık KARABAY (YTÜ)
Prof. Dr. Yani SKARLATOS (BÜ)
Prof. Dr. Emel ÇINGİ (YTÜ)
Prof. Dr. Fatma TEPEHAN (İTÜ)

İSTANBUL, 2007

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
SİMGE LİSTESİ	iv
KISALTMA LİSTESİ	v
ŞEKİL LİSTESİ	vi
ÇİZELGE LİSTESİ	xi
ÖNSÖZ	xii
ÖZET	xiii
ABSTRACT	xiv
1. GİRİŞ	1
2. Genel Bilgiler	4
2.1 Heteroeklemler	4
2.2 Güneş Pilleri	7
2.2.1 P-n Eklem Güneş Pilleri	7
2.2.2 Schottky Eklem Güneş Pilleri	11
2.2.3 Heteroeklem Güneş Pilleri	12
2.3 Atom Hareketleri ve Difüzyon	13
2.3.1 Difüzyon	14
2.3.2 Difüzyon Kuralları	16
2.3.3 Radyasyon ile Uyarılmış Difüzyon	18
2.4 İnce Filmlerin Yapısı ve Oluşum Mekanizmaları	18
2.5 İnce Film Kaplama Teknikleri	22
2.5.1 Manyetik Alanda Sıçratma Yöntemleri	23
2.6 Nötral Molekül Demeti Kaynakları	26
2.7 İzgarasız İyon Demeti Kaynakları	27
2.8 β -FeSi ₂ Yarıiletkeninin Yapısı ve Özellikleri	29
2.8.1 β -FeSi ₂ 'nin Yapısal Özellikleri	29
2.8.2 β -FeSi ₂ 'nin Elektriksel ve Optiksel Özellikleri	33
3. DENEYSEL ÇALIŞMALAR	38
3.1 β -FeSi ₂ Filmlerin Dengelenmemiş Magnetron Yöntemi ile Hazırlanması	38
3.1.1 Altlıkların ve Hedefin Hazırlanması	38
3.1.2 β -FeSi ₂ Filmlerin Hazırlanması	38
3.2 β -FeSi ₂ Filmlerin Yapısal Özelliklerini Belirlenmesi İçin Kullanılan Metotlar ...	41
3.2.1 β -FeSi ₂ Filmlerin ve Eklemlerin XRD Yöntemi ile Analizi	41
3.2.2 β -FeSi ₂ Filmlerin Raman Spektroskopi Analizi	42
3.2.3 β -FeSi ₂ Filmlerin ve Si Altlıkların FT-IR Spektroskopi Analizi	43
3.2.4 β -FeSi ₂ Filmlerin GDOES Analizi	43

3.2.5	β -FeSi ₂ Filmlerin EDS Analizi	44
3.3	β -FeSi ₂ Filmlerin Yüzey Morfolojisinin Belirlenmesi İçin Kullanılan Metotlar ..	45
3.3.1	β -FeSi ₂ Filmlerin SEM Görüntüleri	45
3.3.2	β -FeSi ₂ Filmlerin FE-SEM Görüntüleri	45
3.3.3	β -FeSi ₂ Filmlerin AFM Görüntüleri	46
3.4	β -FeSi ₂ /Si Heteroeklemlerin Elektriksel Özelliklerinin Belirlenmesi	46
3.4.1	β -FeSi ₂ /Si Heteroeklemlerin Omik Kontaklarının Hazırlanması	46
3.4.2	β -FeSi ₂ Filmlerin Özdirençlerinin ve İletkenliklerinin Ölçülmesi	47
3.4.3	β -FeSi ₂ Filmlerin İletkenlik Tipi Ölçümleri	48
3.4.4	β -FeSi ₂ /Si Heteroeklemlerin Akım-Gerilim Karakteristiklerinin Belirlenmesi	49
3.5	β -FeSi ₂ /Si Heteroeklemlerin Optiksel Özelliklerinin Belirlenmesi	50
4.	BULGULAR	52
4.1	Kaplamada Kullanılan Fe Hedef ve Si Altlıkların XRD ve GDOES Analizleri ...	52
4.2	Nötral Molekül Kaynağı ile Etc Edilmiş Si Altlıkların Yüzey Özellikleri	55
4.3	β -FeSi ₂ filmlerin Yapısal Özellikleri	58
4.3.1	β -FeSi ₂ filmlerin XRD Analizi Sonuçları	58
4.3.2	β -FeSi ₂ filmlerin RAMAN Analizi Sonuçları	62
4.3.3	β -FeSi ₂ filmlerin FT-IR Analizi Sonuçları	65
4.3.4	β -FeSi ₂ filmlerin GDOES Analizi Sonuçları	66
4.3.5	β -FeSi ₂ filmlerin EDS Analizi Sonuçları	69
4.4	β -FeSi ₂ filmlerin Yüzey Özellikleri	72
4.4.1	β -FeSi ₂ filmlerin SEM Görüntüleri ve Yüzey Morfolojisi	72
4.4.2	β -FeSi ₂ filmlerin FE-SEM Görüntüleri	74
4.4.3	β -FeSi ₂ filmlerin AFM Görüntüleri ve Yüzey Topagrafyası	75
4.5	β -FeSi ₂ filmlerin Optik Özellikleri ve Yasak Bant Aralığının Hesaplanması	77
4.6	β -FeSi ₂ Filmlerin Elektriksel Özellikleri	81
4.6.1	β -FeSi ₂ Filmlerin Yüzey Özdirenç ve İletkenlik özellikleri	81
4.6.2	β -FeSi ₂ Filmlerin İletkenlik Tipleri	82
4.6.3	β -FeSi ₂ Filmlerin Akım-Gerilim Karakteristikleri	83
4.7	End-Hall Tipi İyon Kaynağı Kullanılarak Bombardıman Edilmiş β -FeSi ₂ Filmlerin Özelliği	92
4.8	End-Hall Tipi İyon Kaynağı Kullanılarak İyon Bombardıman Yardımı ile Üretilmiş β -FeSi ₂ Filmlerin Özelliği	97
5.	SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR	103
	KAYNAKLAR	109
	EKLER	114
	ÖZGEÇMİŞ	116

SİMGE LİSTESİ

a,b,c	Örgü Parametreleri
A_g	Raman Aktif Kipler
B_g	İnfrared Aktif Kipler
D	Difüzyon Katsayısı
e	Elektron Yüğü
E	Enerji
E_c	İletim Bandının dibi
E_v	Valans Bandının tavanı
E_g	Yasak Bant Aralığı
h	Plank Sabiti
I	Akım
I_{sc}	Kısa-devre Akımı
k	Boltzman Sabiti
N	Atom Konsantrasyonu
n	İdeallik Faktörü
J	Akım Yoğunluğu
q	Yük
Q	Aktivasyon Enerjisi
R	Direnç
R_s	Seri Direnç, Yüzey Direnci
T	Optik Geçirgenlik, Sıcaklık
t	Kaplama Süresi
V	Gerilim
V_{oc}	Açık-devre Gerilimi
ϕ	İş Fonksiyonu
Φ_B	Bariyer Yüksekliği
χ	Afinite
ρ	Özdirenç
σ	İletkenlik
ν	Frekans
λ	Dalga boyu
ε	Uyumsuzluk Parametresi
α	Absorbsiyon Katsayısı

KISALTMA LİSTESİ

AFM	Atomic Force Microscopy
CVD	Chemical Vapor Deposition
EDS	Energy Dispersive Spectroscopy
EL	Electroluminescence
FF	Fill Faktörü
FESEM	Field Emission Scanning Electron Microscopy
FT-IR	Fourier Transform Infrared Spectroscopy
FWHM	Full Width at Half Maximum
GDOES	Glow Discharge Optical Emission Spectroscopy
IBS	Ion Beam Synthesis
LDA	Local Density Approximation
LED	Light Emitting Diod
LMTO	Linear Muffin Tin Orbital
LO	Longitudinal Optical
NMK	Nötral Molekül Kaynağı
JCPDS	Joint Comittee on Powder Diffraction Standarts
PL	Photoluminescence
PLD	Pulsed Laser Deposition
PVD	Physical Vapor Deposition
RMS	Root Mean Square
SEM	Scanning Electron Microscopy
TEM	Transmission Electron Microscopy
TEMK	Termal Elektro-motor Kuvvet
TO	Transverse Optical
XRD	X-Ray Diffraction

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 2.1	a) p ve n tipi iki farklı yarıiletkenin ve b) p-n heteroeklemin enerji band diyagramları (Tyagi M.S. 1991)	4
Şekil 2.2	Bir p-n eklem güneş pili için a) ışığın soğurulması ile elektron boşluk oluşumu ve yük hareketlerinin şematik gösterimi (Kasap S.O. 2001) b) p-n eklem band diyagramı c) p-n eklem güneş pilleri için I-V karakteristiği.....	8
Şekil 2.3	p-n eklem güneş pilinin eş değer devresi (Tyagi M.S. 1991)	9
Şekil 2.4	Güneş pillerinde band bölgesine bağlı olarak verim (Sze S.M. 1981)	10
Şekil 2.5	Schottky güneş pilinin enerji-band diyagramı (Tyagi M.S. 1991)	11
Şekil 2.6	AlAs heteroeklem güneş pili için a) ara kesit görüntüsü ve b) termal dengedeki enerji band diyagramı (Tyagi M.S. 1991).....	12
Şekil 2.7	Bir atomun kristal örgü içerisindeki a) farklı iki konumu ve b) bu konumlarda sahip olacağı enerjiler (Onaran K. 2003).....	14
Şekil 2.8	Atomların difüzyon mekanizmaları: (a) çift yer değiştirme, (b) halka yer değiştirme, (c) arayer, (d) boşluk ve (e) çinkonun GaAs'de dissosiyatif mekanizması (Caferov T.D. 1998).....	15
Şekil 2.9	(1) Boşluk, (2) arayer ve (3) tane sınırları mekanizmaları ile hareket eden atomların difüzyon katsayılarının sıcaklığa bağımlılığı (Caferov T.D. 1998)..	16
Şekil 2.10	Şematik olarak ince filmlerin büyüme mekanizması a) adatomların yüzeyde soğurulması b) çekirdeklenme c) yakın çekirdeklerin birleşmesi d) bütün çekirdeklerin birleşerek sürekli film oluşturması e) oluşan film tabakasının büyümesi (Barna P. B. 1998).....	19
Şekil 2.11	Movchan ve Demchishin yapısal zone modeli (Thompson C.V. 2000).....	20
Şekil 2.12	Thornton yapısal zone modeli (Ohring M. 1992)	21
Şekil 2.13	Sıçratma kaplama teknikleri için temel mekanizma	23
Şekil 2.14	Şematik olarak a) dengeli ve b) dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma yöntemleri (Smith D.L. 1995).....	23
Şekil 2.15	Plazmadaki elektron çarpışmaları neticesinde nötr atomun iyonize edilmesi ..	24
Şekil 2.16	Elektro-manyetik alanda elektronların hareketi ve sistemin şematik gösterimi	25
Şekil 2.17	Dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniği için magnetron kaynağının ve argon plazmasının gösterimi	26
Şekil 2.18	Hızlı nötral molekül demeti kaynağının a) şematik diyagramı; (1) ızgara, (2) plazma yayıcı, (3) sentez plazma, (4) yük transfer çarpışma odası, (5) iyon, (6)	

	ve (7) pozitif serbest yük tabakaları, (8) hızlandırılmış molekül, (9) yavaş iyon, (10) yavaş molekül, (11) çıkış aralığı ve (12) vakum odası b) C-serisi demet kaynağı (Grigoriev S. 2002)	27
Şekil 2.19	End-Hall tipi iyon kaynağının a) kesit görüntüsü b) şematik diyagramı c)deşarj bölgesindeki oluşan manyetik alan çizgileri (Kaufman R. 1987).....	28
Şekil 2.20	Fe-Si bileşiklerin faz diyagramı.....	29
Şekil 2.21	Çeşitli yapısal fazlardaki FeSi ₂ bileşiklerinin kristal yapıları.....	30
Şekil 2.22	β-FeSi ₂ 'nin kristal yapısı	30
Şekil 2.23	β-FeSi ₂ 'nin XRD analizi a) Si(100) altlık üzerine b) Si(111) altlık üzerine elde edilen (Senthilarasu S. 2004)	32
Şekil 2.24	β-FeSi ₂ filme ait Raman spektrumu (Maeda Y. 2001)	33
Şekil 2.25	β-FeSi ₂ yarı iletkeni için yasak enerji aralığının absorpsiyon spektrumundan belirlenmesi (McKinity C.N. 2002)	34
Şekil 2.26	β-FeSi ₂ yarıiletkeninin yasak enerji aralığının sıcaklıkla değişimi(Ozvold M. 2000)	35
Şekil 2.27	β-FeSi ₂ yarıiletkeni için n ve k'nın dalga sayısı ile değişimi(Ozvold M. 2000)	35
Şekil 3.1	Magnetron cihazı ve kaplama sırasında Fe hedef ile altlıkların fotoğrafı	39
Şekil 3.2	a)Örnek yüzeyine gelen lazer ışınının saçılma olayı b) Raman spektrometresinin şematik gösterimi	42
Şekil 3.3	JY 5000RF model GDOES cihazının a) kesit görüntüsü b) fotoğrafı	43
Şekil 3.4	a) EDS analiz sisteminin basit şekli b) bir örnek için SEM görüntüsü ve o noktadaki EDS analiz spektrumu.....	44
Şekil 3.5	a) Jeol 5410 model SEM cihazı ve Noran 2100 EDS analiz sistemi bağlantısı b) Taramalı elektron mikroskobunun şematik gösterimi	45
Şekil 3.6	Atomik kuvvet mikroskobu ile yüzey taramasının gösterimi (Siber A. 2003) .	46
Şekil 3.7	β-FeSi ₂ / Si heteroeklemlerin omik kontaklar ile şematik gösterimi.....	47
Şekil 3.8	Dört nokta prob tekniğinde filmin üzerinde kontak uçlarının gösterimi	47
Şekil 3.9	β-FeSi ₂ filmlerin iletkenlik tipi ölçüm sistemi.....	49
Şekil 3.10	Akım-gerilim karakteristiğinin ölçüm devresi.....	49
Şekil 3.11	Bir yarıiletken için absorpsiyon katsayısı ile foton enerjisi değişiminden yasak enerji aralığının bulunması	51
Şekil 4.1	Kaplamada kullanılan demir hedefe ait XRD deseni.....	52
Şekil 4.2	Kaplamada kullanılan demir hedefe ait GDOES spektrumu	53
Şekil 4.3	β-FeSi ₂ filmlerin büyütülmesi için kullanılan n-tipi Si altlık ve p-tipi Si altlık	

	için XRD spektrumu	54
Şekil 4.4	Kaplamada kullanılan Si altlığı ait GDOES spektrumu.....	54
Şekil 4.5	a) referans p-Si altlık ve b) etc edilmiş p-Si altlık için FT-IR spektrumu	55
Şekil 4.6	a) referans n-Si altlık ve b) etc edilmiş n-Si altlık için FT-IR spektrumu	56
Şekil 4.7	a) referans Si altlıkların ve b) nötral molekül kaynağı ile etc edilmiş Si altlıkların yüzey AFM görüntüleri	57
Şekil 4.8	n-Si altlık üzerine t=6 dk ve t=30 dk kaplama sürelerinde büyütülmüş β -FeSi ₂ filmlerin XRD desenleri.....	59
Şekil 4.9	p-Si altlık üzerine t=6 dk ve t=30 dk kaplama sürelerinde büyütülmüş β -FeSi ₂ filmlerin XRD desenleri.....	60
Şekil 4.10	a) t=4 dk. b) t=6 dk. c) t=8 dakika kaplama sürelerinde hazırlanan β -FeSi ₂ /n-Si(100) heteroeklemlerin XRD desenleri.....	60
Şekil 4.11	a) t=4 dk. b) t=6 dk. c) t=8 dakika kaplama sürelerinde hazırlanan β -FeSi ₂ /p-Si(111) heteroeklemlerin XRD desenleri.....	61
Şekil 4.12	β -FeSi ₂ filmlerin Raman spektrumu a) n-Si(100) b) p-Si(111) altlık üzerine büyütülmüş.....	62
Şekil 4.13	Derinliğe bağlı β -FeSi ₂ filmlerin Raman spektrumu (Tatar B., 2007)	64
Şekil 4.14	β -FeSi ₂ filmlerin oda sıcaklığındaki FT-IR spektrumu	65
Şekil 4.15	β -FeSi ₂ filmlerin oda sıcaklığındaki GDOES spektrumu a) 4dk kaplama kalınlığına sahip β -FeSi ₂ /n-Si b) 6dk kaplama kalınlığına sahip β -FeSi ₂ /n-Si c) 8dk kaplama süresine sahip β -FeSi ₂ /n-Si d) 30dk kaplama süresine sahip β -FeSi ₂ /n-Si	68
Şekil 4.16	β -FeSi ₂ filmlerin Manyetik alanda sıçratma tekniği ile oda sıcaklığında oluşum yerinin GDOES analizi verileri ile gösterimi.....	69
Şekil 4.17	n-Si(100) altlık üzerinde büyütülen β -FeSi ₂ filmlerin SEM görüntüleri a) kaplamadan hemen sonra b) kaplamadan yaklaşık 1 sene sonra c) ve d) tane sınırlarının büyütülmüş fotoğrafları.....	72
Şekil 4.18	p-Si(100) altlık üzerinde büyütülen β -FeSi ₂ filmlerin SEM görüntüleri a) kaplamadan hemen sonra b) kaplamadan yaklaşık 1 sene sonra c) tane sınırlarının d) filmin yüzeyindeki dropletlerin büyütülmüş fotoğrafları.....	73
Şekil 4.19	β -FeSi ₂ filmlerin FE-SEM yüzey görüntüleri a) x10000 b)x40000 büyütme ..	74
Şekil 4.20	β -FeSi ₂ filmlerin FE-SEM arakesit görüntüleri a) x50000 b) x70000 büyütme	74
Şekil 4.21	n-Si(100) altlıklar üzerine hazırlanmış β -FeSi ₂ filmlerin farklı büyütmelelerdeki AFM fotoğrafı görüntüleri a) iki boyutlu görüntüsü b) üç boyutlu görüntüsü .	75

Şekil 4.22	p-Si(111) altlıklar üzerine hazırlanmış β -FeSi ₂ filmlerin farklı büyütmelelerdeki AFM fotoğrafı görüntüleri a) iki boyutlu görüntüsü b) üç boyutlu görüntüsü .	76
Şekil 4.23	β -FeSi ₂ filmlerin optiksel a) geçirgenlik b) soğurma spektrumları	78
Şekil 4.24	β -FeSi ₂ filmlerin optiksel yasak bant aralığı için çizilen $(\alpha h\nu)^2$ α (E) grafiği a) n-Si(100) altlık b) p-Si(111) altlık üzerinde büyütülen filmler için	79
Şekil 4.25	β -FeSi ₂ /n-Si(100) heteroeklemlerin bant kıyı bölgesi içerisindeki soğurma katsayılarının foton enerjisi ile değişimi.....	80
Şekil 4.26	β -FeSi ₂ filmlerin öz dirençlerinin kalınlıkla değişimi a) n-Si(100) altlık b) p-Si(111) altlık üzerinde büyütülen filmler için.....	82
Şekil 4.27	Farklı kalınlık sürelerinde büyütülmüş β -FeSi ₂ /n-Si heteroeklemlerin I-V karakteristikleri a) aydınlıkta b) karanlıkta.....	83
Şekil 4.28	Farklı kalınlık sürelerinde büyütülmüş β -FeSi ₂ /p-Si heteroeklemlerin I-V karakteristikleri a) aydınlıkta b) karanlıkta.....	84
Şekil 4.29	Farklı kalınlık sürelerinde büyütülmüş β -FeSi ₂ /n-Si heteroeklemlerin karanlıkta ters ve düz yön I-V karakteristiği a) 4dk b) 6dk c) 8dk ve d) 30dk kaplama süreleri.....	85
Şekil 4.30	Farklı kalınlık sürelerinde büyütülmüş β -FeSi ₂ /p-Si heteroeklemlerin karanlıkta ters ve düz yön I-V karakteristiği a) 4dk b) 6dk c) 8dk ve d) 30dk kaplama süreleri.....	85
Şekil 4.31	β -FeSi ₂ /n-Si heteroeklemlerin karanlıkta doğru yön gerilimindeki I-V karakteristiği a) 4dk b) 6dk c) 8dk ve d) 30dk kaplama süreleri	86
Şekil 4.32	β -FeSi ₂ /p-Si heteroeklemlerin karanlıkta doğru yön gerilimindeki I-V karakteristiği a) 4dk b) 6dk c) 8dk ve d) 30dk kaplama süreleri	87
Şekil 4.33a	β -FeSi ₂ filmden üretilmiş çeşitli kalınlıktaki heteroeklemlerin ideallik faktörünün kalınlıkla değişimi	88
Şekil 4.33b	β -FeSi ₂ filmden üretilmiş çeşitli kalınlıktaki heteroeklemlerin bariyer yüksekliğinin kalınlıkla değişimi	88
Şekil 4.34	β -FeSi ₂ /n-Si heteroeklemlerin I-V karakteristikleri a) β -FeSi ₂ film tarafından b) Si altlık tarafından 1-aydınlıkta 2-karanlıkta	89
Şekil 4.35	β -FeSi ₂ ve Si için enerji seviyelerinin şematik gösterimi	90
Şekil 4.36	β -FeSi ₂ /n-Si ve β -FeSi ₂ /p-Si heteroeklemlerin enerji bant diyagramının şematik gösterimi	91
Şekil 4.37	Kaplamadan sonra bombardıman edilen β -FeSi ₂ filmlerin XRD Analizi	92

Şekil 4.38	Kaplamadan sonra bombardıman edilen β -FeSi ₂ filmlerin Raman spektrumları	93
Şekil 4.39	β -FeSi ₂ filmlerin FE-SEM resimleri a) yüzey görüntüleri b) ara kesit görüntüleri	94
Şekil 4.40	Bombardıman edilmiş β -FeSi ₂ filmin AFM fotoğrafı a) iki boyutlu görüntüsü b) üç boyutlu görüntüsü	95
Şekil 4.41	Kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi ₂ filmlerin XRD analizi	97
Şekil 4.42	Kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi ₂ filmlerin Raman spektrumları	98
Şekil 4.43	Kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi ₂ filmlerin FE-SEM resimleri a) yüzey görüntüleri b) ara kesit görüntüleri	99
Şekil 4.44	İyon bombardımanı yardımı ile elde edilmiş β -FeSi ₂ filmin AFM fotoğrafı a) iki boyutlu görüntüsü b) üç boyutlu görüntüsü	100
Şekil 4.45	Farklı işlemler uygulanmış filmlerin XRD analizi a) β -FeSi ₂ film b) kaplamadan sonra bombardıman edilmiş film c) kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilmiş film	101
Şekil 4.46	Farklı işlemler uygulanmış filmlerin Raman spektrumu a) β -FeSi ₂ film b) kaplamadan sonra bombardıman edilmiş film c) kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilmiş film	102

ÇİZELGE LİSTESİ

Sayfa

Çizelge 2.1	β -FeSi ₂ yarıiletkenine ait bazı parametreler	31
Çizelge 2.2	β -FeSi ₂ filmin Si(100) ve Si(111) altlıklar üzerinde büyütüldüğünde ona ait bazı XRD parametreleri (Senthilarasu S. 2004)	32
Çizelge 3.1	Filmlerin kaplanma akış şeması.....	40
Çizelge 3.2	İyon bombardımanında deneysel parametreler a) glow discharge işlemi için b) bombardıman işlemi için.....	40
Çizelge 4.1	β -FeSi ₂ yarıiletkenine ait 5 keV elektronlarla alınmış EDS analizi	70
Çizelge 4.2	β -FeSi ₂ yarıiletkenine ait 10 keV elektronlarla alınmış EDS analizi	70
Çizelge 4.3	β -FeSi ₂ yarıiletkenine ait 15 keV elektronlarla alınmış EDS analizi	71
Çizelge 4.4	β -FeSi ₂ /n-Si(100) heteroeklemine ait bazı elektriksel parametreler.....	81
Çizelge 4.5	β -FeSi ₂ /p-Si(111) heteroeklemine ait bazı elektriksel parametreler.....	81
Çizelge 4.6	β -FeSi ₂ /n-Si(100) heteroeklemine ait bazı diyot parametreleri	86
Çizelge 4.7	β -FeSi ₂ /p-Si(111) heteroeklemine ait bazı diyot parametreleri	87
Çizelge 4.8a	Silisyum üzerinde elde edilmiş farklı tür eklemlere ait fotovoltaiik parametreler (RF güç kaynağı kullanılarak büyütülen)	89
Çizelge 4.8b	Silisyum üzerinde elde edilmiş farklı tür eklemlere ait fotovoltaiik parametreler (DC güç kaynağı kullanılarak büyütülen).....	90
Çizelge 4.9	Kaplamadan sonra bombardıman edilmiş β -FeSi ₂ filmin EDS analizi verileri	95
Çizelge 4.10	Kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi ₂ filmin EDS analizi verileri	101

ÖNSÖZ

Bana bugüne kadar inanan ve destekleyen herkese öncelikle teşekkür ederim. Hayatımın bu evresinde benim için çok önemli dört insan oldu. Bunlardan ilki saygıdeğer hocam Prof. Dr. Kubilay KUTLU dur. Önünla tanıştıktan ve çalışmaya başladıktan sonra hayat felsefem ve hayata bakışım tamamıyla değişti. Doktora çalışmamı başlamadan önce kaybettiğim babam kadar sevdiğim ve hiçbir zaman ona olan saygımı kaybetmeyeceğim değerli hocam, bana gösterdiğiniz sabır, sevgi ve değer benim için çok önemliydi ve bana çok şeyler kattı. Akademik hayatımda ve sosyal hayatımdaki etkiniz tavsiyeleriniz ve yardımlarınız için ve her başım sıkıştığımda sizinle paylaşabildiğim için ne kadar şanslı olduğumu anlatamam. Siz benim ikinci babam oldunuz ve inşallah sizi hiç utandırmam her şey için size minnettarım.

İkinci olarak saygıdeğer Prof. Dr. Mustafa Urgen hocama birçok şey borçluyum. Doktora çalışmamın deneysel evresinde tanıştığım ve İTÜ malzeme bölümündeki laboratuvarlarını bana açan ve çalışmalarımın gerek planlanması aşamasında gereksede sonuçların yorumlanması aşamasında bana destek olup katkıda bulunan ve değerli görüşlerini esirgemeyen hocam her şey için size teşekkür ederim. Siz benim için çok önemli bir insansınız ve sizinle olan diyologlarım inşallah hep ilerleyerek devam eder. Hocam bana gösterdiğiniz değer ve güven benim için çok önemli ve bana bilimsel anlamda çok şey kattınız ve sizden öğreneceğim daha birçok şey var desteğiniz için minnettarım.

Sevgili Serda KEÇEL, doktora çalışmamın başlarında sizin üniversiteden aldığım bir ders sonucunda tanıştığım ve hayatıma bu aşamadan sonra girip benim olgunlaşma evremde bana her türlü desteğini esirgemedin. Seninle paylaştığım her şey çok güzeldi ve bana sıkıntılarında, çıkmazlarımda ve başarısızlıklarımda hep ümit aşıladın sevgin ve desteğin bana çok şeyler kazandırdı. Sanada bana gösterdiğin sabır, sevgi ve saygı için minnettarım ve benim için çok önemlisin.

Ve sevgili ailem sizede bu yaşıma kadar bana destek olduğunuz ve beni sevip sorunlarımı paylaştığınız için en içten duygularıyla teşekkür ederim.

Doktora çalışmamda filmlerin üretimi, yapı ve yüzey karakterizasyonları İstanbul Teknik Üniversitesi Malzeme Mühendisliğinde Sayın Prof. Dr. Mustafa URGEN hocamın laboratuvarlarında yaptım. Oradaki bana destek olan arkadaşlarım Sayın Semih ONCEL, Sayın E. Devrim SAM, Sayın Berk Ş. DEMİREL ve Sayın Behiye Yüксеle teşekkür ederim.

İTÜ fizik bölümündeki Hocam Sayın Prof. Dr. Fatma Z. TEPEHAN hocama laboratuvarını kullandığı ve değerli görüşlerini esirgemeyip bana destek olduğu için teşekkürü bir borç bilirim. Ayrıca yine Fizik Bölümündeki arkadaşım Sayın Esat PEHLİVAN'a da AFM çalışmalarım süresince desteği için teşekkür ederim.

Ayrıca nezih huzurlu bir çalışma ortamı sağlayan Rektörümüz Sayın Prof. Dr. E. Durul ÖREN hocama ve Prof. Dr. Emel ÇİNGİ'ya, Prof. Dr. Tayyar CAFEROV'a, Yrd. Doç. Dr. Kutsal BOZKURT'a ve Yrd. Doç. Dr. Nursel CAN'a çok teşekkürler.

Oda arkadaşlarım, bana sabreden ve huzurlu bir ortamda çalışabildiğim sizede her şey için teşekkürler.

Son olarak, 14 senedir yatağa bağlı olarak yaşayan ve buna rağmen kendi hastalığı bir yana benim için üzülen, dertlenen ve gözyaşı döken duygularını konuşmadan içine atan ve tek isteği benim mutlu olmam olan ANNEM NAFİYE TATAR SENİ ÇOK SEVİYORUM.....

β -FeSi₂ İnce Filmlerin Elde Edilmesi ve Fiziksel Özelliklerinin İncelenmesi

ÖZET

β -FeSi₂ ince filmler oda sıcaklığında n-Si(100) ve p-Si(111) altlıklar üzerine dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniği ile büyütülerek β -FeSi₂/n-Si ve β -FeSi₂/p-Si heteroeklemler bu şekilde hazırlandı. Bu çalışmanın orjinalliği filmlerin kaplama işleminden sonra hiçbir ısıtım işlemi uygulanmadan bu heteroeklemlerin elde edilmesinin başarılmasıdır. Farklı film kalınlıklarında β -FeSi₂/Si heteroeklemlerin üretimi saf demirin Si altlıklar üzerine dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniğiyle kaplanmasıyla yapıldı. Kaplama işleminden önce altlıklar ve hedef nötröl molekül kaynağı ile temizlendi.

β -FeSi₂ filmlerin mikro-yapıları X-ışınları kırınım analizleri ve Raman spektroskopisi analizleri ile incelendi. Bu filmlerin elementel analizleri EDS ve GDOES analizleri kullanılarak yapıldı. β -FeSi₂ ince filmlerin yüzey özellikleri taramalı elektron mikroskobu, alan emisyonlu taramalı elektron mikroskobu ve atomik kuvvet mikroskobu ile karakterize edildi. β -FeSi₂ filmler polikristal yapıda oldukları tespit edildi. Ara katmanın yüzey özelliklerinin ve kristalliğinin altlığın yüzey özelliklerine bağılı olduğu bulundu. Altlığın yüzey özellikleri ve kaplama parametreleri optimize edilerek çok düzgün yüzey özelliklerine sahip β -FeSi₂ filmler hazırlanabileceğı görüldü.

β -FeSi₂ filmlerin optiksel soğurma katsayıları oda sıcaklığında FT-IR ölçümleri ile belirlendi. Bu β -FeSi₂ filmlerin kıyı bölgesi içerisindeki optiksel soğurmasından direkt geçişli bir yarıiletken karakteristiğinde oldukları ve $E_g=0,85$ eV olarak belirlendi. β -FeSi₂/n-Si ve β -FeSi₂/p-Si heteroeklemlerin elektriksel özellikleri oda sıcaklığında akım-gerilim(I-V) karakteristikleri alınarak incelendi. Kaplanmış filmler tarafından alınan karanlıktaki akım-gerilim karakteristiklerinde heteroeklemler için doğrultucu özellik göstermiştir. İdeallik faktörü ve bariyer yüksekliğı gibi diyot parametreleri termo iyonik emisyon teorisi kullanılarak belirlendi.

Bunun yanında, bu çalışmada n-Si(100) altlıklar üzerine dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniğı kullanılarak büyütülen yarıiletken β -FeSi₂ ince filmlerin yapı ve yüzey özelliklerine kaplamadan önce ve kaplama süresince uygulanan iyon bombardımanının etkisi incelendi.

Anahtar Kelimeler: β -FeSi₂ ince filmler, Yapı özellikleri, Yüzey özellikleri, Optik özellikleri, Elektriksel ve fotovoltaiik özellikleri, İyon bombardımanı

Investigation of Physical Properties and Synthesis of β -FeSi₂ Thin Films

ABSTRACT

β -FeSi₂ thin films were grown on n-Si (100) and p-Si (111) substrates at room temperature by unbalanced magnetron sputtering and β -FeSi₂/n-Si and β -FeSi₂/p-Si heterojunctions were thus prepared. The originality of the study is the achievement of heterojunctions without any further heat treatment of the deposition films. Pure iron is deposited on Si substrates with unbalanced magnetron sputtering for the production of β -FeSi₂/Si heterojunctions with different film thicknesses. Prior to coating process the target and substrates are cleaned with neutral molecular source.

Microstructure of β -FeSi₂ films were investigated by X-Ray Diffraction analysis and Raman spectroscopy. Elemental analyses of β -FeSi₂ films were made using Energy Dispersive Spectroscopy and Glow Discharge Optical Emission Spectroscopy. Surface properties of β -FeSi₂ films were characterized with Scanning Electron Microscopy, Field Emission Scanning Electron Microscopy and Atomic Force Microscopy. The β -FeSi₂ films were found to be polycrystalline in nature. Surface morphology and crystallinity of the template layers were found to depend on the surface conditions of substrates. β -FeSi₂ films with very smooth surfaces can be obtained by optimization of substrate surface properties and coating parameters.

Optical absorption coefficients of the β -FeSi₂ films at room temperature were evaluated from the Fourier Transform Infrared Spectroscopy measurements. The optical absorption in the edge region of these β -FeSi₂ films was evaluated as $E_g=0,85$ eV which is characteristic for a direct transition semiconductor. The electrical properties obtained from current-voltage characteristics (I-V) of β -FeSi₂/n-Si and β -FeSi₂/p-Si heterojunctions at room temperature have been investigated. Dark current-voltage characteristics of the deposited coatings showed a rectifying behaviour for the heterojunctions. The diode parameters such as zero-bias barrier height and ideality factor were determined using thermionic emission theory.

However, we have investigated the effect of ion bombardment during and after deposition on the structure and surface properties of semiconducting β -FeSi₂ thin films grown on n-Si (100) substrates at room temperature by unbalanced magnetron sputtering.

Keywords: β -FeSi₂ thin films, Structural properties, Surface properties, Optical properties, Electrical and photovoltaic properties, Ion Bombardment

1. GİRİŞ

Fotovoltaik temelli aletlerin kullanımı enerji ihtiyacı ile orantılı olarak gün geçtikçe artmaktadır. Fotovoltaik aletlerin yapımında kullanılan elementin bozulma zamanı kadar, bol bulunabilmesi, zehirli olmaması(çevreyle dost) ve yeniden kullanılabilmesi de önemlidir (Powalla M., 1993), (Makita Y., 1997). Bu nedenle yarıiletken silisyum elementinin fotovoltaik teknolojisinde önemli bir yeri vardır. Silisyum bazlı fotovoltaik aletler uzun yaşama ömürleri, mikroelektronik teknolojisine yatkınlığı ve yüksek verimli olması nedeniyle tercih edilirler.

Silisidler çok uzun zamandır mikroelektronik teknolojisinde kullanılmaktadır (Borisenko V. E., 2000), (Markvart T., 2000), (Yoshitake T. 2001). Fakat bunlar içerisinde çok küçük bir grup olan silisyumdan daha dar yasak enerjisine sahip ($E_g \sim 0.13-1.2$ eV) yarıiletken silisidler son yıllarda çok ilgi çekmektedir. Mg_2Si , Ca_2Si , $\beta\text{-FeSi}_2$ ve $MnSi_2$ gibi silisidler bu grup içerisine girer. Özellikle yarıiletken silisidler içerisinde $\beta\text{-FeSi}_2$ çok dikkat çekmektedir.

β -faz demir disilisid ($\beta\text{-FeSi}_2$) silikon teknolojisi ile uyumlu yeni bir çeşit yarıiletkenidir ve 0.87 eV civarında direk band bölgesi, $1.5 \mu m$ dalga boyu ve 10^5 cm^{-1} den daha büyük optiksel absorpsiyona sahip optik özellikleri ile dikkate değer bir çekiciliğe sahiptir(Ozvol M., 1995), (Daractchieva V., 2000). Onun bu yarıiletken özelliklerinden dolayı optoelektronik, termoelektronik ve fotovoltaik aletlerde çok yaygın olarak kullanılmaya başlanmıştır (Yang Z., 1995), (Chiristensen N. E., 1990), (Lange H., 1997), (Lefki K., 1993). Bunun yanında, $\beta\text{-FeSi}_2$ ışığı güçlü emiciliği ile yeni bir güneş pili malzemesi için ümit vericidir (Reeson K. J., 1995), (Leong D., 1997). Dünya üzerinde bol oranda silisyum ve demir bulunması, toksin olmayışı ve yenilenebilirliğinden dolayı fotovoltaik malzemeler içerisinde $\beta\text{-FeSi}_2$ kullanımını ön plana çıkartmıştır.

Yarıiletken $\beta\text{-FeSi}_2$ faz, orthorombik CaF_2 yapıya sahiptir (örgü sabitleri; $a= 0.9863$ nm, $b= 0.7791$ nm ve $c= 0.7833$ nm) ve birim hücresinde 16 demir ile 32 silisyum atomu bulunmaktadır (16 tane $\beta\text{-FeSi}_2$ molekülü) (Dusausoy Y.,1971), (Chiristensen, 1990), (Maeda Y., 2001). Demir –silisyum faz diyagramına bakıldığında $FeSi_2$ 'nin çok çeşitli yapılarda oluşabileceği görülmektedir. Bu yapılardan bazıları $\alpha\text{-FeSi}_2$, $\varepsilon\text{-FeSi}$, CsCl- tipi $FeSi$, $\gamma\text{-FeSi}_2$ ve $\beta\text{-FeSi}_2$ dir (Goss N.P., 1935) ve bunlar arasında sadece $FeSi$ ve $\beta\text{-FeSi}_2$ oda sıcaklığında termodinamik olarak stabildir. $\alpha\text{-FeSi}_2$ ve $\beta\text{-FeSi}_2$ arasında 937°C denge şartı altında faz geçişleri oluşur. Metalik yüksek sıcaklık fazı ara geçişler için kullanışlı olmasına rağmen, yarı iletken β -fazı çok daha ilgi çekicidir (Behar M., 1996), (Miglio L. 1995), (Starke U., 2002).

Epitaksiyel β -FeSi₂ ince filmlerin tek kristal Si altlık üzerinde büyütülmesi birçok çalışmada incelenmiştir. Son yıllarda önem kazanan bu eklemler günümüzde birçok kullanım alanı da bulmuştur. 1997 yılında 1.5 μ m dalga boyunda çalışan LED aletin IBS (iyon demeti sentezlenmesi) yöntemli ilk başarılı çalışmasından sonra β -FeSi₂/Si (LEDs)' ler çok daha büyük ilgi çekmeye başlamışlardır (Lourenço M. A., 2001), (Chu S., 2004), Takauji M.,2005), (Ugajin Y., 2006). Ayrıca bu malzemenin termal özelliklerinden dolayı β -FeSi₂/Si heteroeklemler termoelektronik teknolojisinde de yaygın olarak yer bulmuştur. Aynı zamanda çeşitli yöntemlerle hazırlanan β -FeSi₂/Si heteroeklemlerin yapısı ve yüzey morfolojisi yapılan çalışmalarla geniş bir çerçevede incelenmiştir.

β -FeSi₂ film ve β -FeSi₂/Si heteroeklem için çok çeşitli kaplama teknikleri kullanılarak silisyum altlıklar üzerinde elde edilmeye çalışılmıştır. IBS yöntemi, atımlı lazer kaplama metodu (PLD), radyoaktif epitaksiyel büyütme (RDE), moleküler epitaksiyel büyütme (MBE), termal buharlaştırma, elektron beam buharlaştırma metodu ve sıçratma metodları başlıca kullanılan büyütme tekniklerindendir (Maeda Y., 2001), (Takakura K., 2000), (Takakura K., 2002), (Yoshitake T., 2001), (Sugiyama M.,1999). Silisyum üzerinde β -FeSi₂ film oluşturmak için kaplamadan sonra yaygın olarak ısıtma işlemi uygulanmaktadır. Bu işlem difüzyon mekanizmasını hızlandırarak yapı oluşumunu sağlar. Burada söz edilen bütün tekniklerde demir silisid oluşumu için bir ısıtma işlemi gerekmektedir.

β -FeSi₂ filmin yapı ve yüzey özellikleri, altlığın yüzey özelliklerine ve kaplama şartlarına önemli derecede bağlıdır (Yamamoto A., 2004), (Kuroda R., 2004), (Tanaka S.,2005), (Yamaguchi K., 2004). Kullanım alanına uygun yüzey morfolojisine ve yapısal özelliklere sahip β -FeSi₂ film elde etmek önemlidir. Bu yüzden yukarıda bahsettiğimiz teknikler ve bunun yanında yeni tekniklerle de bu filmler elde edilerek filmlerin yapı ve yüzey özelliklerine ait araştırmalar devam etmektedir. Bunun yanında elde edilen filmlerle oluşturulan p-n eklemler, heteroeklemler ve β -FeSi₂ temelli yapılan aygıtların özellikleri de bu kaplama şartlarına bağlı olarak değişmektedir. Bunun için yarıiletken β -FeSi₂ malzemesinin yapı ve yüzey özellikleri ile ilgili çalışmalar devam etmektedir.

Yapısal kusurlara sahip altlıklar ve iyon bombardımanının etkisi, ince filmin difüzyon mekanizmasını hızlandırır. Bu şekilde ZnO(çinko oksid), ITO(indiyum titanyum oksid) ve WSi₂(tungsten silisid) gibi düzenli yapılar oluşturulmuştur (Dreeseand R.J., 2005), (Minami T., 2000), (Hinze J., 2000). Biz bu çalışmada hiçbir ısıtma işlemi uygulamadan düzenli yapıya sahip β -FeSi₂ film üretmek için yeni bir yaklaşımda bulunduk. İlk yaklaşımımız nötral molekül

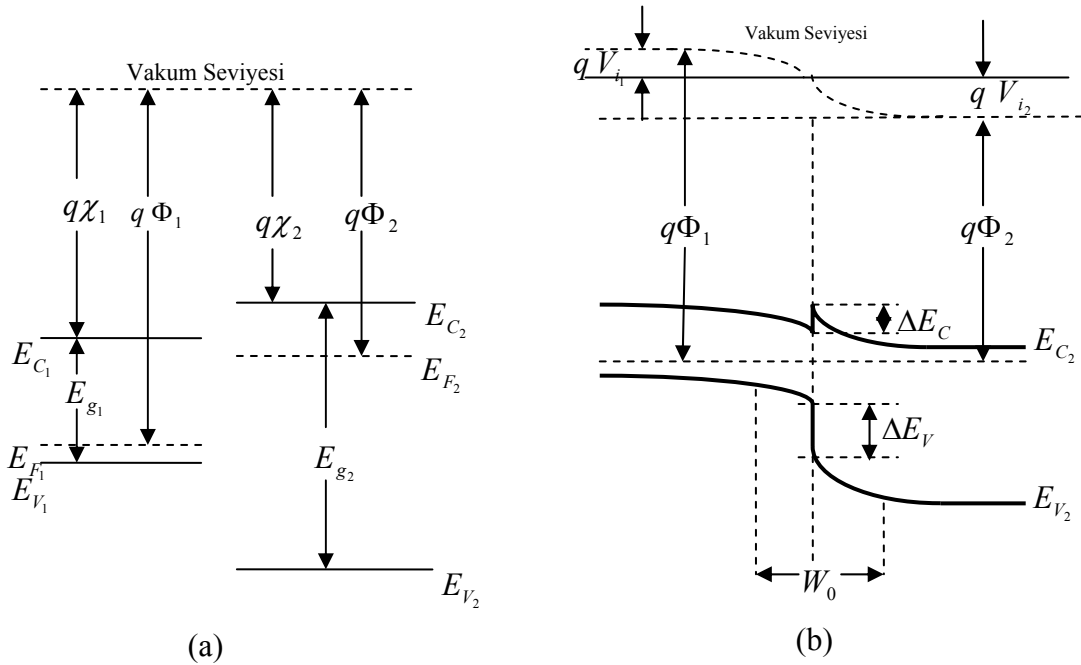
kaynağı ile yüzeyi dağlanan (etching) altlık yüzeyi üzerinde nano boyutta kusurlar ve hatalar oluşturmaktır. İkinci yaklaşımımız ise dengelenmemiş magnetron sisteminin iyi bilinen bir özelliği olan kaplama işlemi süresince iyon bombardımanı etkisi yaratıp bu kusurlandırılmış silisyum altlık üzerine demiri kaplamaktır.

Biz bu çalışmada hiçbir ısıtma işlemi uygulamadan dengelenmemiş magnetron yöntemi ile düzenli β -FeSi₂ yapısını oluşturmayı amaçladık ve bu amaçla silisyum altlıklar üzerine oda sıcaklığında bu metodu kullanarak demir kapladık. Öncelikle kaplama işlemine başlamadan silisyum altlıklar nötral molekül kaynağı ile dağlanarak temizlendi ve bu işlemin altlıklar üzerindeki etkileri incelendi. Daha sonra elde edilen β -FeSi₂ filmlerin yapısal özellikleri ve yüzey morfolojileri elde edildi. Bu filmlerden elde edilen eklemlerin elektriksel ve optik özellikleri araştırıldı. En son olarakda kaplama sırasında ve kaplamadan sonra iyon kaynağı kullanılarak iyon bombardımanının β -FeSi₂ ince filmlerin yapısına etkisi incelendi. Bu filmlerin literatürle karşılaştırmaları yapılarak literatüre katkıları ortaya koyuldu.

2. Genel Bilgiler

2.1 Heteroeklemler

Katkı tipleri farklı olan aynı yarıiletken malzemeler kullanılarak yapılan eklemler Homoeklemler, bunun tersine farklı enerji band aralıklarına sahip farklı iki yarıiletken malzeme kullanılarak yapılan eklemler ise Heteroeklemlerdir. Kimyasal olarak iki farklı yarıiletkenlerden biri n-tipi geniş yasak enerji aralığına sahip diğeri ise dar yasak enerji aralığına sahip olan p-tipi yarıiletkenler arasında meydana gelen yapıya p-n heteroeklemler denir. Heteroeklemler p-n, n-p, p-p ve n-n tipi olabilir.



Şekil 2.1 a) p ve n tipi iki farklı yarıiletkenin ve b) p-n heteroeklemin enerji band diyagramları (Tyagi M.S. 1991)

Şekil 2.1a'da açıklanan dar band bölgesine (E_{g1}) sahip p-tipi yarıiletken ile geniş band bölgesine (E_{g2}) sahip n-tipi yarıiletken sırası ile Φ_1 ve Φ_2 termodinamik iş fonksiyonlarına ve χ_1 ve χ_2 elektron afinitesi sahiptirler. İş fonksiyonu elektronu fermi seviyesinden vakum seviyesine, elektron afinitesi ise elektronu iletkenlik bandından vakum seviyesine çıkartmak için gerekli olan enerjilerdir. Bu iki farklı yarıiletken birbiri ile kontağı sağlandığında, heteroeklem termik dengeye gelene kadar eklemden karşılıklı olarak elektron- boşluk akışı olacaktır. P-n homoeklemdeki gibi n-tipindeki iyonlaşmış donörler ve p-tipindeki iyonlaşmış

akseptörler ile heteroeklemden bir arınma bölgesi oluşturacaktır. Sistem dengeye ulaştığı zaman eklem her iki tarafındaki fermi düzeyi çakışmıştır ve vakum seviyesi her yerde bant kenarlarına paralel ve sürekli. Eklemden yarıiletkenlerin yasak enerji aralıkları farklı olması nedeniyle iletim bantı sınırında bir süreksizlik oluşur ve bu iki iletim bantı arasındaki fark ΔE_c olarak tanımlanır ve denklem (2.1) yardımı ile hesaplanır.

$$\Delta E_c = q(\chi_1 - \chi_2) \quad (2.1)$$

Benzer olarak denklem (2.2) yardımı ile valans bandındaki kesinti hesaplanabilir.

$$\Delta E_v = (E_{g2} - E_{g1}) - q(\chi_1 - \chi_2) = \Delta E_g - \Delta E_c \quad (2.2)$$

İdeal şartlarda p-n heteroeklemlerde doğru yön akımını büyük oranda azınlık yük taşıyıcıların bariyerden enjeksiyonu oluşturur. Şekil 2.1b’de görüldüğü gibi geniş band bölgesine sahip yarıiletkendeki (n-tipi) elektronlar ve dar band bölgesine sahip (p-tipi) boşluklardan daha düşük bir bariyer ile karşılaşır. Eğer iki yarıiletkenin band bölgeleri yeteri kadar farklı olmasaydı dar band bölgesine sahip yarı iletken kaynaklanan enjeksiyon ihmal edilebilir. Bu durumda akım n-tipi yarıiletken p-tipi yarıiletken doğru olur. Bu durum bize heteroeklemlerin enjeksiyon laserler ve çift kutuplu transistorlar gibi cihazların kullanımında büyük bir avantaj sağlar. Dolayısıyla şekildeki p-n heteroeklem için akım voltaj karakteristiği denklem (2.3)’de verildiği haliyle uygun olabilir.

$$I = \frac{qAD_n n_{po}}{L_n} \left[\exp\left(\frac{K_2 V_a}{V_T}\right) - 1 \right] \quad (2.3)$$

Denklemde n_{po} termal dengede p-tipi yarıiletken içerisindeki elektron konsantrasyonudur ve $K_2 V_a = V_{a2}$ dir. Denklem bu şekliyle p-n heteroeklemlerin diğer akım bileşenlerinin ihmal edilmesinden dolayı deneysel sonuçlarla yeterince uyuşmaz. Örneğin bazı durumlarda arınma bölgesindeki jenerasyon ve rekombinasyon akımları önemli olabilir. Çoğu zaman eklem geniş bölgesindeki ara yüzey durumlarından ve band bölgesinin devamsızlığından dolayı elektronların kuantum mekaniksel tünellemesinden oluşan akım da baskın olabilir.

n-n veya p-p heteroeklemler için baskın akım taşıma mekanizması bariyeri geçen termoiyonik emisyon taşıyıcılarıdır ve akım gerilim karakteristiği denklem (2.4)’deki gibidir.

$$I = I_s \left(1 - \frac{V_a}{V_i} \right) \left[\exp\left(\frac{V_a}{V_T}\right) - 1 \right] \quad (2.4)$$

$$I_s = \frac{qAR^*TV_i}{k} \exp\left(\frac{-V_i}{V_T}\right) \quad (2.5)$$

Burada R^* etkin Richardson sabitidir.

Heteroeklemlerde kullanılan farklı iki yarıiletkenin örgü sabitlerinin ve termal genleşme katsayılarının kusursuz olarak eşleşmesi pek mümkün değildir. Dolayısıyla aynı kristal yapıya sahip olsalar bile örgü sabitlerindeki farktan dolayı örgü içerisinde kusurlar oluşur. Oluşan bu kusurlar ara yüzey dislokasyonları şeklindedir ve kusur yoğunlukları örgüler arasındaki uygunluk derecesine bağlıdır. Kristal yapıdaki kusurlar yasak enerji bandındaki izinli enerji seviyelerinin artmasına neden olur. Kusurlardan dolayı oluşan bu seviyeler eklem bölgesindedir ve rekombinasyon merkezi gibi davranırlar. Bu bölgenin dar olması nedeni ile akım, elektronların tünelleme olayı neticesinde eklem bir tarafından diğer tarafına doğru akar. Bu durum güneş pillerinin veriminin azalmasına neden olur. Örgü yapıları mümkün olduğu kadar benzer yarıiletkenler kullanılarak heteroeklemlerin özellikleri idealleştirmek mümkündür.

Heteroeklemler çeşitli yöntemler kullanılarak elde edilebilir. Bunlardan bazıları ara yüzey alaşım tekniği (interface-alloy), epitaksiyel büyütme tekniği, vakumda çökeltme tekniği ve benzeri yöntemlerdir. Bu yöntemlerden epitaksiyel büyütme yöntemi son yıllarda çok sık kullanılmaktadır. Bu yöntemle büyütülmüş filmlere *epitaksiyel filmler* ve heteroeklemlere ise *epitaksiyel heteroeklemler* denir. Bu yöntemle tek kristal heteroeklemlerin büyütülmesi şu şartlara bağlıdır.

- a) Büyütülen kristalin ve altlığın kristal örgüleri aynı yapıda olmalıdır (kübik- kübik vb.).
- b) Büyütülen filmin ve altlığın örgü parametrelerinin değerleri (a_1, a_2) çok yakın olmalıdır. Örgü parametrelerinin farkları uyumsuzluk parametresi (ε) ile karakterize edilmektedir.

$$\varepsilon = \frac{a_1 - a_2}{\bar{a}} 100 = 2 \frac{(a_1 - a_2)}{(a_1 + a_2)} 100 \quad (2.6)$$

Epitaksiyel yöntemle tek kristal filmi tek kristal altlığın üstünde büyütme için $\varepsilon \leq 3\%$ olmalıdır, aksi takdirde film- altlık sınırında deformasyon ve dislokasyonlar oluşur ve bu nedenle polikristal yapıya sahip filmler büyütülmektedir.

- c) Filmin ve altlığın genleşme katsayılarının değerleri çok yakın olmalıdır ($\alpha_1 \approx \alpha_2$).

Heteroeklemlerin, fotodetektör, güneş pili, yarıiletken lazer, ışık yayan diyot ve çift kutuplu

transistor gibi birçok cihazın yapımında çok büyük öneme sahiptir ve heteroeklemler ile ilgili birçok uygulamaya rastlamak mümkündür.

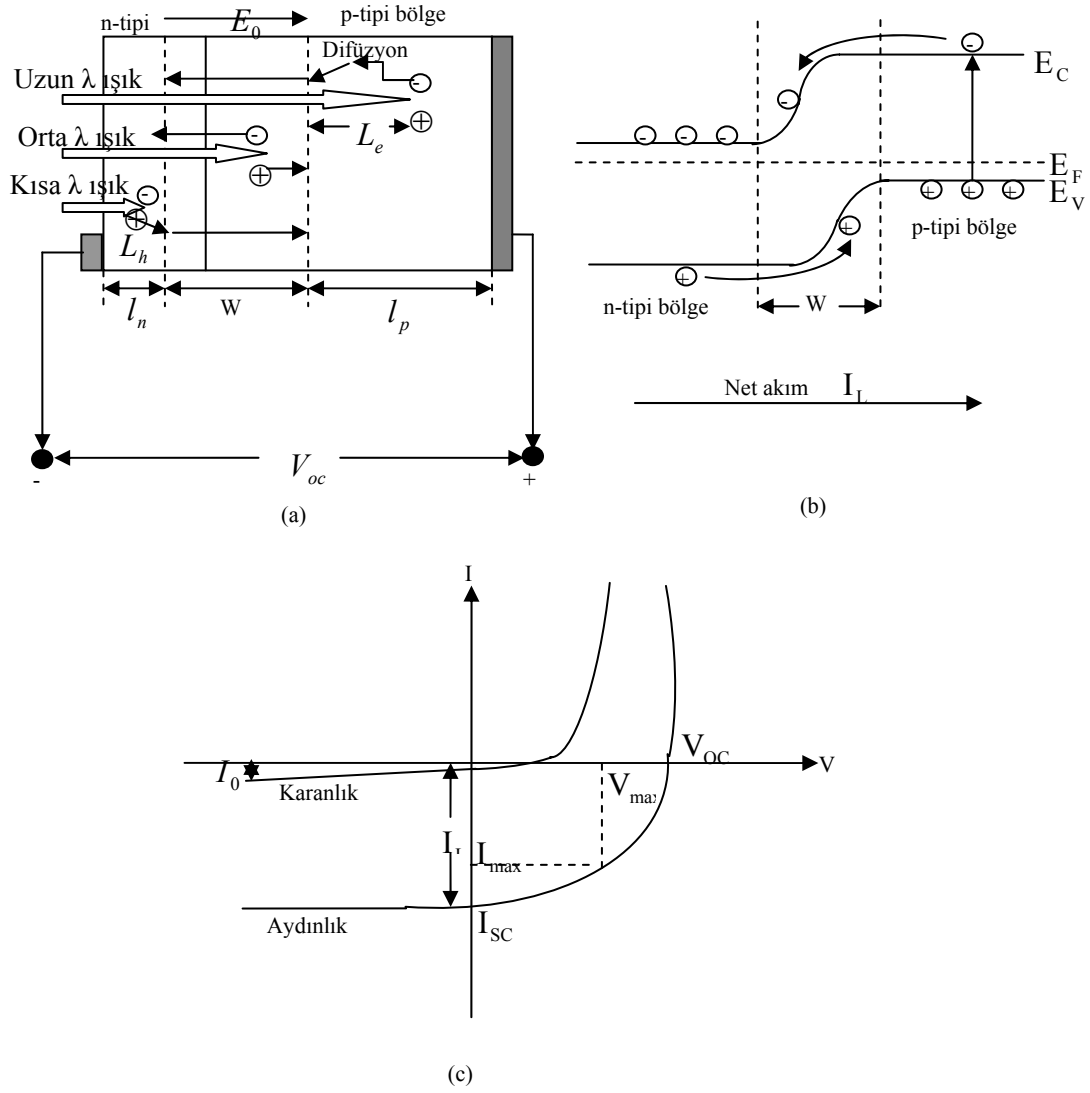
2.2 Güneş Pilleri

Işık enerjisinin elektrik enerjisine çevrilmesine fotovoltaiik olay denir. Güneş pili ve fotodiyot gibi cihazların temel çalışma prensibi bu olaya dayanır. Başka bir deyişle ışığın soğurulması ile elektron-boşluk çiftlerinin oluşması ve bu çiftlerin içerde oluşan elektrik alan yardımı ile birbirlerinden ayrılması ile elektrik akımı oluşturulması esasına fotovoltaiik olay denir, yani güneş pillerinin temel çalışma prensibidir. p-n eklem, schottky eklem ve heteroeklem kullanılarak güneş pilleri hazırlanabilir.

2.2.1 P-n Eklem Güneş Pilleri

Bir ışık demeti p-n eklem üzerine düştüğü zaman elektron-boşluk çifti oluşturur ve bu olay p-n eklemde çeşitli noktalarında meydana gelebilir. Şekil 2.2a da güneş pilleri için basit bir şematik diyagram gösterilmiştir. Burada, eğer elektron-boşluk çifti eklem bölgesinde meydana gelirse, bu bölgedeki yüksek potansiyel gradyanından dolayı, elektrik alan elektronu n-tipi bölgeye boşluğu ise p-tipi bölgeye doğru ayırıp hızlandırır. Yani, eklem bölgesinde oluşan çiftler elektrik alan yardımı ile yük taşıyıcılarının çoğunlukta olduğu yerlere doğru hareket ederler. Bu yük hareketinden dolayı n-tipi bölge negatif ve p- tipi bölge pozitif olarak yüklenmektedir.

Işığın n ve p- tipi bölgelerde yarattığı elektron boşluk çiftleri, azınlık yük taşıyıcısı olduğu bölgelerde (p-tipinde elektronlar ve n-tipinde boşluklar) eklem doğru difüzyon ederler ve buradaki elektrik alan yardımı ile bariyeri geçerek elektrik akımını oluştururlar. Şekil 2.2a'da L_n ve L_p elektron ve boşluk azınlık yük taşıyıcılarının difüzyon uzunluğunu tanımlar ve l_n , W , l_p sırası ile n-tipi bölgenin, arınma bölgesinin ve p-tipi bölgenin genişlikleridir. P-n eklem üzerine ışığın düşmesiyle oluşan elektron-boşluk çiftlerini birbirinden ayırır ve bantlar arasında oluşan jenerasyon akımı I_L 'yi p-n eklem boyunca bir elektrik akımına dönüştürür. Burada I_L fotoakım yani ışık etkisiyle oluşan akımdır. P-n eklem eğer dışardan bir R yük direnci ile birleştirilirse bu akım dış devreden akar, böylece eklem ışık enerjisini elektrik enerjisine çevirmiş olur.



Şekil 2.2 Bir p-n eklem güneş pili için a) ışığın soğrulması ile elektron boşluk oluşumu ve yük hareketlerinin şematik gösterimi (Kasap S.O. 2001) b) p-n eklem band diyagramı c) p-n eklem güneş pilleri için I-V karakteristiği

Bu durumda toplam I akımı Şekil 2.3’de güneş pilinin eş değer devresi göz önünde bulundurulduğunda, ışık ile üretilen I_L akımı ve diyot akımı I_d arasındaki farka eşittir. Denklem (2.7) ve (2.8) da toplam akım ifadeleri verilmiştir.

$$I = -I_L + I_d \quad (2.7)$$

$$I = -I_L + I_0 \left[\exp\left(\frac{eV}{nk_b T}\right) - 1 \right] \quad (2.8)$$

Burada I_0 ters yöndeki doyma akımı ve n ise ideallik faktörüdür ($n=1-2$). Şekil 2.2c’de p-n eklem güneş pilleri için I-V karakteristiği görülmektedir. Bu eğride V_{max} maksimum güç

noktası gerilimi ve $I_{\max}$ maksimum güç noktası akımıdır. Güneş pillerini karakterize eden birkaç önemli parametre vardır. Bunlardan biri, (I_{sc}) kısa devre akımı pildeki direnç sıfır olduğunda okunan akım yani basitçe pilde ışık tarafından üretilen (I_L) akım. İkincisi ise $I=0$ durumunda elde edilen yani direnç sonsuzken elde edilen (V_{oc}) açık devre gerilimidir. Denklem 2.8'deki $I=0$ alınıp çözüm yapıldığında V_{oc} için 2.9'daki eşitlik sağlanır.

$$V_{oc} = \frac{kT}{e} \ln \left(\frac{I_L}{I_o} + 1 \right) \quad (2.9)$$

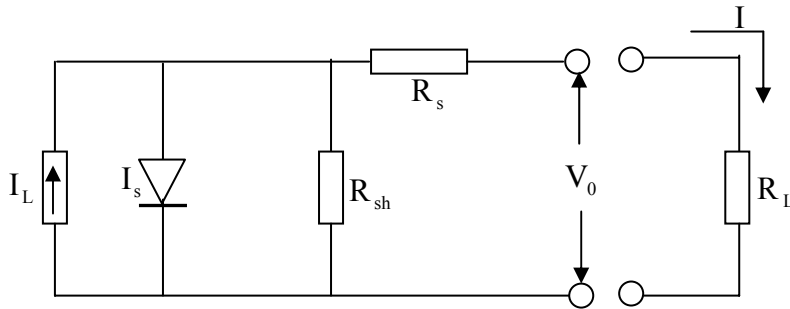
Güneş pilinin maksimum gücünü tanımlayan diğer bir parametre de fill faktörüdür, şekil 2.2c'deki ışıktaki eğrinin dördüncü bölgesinde $I_{\max}$ ve $V_{\max}$ noktalarının kesiştiği en büyük alanlı dikdörtgen kullanılarak denklem (2.10)'deki gibi hesaplanır.

$$FF = \frac{V_{\max} I_{\max}}{V_{oc} I_{sc}} \quad (2.10)$$

Güneş pilinin verimi (η) enerjinin dönüşüm oranını belirleyen pillerin en önemli parametresidir. Güneş pilinin verimi eşitlik (2.11)'deki gibi hesaplanır.

$$\eta = \frac{V_{oc} I_{sc}}{P_{in}} FF = \frac{V_{\max} I_{\max}}{P_{in}} \quad (2.11)$$

Burada P_{in} pil üzerine gelen ışığın toplam şiddetidir. Yani başka bir deyişle üretilen güç miktarının harcanan güç miktarına oranı bize pilin verimliliğini verir diyebiliriz.



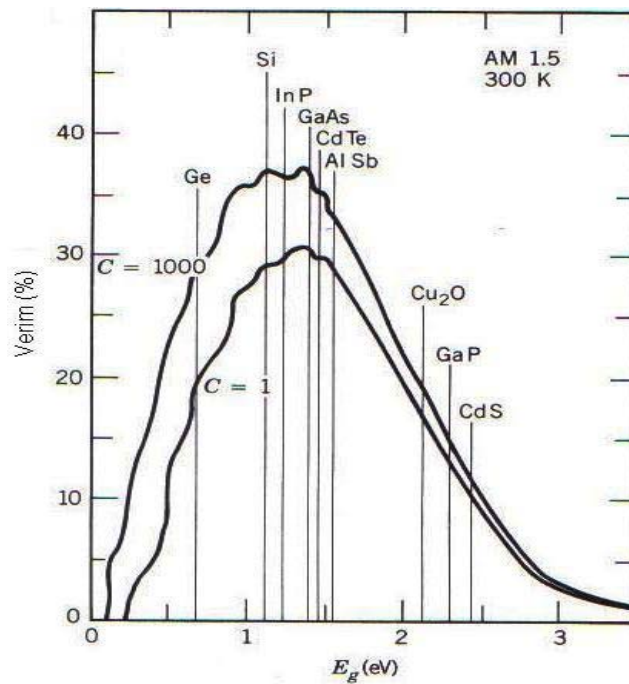
Şekil 2.3 p-n eklem güneş pilinin eş değer devresi (Tyagi M.S. 1991)

p-n eklem güneş pilinin eşdeğer devresinde I_L fotoakım, R_{sh} shunt direnci, R_s seri direnç ve I_s diyotun akımıdır. Shunt direnci eklem arınma bölgesi boyunca mevcut olan kristal kusurları veya pillerin kenarlarındaki yüzey sızıntıları sonucunda oluşabilir. Seri direnç n ve p-tipi bölgenin dirençlerinden kaynaklanır ve omik kontakların direncine benzetebiliriz. Pilde kullanılan yarıiletkenin yüksek dirençli olması veya kontağın iyi olmaması durumunda, pilin

seri direnci yüksek olabilir. Seri direncin büyük olması pilin fill faktörünü azaltarak pilin verimini direk etkiler. Seri direncin de katılmasıyla bu cihazın akım bağıntısı denklem (2.12)'deki gibi yazılır.

$$I = I_L - I_0 \left[\exp \left(\frac{eV + IR_s}{nkT} \right) - 1 \right] \quad (2.12)$$

Seri direncin değerini azaltabilmek için aşırı katkılanmış merkez tabaka ve eklem kalın olması gereklidir. Bu iki özelliğe bağlı olarak azınlık taşıyıcıların yaşam süreleri azalır ve bu da karanlık akımın artma eğilimi göstermesine neden olur. Bu nedenler göz önünde bulundurularak seri direnci azaltmak için en iyi tasarım seçilmelidir.



Şekil 2.4 Güneş pillerinde band bölgesine bağlı olarak verim (Sze S.M. 1981)

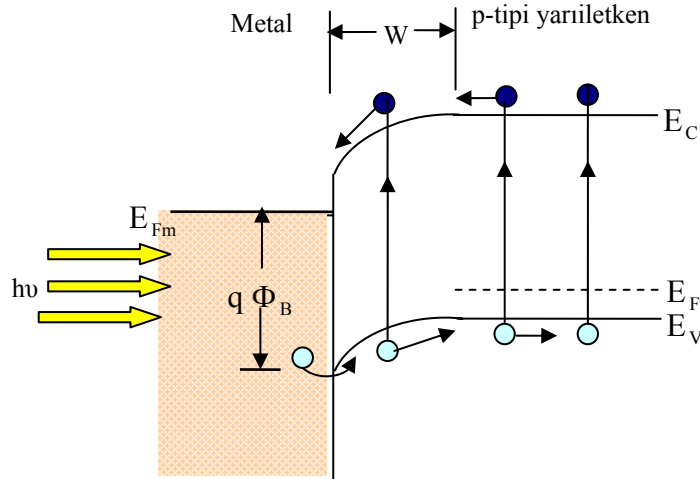
Şekil 2.4'de 1 kat güneş (C=1) ve 1000 kat güneş (C=1000) konsantrasyonları için 300 K de çeşitli malzemeler için η verimliliğinin E_g yasak enerji aralığına bağlı olarak gösterimi verilmiştir (Sze S.M. 1981). Şekilde de görüldüğü gibi yasak enerji aralığı 1 eV ile 2 eV arasında olan yarıiletkenler teorik olarak güneş pili için kullanıldığında verimi %20 civarındadır. Bunun yanında teknolojik ve diğer sebeplerden dolayı güneş pili için Si ve GaAs malzemelerinden yapılması uygun olarak seçilmiştir. GaAs ile yapılan güneş pilleri daha yüksek verimli olmasına rağmen Si, onun teknolojidaki avantajları ve maliyetinin ucuzluğundan dolayı p-n güneş pilleri için daha yaygın kullanım alanına sahiptir.

2.2.2 Schottky Eklem Güneş Pilleri

Schottky eklem güneş pilleri için yarıiletken üzerine çok ince ($100 \text{ \AA}$ dan daha ince) bir metal filmle kaplanmalıdır. Şekil 2.5’de p-tipi yarıiletken ile hazırlanan bir güneş pili için enerji band diyagramı verilmiştir. Işık ön yüzeye geldiğinde yani metale geldiğinde $h\nu > q\Phi_B$ enerjisine sahip olan fotonların metal içindeki boşlukları uyararak metal ile yarıiletkenin ara yüzeyindeki Schottky bariyerini aşarak yarıiletkene geçmesini sağlayabilir.

Bununla birlikte çok ince bir metal film olduğundan dolayı ışık yarı iletken içerisinde geniş bir bölgeye kadar girebilir ve $h\nu > E_g$ enerjisine sahip olan fotonlar arınma bölgesinden ve yarıiletkenin içerisinden elektron-boşluk çiftleri üretir. Oluşan boşluklar arka kontağa doğru hareket ederlerken elektronlar ise eklemde toplanırlar bunun sonucu olarak da diyottakinin tersine bir fotoakım oluşur. Metalden yarıiletkene geçen boşlukların termoiyonik emisyonu sonucu oluşan diyotun karanlık akımı fotoakıma karşıdır.

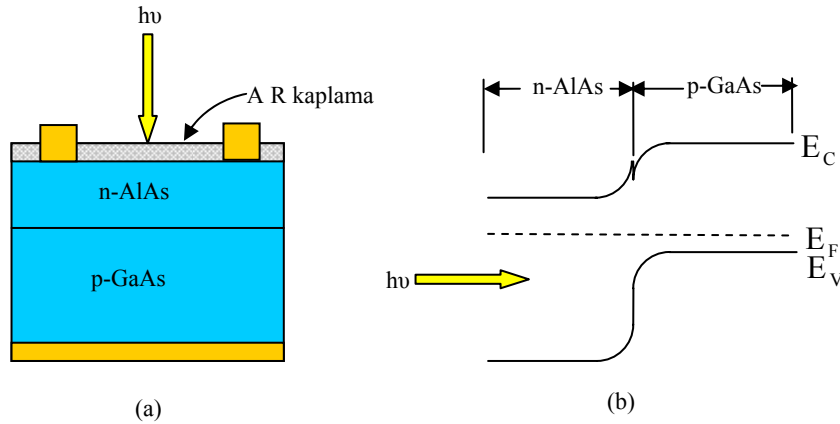
Bir Schottky bariyer diyotta oluşan karanlık akım p-n eklemdekinden yaklaşık birkaç kat fazladır bundan dolayı da Schottky güneş pilinde açık devre gerilimi (V_{oc}) p-n eklem güneş pilinden daha düşüktür. Sonuç olarak bu pillerdeki verimde p-n eklem güneş piline göre çok daha düşüktür. Schottky güneş pillerinin en büyük avantajı onların yapımında difüzyon işlemindeki gibi yüksek sıcaklık gerekmediğinden üretim maliyeti daha düşüktür.



Şekil 2.5 Schottky güneş pilinin enerji-band diyagramı (Tyagi M.S. 1991)

2.2.3 Heteroeklem Güneş Pilleri

Heteroeklem güneş pilleri geleneksel homoeklem p-n eklem güneş pillerine göre bazı avantajlara sahiptirler. Eğer heteroeklemin öndeki katmanını oluşturan yarıiletkenin band bölgesi E_{g1} alttaki yarıiletkenin yasak enerji aralığı E_{g2} 'den daha büyük ise $h\nu > E_{g1}$ enerjisine sahip fotonların büyük bir kısmı üsteki yarıiletken katmanı içerisinde soğrulur. Bununla beraber üsteki tabakadan geçen düşük enerjili fotonlar ise ikinci yarıiletken tarafından soğrulabileceklerdir. Bu durum kısa dalga boyuna sahip ışıkla etkileşmeyi de arttıracaktır. Fakat heteroeklem güneş pillerinin elde edilmesi uygun örgü parametrelerine sahip yarıiletkenler bulmaktaki güçlükten dolayı en temel zorluktur. Örneğin AlAs ve GaAs gibi uygun iki yarı iletken ele alalım. Bu yarıiletkenlerden yapılan AlAs/GaAs heteroeklem güneş pili için enerji band diyagramı ve arakesit görüntüsü şekil 2.6'da verilmektedir. AlAs ($E_{g1}=2.2\text{eV}$) yarıiletkeni GaAs'den daha büyük yasak enerji aralığına sahiptir. Güneş ışığı için AlAs'ğin absorpsiyon katsayısı nispeten küçüktür ve bu durum ışığın büyük oranda GaAs içerisine girip soğrulmasına neden olur. Sonuç olarak ışıkla üretilmiş taşıyıcılar p-n homoeklem güneş pillerine benzer bir şekilde toplanırlar. Heteroeklem güneş pillerinde verim %18 civarlarına kadar yükselmiştir.



Şekil 2.6 AlAs heteroeklem güneş pili için a) ara kesit görüntüsü ve b) termal dengedeki enerji band diyagramı (Tyagi M.S. 1991)

İnce film güneş pilleri, elektriksel olarak aktif veya pasif olan cam, seramik, grafit veya metal gibi bir altlık üzerine ince film yarıiletken malzeme kaplanmasıyla üretilirler. CdS, CdTe, ZnSe, InP, GaAs, Si ve diğer yarıiletken filmlerin kaplanması için PVD (fiziksel buhar biriktirme) ve CVD (kimyasal buhar biriktirme) yöntemlerine ait birçok kaplama tekniği

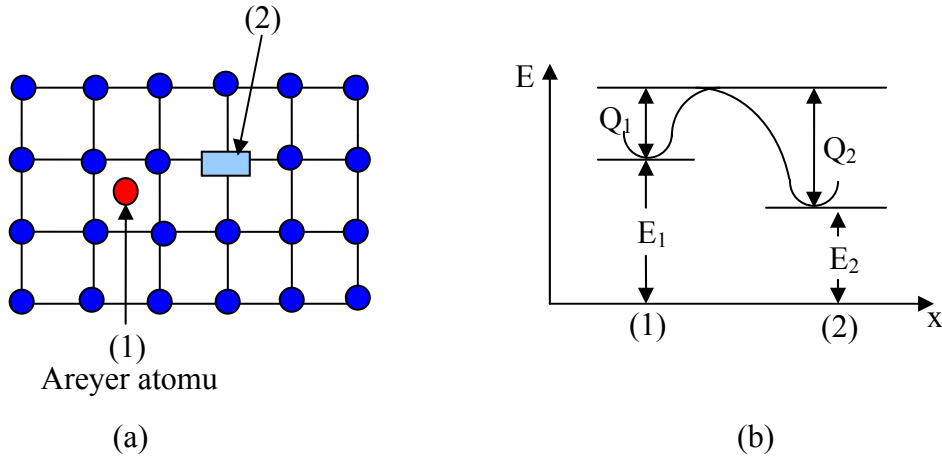
kullanılır. Bu şekilde kaplanmış filmler ya polikristal yapıdadır yâda amorf yapıdadır ve bu yüzden tek kristalden daha düşük özellikleri ile kristal yapısında çok fazla düzensizliklere sahiptirler. Düşük üretim maliyeti ve ucuz malzemelerin kullanılabilmesi ince film güneş pilleri için büyük bir avantajdır. Bunun yanında bu piller düşük verime sahiptir ve kaplanmış yarıiletken ile ortamın kimyasal reaksiyonu sonucunda uzun süre dengede kalamamaları da başka bir dezavantajdır. İnce film güneş pillerinin en önemlilerinden biri de Cu_2S - CdS heteroeklem güneş pilleridir. Bu heteroeklemlerin Cu_2S ve CdS arasındaki örgü yapısındaki uyumsuzluklardan dolayı ara yüzey durumlarının yoğunlukları büyüktür. Bu durumlar recombinasyon merkezleri gibi davranırlar ve güneş pilinin verimini azaltırlar.

2.3 Atom Hareketleri ve Difüzyon

Malzemelerde birçok uygulama sırasında görülen katılaşma, çökeltme, yeniden kristalleşme, tane büyümesi gibi olaylar büyük ölçüde atomların kütle içerisindeki hareketleri ile ilişkilidir. Isı enerjisi etkisiyle atom hareketleri iki şekilde oluşabilir. Bu hareketlerden ilki ısı etkisiyle atomun kendi denge konumundaki küçük titreşim hareketleridir. Diğerisi ise atomsal yayılım veya difüzyon olarak adlandırılan ısı etkisiyle bir denge konumundan diğerine atlayarak yaptıkları uzak mesafe hareketleridir. Difüzyon sonucu cismin yapısı ve buna bağlı olarak da özellikleri değişir. Mikroelektronik teknolojisinde kullanılan katkılama yöntemleri temelde üç gruba ayrılabilir: 1) Yüksek sıcaklık difüzyonu; 2) Radyasyon ile uyarılmış difüzyon; 3) iyon aşılması (iyon implantasyonu).

Mutlak sıfır sıcaklığında atomlar durgundur ve potansiyel enerjileri minimumdur. Isı verilerek sıcaklık artırılmaya başlandığında atomlar da kendi denge konumları etrafında titreşim hareketi yapmaya başlarlar. Bu hareket neticesinde atomlar arasındaki bağıl mesafe sürekli değişir ve dolayısıyla sahip oldukları potansiyel ve kinetik enerjilerde değişir. Bir kütle içinde bulunan atomlar veya moleküller herhangi bir anda aynı enerjiye sahip değildirler. Atom enerjilerinin dağılımı herhangi bir T sıcaklığında Boltzman dağılım eğrisine uyar ve bazı atomların enerjileri sıfıra yaklaşırken bazılarının ise çok yüksek olabilir. Fakat atomların çoğunluğunun enerjisi ortalama bir E enerjisi civarındadır ve sıcaklık artınca bu ortalama enerjide artar. Ayrıca sıcaklık artınca yüksek enerjiye sahip parçacıkların sayısı da artar.

Şekil 2.7’de bir atomun kristal yapı içerisinde iki farklı konumdaki enerji durumu yer almaktadır. Genellikle kristal yapı içerisindeki arayer atomları sıkışık durumda bulunurlar ve çevrelerinde bir gerilme alanı yaratırlar.



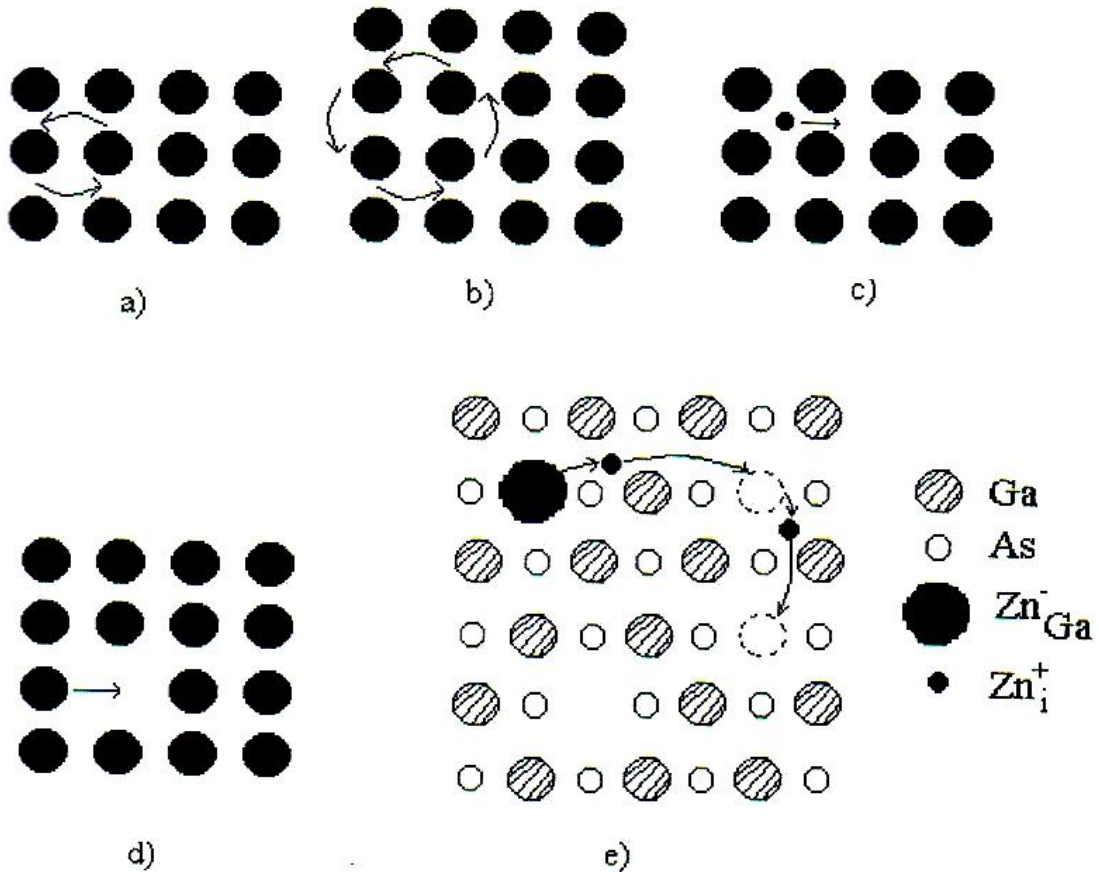
Şekil 2.7 Bir atomun kristal örgü içerisindeki a) farklı iki konumu ve b) bu konumlarda sahip olacağı enerjiler (Onaran K. 2003)

(1) konumunda üzerine basınç etkileyen arayer atomunun E_1 enerjisi, aynı atom (2) konumundaki boş örgü yapısına geçtiğinde sahip olacağı E_2 enerjisinde daha büyüktür. Arayer atomunun (1) konumunu içeren yüksek enerjiye sahip yapı yarıkararlı yapı ve (2) konumundaki düşük enerjili yapı kararlı yapıdır. Cisimlere yeterli olanak verilirse, örneğin ısıtılırsa, daima düşük enerji düzeyine sahip kararlı yapılar oluşturmaya doğru eğilim gösterirler. Şekil 2.7 de görüldüğü gibi atom (1) den (2) konumuna geçerken aştığı enerji engeli tam tersi olarak (2) den (1) konumuna geçerken aştığı enerji engelinden daha küçüktür. Bu enerji engelleri difüzyon sisteminin bir özelliğidir. Difüz eden bir atomun bir enerji engelini aşması için gerekli enerjiye aktivasyon enerjisi denir. Difüzyonun oluşabilmesi için aktivasyon enerjisi enerji engeline eşit olmalıdır (Onaran K. 2003).

2.3.1 Difüzyon

Sıcaklığın artması ile malzeme içindeki atomların ısı titreşimleri artar ve bir kısmı içinde bulunduğu yapıda bir konumdan diğerine atlayarak yer değiştirir. Atomal yayılım veya difüzyon denilen bu olayda öncelikle atom çevresi ile bağları koparır, sonra atomlar arası boşluktan geçer ve yeni konumunda tekrar çevresi ile bağ kurar. Yani genel olarak atomların malzeme içerisinde bir noktadan diğer bir noktaya taşınması olayına difüzyon denir. Bütün bunlar için gerekli olan difüzyon sisteminin bir özelliği olan aktivasyon enerjisidir. Yer değiştirme tek tür atom içeren saf malzemelerde olursa öz-difüzyon, katkı atomlarının yer değiştirmesine ise difüzyon denir. Genellikle atomlar yüksek konsantrasyonlu bölgeden düşük konsantrasyonlu bölgeye doğru difüz ederler.

Atomlar kristal yapı içerisinde bir denge konumundan diğerine geçişini farklı yöntemlerle gerçekleştirebilirler. Bu geçişleri sağlayan muhtemel yöntemler şekil 2.8’de yer almaktadır. Bunlardan birincisi komşu iki atomun aynı anda yer değiştirmesi ile meydana gelir ve *çift yer değiştirmesi* denir. Bu yöntem daha çok metallerde görülür ve gerçekleşme olasılığı oldukça düşüktür. İkinci yöntem, yüksek enerji gerektirdiği için gerçekleşme olasılığı düşüktür. Birbirine değerek bir halka halinde bulunan atomlar aynı anda ve aynı yönde hareket ederek birbirlerinin yerini alabilirler ve buna *halka yer değiştirmesi* denir. *Arayer difüzyonu* denilen üçüncü yöntemde ise arayer atomunun kristal örgüde mevcut atomlar arasından geçerek oluşturduğu harekettir. Diğer bir yöntem *vakansiyon veya boşluklarla difüzyon* dur ve atomun bulunduğu yerden komşu boşluğa geçmesiyle oluşur. Arayer ve boşluklarla difüzyon yöntemlerinin bir bileşkesi olan ve aynı anda iki yöntemin kullanılmasıyla oluşan yöneme ise *karmaşık veya dissosiyatif difüzyon* denir.



Şekil 2.8 Atomların difüzyon mekanizmaları: (a) çift yer değiştirme, (b) halka yer değiştirme, (c) arayer, (d) boşluk ve (e) çinkonun GaAs’de dissosiyatif mekanizması (Caferov T.D. 1998)

2.3.2 Difüzyon Kuralları

Adolf Fick tarafından 1855 yılında difüzyonun birinci ve ikinci kuralı olarak adlandırılan difüzyon kuralları verilmiştir.

Difüzyonun Birinci Kuralı (1. Fick Kuralı) : Atomların malzeme içerisinde serbest difüzyon akısı o noktadaki konsantrasyon gredyenti (dN/dx) ile alakalıdır.

$$J = -D \frac{dN}{dx} \quad (2.13)$$

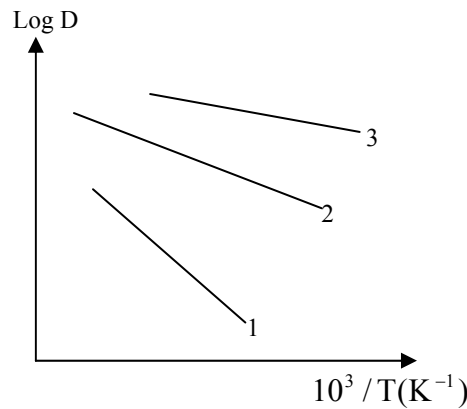
Burada J atomların serbest difüzyon akısı, N atomların konsantrasyonu, D difüzyon katsayısıdır ve birimi (m^2/s) dir. Atomların akış yönü konsantrasyon gredyentinin tersi yönünde olduğu için denklemde (-) işareti konmuştur. D difüzyon katsayısı sıcaklığa, yer değiştirme sisteminin türüne ve yapısına bağlıdır.

$$D = \alpha a^2 v \quad (2.14)$$

Bu denklemde a örgü parametresi, v atomların kristaldeki titreşim frekansı ve α ise kristal örgüsüne bağlı boyutsuz bir sabittir. Boltzman D difüzyon sabitinin sıcaklığa bağlılığını Arrhenius tipindeki (2.15) eşitliği ile vermiştir.

$$D = D_0 \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) \quad (2.15)$$

Burada D_0 yayılım sabiti, Q aktivasyon enerjisi (kal/mol), T mutlak sıcaklık ve k boltzman sabitidir.



Şekil 2.9 (1) Boşluk, (2) arayer ve (3) tane sınırları mekanizmaları ile hareket eden atomların difüzyon katsayılarının sıcaklığa bağlılığı (Caferov T.D. 1998)

Yayınım sabitlerinin difüzyon sisteminin türü ve yapısına bağlılığı şu şekilde açıklanabilir:

- 1) Küçük atomlar daha kolay yayınır.
- 2) Bir atom ergime sıcaklığı düşük, dolayısıyla atomlar arası bağı daha zayıf olan ortamda daha kolay yayınır.
- 3) Atomsal dolgu faktörü düşük ortamlarda yayınım daha az enerjiyi gerektirir.
- 4) Düzensiz yapıya sahip ve atom sıklığı tanelere göre daha az olan tane sınırları boyunca yayınım daha kolay oluşur. Bu nedenle faz dönüşümleri ve korozyon olayları tane sınırlarında başlar ve daha hızlı gerçekleşir.

Difüzyonun İkinci Kuralı (2. Fick Kuralı): Denklem (2.16)'da verilen süreklilik denklemi difüzyonun 1. kuralına uygulanırsa, (2.17) eşitliği elde edilir ve konsantrasyonun zamanla değişme hızının konsantrasyonun ikinci türevi ile orantılı olduğunu gösterir.

$$\frac{\partial N}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial x} \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} \quad (2.17)$$

Koordinat ve zamana bağlı olan $N(x,t)$ konsantrasyon dağılımını çıkarmak, ikinci difüzyon denklemini (2.17) çözmek demektir. Bunun için sabit konsantrasyonlu kaynaktan yarı sonsuz boyutlu ($x=\infty$) numunenin yüzeyinden içine doğru atomların difüzyonu gözönüne alınır. 2. Fick kuralının çözümü için başlangıç ve sınır şartları şunlardır;

$$N(0,t) = N_0 \quad (2.18)$$

$$N(x,t) = 0 \quad (2.19)$$

Bu şartlar uygulandığında 2. Fick denkleminin çözümü eşitlik (2.20) şeklindedir.

$$N(x,t) = \left(1 - \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (2.20)$$

Burada N_0 örnek yüzeyindeki ($x=0$) sabit konsantrasyonu ifade eder ve $\operatorname{erf}(z)$ Gauss hata fonksiyonudur.

$$\operatorname{erf} z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-z^2} dz \quad (2.21)$$

İkinci difüzyon kuralına göre, yayılım olayı başlangıçta çok hızlıdır, zamanla konsantrasyon gradyanı azaldığından hız düşer ve tam homojen bir yapı için sonsuz süreye gerek vardır.

2.3.3 Radyasyon ile Uyarılmış Difüzyon

Silisyum içerisinde üçüncü grup ve beşinci grup akseptör ve donör katkıları yapılması mikroelektronik teknolojisinde çok kullanılır. Silisyumun kristal örgüsü içinde bu katkı atomların difüzyonu vakansiyon (boşluklar) mekanizması ile gerçekleşir. Bu nedenle silisyumda üçüncü ve beşinci grup katkı atomlarının difüzyon katsayıları, örgü içerisindeki boşlukların konsantrasyonu ile belirlenir. Kristal örgüde termodinamik dengedeki boşlukların konsantrasyonu sadece sıcaklığa bağlıdır. Bu tür boşluklara ek olarak termodinamik dengede olmayan ve kristal örgüye dışardan uygulanan etkilerle de, yüksek enerjili parçacıklarla (H, He, N, Ar, vb),;yani radyasyon ile, boşluklar oluşturmak mümkündür. Böylece radyasyon etkisiyle boşlukların konsantrasyonu artar ve buda katkı atomlarının difüzyon hızının artmasına neden olur. Bu olay radyasyon ışınları ile uyarılmış katkı difüzyonunun temelini oluşturur.

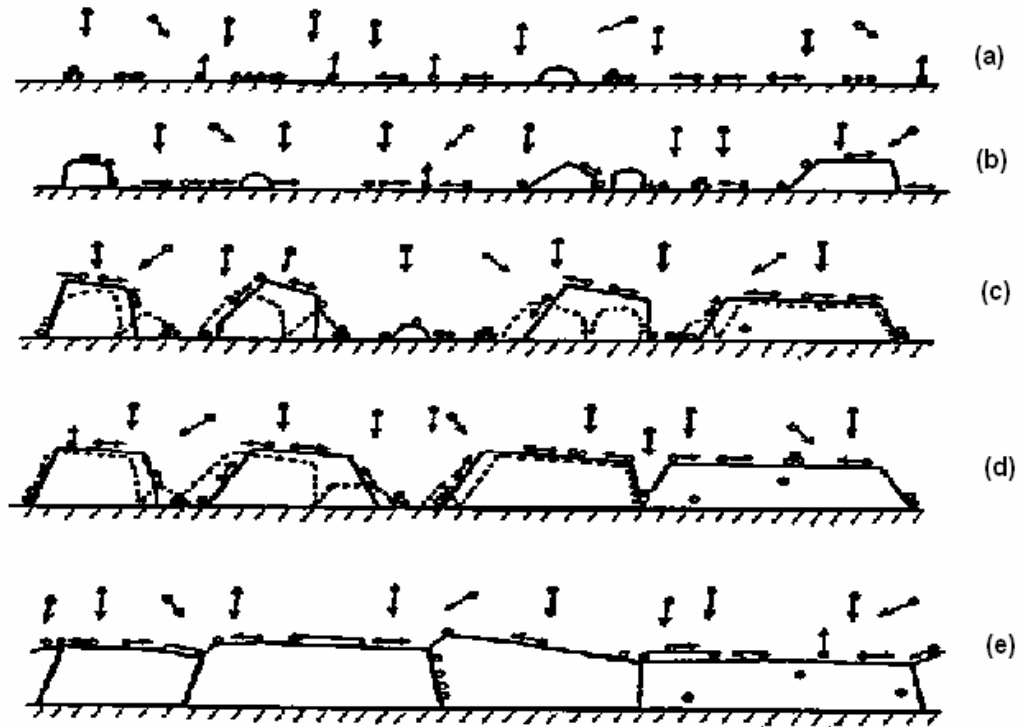
Radyasyon ile (H, He, N, Ar iyonları ile) uyarılmış katkı difüzyonunun termal difüzyona nazaran üstünlüğü daha düşük sıcaklıklarda gerçekleşmesidir. Bunun için iki yöntem kullanılmaktadır. Bunlardan birincisi, önce difüzyon yöntemi ile katkı atomları yarıiletkenin yüzey bölgesine yerleştirilir ve sonra hızlandırılmış iyonlarla örneğin içine doğru hareketlendirilir. İkincisi ise, önce malzeme içinde boşlukların oluşması için radyasyon ışınlama ve daha sonra termal katkı difüzyonu yapılır(Caferov T.D. 1998).

Radyasyon ile uyarılmış difüzyon, termal difüzyona karşı (1100 °C – 1200 °C), çok düşük sıcaklıklarda (600 °C – 700 °C) yapılır. Ayrıca, radyasyon ile uyarılmış difüzyonun neticesinde, kontrollü olarak katkı atomlarının farklı konsantrasyon dağılımlarını elde etmek mümkündür.

2.4 İnce Filmlerin Yapısı ve Oluşum Mekanizmaları

İnce filmlerin mikro yapısal karakteristiği, bize onların geniş kullanım alanları olan elektronik, manyetik, optik, kimyasal cihazlardaki ve sistemlerdeki uygulamalarında özelliklerini, performanslarını ve güvenilirliklerini kontrol edebilmemiz için önemlidir. İnce filmler mikro yapılarını karakterize eden tane boyutu, kristal yönelimi, örgü kusurları, faz oluşumları ve yüzey özellikleri gibi terimlerle çok geniş yapısal özellikler gösterirler. İnce film kaplama sürecinde başlangıç oluşum atom buharında yâda plazma içerisinde gelen atomların yüzeye

ulaşıp, bu yüzeyden soğurulmasıdır. Yüzeye gelen bu atomların dağılımı ilk başta rasgeledir ve bu atomlara adatom adı verilir. Adatomlar yüzeyde enerji açısından denge haline ulaşıncaya kadar difüzyon yardımı ile hareketli durumdadırlar. Bu adatomların difüzyon enerjileri ve mekanizmalarını anlayabilmek kaplama sırasında oluşan adacıkları açıklayabilmek için çok önemlidir. Yüzeyde difüzyona uğrayıp diğer atomlarla etkileşime giren atomlar daha büyük grupları yani adacıkları oluştururlar. Daha sonra film içerisindeki fazlar ve bu fazlar içerisindeki atomlar bağ kurarlar. Yüzeydeki enerji dengesinin kurulması ile birlikte çekirdeklenme başlar. Çekirdeklenmeden sonrada filmin büyümesi bu çekirdekler etrafında gerçekleşir (Petrov I., 2003). İnce film büyütme prosesinin mikro yapısal oluşumu şematik olarak şekil 2.10’da verilmiştir.

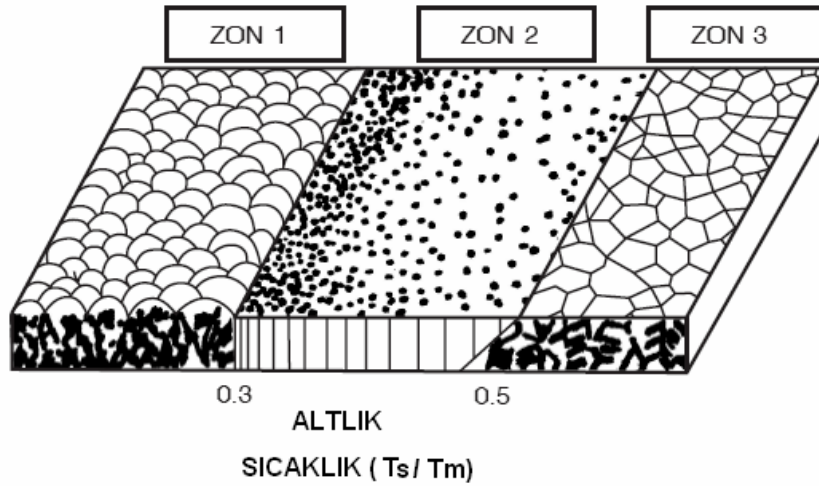


Şekil 2.10 Şematik olarak ince filmlerin büyüme mekanizması a) adatomların yüzeyde soğurulması b) çekirdeklenme c) yakın çekirdeklerin birleşmesi d) bütün çekirdeklerin birleşerek sürekli film oluşturmaya başlaması e) oluşan film tabakasının büyümesi (Barna P. B. 1998)

Film tabakasının bütünleşmesi sıcaklığa ve adacıkların boyutlarına bağlı olarak çok hızlı veya yavaş gerçekleşebilir. Oluşum difüzyon yüzeyleri veya değme noktalarındaki kristalleşme ile başlar. Adacıkların birleşmeye başlaması ile kenar ve yüzey enerjileri serbest kalarak bir sınır kuvveti meydana gelir.

Filmlerin çeşitli uygulamalar için mikro yapısal ve nano yapısal uygulamalarına ihtiyaç

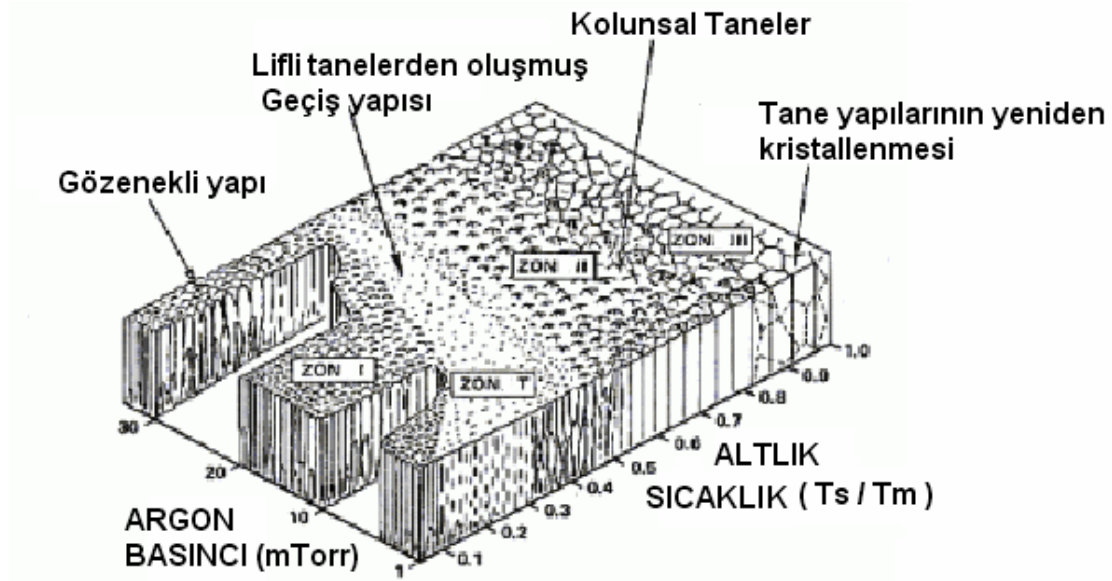
duyulmuştur ve bu geçişi kontrol edebilmek içinde son yıllarda çok çalışma yapılmıştır. Filmlerin kaplama morfolojisini kontrol edebilmek yapısal özelliklerini belirlememiz anlamına gelir. Bu nedenle de filmlerin büyütme parametrelerine bağlı olarak fiziksel kaplama teknikleri için filmlerin yapısal oluşumunu sistematik bir şekilde kategorize eden yapısal zon (bölge, zone) modelleri geliştirilmiştir. Bunlardan Movchan-Demchishin sıcaklık etkisine bağlı olarak termal buharlaştırma sistemlerindeki kaplamalarda yapının değişimini gösteren bir model geliştirmiştir. Şekil 2.11’de görülen bu yapısal zon modeli, T_s kaplama sıcaklığının T_m altlığın ergime sıcaklığı oranına (T_s/T_m) bağlı değişiminin etkisini verir. Bu yapısal modelde 3 ayrı zon bulunmaktadır. Zon 1’den 2’ye geçiş metaller için yaklaşık 0.3 oksitler için ise 0.26 T_s/T_m oranıdır. Z2 den Z3 geçiş içinde bu oranın yaklaşık 0.5 olması gerekmektedir.



Şekil 2.11 Movchan ve Demchishin yapısal zone modeli (Thompson C.V. 2000)

Thornton sıçratma yöntemi ile elde edilen filmler için bu modeli ilerletmiş ve yapının Ar^+ gaz basıncına olan bağımlılığını da dahil ettiği yeni bir model geliştirmiştir. Bu model hem sıcaklık hem de basınç ile kaplama morfolojisinin nasıl değiştiğini göstermektedir (Şekil 2.12). Bu yapısal modelde Z1 ile Z2 arasında bir ZT adı verilen bir ara geçiş bölgesi (zonu) bulunmaktadır. ZT bölgesine sadece sıçratma ile değil diğer iyon kaplama tekniklerinin hepsinde rastlanmıştır. Zon 1 yapısı çok düşük sıcaklıklarda oluşmaktadır ve bu sıcaklıklarda yüzey difüzyonu ile adatom mobilitesi çok azdır. Düşük sıcaklık nedeni ile yüzeye gelen atomların enerjilerinin düşük olması hareket kabiliyetlerini etkileyerek atomların çarptıkları noktalara yakın kısımlarda çekirdeklenmelerine sebep olur. Bu durum çekirdeklenme

yoğunluklarını arttıracaktır ve yüksek çekirdeklenme yoğunluğu nedeniyle filmin ince kolonlu Z1 modelinde büyümesine neden olacaktır. Film gelişimi üç boyutlu adacıklar modeline uygundur ve büyüyen film yüzeyi pürüzlüdür. Film içerisinde aralarında birkaç nm boşluk olan 10–100 nm çapında kolansal kristaller bulunmaktadır. Z1 modelinde oluşan kolomlar hatalı kristallerden oluşmuştur ve film kalınlığı arttıkça yüzey difüzyonu az olduğundan hatalar büyümekte ve kalıcı hale gelmektedir. Bu hatalar kaplamadan sonra film tavlama işlemine tabi tutulup yeniden kristalleşmesi sağlanarak azaltılabilir.



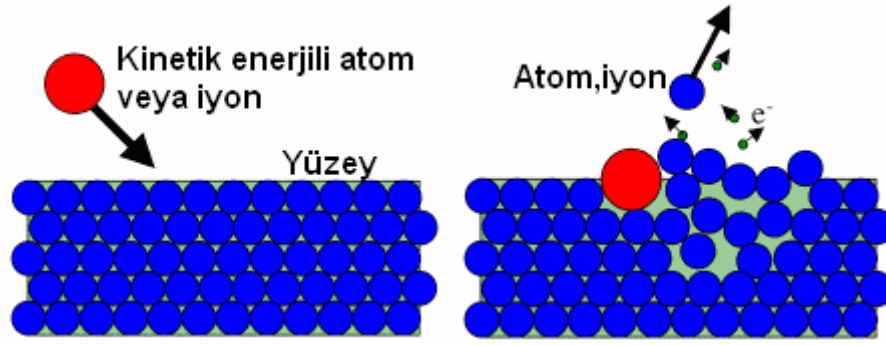
Şekil 2.12 Thornton yapısal zone modeli (Ohring M. 1992)

Ara geçiş bölgesi olan ZT de yapı oluşumu film kalınlığı boyunca homojen değildir ve altlık yüzeyinde kristallenmeler vardır. Zon T’de de zon1’deki gibi hatalı kolon yapısı mevcuttur ve V-şeklindeki taneler film kalınlığı arttıkça kolonsal yapıya dönerler. Fakat zon 1’deki gibi kolonlar arasında boşluklar yoktur. İyon kaplama tekniklerinin hepsinde bu zon T yapısına çok rastlanmaktadır çünkü aslında sıcaklığın düşük olduğu bu iyon kaplamalarında zon 1 yapısında filmin büyümesi beklenirken iyonların bu kaplamada sahip oldukları kinetik enerji nedeni ile film büyümesi zon T yapısına dönüşmektedir. Zon 2’de sıcaklık yüksektir ve yüzey difüzyon mekanizması birinci etkindir. Bu bölgesel yapı birbirlerine sıkı sıkıya yapışmış tane sınırlarına sahip kolonlardan oluşmuştur. Kolon çapları Z1’e göre daha büyüktür ve çap sıcaklık oranı arttıkça büyümektedir. Kolonlar diğer bölgelere (Z1 ve ZT) göre daha az kristal hatalarına sahiptirler. Zon 3’de çok yüksek sıcaklığın olması nedeni ile kütsel difüzyon mekanizması hâkimdir. Kristaller büyüktür ve rasgele yönlendirilmiştir. Yeniden kristalleşmeler söz konusudur. Bu yapısal bölgede oluşan filmlerin yüzeyi düz ve parlaktır.

Bu modeldeki 4 zonun hepsi kaplanan her malzeme için geçerli olmayabilir. Örneğin zon 3'e çoğu malzemelerde rastlanılmaktadır. Ayrıca zonlar arasında geçiş kesin bir sıcaklık oranında olmayabilir. Geçiş sıcaklık oranı kaplama koşullarına ve malzemeye bağlı olarak değişebilir. Geçiş, film kalınlığının artması ile bazen Z3'den Z2'ye yada ZT'den Z1'e doğru olabilir. Zonların yüzey topografıları yüzey enerjisine ve atomların yüzeye geliş açılarına bağlı olarak değişebilir.

2.5 İnce Film Kaplama Teknikleri

Teknoloji uygulamaları için çok çeşitli kaplama teknikleri kullanılmaktadır. Fakat bu teknikler içinde bazıları ince film büyütme yöntemleri arasında önemli yer teşkil eder. Kaplama vakum ortamında malzemenin çeşitli tekniklerle altlık üzerinde biriktirilmesi işlemidir ve bu yüzden uygulamalarda vakum teknikleri önemlidir. İnce film büyütme tekniklerinden en çok kullanılan yöntemler şunlardır; termal buharlaştırma, moleküler beam epitaksi, katodik ark, kimyasal buhar biriktirme teknikleri, Sıçratma teknikleri, iyon beam biriktirme, darbeleri lazer biriktirme gibi teknikleridir. Termal buharlaştırma en kolay kaplama yöntemlerindendir ve kaplanacak malzemenin ya termal olarak ya da elektron bombardımanı ile ısıtılarak buharlaştırılıp altlık üzerine biriktirilmesi ile gerçekleştirilir. Moleküler beam epitaksi yönteminde knudsen kaynakları ile üretilen sürekli bir beam vardır ve beam elektron çarpışmaları sonucu kısmen iyonize edilip elektrik alan yardımı ile hedefe doğru hızlandırılması ile kaplama gerçekleştirilir. Katodik ark yönteminde yüksek akım katot ve anot sistemi ile iletken katı hedeften bir plazma oluşturularak kaplama yapılır. Kimyasal buhar biriktirme yöntemlerinde de bu plazma oluşturulur fakat bu yöntemde ortamdaki reaksiyonlardan dolayı altlık ısıtılmalı ve daha fazla gaz verilmelidir. İyon beam kaplama tekniğinde diğer plazma tekniklerine göre plazma altlıktan daha uzaktadır ve plazma içindeki iyonlar uyarılarak altlığa doğru hızlandırılıp kaplama gerçekleştirilir. Darbeleri lazer biriktirme tekniğinde ise lazer kaplanacak hedef malzemeye odaklanır ve belli atımlarla hedef yüzeyine vurarak hedef yüzeyinden altlığa doğru bir plazma oluşturularak kaplama işlemi gerçekleştirilir. Sıçratma yöntemi ile kaplama temel olarak ortamdaki gazın elektronlarla çarpışması sonucu iyonize edilip katı haldeki hedefe çarptırılarak hedef atomlarını kopartmasıyla oluşan kaplamadır. Film kaplamak için sıçratma teknikleri iki şekilde kategorize edilir: glow discharge (diyot ve magnetron) ve iyon beam. Bu sıçratma yöntemlerinin hepsinde de, enerjili parçacıklar ile yüzey atomları arasındaki momentum transferi olan aynı temel mekanizma ile parçacıklar aniden fırlatılırlar(saçılırlar). Şekil 2.13'de basitçe bu mekanizma görülmektedir.

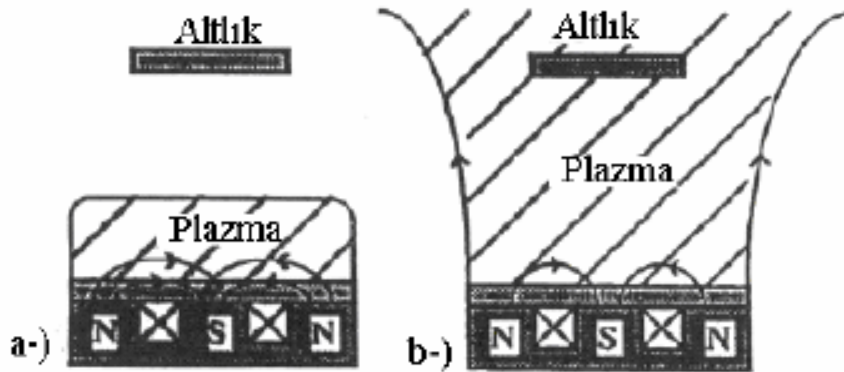


Şekil 2.13 Sıçratma kaplama teknikleri için temel mekanizma

2.5.1 Manyetik Alanda Sıçratma Yöntemleri

Bu sıçratma tekniği mıknatısların dizaynından dolayı dengeli manyetik alanda sıçratma ve dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma adı altında ikiye ayrılır. Her iki manyetik alanda sıçratma tekniğinde de elektrik alana dik olarak katot yüzeyine paralel manyetik alan uygulanır. İyon bombardımanı ile katot dan çıkarılan elektronlar katodun yanında sikloid şeklinde hareketlenirler. Bu elektronlar katodun yanındaki başka atom veya moleküllerle çarpışarak onları iyonlaştırır. Dolayısıyla tam katodun yanında yüksek konsantrasyonlu pozitif iyonlar meydana gelir ve bu katot bombardımanının şiddetini artırır ve bununla birlikte katodun önündeki hedefe çarpan bu iyonlar hedeften parçacıkları fırlatmaya başlar.

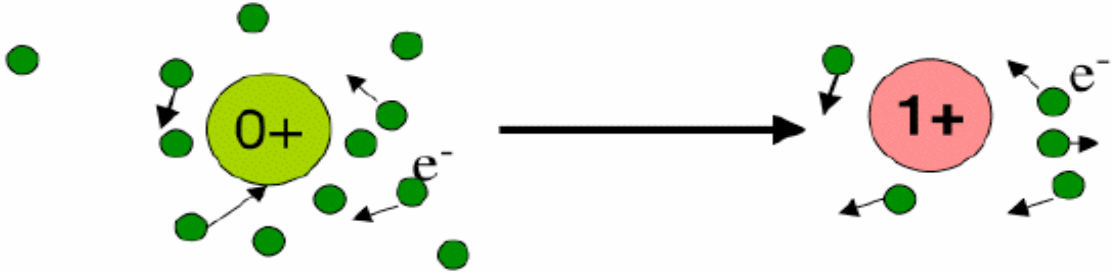
Manyetik alanlar elektronların dışarı doğru yönlenmelerine izin verecek şekilde düzenlenmişse buna dengelenmemiş magnetron sistemi denir. Dengelenmiş ve dengelenmemiş magnetron sistemleri şekil 2.14 a ve b’de görüldüğü gibidir ve plazmanın şiddeti mıknatısların konumlarına göre değişmektedir.



Şekil 2.14 Şematik olarak a) dengeli ve b) dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma yöntemleri (Smith D.L. 1995)

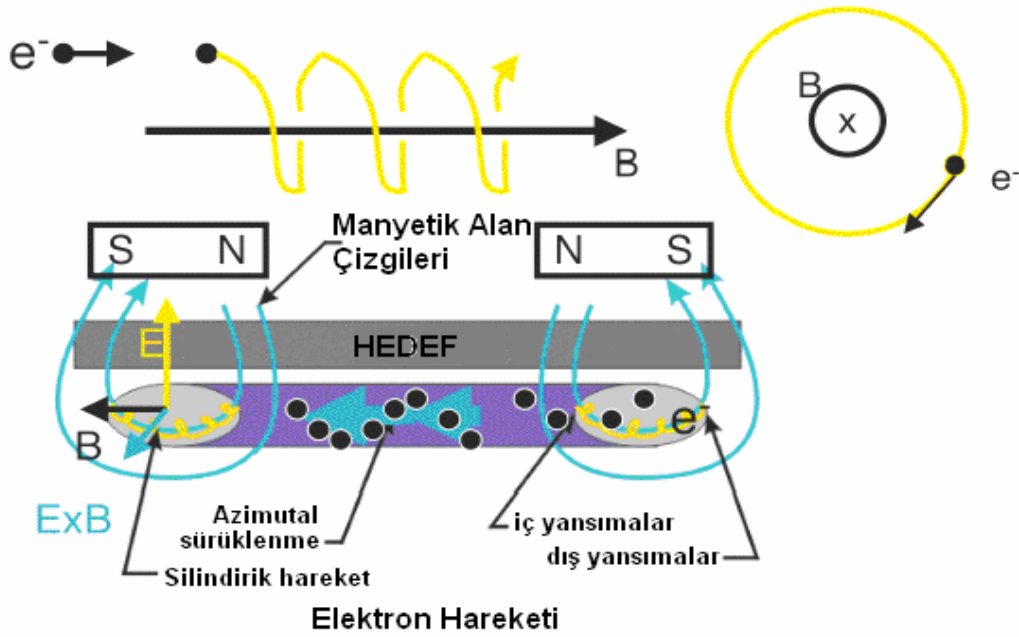
Dengelenmiş magnetron sisteminde altılığa doğru olan iyon akışı ve elektron akışı düşüktür. Dengelenmemiş magnetron sisteminde ise daha yüksek iyon ve elektron akışı mevcuttur altılığa doğru ve bu dengelenmiş manyetik alandakine göre yaklaşık 100 kat daha büyüktür. Dengelenmemiş manyetik alanda elektronların dışarı doğru yönlendirilmesi neticesinde plazma magnetron yüzeyinden uzakta oluşur. Bu plazma ise kaplama sırasında altılığın bombardımanı ve reaktif olarak biriktirme prosesi için verilen gazın etkin hale geçmesini sağlar.

Plazma elektriksel olarak nötr ortamdaki pozitif iyonların ve elektronların akışı ile oluşur. Bu akış elektrik ve manyetik alan vasıtası ile gerçekleşir. Birçok plazma kaplama tekniğinde pozitif iyonlar enerjili elektronlar ile nötr parçacıklar arasındaki çarpışmalar neticesinde meydana gelir. Bir plazma içerisindeki elektronlar, örneğin magnetron sıçratma tekniğinde çok sık kullanılan Ar(argon) gibi iyonlarla karşılaştırıldığında çok yüksek hareketliliğe sahiptirler. Tüm plazmanın kontrolü için bu yüksek hareketliliğe sahip plazma elektronlarının kontrolü gereklidir. Şekil 2.15’de elektrik ve manyetik alan kombinasyonu içerisinde elektronların hareketleri ve nötr atomlarla çarpışmaları sonucu pozitif iyonların meydana gelişi görülmektedir.



Şekil 2.15 Plazmadaki elektron çarpışmaları neticesinde nötr atomun iyonize edilmesi

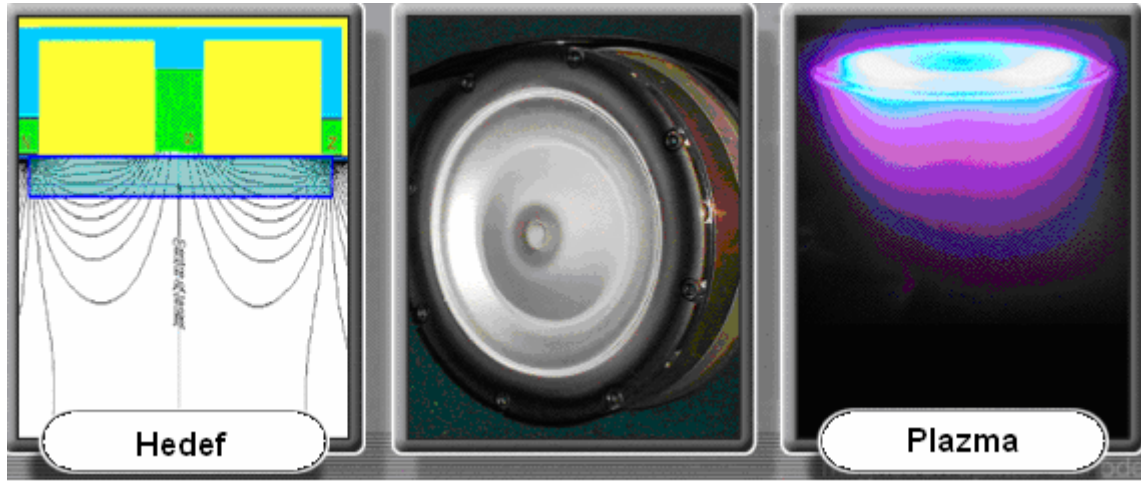
Elektronun, elektrik ve manyetik alan ile etkileşimi, $(E \times B)$ alanının vektör yönelimine ve büyüklüğüne bağlıdır. Örneğin; manyetik alan yüzeye paralel ve elektrik alan yüzeye dik olursa, yüzeyden ayrılan elektron ayrılır ayrılmaz hızlanacak ve manyetik alan etrafında sarmal hareket yapmaya başlayacaktır. Eğer, manyetik alan, manyetik alana dik hareket eden elektronlar için kapalı bir yol biçiminde şekillendirilirse, yüzeyde “akım” meydana gelecektir. Bu devreden akım, belki birkaç kere dış elektrik ünitelerince ölçülecek ve böylece katot yüzeyinde plazma oluşumu sınırlı olacaktır.



Şekil 2.16 Elektro-manyetik alanda elektronların hareketi ve sistemin şematik gösterimi

Manyetik alanın homojen olmayışı, homojen olmayan plazmanın oluşmasına sebep olur buda katot yüzeyinin homojen olmayan bombardımanı ve homojen olamayan katot malzemesinin sıçratılması, homojen olmayan plazma oluşumu demektir. Plazmadaki homojenliği arttırmak için, manyetik alanı hedef malzeme yüzeyine doğru hareket ettirmek veya hedef malzeme yüzeyini manyetik alana doğru hareket ettirmek gerekmektedir (Demirel B. 2006).

Dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma yönteminde, dışarıda bulunan mıknatıslardan çıkan manyetik alan çizgilerini itemeyecek büyüklükte, diğerlerine göre daha küçük bir çubuk mıknatıs merkeze yerleştirilir. Bu nedenle bazı manyetik alan çizgileri direkt olarak kaplanacak malzeme üzerine yönelir. Elektronlar manyetik alana paralel olarak hareket ettiklerinden, manyetik alan elektron hareketini etkilemeyecektir. Bu nedenle elektronlar, manyetik alan çizgilerini kullanarak kaplanacak malzemeye doğru hareket edecektir. Elektronlar bu hareketi sırasında artı yüklü iyonları da itecekler yani numuneye doğru yönlendireceklerdir bu da numune üzerine giden iyonların sayısını arttırarak iyon bombardımanı güçlendirecektir. Bombardıman enerjisi numuneye negatif hızlandırma voltajı uygulanarak daha da arttırılabilir. İyon bombardımanı güçlendirmenin bir başka yolu ise, nötral olarak sıçratılan parçacıkların kaplanacak malzemeye ulaşana kadar iyonize edilmesidir.

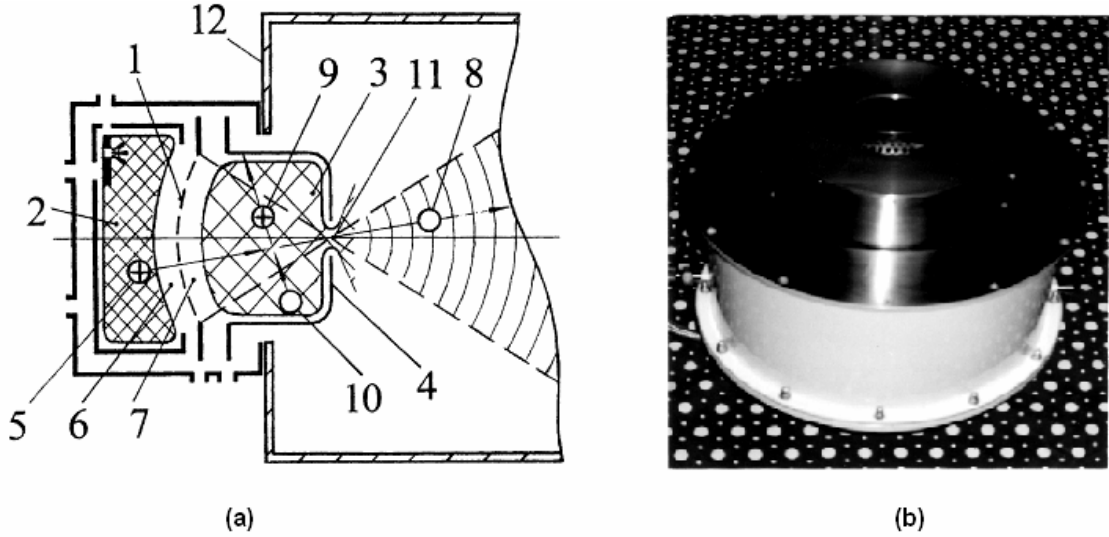


Şekil 2.17 Dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniği için magnetron kaynağının ve argon plazmasının gösterimi

2.6 Nötral Molekül Demeti Kaynakları

Endüstriyel uygulamalarda kullanılmak üzere hızlı nötral molekül kaynaklarının üç öncü serisi geliştirilmiştir. Bunlar dairesel arakesitiyle C-serisi, dikdörtgen arakesitiyle R-serisi ve silindirik A-serisidir. Bu kaynakların hepsi kaplama odasının ekseninde monte edilir ve altlık üzerinde hemen hemen benzer büyüklükte davranışlar sergilerler. Şekil 2.18a’da bir ızgara (1) ve her biri ızgara ile ayrılmış iki plazma elektrotundan (2 ve 3) oluşmuş bir üç elektrotlu sistem görülmektedir. Bunlardan biri yayıcı plazma (2) diğeri ise yükün çarpışma odasına (4) geçişi içerisinde sentez plazma diye adlandırılır (3). İyonlar (5) ilk yayıcı plazma (2) ile %80 geçirgen ızgara (1) arasındaki pozitif serbest yük tabakası (6) içerisinde hızlandırılmaya başlar ve ızgarayı geçip iyonlar sentez plazma (3) ile ızgara (1) arasındaki ikinci tabaka içersine girdiğinde hızları azaltılırlar.

Elektronların durgun durumlarından kurtulup akkor halinde soğuk katotdan fırlatılmaları için geniş kurulmuş bir yayıcı plazma kullanılmalıdır. Çarpışma odasında yük transferi neticesinde ilk iyonlar (5) hızlı moleküllere (8) dönüşürler. Gaz molekülleri ile yük transferi çarpışmaları sonucunda üretilen düşük enerjili iyonların hepsi ya tekrar ızgarada yâ da çarpışma odasında soğrulurlar. Bu yolla sadece hızlı moleküller çıkış yarığını (11) geçip kaplama odasına (12) girerler. Izgaranın şeklinin değiştirilmesiyle ve yayıcı plazmayı sınırlandırarak elektrostatik tuzakların değiştirilmesiyle, yüksek uyumlulukta geniş demetler, birbirinden ayrı veya birbiriyle iç içe girmiş demet konfigürasyonlarının herhangi birinden üretmek mümkündür.

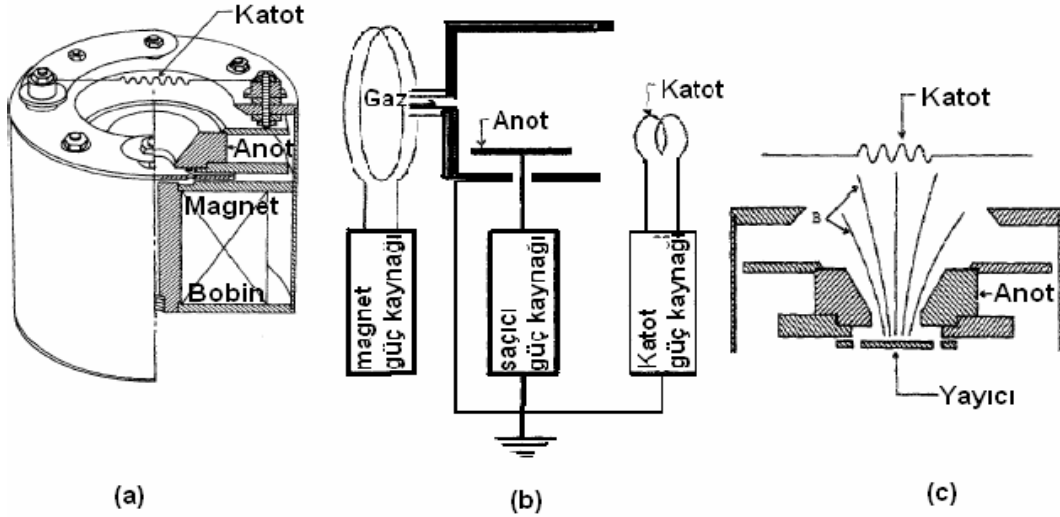


Şekil 2.18 Hızlı nötral molekül demeti kaynağının a) şematik diyagramı; (1) ızgara, (2) plazma yayıcı, (3) sentez plazma, (4) yük transfer çarpışma odası, (5) iyon, (6) ve (7) pozitif serbest yük tabakaları, (8) hızlandırılmış molekül, (9) yavaş iyon, (10) yavaş molekül, (11) çıkış aralığı ve (12) vakum odası b) C-serisi demet kaynağı (Grigoriev S. 2002)

C-serisi kaynaklardan birinin görüntüsü şekil 2.18b’de verilmiştir. METEL-C230M modelinin yük transfer odası 230 nm yarıçapındaki küresel ızgaralara ve 90 nm yarıçapında delikli çıkışa sahiptir. Kaynak kullanılmadığında yük transfer odasındaki hareketli bir ekran ile otomatik olarak delik kapatılır ve bu sayede çalışma odasından gelebilecek safsızlıkların kaynağa toplanması ve elektrotların korunması sağlanır. Bu modelde 2.5 A maksimum denge akımı ile 20 eV dan 1000 eV’a kadar enerjiye sahip demet üretilebilir. Film kaplama işlemlerinden önce altlığın temizliği ve aktivasyonu için 500 eV’dan daha enerjili demetler kullanılabilir. Düşük enerjili demetlerde kaplama işlemine yardımcı olması için aktif olarak kullanılabilir. Büyük oranda uygun demet parametreleri için çevrici çeşit güç kaynakları (~50 kHz) kullanılarak modelin elektrotlarındaki ark oluşumundan korunabilir.

2.7 İzgarasız İyon Demeti Kaynakları

İzgarasız iyon kaynaklarından, iyon demetinin kaynağın manyetik alanının sonunda çıktığı tip End-Hall tipi iyon kaynağı diye adlandırılır. Closed-Drift iyon kaynaklarında ise hızlandırıcı kanal halka şeklindedir. Bu tip kaynaklar ortamdan gelebilecek safsızlıklar ve kirliliklere karşı hassas olduklarından, kaplama sırasında kontaminasyonlara daha az hassas olan End-Hall tipi iyon kaynakları kullanmak daha uygundur. Bu tip iyon kaynakları 10^{-3} Torr veya daha düşük gaz basıncında çalıştırılabilirler. Şekil 2.19’da End-Hall tipi bir iyon kaynağı görülmektedir.



Şekil 2.19 End-Hall tipi iyon kaynağının a) kesit görüntüsü b) şematik diyagramı c) deşarj bölgesindeki oluşan manyetik alan çizgileri (Kaufman R. 1987)

Çalışılmak istenilen gaz tercihinine göre bu gazın nötral atomları veya molekülleri kaynağa gaz bağlantısı yoluyla verilir. Şekil 2.19b’de görüldüğü gibi elektron yayılımı katot güç kaynağı ile kontrol edilirken, anot potansiyeli ise anot akımı, manyetik alan kuvveti ve gaz akışıyla kontrol edilmektedir. Katottan yayılan elektronlar, şekil 2.19c’de görülen manyetik alan çizgilerini izleyerek geriye doğru hareket ederler ve anoda yakın olan deşarj bölgesine gelirler, burada nötral gaz atomları veya molekülleri ile çarpışmaya başlarlar ve bu çarpışmaların sonucunda iyonları oluştururlar. Plazma elektronların ve iyonların dengeli karışımıyla deşarj bölgesinde oluşturulur. Manyetik alan çizgileri birbirine ne kadar yakın olur ise anot o kadar pozitif potansiyele sahip olacaktır. Plazma iletkenliğinin şiddeti manyetik alan çizgileri doğrultusunda azaltılarak, manyetik alanda oluşturulan iyonların bu potansiyel fark ile hızlandırması sağlanabilir. Manyetik alana paralel ve dik iletkenliğin oranları denklem (2.22)’deki gibidir.

$$\sigma_{\parallel} / \sigma_{\perp} = (\omega / \nu)^2 \quad (2.22)$$

Burada ω elektronun açısal frekansı ν ise elektronun çarpışma frekansıdır. Elektronun çarpışma frekansı, kuvvetli bir manyetik alan boyunca iletim olduğundaki plazma dalgalanması ile oluşan kurak dışı difüzyon ile belirlenir. Manyetik alana dik ve paralel olan iletkenlikteki bu farktan dolayı şekil 2.19c’deki plazma içinden dışa açılan bu çizgilerin eşit potansiyelli olması beklenir (Kaufman R., 1985 ve 1987). İyonlar nötrale yakın plazma içinde bulunmasından dolayı, iyon demeti akımında herhangi bir sınırlama olmamaktadır. İyon demeti, deşarj akımının %20-30’u kadar ve ortalama iyon enerjisi deşarj voltajının yaklaşık

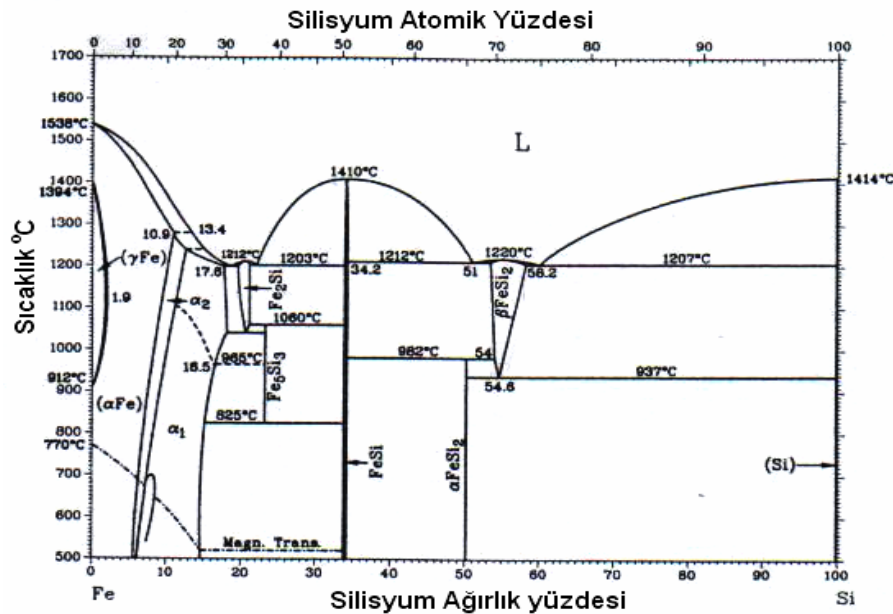
%60-70'i kadardır. Bu tip kaynaklar 100-350eV'luk enerjilere sahip iyonlar üretirler. Yüksek iyon demeti akımı ($20-30\text{mA/cm}^2$) üretebilir, fakat yüksek iyon enerjilerini çok kolay üretemezler. Bu sebepten dolayı, End-Hall tipi iyon kaynakları, düşük enerjili yüksek akımlı iyon demetleri üretirler. İyon demeti görüntüsü ise kaynağın şekline bağlıdır, çoğaltılabilir ve hedef malzemeyi geniş alanlı demetle tarama imkânı sağlar (Morosov, 1978).

Bu düşük enerjili iyon kaynakları sonuçta kaplamadan önce ve kaplama sırasında kaplamaya yardımcı olarak çalıştırılabilirler. Sonuç olarak; sertliği arttırmak, yüzeyi pasifleştirmek, yüzey temizlemek, tercihli kristal yönelmesini yardımcı olmak, kimyasal reaksiyonlar için yüzeyi aktive etmek ve iyon demeti destekli kaplamalar için kullanılır (Demirel B. 2006).

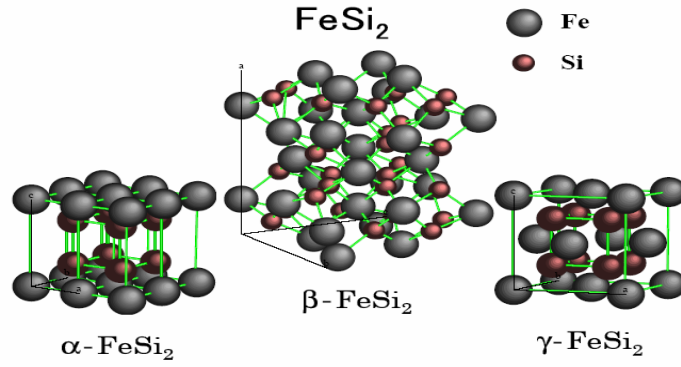
2.8 β -FeSi₂ Yarıiletkeninin Yapısı ve Özellikleri

2.8.1 β -FeSi₂'nin Yapısal Özellikleri

Fe-Si temelli malzemelerin keşfinden günümüze kadar onların çeşitli yapısal fazları bulunmuştur, örneğin Fe₃Si, Fe₅Si₃, ϵ -FeSi, β -FeSi₂, γ -FeSi₂ ve α -Fe₂Si₅ (Goss N.P. 1935). Şekil 2.20'deki faz diyagramına bakıldığında bu fazların moleküler karışım oranları ve sıcaklık denge şartları görülmektedir. Bu diyagramdan da görüleceği gibi β faz demir silisid oluşması için gerekli şartları sağlayan bölge, stokiometrik oranda demir ve silisyumun (Fe/Si=1/2 oranında karışım sistemi) yaklaşık olarak 937 °C civarında bir sıcaklıkta oluşturduğu bölgedir.

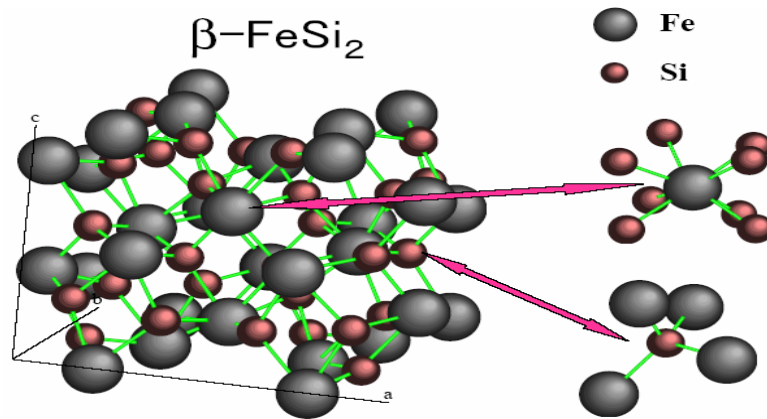


Şekil 2.20 Fe-Si bileşiklerin faz diyagramı



Şekil 2.21 Çeşitli yapısal fazlardaki FeSi_2 bileşiklerinin kristal yapıları (Mori Y. 2002)

Demir –silisyum faz diyagramına bakıldığında FeSi_2 'nin çok çeşitli yapılarda oluşabileceği görülmektedir. Bu yapılardan bazıları $\alpha\text{-FeSi}_2$, $\epsilon\text{-FeSi}$, CsCl- tipi FeSi , $\gamma\text{-FeSi}_2$ ve $\beta\text{-FeSi}_2$ dir ve bunlar arasında sadece FeSi ve $\beta\text{-FeSi}_2$ oda sıcaklığında termodinamik olarak stabildir (Miglio L. 1995). $\beta\text{-FeSi}_2$ faz yarıiletken özellik gösterirken onun dışındaki diğer fazların hepsi metalik özellik gösterir (Starke U. 2002). Silisyumun diğer elementlerle yüksek reaksiyon kabiliyetinden dolayı Fe-Si bileşiklerde çok çeşitli kristal yapılarda bulunurlar. Bunlardan bazıları şekil 2.21’de verilmiştir. Yarıiletken $\beta\text{-FeSi}_2$ faz orthorombik CaF_2 kristal yapıya sahiptir ve örgü sabitleri sırasıyla $a= 0.9863$ nm, $b= 0.7791$ nm ve $c= 0.7833$ nm dir. Birim hücresinde 16 demir ile 32 silisyum atomu bulunmaktadır (16 tane $\beta\text{-FeSi}_2$ molekülü). Şekil 2.22’de $\beta\text{-FeSi}_2$ 'nin kristal yapısı görülmektedir. Orthorombik birim hücrenin merkezinde Cmca uzay grubuna sahiptir ve birim hücrede atomik düzen şu şekildedir: bir Si atomu dört Fe atomu ile bağ yaparak bozulmuş tetrahedral örgü üzerinde konumlanır, bir Fe atomu ise sekiz tane Si atomu ile bağ yaparak bozulmuş kübik köşegenler üzerinde konumlanır (Takarabe K. 2001).



Şekil 2.22 $\beta\text{-FeSi}_2$ 'nin kristal yapısı (Mori Y. 2002)

Moleküler ağırlığı	112 g
Malzemedeki % silisyum yoğunluğu	53.4 ~ 58.2
Kristal Yoğunluğu	4.93 g/cm ³
β -fazı geçiş sıcaklığı	~800 °C
Erime sıcaklığı	<1220 °C
Örgü sabitleri	a=0.9865 nm, b=0.7791 nm, c=0.7833 nm
Isıl genleşme katsayısı	a eksenini $1.7 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ b ve c eksenini $\sim 5 \times 10^{-7} \text{ K}^{-1}$
Isıl iletkenlik	0.685 W/cmK (70 K) 0.122 W/cmK (300K)
Özgül ısı kapasitesi	66.15 (J/molK) (300K)
Seebeck sabiti	-150 - -450 $\mu\text{V/K}$
Debye sıcaklığı	587-613 K
Statik dielektrik sabiti	22.9-61.6
Optiksel dielektrik sabiti	9.89-31
Özdirenç	2-3 Ωcm
Mobilite :	
Elektronlar	4 cm^2 / Vs
Boşluklar	0.3 cm^2 / Vs
Yasak band genişliği	0.87 eV
Yasak bandın sıcaklıkla değişim hızı	$3.1 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$
Uzay grubu	Cmca

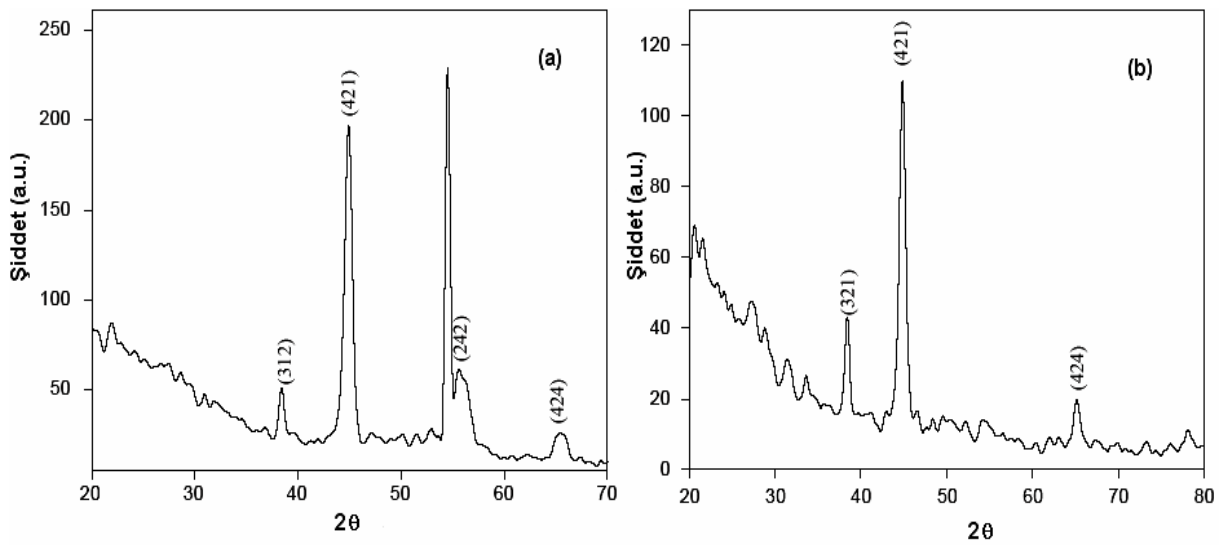
Çizelge 2.1 β -FeSi₂ yarıiletkenine ait bazı parametreler

β -FeSi₂'nin yapısal özelliklerinin yapılan bir çok çalışmada kaplama tekniklerine bağlı olarak değişim gösterdiği ve aynı zamanda yapısal özellikleri altlık parametrelerine de doğrudan bağlı olduğu görülmüştür (Yamamoto A. 2004). β -FeSi₂ filmin yönelimi silisyum althığın yönelimine bağlı olarak değiştiği ve bu şekilde tercih edilen kristal yönelimleri yapılan çalışmalarla araştırılmıştır. Tek kristal β -FeSi₂ yapıya sahip film elde etmek çok zordur. Çeşitli kaplama teknikleri ile elde edilen β -FeSi₂ filmlerin XRD analizleri neticesinde polikristal yapıda olduğu ve birçok yönelime sahip olduğu görülür (Senthilarasu S. 2004). Çizelge 2'de Si(100) ve Si(111) altlık üzerine büyütülen β -FeSi₂ yapının 2 θ 'ya karşı oluşan çeşitli düzlemler verilmiştir.

d (Å)	β -FeSi ₂ /Si(100)			d (Å)	β -FeSi ₂ /Si(111)		
	2 θ	d (Å)	hkl		2 θ	d (Å)	hkl
2.243	38.48	2.346	312	2.243	38.48	2.335	312
2.007	44.93	2.032	421	2.007	44.93	2.016	421
1.646	55.74	1.689	242	1.419	65.28	1.428	424
1.419	65.28	1.429	424	—	—	—	—

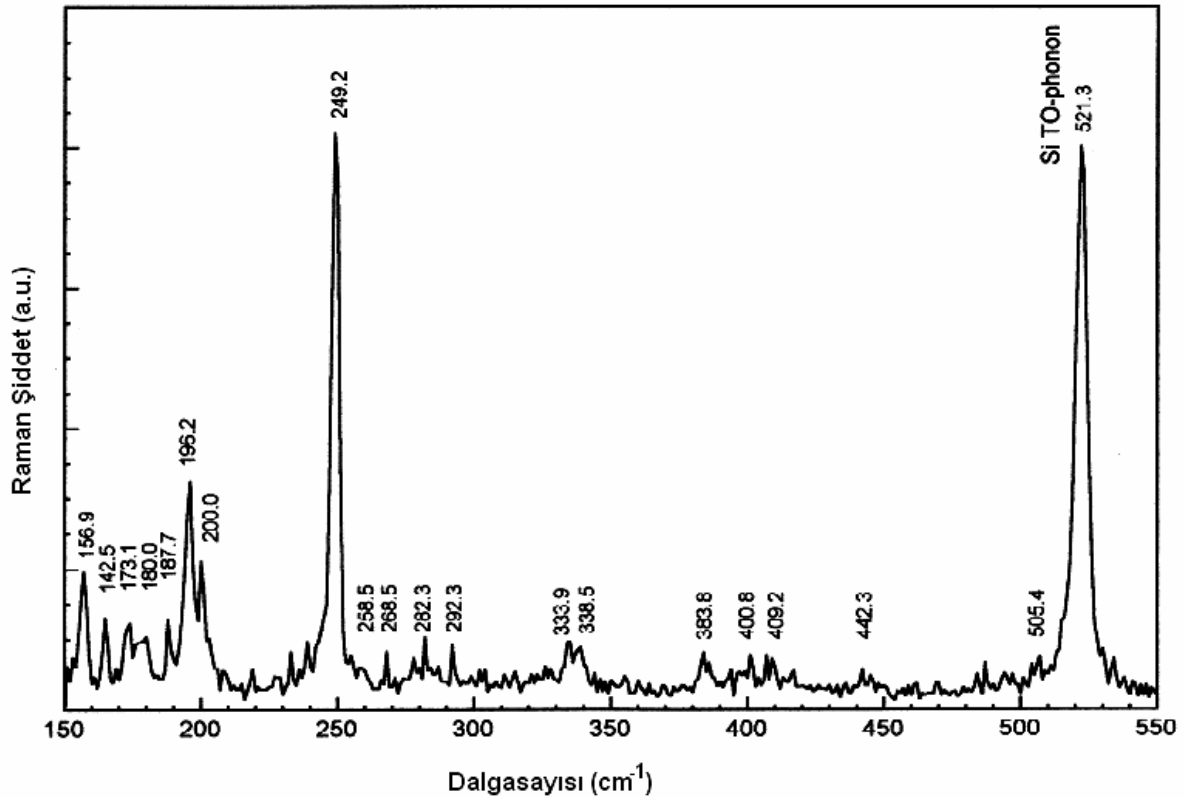
Çizelge 2.2 β -FeSi₂ filmin Si(100) ve Si(111) altlıklar üzerinde büyütüldüğünde ona ait bazı XRD parametreleri (Senthilarasu S. 2004)

Şekil 2.23a ve b'de ise X-ışınları kırınım deseninde β -FeSi₂ yapısına ait pikler ve karşı gelen düzlemler yer almaktadır.



Şekil 2.23 β -FeSi₂'nin XRD analizi a) Si(100) altlık üzerine b) Si(111) altlık üzerine elde edilen (Senthilarasu S. 2004)

β -FeSi₂ çok kompleks bir kristal yapıya sahiptir ve birim hücresi içerisinde 16 FeSi₂ molekülü bulunan iki farklı örgü yapısından oluşmuş orthorombik yapıdadır (Grigoriev S. 2002). Yapılan çalışmalarda grup teoremin beklenen sonuçlarına göre onun toplam 72 adet titreşim kipine sahip olduğu ve 3n kipleri ile kristalin 3 dönme ve 3 geçiş piklerini içerdiğini söyleriz (Ayache R. 2004). Raman aktif kipler g mod (gerade) denir ve infrared aktif piklere ise u mod (ungerade) denir. A_g, B_{1g}, B_{2g} ve B_{3g} kipleri raman aktifken B_{1u}, B_{2u} ve B_{3u} kipleri infrared aktiftir. Yapılan bir çok çalışmada ~200, ~250, ~340 cm⁻¹ raman aktif (A_g mod) piklerin β faza ait karakterize pikler olduğu rapor edilmiştir (Maeda Y. 2001 ve Lefki K. 1991). Bu piklerin yanında β -FeSi₂'ye ait birçok pik daha raman ölçümlerinde tespit edilmiştir (Maeda Y. 2004). Şekil 2.24'de β -FeSi₂'ye ait bir raman spektrumu görülmektedir.



Şekil 2.24 β -FeSi₂ filme ait Raman spektrumu (Maeda Y. 2001)

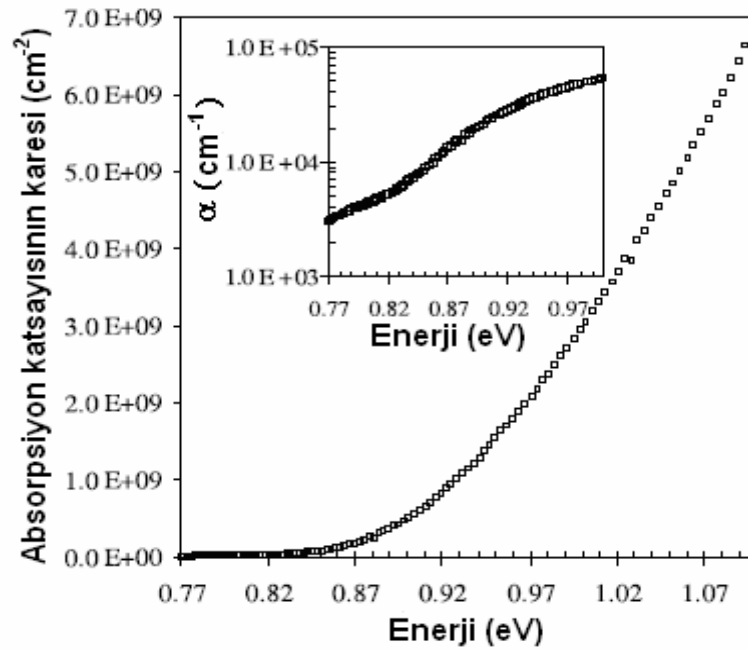
2.8.2 β -FeSi₂'nin Elektriksel ve Optiksel Özellikleri

β -faz FeSi₂ yarıiletkeni ile ilgili son 10 yıldır birçok çalışma yapılmıştır. Bu kısımda özellikle son yıllarda yapılan çalışmalardan seçilip literatür olarak sunulmuştur.

2000 yılında Ozvold v.d. tarafından yapılan çalışmada demir silisit örnekleri, demir filmin silisyum altlıklar üzerine kaplanması ve tavllanması ile hazırlanmıştır. Yarıiletken FeSi₂ fazı

550 °C ile 850 °C sıcaklıklarında tavlama işlemi sonucunda elde etmişlerdir. FeSi₂ filmin optiksel özelliklerini 77-380K aralığındaki sıcaklık bölgesinde yansıtma ve geçirgenlik ölçümleri ile belirlemişlerdir. Absorpsiyon katsayısının spektrumundan oda sıcaklığında yasak bant bölgesini direkt geçiş olarak 0.87 eV bulmuşlardır. İnce film altlık sisteminde optiksel modelden 0.65 ile 1.15 eV foton enerji aralığında kırılma indisini 5–5.9 civarında bulmuşlardır. 1.05eV değerinde yüksek enerjili absorpsiyon kıyısı gözlemlemişler.

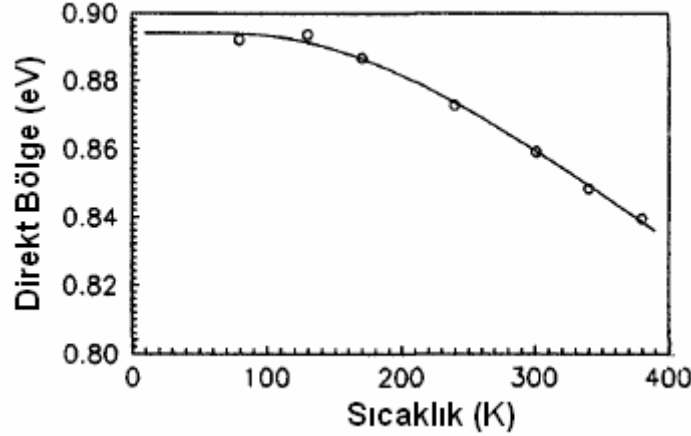
β -FeSi₂ yarıiletkeninin bant yapısının teorik olarak LMTO(linear muffin tin orbital) ve ASA(atomic sphere approximation) metotları ile hesaplanması sonucunda bu yarıiletkenin yasak bant bölgesi 0.8 eV indirekt geçiş ve 0.835 eV direkt geçişe sahip olduğu belirlenmiş (Christensen N.E. 1990). LDA(local density approximation) metodunda LMTO metodunun değişimleri ve düzeltmeleri ile bu yarıiletkenin bant bölgesi hesaplanmış ve indirekt geçiş 0.738 eV ile 0.75 eV arasında, direk geçiş ise 0.825 eV olarak belirlenmiş (Filonov A.B. 1996). Şekil 2.25’de β -FeSi₂ yarı iletkeni için bant bölgesi ve absorpsiyon spektrumundan yasak enerji aralığının değerini bulmak için çizilmiş grafik vardır.



Şekil 2.25 β -FeSi₂ yarı iletkeni için yasak enerji aralığının absorpsiyon spektrumundan belirlenmesi (McKinty C.N. 2002)

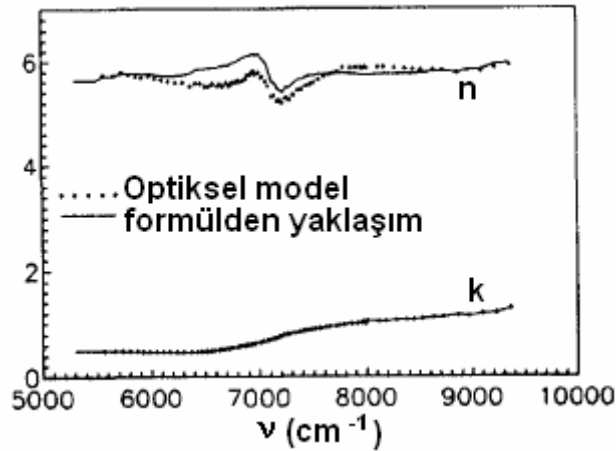
Bunun yanında deneysel sonuçlar kullanılarak β -FeSi₂ yarıiletkeninin bant yapısı hesaplanmıştır (Bost M.C., 1985), (Lange H., 1997), (Ozvolt M., 1995). Yapılan çalışmalarda β -FeSi₂ yarıiletkeninin direkt bant geçişine sahip olduğu belirlenmiş ve deneysel

olarak indirekt geiş enerjisinin direkt geiş enerjisinden düşük olduėu bulunmuř (Giannini C., 1992), (Rademacher K., 1994). Filonov v.d. gre 0.73 eV optiksel ara bant geiş bařlangı enerjisi ile 0.87 eV direkt bant geiři enerjisi arasında geiřler st ste binmiřtir. řekil 2.26’de sıcaklıėa baėlı olarak direkt geiře sahip β -FeSi₂ yarıiletkeninin yasak enerji aralıėının nasıl deėiřtiėi grlyor(Ozvold M., 2000)



řekil 2.26 β -FeSi₂ yarıiletkeninin yasak enerji aralıėının sıcaklıkla deėiřimi(Ozvold M. 2000)

β -FeSi₂’nin ıřık geirgenliėi ve yansıtması ile ilgili yapılan alıřmalar neticesinde yaklaşık olarak 0.3 ile 1.1 eV foton enerjisinde kırılma indisi 4 ile 6.5 arasında deėerler aldıėı belirlenmiřtir (Bost M.C. 1988, Birkholz U. 1968, Ozvold M. 1995). Bu kırılma indisi deėerleri silisyumdan ($n_{Si}=3.5$) daha byk kırılma indisine sahip olduėunu gsterir. řekil 2.27’de kırılma indisi n ve sndrme katsayısı k ile foton dalga sayısı arasındaki iliřki silisyum altlık zerine elde edilmiř β -FeSi₂ yarıiletkeni iin verilmiřtir(Ozvold M. 2000).



řekil 2.27 β -FeSi₂ yarıiletkeni iin n ve k ’nın dalga sayısı ile deėiřimi(Ozvold M. 2000)

2001 yılında Z. Liu v.d. yaptıkları çalışmada atımlı lazer biriktirme (PLD) metodu ile β -FeSi₂/Si heteroeklemleri elde edip onların fotovoltaiik özelliklerini incelemişlerdir. heteroeklemlerin akım gerilim incelemeleri sonucunda silikon tarafından yapılan aydınlatma neticesinde elde ettikleri fotovoltaiik parametreler silisid taraftakine göre daha yüksek çıkmıştır. Hazırladıkları β -FeSi₂/Si heteroeklemlerden 100mW aydınlatma altında en yüksek elde ettikleri açık devre gerilimi (V_{oc}) 300mV ve kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc}) -4.9 mA/cm² değerlerindedir (Liu Z.2001).

IBS (iyon demeti sentez) metodu ile hazırlanan polikristal p-tipi β -FeSi₂/ n-Si(100) heteroeklemler fotovoltaiik özellik göstermişlerdir ve bu eklemlerden elde edilen en yüksek açık devre gerilim değeri 800 °C'de 6 saat tavllanmış heteroeklem için 5mW/cm² beyaz ışık aydınlatmasında V_{oc} = 340 mV dur. Bununla birlikte 500 °C tavlama rejiminin psuedomorphic metalik γ fazın başlamasına ve bu fazın p-n eklemlerin fotovoltaiik gerilimine ve düzenine zarar verdiğini saptamışlardır (Maeda Y. 2001). β -FeSi₂ filmlere Al katkılanarak elde edilen β -FeSi₂/ n-Si(100) p-n heteroeklemlerle bu eklemlerin fotovoltaiik özellikleri geliştirilmesi başarılmıştır. Bu eklemlerin raman spektroskopisi incelemeleri, TEM incelemeleri ve RBS incelemeleri yapılmıştır. Alüminyum katkısı ile hazırlanan β -FeSi₂/ n-Si(100) eklemler için maksimum V_{oc} değerini 450 mV olarak elde etmişlerdir (Maeda Y. 2005).

Ayrıca 2001 yılında Ehara T. Vd. tarafından sıçratma metodu kullanılarak β -FeSi₂ temelli metal-yalıtkan-yarıiletken (MIS) diyet üretimi tasarlandı. Kullandıkları teknikle elde ettikleri diyetün yapısı Al/ oksit-FeSi₂/ β -FeSi₂/ p-Si şeklinde tasarlamışlar ve akım gerilim karakteristiklerinde yaptıkları diyet doğrultucu özellik göstermiştir (Ehara T. 2001).

1.5 μ m dalga boyunda çalışan LED aletin IBS yöntemli ilk başarılı çalışmasından sonra β -FeSi₂/Si (LEDs)' ler çok daha büyük ilgi çekmeye başlamışlardır (Leong D., 1997), (Homewood K.P., 2001). Epitaksiyel Si tabaka içerisine demir nakli ile üretilen aletlerin elektrik, elektronik ve optiksel çalışmalarına burada yer vermişlerdir. Bu aletlerin akım-gerilim(I-V), kapasite-gerilim(C-V),derin seviye geçiş spektroskopisi (DLTS) ve elektroluminescence (EL) ölçümlerinin karakteristiklerini incelemişlerdir. 250 ± 25 meV bir aktivasyon enerjisi ile tuzak merkezlerinde çoğunluk taşıyıcıların bulunduğunu DLTS ile göstermişlerdir. EL sonuçlarının ilk analizinde aletin yapısına bağlı olarak luminescence da belli bir oranda sönme olduğunu öne sürmüşlerdir ve sönümün yüzey recombinyonlarıyla ilgili olduğunu düşünmüşlerdir (Lourenço M.A., 2001). Silisyum içerisine yarıiletken FeSi₂' yi IBS yöntemiyle çökeltirerek β -FeSi₂/Si heteroeklemler üretmişlerdir. 1.55 μ m dalga boyunda bozulma zamanının ölçüldüğünde 10 K de 10 μ s olarak bulmuşlardır.

Fotoluminesans ölçümlerinin cevaplama süresinde direkt geçiş bulunabilir ki bu hız için bir kanıt değildir. Bununla birlikte, FeSi_2 -Si ışık yayan aygıtın(LED) bir gösteriminde elektroluminesans bozulma zamanını ölçmeyi başarmışlardır (Schuller 2002). β - FeSi_2 LEDs oda sıcaklığında ($\sim 1.6 \mu\text{m}$ emisyonu sahip) kusur enerji seviyelerinin yaklaşımı kullanılarak üretilmişlerdir (Lourenço M.A., 2003).

Si(111) altlıklara IBS yöntemi ile β - FeSi_2 filmler hazırlanmış ve raman spektroskopisi ile IR spektroskopisi yöntemleri ile incelenmiştir. β - FeSi_2 /Si(111) yapılar elde edilmiş ve bu yapılar 90 dakika 850°C 'de tavlendiğinde 12K sıcaklığında 0.811 eV civarında çok şiddetli PL (photoluminescence) piki elde edilmişlerdir (Ayache R. 2004). İyon demeti sentezi yöntemi ile elde edilen β - FeSi_2 yarıiletkenin safsızlıkları (Al, Mn, Co) katkılanması ile elde edilen yapılarda PL özelliklerinin katkı tipine göre değiştiğini yapılan ölçümlerle göstermişlerdir. Al atomlarının β - FeSi_2 içerisinde Si örgüsü içerisine girip oraya yerleştiğini belirlemişler ve $1.54\mu\text{m}$ fotoluminesans elde etmişlerdir (Terai Y. 2004). İyon demeti sıçratma yöntemi ile büyütülen β - FeSi_2 filmlerin PL özellikleri incelenmiş ve ilk kez 100K altında 0.77 ve 0.83 eV civarında küçük PL pikleri gözlemlenmiştir. 1153 K'de 24 saat yapılan tavlama neticesinde 0.81 eV civarında çok güçlü bir PL pik gözlemlenmiştir ve 6K'de bu pikin daha büyük bir şiddete sahip olduğunu görmüşler (Shimura K. 2006).

3. DENEYSEL ÇALIŞMALAR

Bu çalışmada n-tipi Si(100) ve p-tipi Si(111) altlıklar üzerine dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma metodu (unbalanced magnetron sputtering) ile oda sıcaklığında β -FeSi₂ ince filmler büyüttük. Bunun için öncelikle altlıklar hazırlandı ve kaplanmadan önce demir hedef ile silisyum altlıklar Ar iyon akışına tabi tutularak (Glow Discharge) temizlendi. Daha sonra hedef önündeki kapak kapatılarak nötral molekül kaynağı ile altlık yüzeyleri dağlandı. Bu işlemlerden sonra kaplama prosesine geçildi. Farklı kalınlıklarda β -FeSi₂ filmler elde edildi. Bunların yapısal özellikleri ve yüzey morfolojileri incelendi. Filmlerin yapısal analizleri için GDOES, XRD, EDS, Raman ve FT-IR spektrometreleri kullanıldı. β -FeSi₂ filmlerin yüzey morfolojileri ise FE-SEM, SEM ve AFM mikroskoplarını kullanarak araştırıldı. Bu filmlerden elde edilen β -FeSi₂/ Si heteroeklemlerin elektriksel özellikleri; I-V ölçümü, dört nokta kontak öz direnç ölçümü ve TEMK yöntemi ile iletkenlik tip ölçümü ile incelendi. β -FeSi₂ filmlerin optiksel ölçümlerinden yasak bant aralıkları tespit edildi. Daha sonra kaplama sırasında End-Hall tipi iyon kaynağı kullanarak, iyon demeti destekli β -FeSi₂ filmler büyütüldü ve özellikleri incelendi.

3.1 β -FeSi₂ Filmlerin Dengelenmemiş Magnetron Yöntemi ile Hazırlanması

3.1.1 Altlıkların ve Hedefin Hazırlanması

Kaplama işleminde kullanılacak n-tipi 100 kristal yönlenmesine sahip ve p-tipi 111 kristal yönlenmesine sahip altlıklar 5x5x0.3 mm boyutlarında kesilerek hazırlandı. Kullanılan n ve p-tipi silisyum altlıkların öz dirençleri sırası ile 5–10 Ω -cm ve 10.5–19.5 Ω -cm dir. Altlıklar kaplama işlemi için hazırlanmış özel bir taşıyıcı yerleştirilip bu taşıyıcı ile hedefin 0.1 m karşısına yerleştirilmiştir. Kaplamada kullanılacak demir hedef %99.9 saflıkta olup magnetron cihazında kullanılacak boyutlarda kesilerek hazırlandı.

3.1.2 β -FeSi₂ Filmlerin Hazırlanması

Kaplama işleminde Mighty mak marka Dengelenmemiş Magnetron Kaplama cihazı kullanıldı. Fe hedef ve Si altlıkların yerleştirildiği taşıyıcı kaplama sistemine yerleştirildikten sonra vakum alma işlemine geçildi. Vakum alma işlemine yaklaşık 10^{-5} Torr oluncaya kadar devam edildi ve bu basınca düştükten sonra ortama Ar gazı verilmeye başlandı. 5 dakika altlıklar ve hedef 140 Sccm akış hızında argon gazı ile temizlendi. Bundan sonra argon gazının akış hızı ~60 Sccm ve ortamın gaz basıncı yaklaşık 5.5 mTorr civarında sabitlendi.

ve kaplama işlemine başlamadan önce shutter kapalı iken bütün altlıklar nötral molekül kaynağı ile dağlandı. Bu işlem bütün kaplama işlemlerinde uygulandı ve toplam 3 dakika süresince 0.7 Pa argon gaz basıncında 2 kV hızlandırma gerilimi ve 200 V bias gerilimi parametreleri bütün işlemler için sabit tutuldu. Daha sonra shutter açılıp kaplama işlemine başlanmıştır. Kaplamalarda güç kaynağı hem 200 W DC hemde 200 W darbeleri akım (Pulse Mod) kullanılarak filmler elde edildi. Gaz basıncı ve Ar gazı akış hızı sabit tutulmuştur. Filmler 3 dk, 4dk, 6dk, 8dk, 9dk ve 30dk kaplama sürelerinde n-tipi Si(100) ve p-tipi Si(111) altlıklar üzerinde elde edildi. Kaplama cihazının görüntüsü ve kaplama sırasında altlıklar ve hedefin görüntüleri şekil 3.1’de verilmiştir.



Şekil 3.1 Magnetron cihazı ve kaplama sırasında Fe hedef ile altlıkların fotoğrafı

Bütün kalınlıklarda elde edilen filmler için aynı prosedür uygulandı (bu prosedürün akış şeması çizelge 3.1’deki gibidir). Ayrıca End-Hall tipi iyon kaynağı kullanılarak bazı filmler kaplamadan sonra iyon bombardımanına tabi tutuldu ve bazı filmlerde kaplama sırasında bu iyon kaynağı açık tutularak elde edildi. Bu şekilde yardımcı iyon kaynağı olarak ve iyon bombardımanı için kullanılan End-Hall tipi iyon kaynağının bu işlemler için kullanılan parametrelerin detayları çizelge 3.2a ve b’de verildi.

Elde edilen filmlerin hepsi oda sıcaklığında ve n-Si(100) ve p-Si(111) altlıklara hazırlandı. Kaplama işlemleri bütün filmler için aynı parametreler kullanılarak yapılmaya çalışıldı.

Çizelge 3.1 Filmlerin kaplanma akış şeması

- ➡ Vakuma Alma
- ➡ Temel basınç ($\sim 10^{-5}$ Torr)
- ➡ Argon gazı akışı
- ➡ Numune Temizleme
- ➡ Glow Discharge
- ➡ Nötral Molekül Kaynağı
- ➡ Shutter kapalıyken hedef temizleme
- ➡ Gaz akışı (~ 60 sccm) ve gaz basıncı ($\sim 5 \cdot 10^{-3}$ Torr)
- ➡ Shutter Açık KAPLAMA (200W DC ve 200W pulse mod)

Çizelge 3.2 İyon bombardımanında deneysel parametreler a) glow discharge işlemi için b) bombardıman işlemi için

Temel Basınç	2.3×10^{-3} Pa
Asymmetric bi polar Güç kaynağı	(-80,+15) devir
T_{glow}	50 °C (IR)
Ar Gaz akışı	140 sccm
Gas Basıncı	3.5 Pa
Gerilim	500 V -650 V
Süre	5 min.

	İyon bombardıman ısıtma	İyon bombardıman
Gaz basıncı	1.2 Pa	1.2 Pa
Ar gaz akışı	48 sccm	48 sccm
Filaman Akımı	37 A	25 A
Anot Akımı	4.1 A	4.1 A
Anot gerilimi	20 V	130 V
Bombardıman süresi	10 min.	10 min.

3.2 β -FeSi₂ Filmlerin Yapısal Özelliklerini Belirlenmesi İçin Kullanılan Metotlar

3.2.1 β -FeSi₂ Filmlerin ve Eklemlerin XRD Yöntemi ile Analizi

β -FeSi₂ ince filmlerin ve β -FeSi₂/ Si heteroeklemlerin yapısal analizleri Philips PW3710 model X-ışınları difraktometresi (XRD) ile yapıldı. Analizlerde 40kV ile 40mA'de üretilen $\lambda=0.154$ nm dalga boyunda Cu-K α radyasyonu kullanıldı. Kaplama kalınlığı nanometre mertebesinde olmasından dolayı ince film geometrisi kullanıldı. Analizlerde tarama hızı 0.02 derece/s ve X-ışını giriş açısı 2° olarak alındı. Tarama aralığı genelde 20-100° aralığında seçildi.

Bu ölçümler neticesinde β -FeSi₂ ince filmlerin kristal yapısı hakkında, kristal yönelimleri, yapıdaki fazlar ve tane yapıları hakkında bilgiler edindik. Bunun için denklem (3.1)'de verilen Bragg Bağıntısı, orthorombik kristal yapısı için örgü parametreleri ile düzlem miller indislerine ait parametreler arasındaki bağıntıyı veren denklem (3.2) ve film içindeki β -FeSi₂ tanelerin büyüklükleri hakkında bize bilgi veren denklem (3.3)'deki Scherrer bağıntısı kullanıldı.

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (3.1)$$

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \quad (3.2)$$

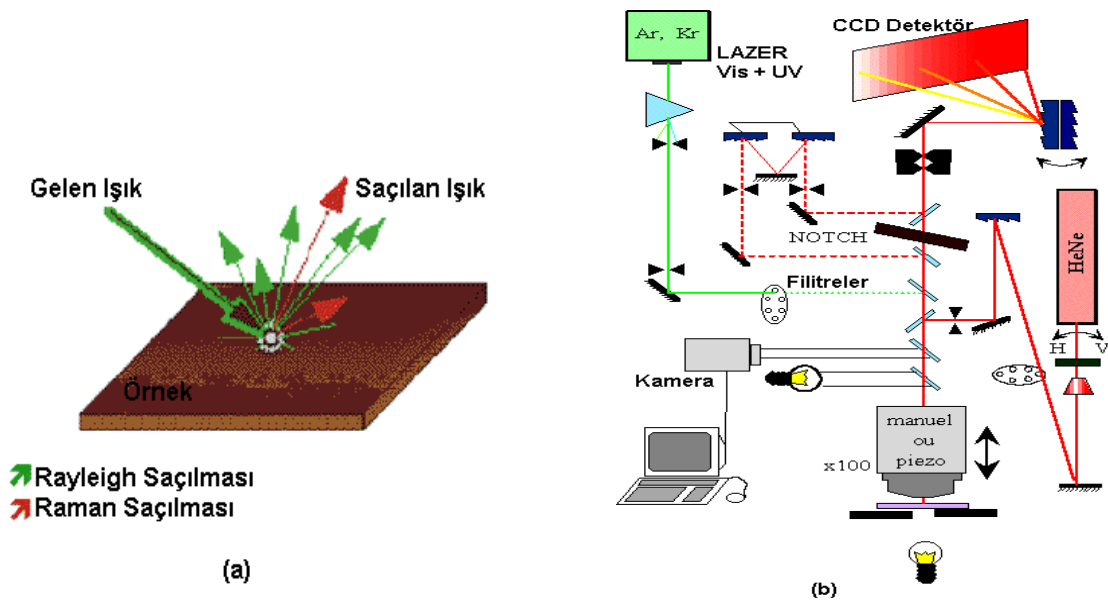
$$D = \frac{0.9\lambda}{W \cos(\theta)} \quad (3.3)$$

Burada λ kristal örgüsüne düşen x-ışınlarının dalgaboyu, θ örgüye düşen x-ışınları ile örgünün yüzeyi arasındaki açı, d kristaldeki atomik düzlemler arası mesafe ve n yansıma derecesi, (hkl) düzlemlere ait miller indisleri, D taneciklerin ortalama çapı, W pikin yarı yüksekliğinin tam açısal genişliğinin (FWHM) radyan cinsinden ifadesidir. β -FeSi₂ orthorombik kristal yapıda olduğu için örgü parametreleri ve aralarındaki açılar $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ şeklindedir. β -faz FeSi₂'nin örgü parametreleri sırasıyla $a= 0.9863$ nm, $b= 0.7791$ nm ve $c= 0.7833$ nm dir.

Elde edilen x-ışınları deseni, XRD veri analiz kartı JCPDS (Joint Committee on Powder Diffraction Standards) desenleriyle karşılaştırılarak kaplanan β -FeSi₂ filmler içerisindeki fazlar ve düzlemler tayin edilmiştir.

3.2.2 β -FeSi₂ Filmlerin Raman Spektroskopi Analizi

Raman spektroskopisinin temelini malzemeye gönderilen fotonlar ile malzemenin yapısına ait saçılan karakteristik fotonlar oluşturur. Bu olay bir lazer ışını demetiyle malzeme içerisindeki örgü titreşimleri veya fononların uyarılmasından dolayı ışığın saçılmasıdır. Işık malzeme ile ya elastik yada inelastik saçılma yapar. Malzemeye gelen ışın eğer saçılan ışın ile aynı frekansa sahip ise buna elastik saçılma (Rayleigh saçılması) denir. İnelastik saçılmada ise gelen ışın ile saçılan ışının frekansları arasında örgünün titreşim frekansı büyüklüğünde belli bir kayma vardır. Bu saçılma iki şekilde Stokes veya anti-Stokes olabilir. Normal Raman (Stokes) saçılması gelen lazer ışını ile bir fonon meydana geldiğinde oluşur. Anti-Stokes saçılması ise gelen ışın ile var olan bir fonon yok edildiğinde oluşur. Yani stokes saçılmasında saçılan ışığın frekansı gelen ışıktan kristal örgünün titreşim frekansı büyüklüğünde daha azdır. Anti-Stokes saçılmasında ise saçılan ışının frekansı tersine gelen ışığın frekansından aynı miktar daha fazladır. Raman saçılmaları, fonon titreşimlerinin atomik bağlarla ilişkili olmasından dolayı kimyasal bağların doğasını karakterize etmede kullanılabilir.



Şekil 3.2 a) Örnek yüzeyine gelen lazer ışınının saçılma olayı b) Raman spektrometresinin şematik gösterimi

β -FeSi₂ filmlerin raman analizleri Horiba Jobin Yvon Labram HR-UV Spektrometer HR800UV mikro-Raman cihazı kullanılarak yapılmıştır. Analizlerde 20mW çıkış gücüne sahip $\lambda=632.8\text{nm}$ dalga boyuna sahip HeNe lazeri kullanılmaktadır. Lazerin çıkış gücü numune yüzeyinde $\sim 10\text{mW}$ olarak ölçülmüştür. Raman analizleri, standart 100x mikroskop objektifi ile numune üzerinde spot çapı $0.86\mu\text{m}$ olan bir bölgeden alınmıştır. Tarama

açıklığı(grating) 1800 ve odak boşluğu ise 100 μ m olarak seçilmiştir.

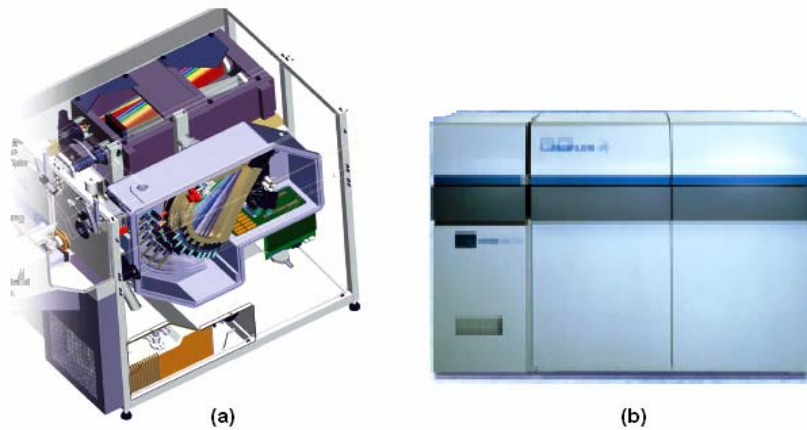
Raman spektrumları genelde 100–500 cm^{-1} aralığında seçilmiştir ve ölçümler 5x30 s süreyle alınmıştır. Filmlerin Raman spektrumları hem XY-konumlarında (yüzeyden seçilen noktalardan) hem de Z-konumunda derinlik profili modunda (film içerisinde istenilen derinlikteki noktalardan) alınmıştır.

3.2.3 β -FeSi₂ Filmlerin ve Si Altlıkların FT-IR Spektroskopisi Analizi

FT-IR (Fourier-Transform Infrared Transmittance) spektrumları oda sıcaklığında 400–4000 cm^{-1} aralığında alındı. Silisyum altlıkların ve β -FeSi₂ filmlerin geçirgenlik ve absorptans spektrumları Perkins Elmer Spectrum One FT-IR cihazı kullanılarak elde edildi. FT-IR spektroskopisi de Raman spektroskopisi ile aynı mantığa sahiptir ve malzeme içerisindeki titreşimlere bağlı olarak kimyasal bağları karakterize etmemizi sağlar. Malzemeler titreşim frekanslarına göre raman aktif, infrared aktif veya hem raman hem de infrared aktif olabilirler. Bu ayırım malzemenin titreşim kiplerine göre yapılır.

3.2.4 β -FeSi₂ Filmlerin GDOES Analizi

β -FeSi₂ filmlerin elementsel analizleri için Horiba Jobin Yvon 5000RF model r.f GDOES (Glow Discharge Optical Emission Spectroscopy) cihazı kullanılarak alınmıştır. Film analizinde 2mm'lik anot kullanıldı ve 480 Pa Ar gaz basıncında 100W'lık güç uygulandı. Bu spektroskopisi uygulamasında enerjili Ar iyonları filmin yüzeyinde belli bir nokta üzerindeki atomları sıçratır ve buradan saçılan atomlar cihaz içerisindeki belirli bir düzende yerleştirilmiş aynalarla dalga boylarına göre ayrılırlar ve detektörler kanalıyla malzeme içerisindeki elementler tespit edilir.

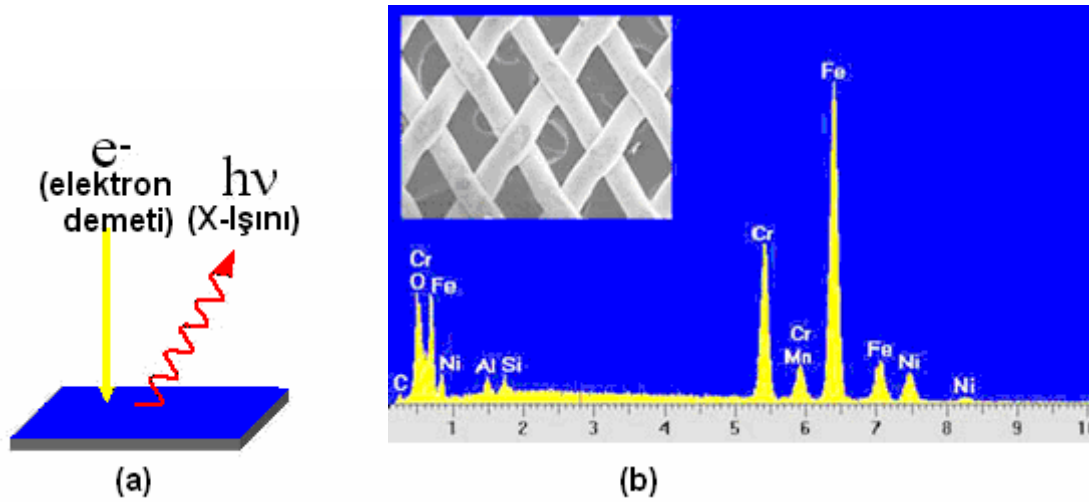


Şekil 3.3 JY 5000RF model GDOES cihazının a) kesit görüntüsü b) fotoğrafı

Şekil 3.3’de JY 5000RF model GDOES cihazının şekli ve kesit görüntüsü vardır. Kesit görüntüsünden anlaşılabacağı gibi numune 2mm çaplı delik ile RF soğutmalı kapak ile sıkıştırılır ve içerisi vakuma alınır. Daha sonra ortama argon gazı verilerek numuneye ait fotonlar sıçratılır ve optik ızgara yardımı ile dalga boylarına ayrılır. Bu dalga boylarının ayrımı yapılarak numunelerin elementsel analizi yapılır. Ayrıca bu analiz neticesinde filmlerin kalınlıkları ve derinlik profiline göre elementler hakkında da bilgi edinilir. Bu ölçüm tekniği ile Fe hedefin, Si altlıkların ve β -FeSi₂ filmlerin element analizleri sıçratma süresine karşı alındı.

3.2.5 β -FeSi₂ Filmlerin EDS Analizi

β -FeSi₂ filmler içerisindeki demir ve silisyum elementlerinin atom ağırlıklarının oranları Joel 5410 model taramalı elektron mikroskobuna bağlı Norvor su soğutma detektörlü NORAN 2100 EDS (Energy Dispersive X-Ray Spectroscopy) analiz sistemi ile alındı. EDS analizinde malzeme içindeki elementlerin karakteristik X-ışınlarının tespiti ile elementlerin kimlikleri belirlenir. Enerji yayılım spektroskopisinde örneğin yüzeyine odaklandırılmış elektron demeti yardımı ile örnek içerisindeki elementlere ait karakteristik X-ışınları dışarı salınır ve detektörlerle bu ışınların analizinde örnek içerisinde hangi elementler olduğu ve yüzde atomik oranları tespit edilir(Şekil 3.4).

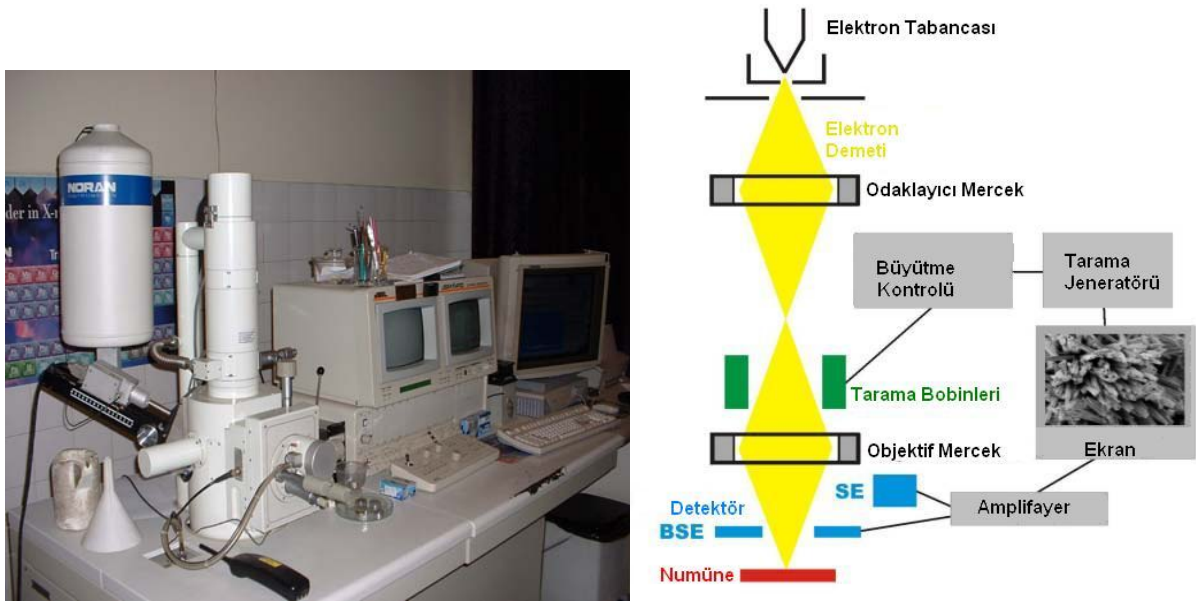


Şekil 3.4 a) EDS analiz sisteminin basit şekli b) bir örnek için SEM görüntüsü ve o noktadaki EDS analiz spektrumu

3.3 β -FeSi₂ Filmlerin Yüzey Morfolojisinin Belirlenmesi İçin Kullanılan Metotlar

3.3.1 β -FeSi₂ Filmlerin SEM Görüntüleri

β -FeSi₂ filmlerin yüzey görüntülerinin alınması için JEOL 5410 SEM model taramalı electron mikroskobu (Scanning Electron Microscopy) kullanıldı. SEM görüntüleri için 10kV ve 15kV enerjili elektron demetleri kullanıldı ve genelde x5000 büyütme tercih edildi. Görüntüler filmin yüzeyinden birkaç yerden alındı ve aynı noktalar için EDS analizi de yapıldı. Şekil 3.5’de Jeol 5410 model SEM cihazı ve üstünde ona bağlı olarak NORAN 2100 model EDS analiz sistemi ile birlikte fotoğrafı yer almaktadır.



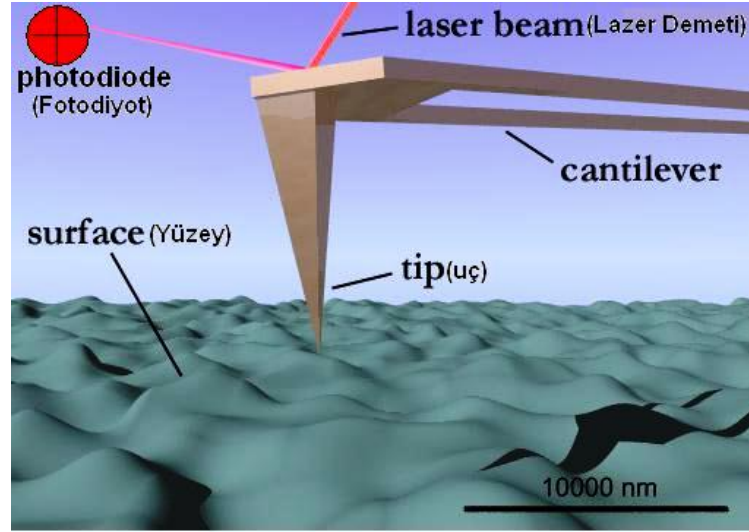
Şekil 3.5 a) Jeol 5410 model SEM cihazı ve Noran 2100 EDS analiz sistemi bağlantısı b) Taramalı elektron mikroskobunun şematik gösterimi

3.3.2 β -FeSi₂ Filmlerin FE-SEM Görüntüleri

β -FeSi₂ filmlerin yüzey morfolojileri ve β -FeSi₂/ Si heteroeklemlerin ara kesit görüntüleri ile büyüme morfolojileri Jeol 7000F model alan emisyonlu taramalı elektron mikroskobu (FE-SEM) kullanılarak elde edildi. Kaplama şartlarına bağlı olarak β -FeSi₂ filmlerin büyüme morfolojisini ve kolonsal yapısını incelemek için film kırılıp ara kesit görüntüleri incelendi. Ayrıca yine büyütme koşullarına bağlı olarak filmin yüzey görüntülerinden filmi oluşturan β -FeSi₂ tanelerin büyüklükleri hakkında bilgi sahibi olduk. FE-SEM (Field Emission Scanning Electron Microscopy) yüzey ve ara kesit görüntüleri için 2kV enerjili elektron demeti kullanıldı ve x10000, x40000 ve x100000 büyütmeye kadar çıkararak incelemeler yapıldı.

3.3.3 β -FeSi₂ Filmlerin AFM Görüntüleri

Silisyum altlıkların ve β -FeSi₂ filmlerin yüzey topografyaları Shimadzu SPM 9500-J3 model atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ile incelendi. Filmlerin AFM görüntüleri alınırken bununla birlikte RMS değerleri de cihazdan alınıp yüzey pürüzlülüğü hakkında bilgi edinildi. Atomik kuvvet mikroskobu (AFM), Şekil 3,6'da görüldüğü gibi uç ile yüzey arasındaki kuvvetlerin ve geçişlerin etkileşimlerinin ölçülmesiyle yüzeyin topografyasının nano boyuttaki görüntüsü elde edilir.



Şekil 3.6 Atomik kuvvet mikroskobu ile yüzey taramasının gösterimi (Siber A. 2003)

3.4 β -FeSi₂/Si Heteroeklemlerin Elektriksel Özelliklerinin Belirlenmesi

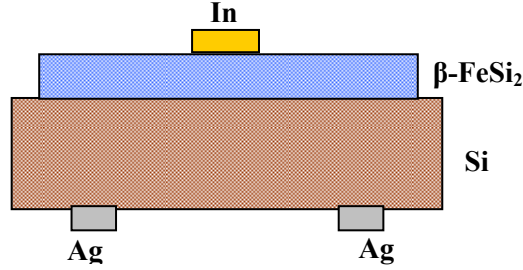
3.4.1 β -FeSi₂/Si Heteroeklemlerin Omik Kontaklarının Hazırlanması

β -FeSi₂/ n-Si ve β -FeSi₂/ p-Si heteroeklemlerin elektriksel özelliklerini ölçmek için omik kontaklar yapılmıştır. Yapılan omik kontakların çeşitli özelliklere sahip olması gerekmektedir; I-V karakteristikleri lineer olmalıdır yani doğrultucu bir özellik göstermemelidir, kontak direnci yarıiletkenin direncinden çok küçük olmalıdır, kontak direnci akımla orantılı olarak değişmemelidir, kontaktan akım geçerken gürültü olmamalıdır ve kontak malzemesi yarıiletkene mekanik olarak iyi yapışmalıdır. Bu özelliklerin yanında omik kontak için metalin seçimi de önemlidir. Metalin seçiminde aşağıdaki şartlar gerçekleştirilmelidir:

1. Kontak olacak metalin çıkış işi yarıiletkenin tipine göre onun termodinamik iş

fonksiyonundan büyük ya da küçük olmalıdır (n-tipi için $\Phi_s > \Phi_m$ olmalı ve p-tipi için $\Phi_m > \Phi_s$ olmalıdır).

2. Kontak için kullanılan metal n-tipi yarıiletken için donör özelliği ve p-tipi yarıiletken için akseptör özelliği göstermemelidir.

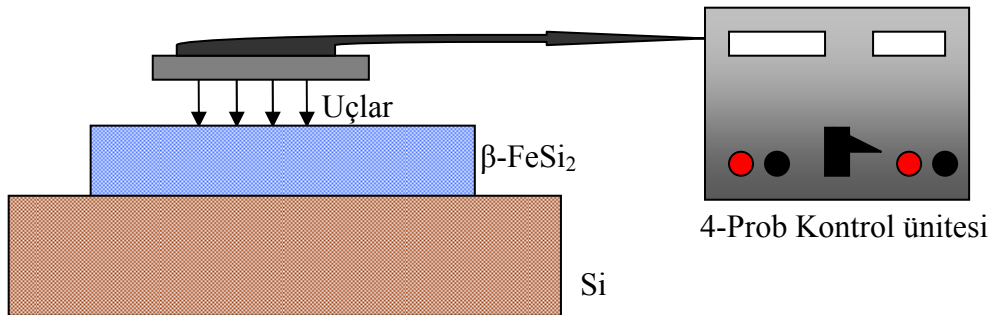


Şekil 3.7 β -FeSi₂/ Si heteroeklemlerin omik kontaklar ile şematik gösterimi

Kontaklar yapıldıktan sonra yarıiletkenin elektriksel özellikleri incelenebilir. Elektriksel ölçümlerde alt kontak (Si altlık yüzeyine yapılan kontak) Ag iletken boya kullanılarak halka şeklinde kontak yapıldı. Üst kontaklarda (β -FeSi₂ film yüzeyine yapılan kontak) ise In ve Ag kullanıldı. İndiyum eritilerek ve mekanik olarak kontak yapıldı (Şekil 3.7).

3.4.2 β -FeSi₂ Filmlerin Özdirençlerinin ve İletkenliklerinin Ölçülmesi

Filmlerin yüzey özdirençlerinin ölçülmesi için dört nokta prob tekniği kullanıldı. Bunun için kullanılan cihazın dört tane uçtan oluşmuş taşıyıcı filmin yüzeyi üzerine mekanik olarak bastırıldı ve R_a ve R_b dirençleri cihazdan okundu. Şekil 3.8’de görülen uçlar ile yapılan kontak da önce dıştaki kontaklardan akım geçirildi ve içteki kontaklar arasındaki gerilimden ohm kanunu yardımı ile R_a direnci belirlendi. Daha sonra içteki iki kontağa akım uygulandı ve dıştaki kontaklar arasındaki gerilim okunarak R_b direnci belirlendi.



Şekil 3.8 Dört nokta prob tekniğinde filmin üzerinde kontak uçlarının gösterimi

β -FeSi₂ filmlerin yüzeylerinden R_a ve R_b dirençleri ölçüldükten sonra Filmlerin ortalama dirençleri denklem (3.4) yardımı ile hesaplandı.

$$R_s = R_a \times K_a \quad (3.4)$$

Bu denklemde R_s ortalama direnç ifadesi ve K_a ise düzeltme sabiti olup denklem (3.5) yardımı ile hesaplanır.

$$K_a = -14.696 + 25.173(R_a/R_b) - 7.872(R_a/R_b)^2 \quad (3.5)$$

Filmlerin ortalama dirençleri hesaplandıktan sonra denklem (3.6) kullanılarak elektriksel öz dirençleri hesaplandı ve denklem (3.7) kullanılarak da filmlerin elektriksel iletkenlikleri hesaplandı.

$$R_s = \rho/d \quad (3.6)$$

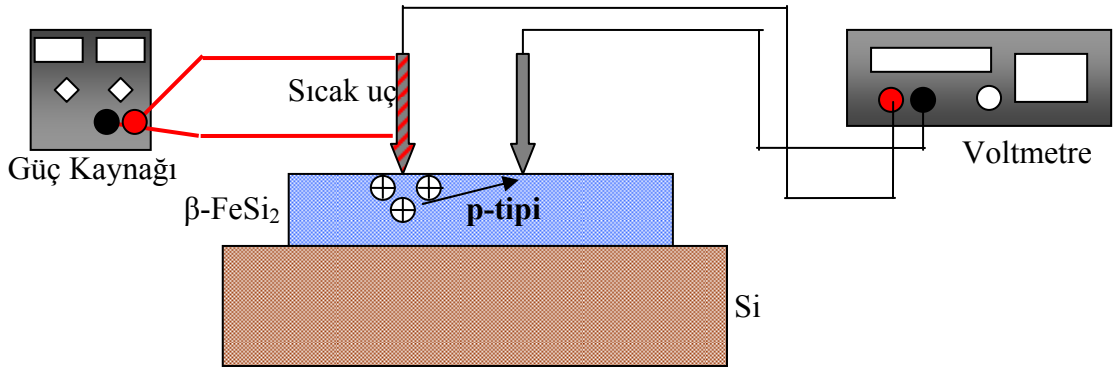
$$\sigma = \frac{1}{\rho} \quad (3.7)$$

Bu denklemlerde ρ elektriksel öz direnç ifadesidir ve birimi ohm-cm dir, d filmin kalınlığıdır ve σ ise iletkenlik ifadesidir ve birimi (ohm-cm)⁻¹ dir. Bu ölçümler neticesinde filmlerin öz dirençlerinin filmin kalınlığına bağlı nasıl değiştiği görüldü.

3.4.3 β -FeSi₂ Filmlerin İletkenlik Tipi Ölçümleri

β -FeSi₂ filmlerin iletkenlik tiplerini belirlemek için termal elektro-motor kuvveti (TEMK) yöntemi kullanıldı. Şekil 3.9'da termal elektro-motor kuvveti yöntemiyle yarıiletkenin yük taşıyıcılarının tipini bulmak için kullanılan sistem görülmektedir. Bu yöntemde iki prob kullanılır. Probun biri yaklaşık 200-300°C kadar ısıtılır, ikinci probun sıcaklığı ise oda sıcaklığında tutulmaktadır. n-tipi yarıiletkende elektronlar daha sıcak probun civarından oda sıcaklığında tutulan probun yönünde hareketlenmektedirler. Neticede daha sıcak probun civarındaki yarıiletken bölgesinin elektrik kutbu pozitifdir ve bu işaret devredeki voltmetre ile kaydedilmektedir. p-tipi yarıiletkende ise tersine, daha sıcak probun elektrik kutbu negatif olmaktadır.

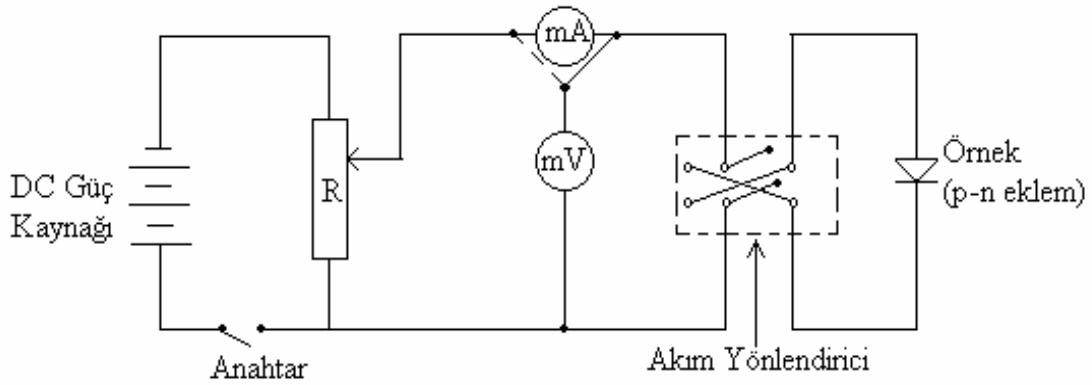
Deneyssel ölçümlerde yarıiletken örneklerin iletkenlik tipini bulmak için öncelikle belirli tipe sahip yarıiletkenin TEMK ölçümü ile devredeki voltmetrenin kalibrasyonu yapılır ve sonra incelenen örneğin tipi belirlenir.



Şekil 3.9 β -FeSi₂ filmlerin iletkenlik tipi ölçüm sistemi

3.4.4 β -FeSi₂/Si Heteroeklemlerin Akım-Gerilim Karakteristiklerinin Belirlenmesi

Akım-gerilim karakteristikleri karanlıkta ve 50Watt'lık tungsten lamba ile (numune üzerine düşen ışık şiddeti $P=100\text{mW/cm}^2$) aydınlıkta ölçüldü. Akım-gerilim karakteristiklerinin elde edilmesinde kullanılan devrenin şeması Şekil 3.10'da gösterilmektedir. Bu ölçümlerde Thurlby 1503 model Dijital multimetre kullanıldı. Eklemlerin akım-gerilim karakteristikleri ters yön ve doğru yön için incelendi. Aydınlatma altında alınan I-V ölçümlerinden eklemlerin fotoduyarlılıkları hesaplandı.



Şekil 3.10 Akım-gerilim karakteristiğinin ölçüm devresi

Karanlıkta yapılan akım-gerilim ölçümlerinden ϕ_B bariyer yüksekliği, I_s doyma akımı ve n ideallik faktörü katsayısı hesaplandı. Bu diyot parametrelerinin hesaplanmasında denklem 3.8' de verilen doğru akım ifadesi kullanıldı. Yapılan I-V ölçümünden yarılogaritmik akım-gerilim grafiği çizip termioyonik emisyon bölgesinin tamamıyla geçerli olduğu ($V \rightarrow 0$)

kısımın eğiminden ve bu doğrusal eğimin I eksenini kestiği noktadan da I_0 doyma akımı ölçüldü.

$$I = I_0 \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{qV}{kT}\right)\right] \quad (3.8)$$

$$I_0 = AA^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{B0}}{kT}\right) \quad (3.9)$$

$$n = \frac{q}{kT} \left(\frac{dV}{d \ln I} \right) \quad (3.10)$$

$$\phi_{B0} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{AA^* T^2}{I_0}\right) \quad (3.11)$$

Ölçülen akım-gerilim karakteristiklerinden, bölüm 2.2’de verildiği gibi aydınlık eğrisinin gerilim eksenini kestiği nokta pilin açık devre gerilimi V_{oc} parametresini

$$V_{oc} = \frac{kT}{e} \ln\left(\frac{I_L}{I_0} + 1\right) \quad (3.12)$$

akım eksenini kestiği nokta kısa devre akımı I_{sc} parametresini vermektedir. Eğri altında kalan dördüncü bölgede çizilen maksimum alandan fill faktörü FF

$$FF = \frac{V_m I_m}{V_{oc} I_{sc}} \quad (3.13)$$

numuneye düşen ışık şiddetinin gücü P olmak üzere numunenin verimi η

$$\eta = \frac{V_{oc} I_{sc}}{P_{in}} FF = \frac{V_{max} I_{max}}{P_{in}} \quad (3.14)$$

ifadeleri ile bulunur. Bu denklemler kullanılarak β -FeSi₂/Si örneklerin fotovoltaiik parametreleri belirlenmiştir.

3.5 β -FeSi₂/Si Heteroeklemlerin Optiksel Özelliklerinin Belirlenmesi

β -FeSi₂ filmlerin optiksel geçirgenlik spektrumları ölçümleri 1–2 μ m aralığında Perkin Emler Spektrum One FT-IR cihazı ile oda sıcaklığında alınmıştır. Optiksel absorpsiyon spektrumları da 0.6-1eV foton enerji aralığında yine bu cihaz yardımı ile belirlendi. Bütün geçirgenlik ve

absorpsiyon spektrumları filmlerin bulunduğu altlığa göre normalize edildi. Yarıiletken malzemelerin bant yapılarını öğrenmek için optiksel absorpsiyon spektrumlarını elde etmek önemlidir. Çünkü yarıiletkenin hem yasak enerji aralığı hakkında bize bilgi verir hem de bant tipi hakkında bilgi sahibi olunur.

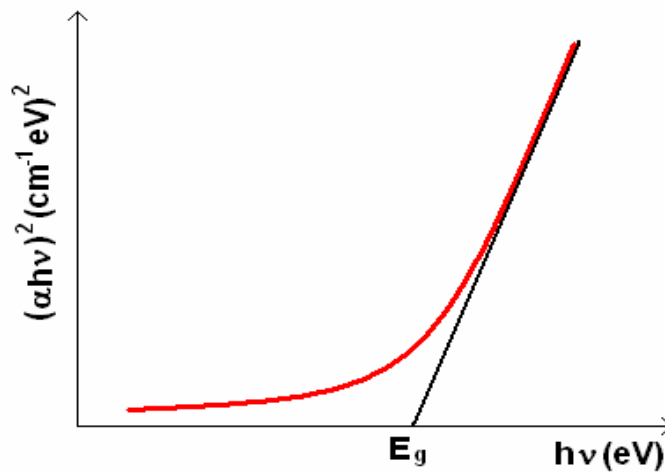
Katı bant teorisine göre absorpsiyon katsayısı ile foton enerjisi arasındaki ilişki denklem (3.8) ile verilmiştir.

$$(\alpha h\nu)^n = A(h\nu - E_g) \quad (3.8)$$

Bu eşitlikte A bir sabit sayı, $h\nu$ foton enerjisi ve n ise direkt band geçişli bir yarıiletken için 2 veya indirekt band geçişine sahip bir yarıiletken için $\frac{1}{2}$ değerlerini alabilen bir sabiti ifade etmektedir. α absorpsiyon katsayısıdır ve denklem (3.9) ile hesaplanır.

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (3.9)$$

Bu eşitlikte k sönüm katsayısıdır ve λ ise dalga boyudur. Yasak bant aralığını hesaplayabilmek için öncelikle $(\alpha h\nu)^2 - (h\nu)$ eğrileri çizilir. Bu eğrilerin lineer olduğu bölgeye karşılık gelen doğrunun $h\nu$ eksenini kestiği noktanın enerji değeri o yarı iletken malzemenin yasak enerji aralığını verir. Yani $(\alpha h\nu)^n = 0$ doğrunun $h\nu$ eksenini kestiği nokta dolayısıyla eşitlik (3.8) ifadesinin diğer tarafı da sıfıra eşitlenir ($h\nu - E_g = 0$ ve $h\nu = E_g$) ve malzemenin yasak enerji aralığı belirlenir. Şekil 3.11’de bir yarıiletken için absorpsiyon katsayısının fotonun enerjisine göre değişiminden yasak enerji aralığının belirlenmesi gösterilmiştir.

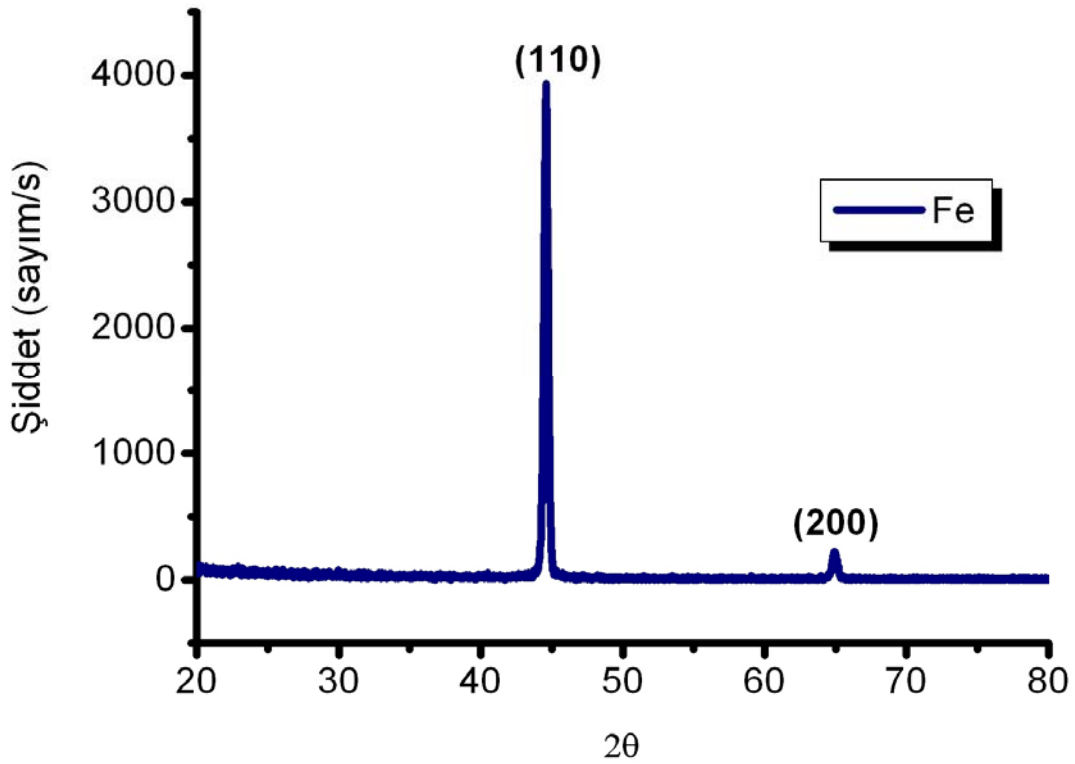


Şekil 3.11 Bir yarıiletken için absorpsiyon katsayısı ile foton enerjisi değişiminden yasak enerji aralığının bulunması

4. BULGULAR

4.1 Kaplamada Kullanılan Fe Hedef ve Si Altlıkların XRD ve GDOES Analizleri

β -FeSi₂ filmlerin dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma yöntemi ile hazırlarken kullandığımız Fe hedef ve Si altlıkların yapısal özellikleri X-ışınları kırınım metodu ile incelendi. XRD spektrumları $20^\circ < 2\theta < 80^\circ$ aralığında ve 2° giriş açısıyla alındı. Şekil 4,1’de Fe hedef için X-ışınları kırınım deseni verilmiştir. Fe hedefin XRD deseninde $2\theta=44.67^\circ$ de kübik kristal yapıya sahip demir için %100 piki ve bu açığa karşı gelen (110) düzlemi ve $2\theta=65^\circ$ de yine bu yapıya ait %20 piki ve (200) düzlemi görülmektedir.

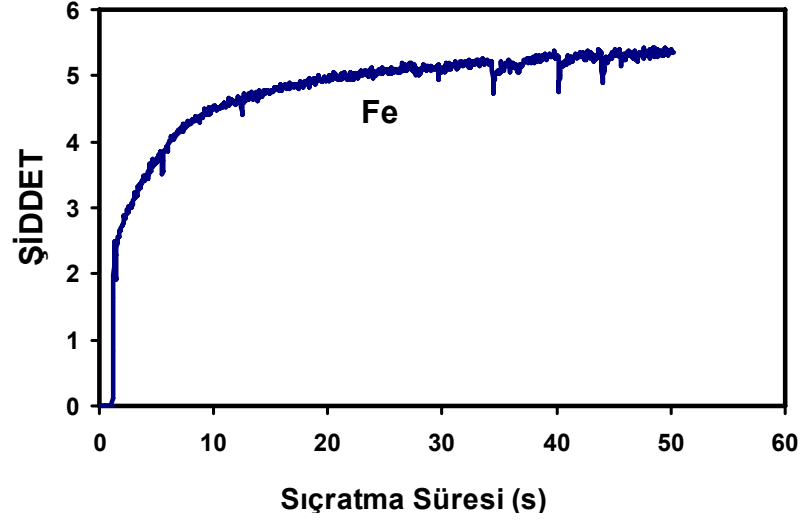


Şekil 4.1 Kaplamada kullanılan demir hedefe ait XRD deseni

XRD veri analiz kartı JCPDS-ICCD ile Fe hedefe ait X-ışınları desenini karşılaştırdığımızda örgü sabiti $a = 2.866 \text{ Å}$ kübik polikristal yapıya sahip olduğunu ve genel kristal yönelmesinin (110) olduğunu söyleriz.

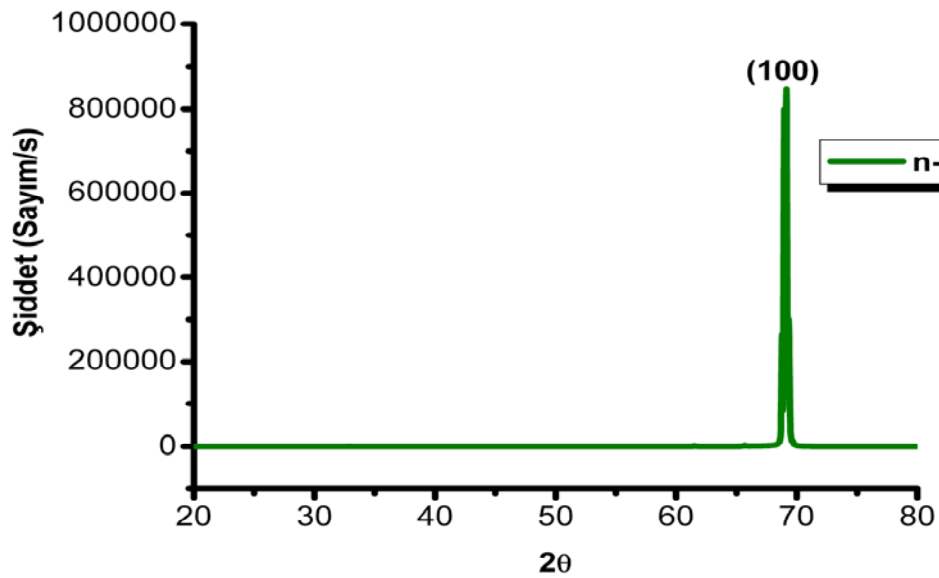
Kaplamada kullanılan Fe hedefin safsızlığından emin olmak ve hedef içerisinde demirden başka elementler olup olmadığını araştırmak için elementel analiz sıçratma süresine karşı

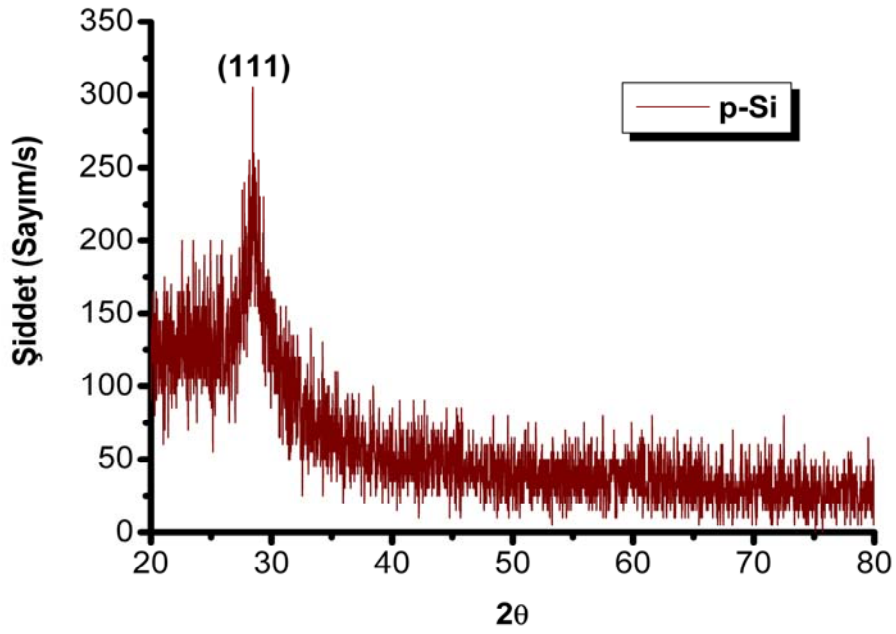
alındı. Şekil 4.2 de görüldüğü gibi Fe hedefin yüzeyinden içeri doğru girdikçe düzgün bir şekilde demir elementinin sinyalini alıyoruz ve hedef malzemede başka bir element olmadığı açıkça görülüyor.



Şekil 4.2 Kaplamada kullanılan demir hedefe ait GDOES spektrumu

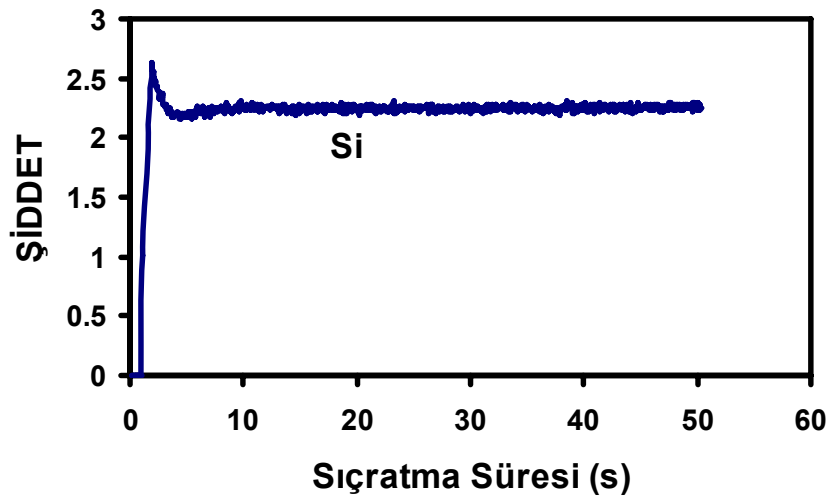
Kaplama sırasında kullanılan n-Si (100) ve p-Si (111) altlıklara ait XRD deseni şekil 4.3 de verilmiştir. X- ışınları kırınım deseninde silisyum altlıkların tek kristal kübik yapıda olduğu ve sırasıyla $2\theta=65^\circ$ ve $2\theta=28.4^\circ$ de (111) ve (100) düzlemlerine sahip oldukları tespit edildi.





Şekil 4.3 β -FeSi₂ filmlerin büyütülmesi için kullanılan n-tipi Si altlık ve p-tipi Si altlık için XRD spektrumu

Şekil 4.4 de silisyum altlığına ait GDOES spektrumu görülmektedir ve yüzeyde bir miktar oksijen elementi gözlemlendi. Bu Si altlıkların yüzeylerinin oksitlendiği anlamına gelir. Fakat sıçratma süresine göre elementsel analize baktığımızda altlıklarda başka herhangi bir elemente rastlanmadı. Bu yüzden kaplamadan önce yapılacak glow discharge işlemi ve nötral molekül kaynağı ile yapılacak etç işlemi ile yüzey temizlenmiş olacaktır.



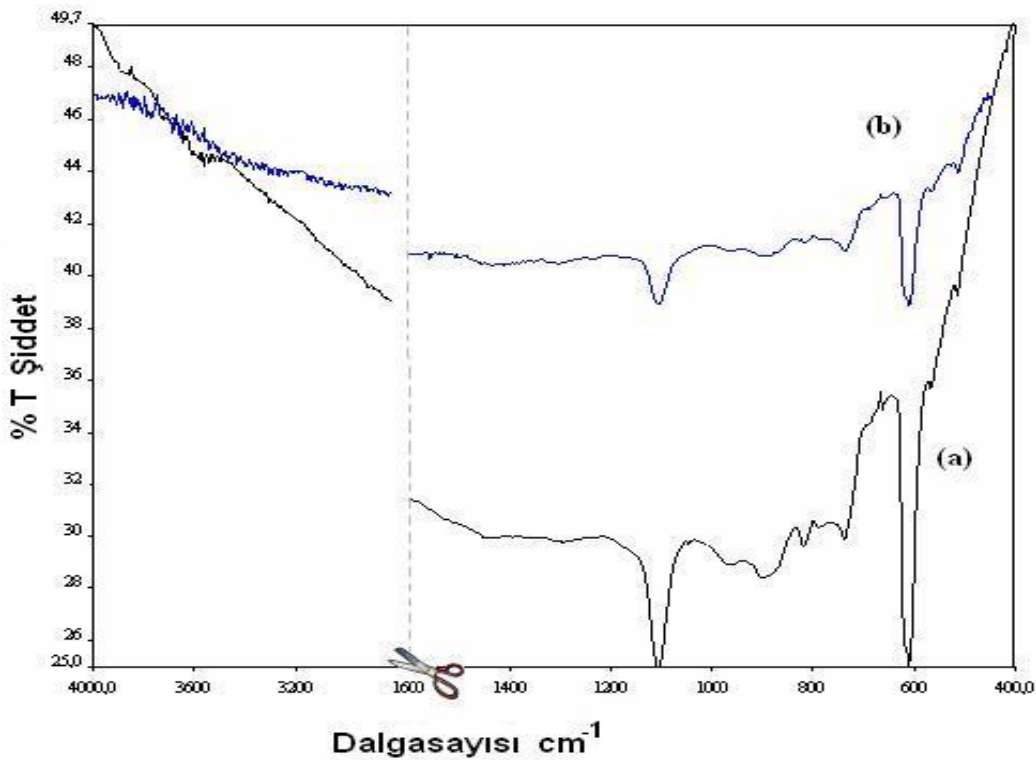
Şekil 4.4 Kaplamada kullanılan Si altlığına ait GDOES spektrumu

4.2 Nötral Molekül Kaynağı ile Dağlanmış Si Altlıkların Yüzey Özellikleri

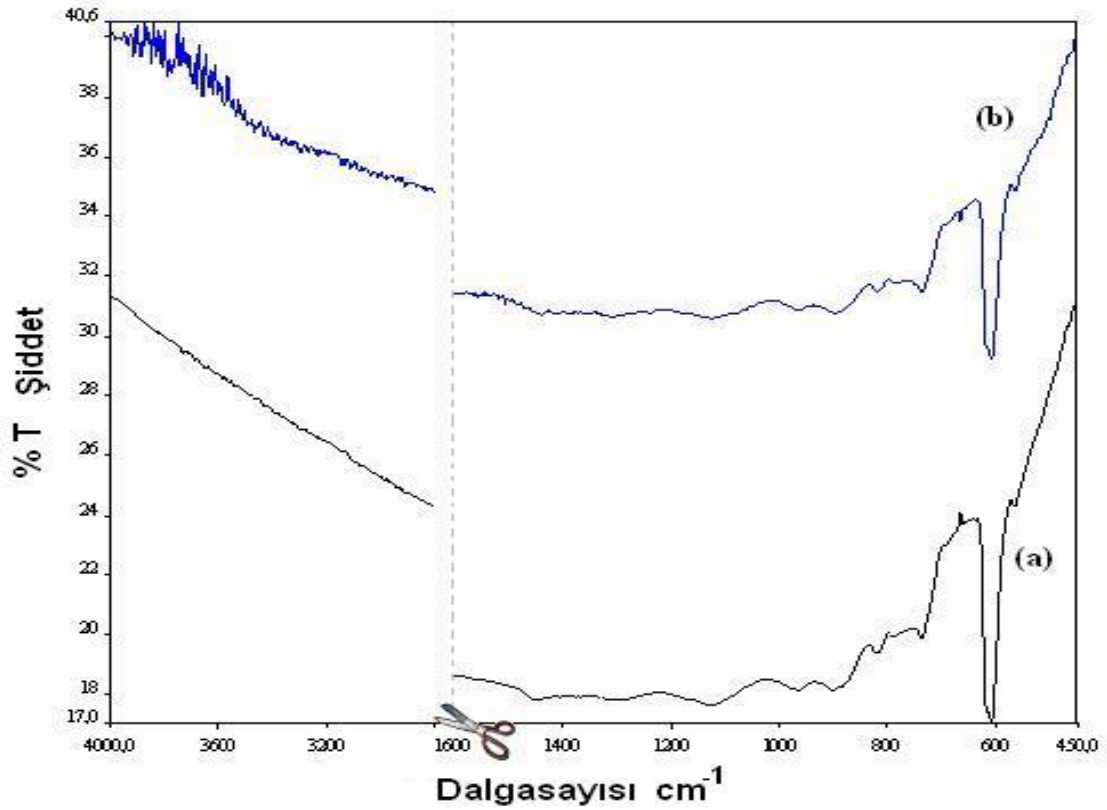
β -FeSi₂ filmler hazırlanırken bütün altlıklar kaplama işleminden önce nötral molekül kaynağı (NMK) ile 3 dakika dağlandı. Bu işlemin p-Si ve n-Si altlıkların yüzey özelliklerini nasıl değiştirdiğini anlamak için FT-IR spektroskopisi ve AFM mikroskobu ile altlıklar incelendi.

Altlıkların FT-IR geçirgenlik spektrumları 400–4000 cm⁻¹ aralığında oda sıcaklığında alındı. p-Si ve n-Si altlıkların dağlama işleminden önceki referans infrared spektrumları ve dağlama işleminden sonraki spektrumları incelenerek altlıkların yüzey ve yapısal özelliklerinin bu işlem neticesinde nasıl değiştiği belirlendi.

Şekil 4.5 a ve b ile Şekil 4.6 a ve b de referans p-Si ve n-Si altlıklar ile dağlanmış p-Si ve n-Si altlıklara ait infrared geçirgenlik spektrumları verilmektedir. Referans altlıkların geçirgenlik spektrumları incelendiğinde 610 cm⁻¹ de karakteristik Si-Si titreşim piki ve 1107 cm⁻¹ de Si-O-Si gerilme bağlarına ait titreşim piki belirlendi. Ayrıca bu piklerin yanında bütün altlıkların infrared spektrumlarında 1290 cm⁻¹ de oksijen gerilme LO, 1100 cm⁻¹ de oksijen gerilme TO ve 820 cm⁻¹ de silisyum TO pikleri gözlemlendi.



Şekil 4.5 a) referans p-Si altlık ve b) dağlanmış p-Si altlık için FT-IR spektrumu

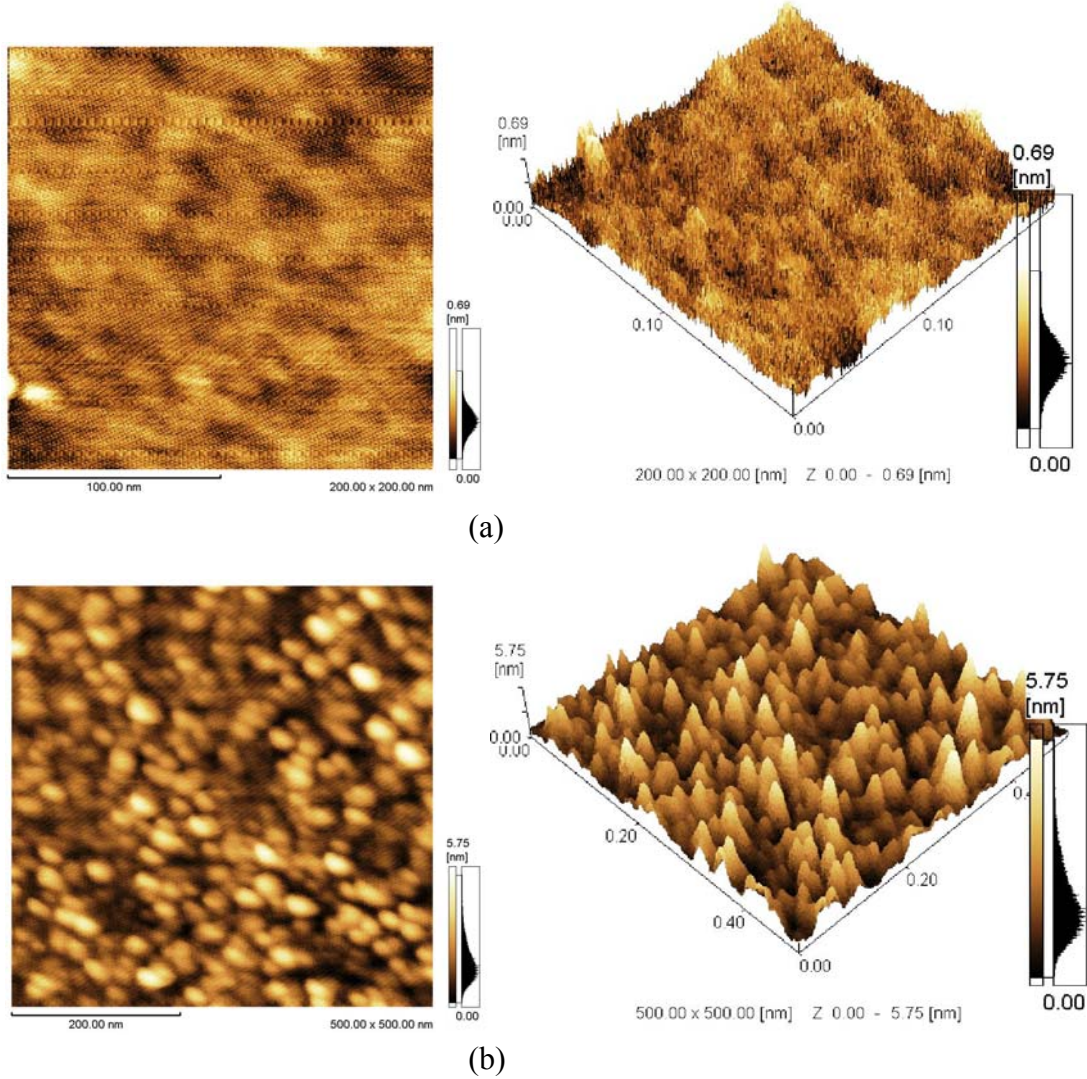


Şekil 4.6 a) referans n-Si altlık ve b) dağlanmış n-Si altlık için FT-IR spektrumu

Referans altlıkların spektrumundan anlaşıldığı gibi ortamdaki oksijenden dolayı silisyum yüzeyinde Si-O-Si bağları vardır. Bu altlıklar dağlama işleminden sonra yüzeylerindeki titreşim bağlarına ait pik şiddetlerinde azalmalar olduğu infrared spektrumunda görüldü. Bu pik şiddetlerindeki azalmalara altlıkların yüzeyindeki Si-Si ve Si-O-Si bağlarındaki kırılmaların neden olduğu söylenebilir. Bağlardaki kırılmalar ve kopmalar yüzeyde yapının bozulmasına neden olur. Dolayısıyla, altlıkların kaplama işleminden önce enerjili Ar^+ iyonları ile bombardıman edilmesiyle uygulanan dağlama işlemi neticesinde yüzeydeki bağların kırılması ile silisyum yüzeyinde kusurlar ve hatalar oluşturuldu.

Silisyum altlıkların yüzeylerinin atomik kuvvet mikroskobu ile incelenmesiyle nötral molekül kaynağı ile dağlanan altlıkların yüzey morfolojilerinin nasıl değiştiği gözlemlendi. Şekil 4.7 a,b de referans silisyum altlığın ve dağlanmış silisyum altlığın yüzeyinin AFM görüntüsü verildi. Referans Si altlığın yüzey topografyasına bakıldığında çok düzgün (smooth) bir yüzeye sahip olduğu görüldü ve yüzey pürüzlülüğü (RMS değeri) 0.096 nm civarında ölçüldü. Altlıklar enerjili Ar^+ iyonları ile dağlandıktan sonra yüzey pürüzlülüğünün arttığı

görüldü (Şekil 4.7b) ve yüzey pürüzlülüğü RMS (Root Mean Square) değeri 0.87 nm ölçüldü. Altlıkların yüzeyinde boşluklar gibi yüzey hatalarının beklenildiği bu dağlama işlemi süresince, silisyum altlıkların yüzeyinde kusurlar oluşturuldu. AFM görüntüleri ile kaplamadan önce uygulanan dağlama işleminden sonra altlıkların yüzeyindeki bu bozulmalar gözlemlendi.



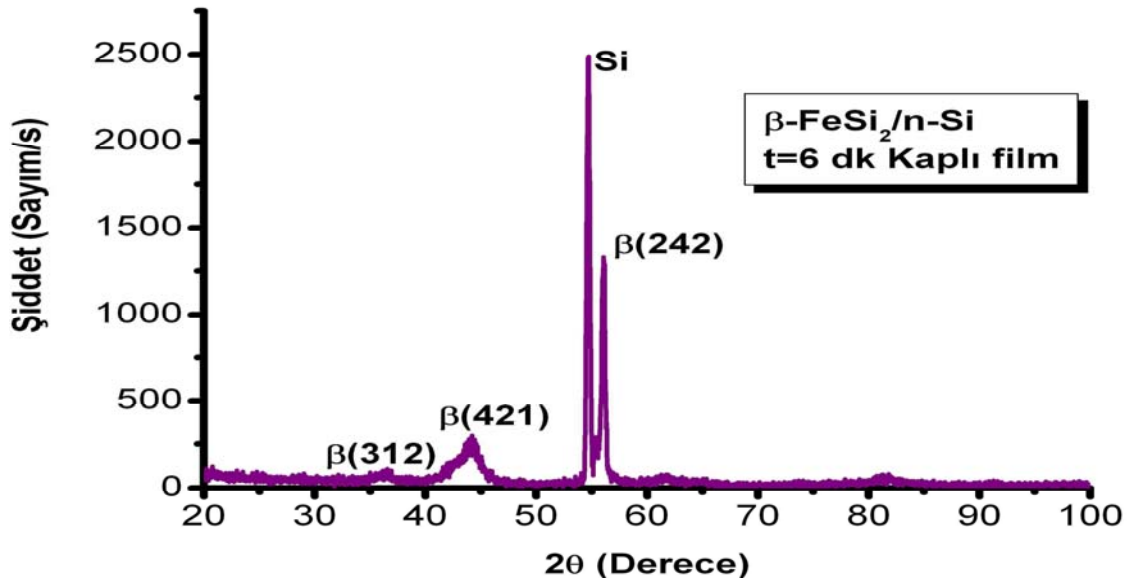
Şekil 4.7 a) referans Si altlıkların ve b) nötral molekül kaynağı ile etç edilmiş Si altlıkların yüzey AFM görüntüleri

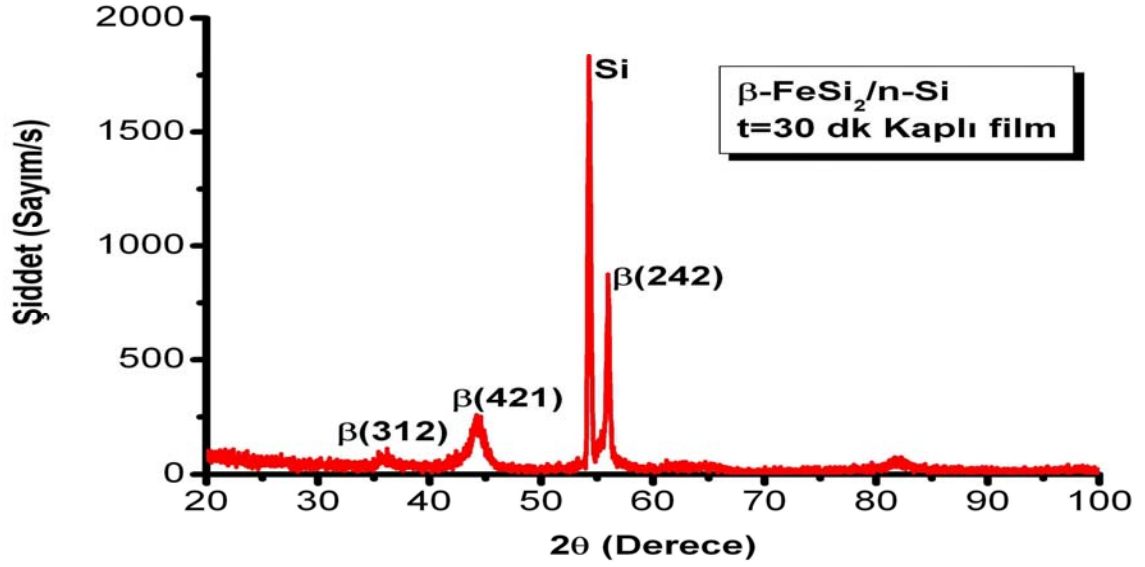
FT-IR geçirgenlik spektrumları ve AFM incelemeleri sonucunda Si altlıklara kaplamadan önce NMK ile uygulanan bu dağlama işlemi neticesinde altlıkların üzerinde kusurlu bir yüzey olduğu tespit edildi. Önceden yapılan bu dağlama işlemi ile Si altlıkların üzerinde yaratılan bu kusurlar ve hatalar Fe atomlarının sıçratılarak kaplanması süresince silisyum içerisine demir difüzyonunun ilerlemesini sağlayabilir. Bu sayede Fe atomları silisyum yüzeyinden içeri doğru daha rahat hareket edebilir ve β -FeSi₂ filmlerin oluşumuna katkı sağlar.

4.3 β -FeSi₂ filmlerin Yapısal Özellikleri

4.3.1 β -FeSi₂ filmlerin XRD Analizi Sonuçları

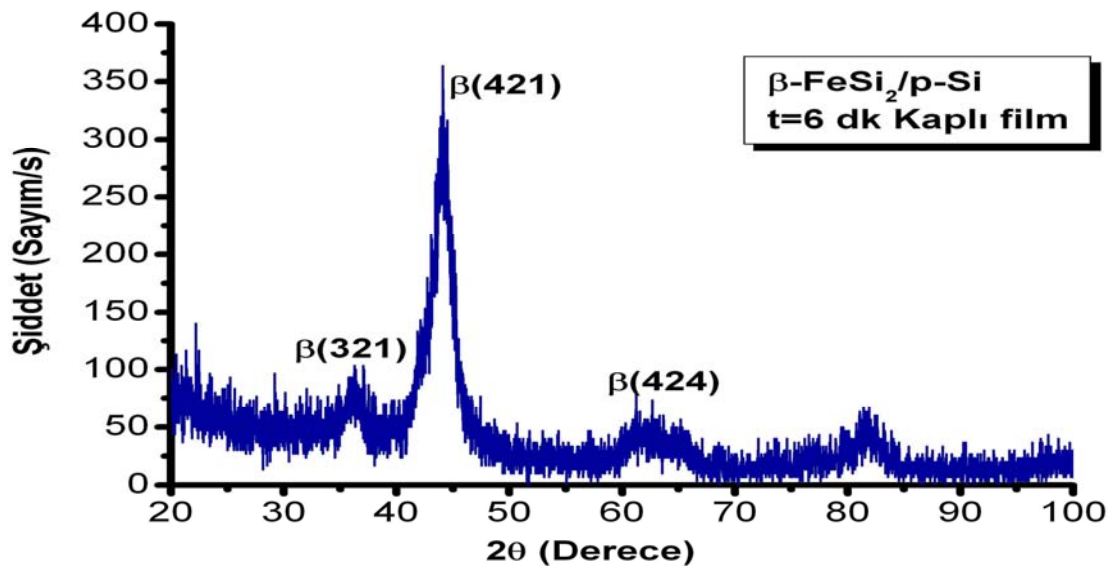
β -FeSi₂ filmlerin yapı, yönelim ve faz gibi özelliklerinin belirlenmesinde giriş açılı X- Işını difraksiyonu (glancing angle XRD) yöntemi kullanıldı. XRD spektrumları $20^\circ < 2\theta < 100^\circ$ aralığında ve 2° giriş açısıyla alındı. β -FeSi₂ filmler, manyetik alanda sıçratma metodu ile oda sıcaklığında n-Si(100) ve p-Si(111) altlıklar üzerine çeşitli kalınlıklarda kaplanarak hazırlandı. Kaplama kalınlıkları kaplama süreleri değiştirilerek ayarlandı ve bütün filmlerin hazırlanmasında daha önceki kısımlarda anlattığımız temizlik prosesleri yapıldı. Şekil 4.8 da (100) yönelime sahip n tipi silisyum altlıklar üzerinde $t=6$ dk ve $t=30$ dk kaplama sürelerinde büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin XRD deseni görülmektedir. Görüldüğü gibi 6 dk kaplı film ile 30 dk kaplı filmin difraksiyon deseni piklerin şiddetleri dışında konumları ve genel kristal yönelimleri aynı olduğunu söyleyebiliriz. Şekilde β -FeSi₂ filmlerin $38,5^\circ$, 45° ve 56° deki 2θ açılarına karşı gelen piklerin düzlem yönelimlerinin (312), (421) ve (242) olduğu açıkça görülüyor. Ayrıca (100) yönelimli n-Si altlık üzerinde büyütülen filmlerin difraksiyon desenlerinde birçok β fazına ait pik olduğundan dolayı n-Si(100) altlıklar üzerinde büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin polikristal yapıya sahip olduğunu söyleyebiliriz. $2\theta=55^\circ$ deki pikin altlık malzemeden geldiği düşünülmektedir.

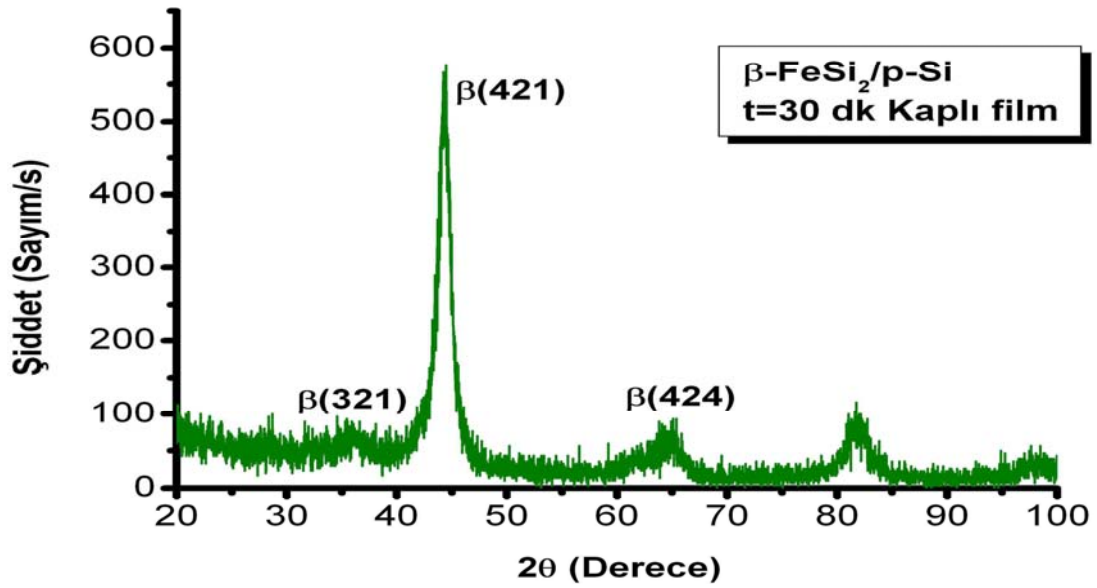




Şekil 4.8 n-Si altlık üzerine t=6 dk ve t=30 dk kaplama sürelerinde büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin XRD desenleri

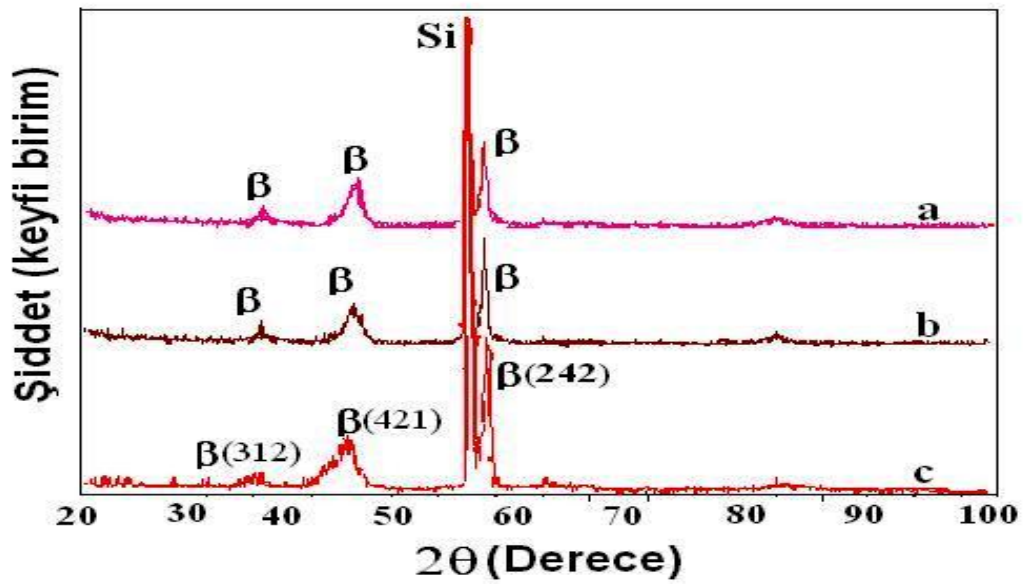
Şekil 4.9 de (111) yönelimli p tipi silisyum altlıklar üzerinde oda sıcaklığında 6dk ve 30dk kaplama sürelerinde büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin X-ışınları kırınım deseni görülmektedir. β -FeSi₂ filmlerin difraksiyon piklerine karşı gelen (321), (421) ve 424) düzlemleri $2\theta = 38,5^\circ$, 45° ve 65° de gözlemlendi ve p-Si(111) altlıklar üzerinde manyetik alanda sıçratma metodu ile büyütülen bu filmlerin polikristal yapıda oldukları belirlendi.



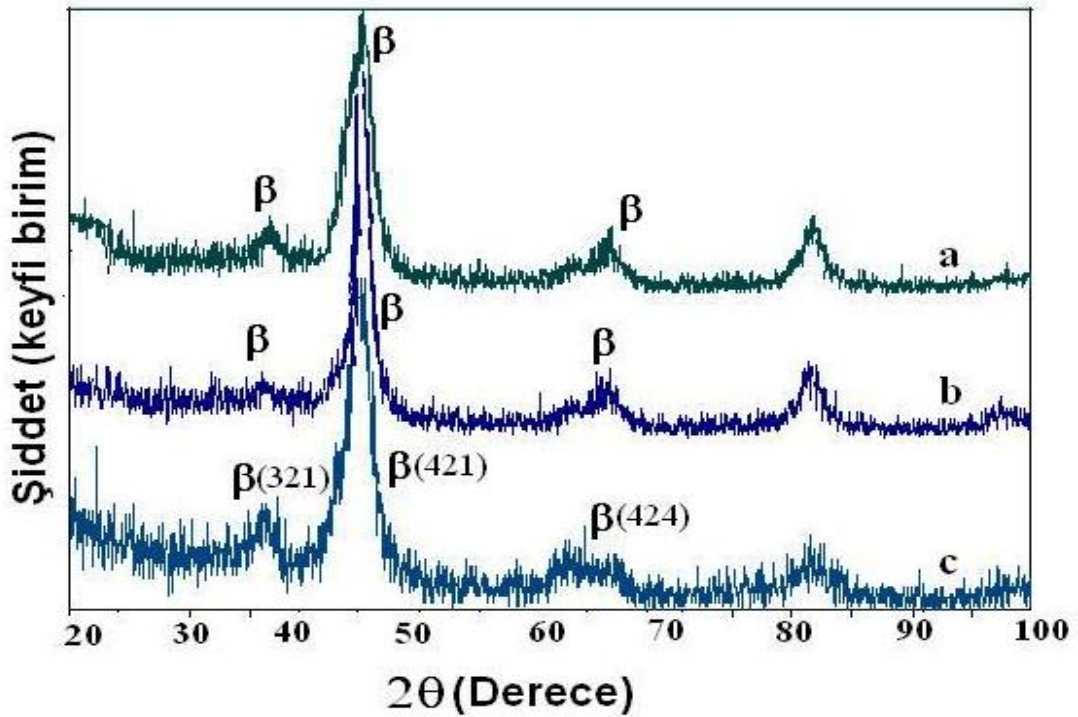


Şekil 4.9 p-Si altlık üzerine $t=6$ dk ve $t=30$ dk kaplama sürelerinde büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin XRD desenleri

Manyetik alanda sıçratma tekniği ile hazırlanan β -FeSi₂ filmlerin kalınlıklarının yapısal özelliklere etkisini araştırmak için yine filmin kaplama koşullarını aynı tutarak $t=4$ dk, $t=6$ dk ve $t=8$ dk kaplama sürelerinde n ve p tipi Si altlıklar üzerine β -FeSi₂ filmler büyütüldü. Şekil 4.10 ve 4.11 de sırasıyla n-tipi Si(100) ve p-Si(111) altlıklar üzerine farklı kalınlıklarda hazırlanmış β -FeSi₂ filmlerin X-ışınları kırınım desenlerini görüyoruz.



Şekil 4.10 a) $t=4$ dk. b) $t=6$ dk. c) $t=8$ dakika kaplama sürelerinde hazırlanan β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin XRD desenleri



Şekil 4.11 a) $t=4$ dk. b) $t=6$ dk. c) $t=8$ dakika kaplama sürelerinde hazırlanan β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemlerin XRD desenleri

Sonuç olarak manyetik alanda sıçratma tekniği ile oda sıcaklığında demir hedeften Fe atomlarının dengelenmemiş manyetik alanda hızlandırılmış iyonlar tarafından koparılıp silisyum altlıklara biriktirilmesi ile büyütülen β -FeSi₂ filmlerin XRD incelemeleri sonucunda,

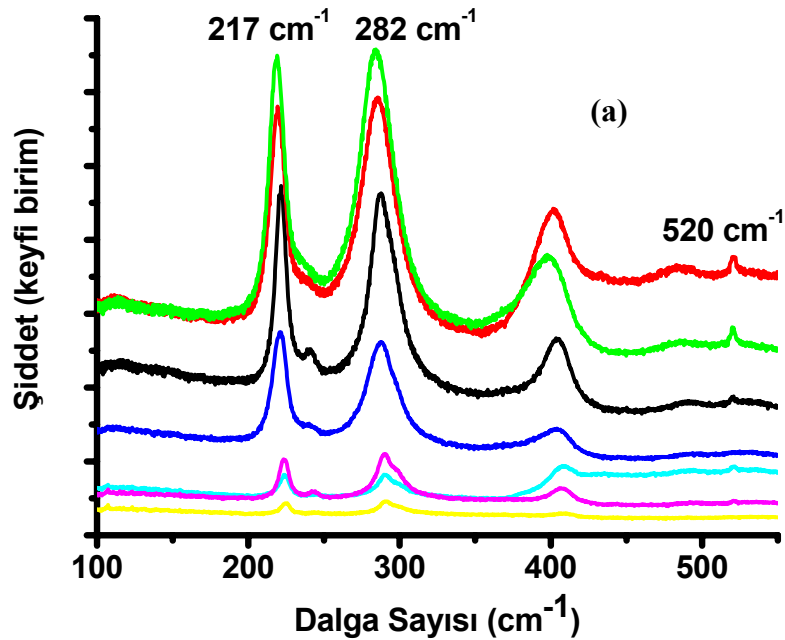
- Elde edilen FeSi₂ filmlerin çeşitli yönelimlerde ve β -Fazda olduğu
- β -FeSi₂ filmlerin polikristal yapıda olduğu
- β -FeSi₂ filmlerin yapısal özelliklerinin altlık yönelimine ve tipine direkt bağlı olduğu
- Hazırlanan β -FeSi₂ filmlerin yapısal özelliklerinin kaplama kalınlıklarına bağlı olmadığı yani film kalınlığından bağımsız olduğu

belirlendi. Burada yer alan sonuçlar ve grafiklerin bazıları, Surface characterization of β -FeSi₂/Si heterojunctions prepared by magnetron sputtering başlıklı çalışmada Surface & Coatings Technology 201, (2007) 8373-8376 ve Synthesis of β -FeSi₂/Si heterojunctions for photovoltaic applications by unbalanced magnetron sputtering başlıklı çalışmada Thin Solid Films 516, (2007) 13-16 dergilerinde yayınlandı.

4.3.2 β -FeSi₂ filmlerin RAMAN Analizi Sonuçları

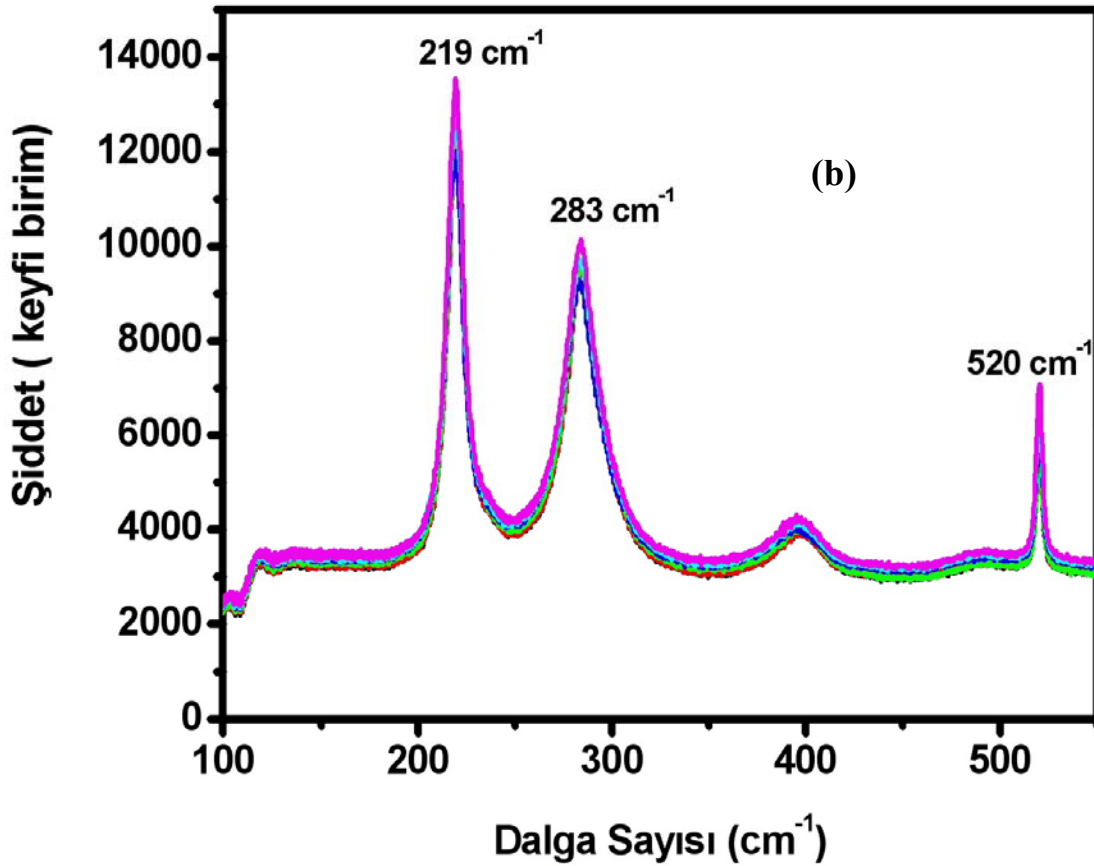
Yarıiletken β -FeSi₂, birim hücresinde 16 molekül bulunduran ve iki farklı örgü yapısına sahip Fe-Si atomlarından oluşmuş çok karmaşık bir kristal yapıya sahiptir. Grup teorisinin öngördüğü gibi β -FeSi₂ kristal yapısının 3n kipinde olacağı (birim hücre 8 FeSi₂ molekülü ve 24 atom içerir) ve tüm kristalden 3 dönme ve 3 geçiş ile birlikte beklenen toplam kip sayısının 72 olacağı literatürde rapor edildi (R. Ayache, 2004). β -FeSi₂ yapı için g kipleri (gerade, çift) Raman aktifken u kipleri(ungerade, tek) ise Infrared aktif kiplerdir. B_{1u}, B_{2u} ve B_{3u} infrared aktif kipleriyken A_g, B_{1g}, B_{2g} ve B_{3g} kipleri de Raman aktiftir. β -FeSi₂ yarıiletkeninin kristal yapısına ait literatürde rapor edilen en karakteristik pikler, β -FeSi₂'nin kutuplanabilir tensörünün (α_{ii} , i=x, y, z) köşegen bileşenleri için A_g kipine ait olan $\sim 200 \text{ cm}^{-1}$ ve $\sim 250 \text{ cm}^{-1}$ de yer alan piklerdir (K. Lefki, 1991), (Y. Maeda, 2001), (T. Yoshitake, 2001).

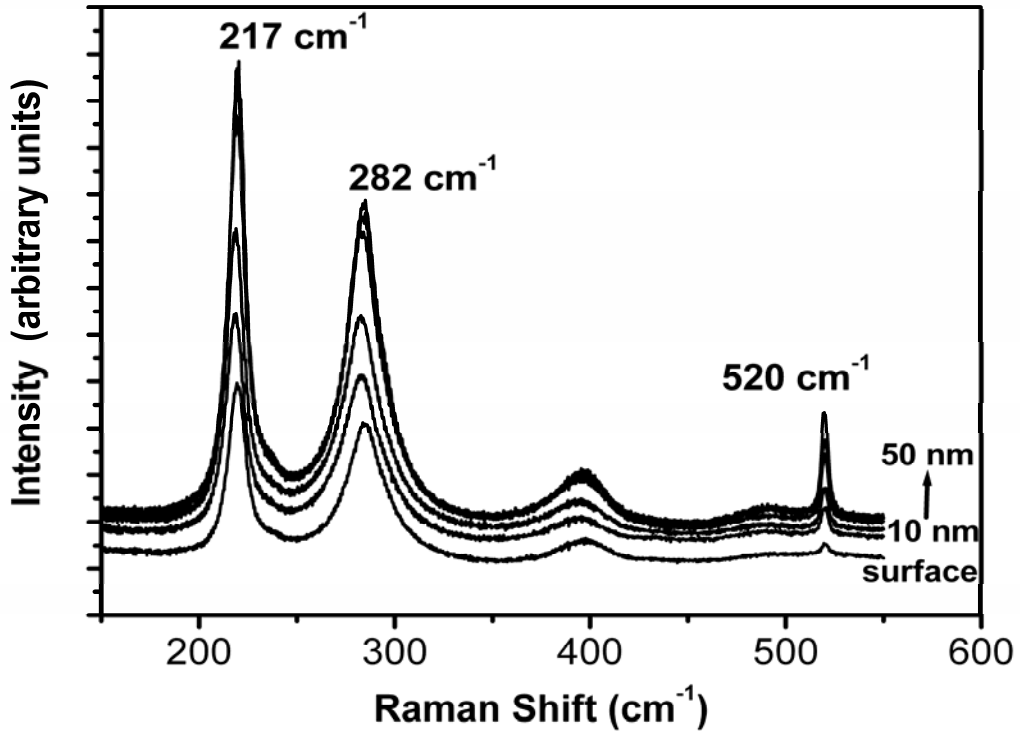
Raman spektrum ölçümleri aynı odaklı mikro Raman (confocal micro-Raman) sistemi ile filmin yüzeyinden arabölgeye doğru derinliğe bağlı olarak (z-stage) n-tipi ve p-tipi silisyum altlıklar üzerine oda sıcaklığında manyetik alanda sıçratma tekniği ile büyütülmüş β -FeSi₂ filmler için alındı. Şekil 4.12a' da n-Si(100) altlık üzerine büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin Raman spektrumu görülmektedir.



Şekil 4.12 β -FeSi₂ filmlerin Raman spektrumu a) n-Si(100) b) p-Si(111) altlık üzerine büyütülmüş

Şekil 4.12 a ve b’de görüldüğü gibi β -FeSi₂ filmlerin spektrumunda (217 cm^{-1} ve 232 cm^{-1}) ve (219 cm^{-1} ve 283 cm^{-1}) civarında dalga sayısına sahip iki şiddetli Raman piki gözlemlendi. Bu pikler β -FeSi₂ kristal yapısına ait karakteristik A_g kipine karşılık gelen piklerdir ve bu piklerde orijinal Raman çizgilerinden çok belirli bir kayma görülmüştür. β -FeSi₂ filmlerin kaplama tekniğinden dolayı yapısında oluşabilecek safsızlıklar yüzey periyodikliğini bozacaktır. Aynı zamanda bu safsızlıklar ve yapıdaki oluşacak diğer Fe-Si faz oluşumları β -FeSi₂ kristal yapısına belirli bir basınç uygular ve bu basınç nedeniyle örgü periyodikliğinde de bozulmalar oluşur. β -FeSi₂ yapısının haricindeki diğer oluşumların kristal örgü üzerindeki oluşturduğu bu basınç nedeniyle molekülün titreşim hareketinde değişimler meydana gelir. Raman spektrumundaki görülen bu piklerinin orijinal yerlerindeki kaymaların nedenini bu şekilde açıklayabiliriz. β -FeSi₂ molekülündeki simetrik ve anti-simetrik titreşimler nedeniyle bu piklerdeki kaymalar farklı olur. Bunun nedeni molekül içerisindeki Si-Fe-Si bağlarındaki hafif açı değişimleri coupling nedeniyle her iki titreşime de (simetrik, anti-simetrik) farklı etki ederler. Dolayısıyla simetrik ve anti-simetrik titreşimlerde farklı kaymalar gözlemlenir.



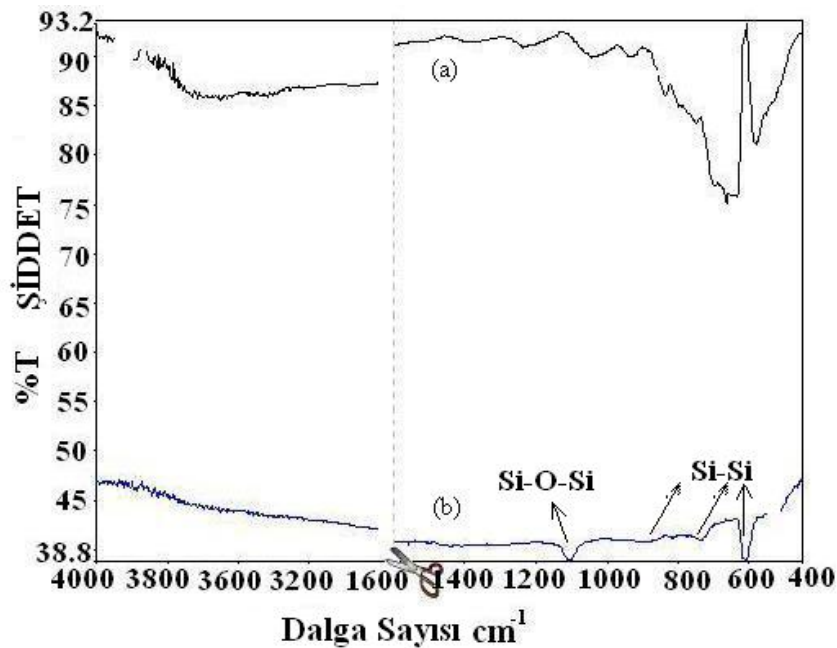


Şekil 4.13 Derinliğe bağlı β -FeSi₂ filmlerin Raman spektrumu (Tatar B., 2007)

Derinliğe bağlı Raman ölçümleri β -FeSi₂ filmlerin yüzeyinden 10 nm aralıklarla filmin içerisine mikroskobu odaklayarak 50 nm derinliğe kadar ölçülerek gerçekleştirildi. Bu ölçümler sayesinde β -FeSi₂ filmlerin yüzeyinden başlayarak film altlık ara yüzeyine ve altlığa kadar inceleme yapabildik. Şekil 4.13’ de 6 dk kaplama süresinde üretilmiş β -FeSi₂ filmlerin Raman spektrumunda görüldüğü gibi piklerde filmin içerisine doğru girildikçe negatif yönde bir kayma meydana geldiği yani bu pikler orijinal konumları olan ~ 200 ve ~ 250 cm⁻¹ konumuna doğru kaydığı görülür. Aynı zamanda filmin yüzeyinden içeri girildikçe bu piklerin şiddetlendiği de görülür. Buradan da film altlık sisteminde ara yüzeye doğru odaklandığımızı ve 520 cm⁻¹ konumundaki Si pikinin 20 nm derinliğinden itibaren şiddetinin artması da silisyum tabana doğru ulaştığımız sonuçlarını çıkarabiliriz. Film altlık ara yüzeyindeki spektrumlarının verilerine dikkat edildiğinde piklerin şiddetlerinin artması ve bu piklerin sola doğru kaymaları yüzeyde safsızlıkların daha fazla olduğu ve ara yüzeydeki β -FeSi₂ oluşumunun daha düzgün bir kristal örgüye sahip olduğu anlamına gelir. Bu bölgenin aynı zamanda hem demirce hem de silisyumca daha zengin bir bölge olduğu ve β -FeSi₂ oluşumunun yüzeyden altlığa doğru gidildikçe daha iyi olduğunu söyleyebiliriz. Bu sonuçlardan 6dk kaplama süresinde üretilen filmin toplam kalınlığının yaklaşık 30nm olduğu sonucuna varırız.

4.3.3 β -FeSi₂ filmlerin FT-IR Analizi Sonuçları

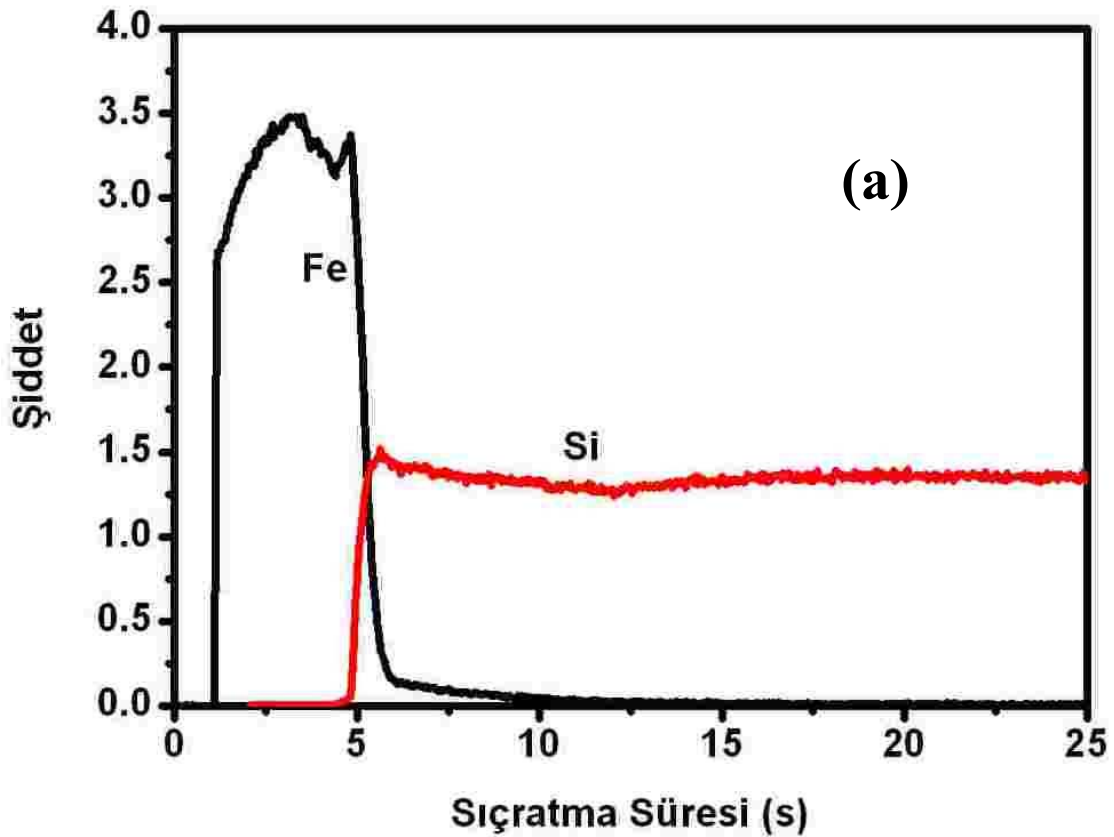
β -FeSi₂ filmlerin IR spektrumu ile ilgili literatürde çok fazla çalışma yapılmamakla birlikte, bu yapının infrared aktif kipleri olan B_{1u}, B_{2u} ve B_{3u} kipler grup teorisinin ön gördüğü şekilde hesaplanmış ve deneysel olarak bu piklerin frekans konumları sırasıyla 263 cm⁻¹, 300 cm⁻¹, 344 cm⁻¹ ve 425 cm⁻¹ dedir (R. Ayache, 2004). Bu piklerin FT-IR spektrumları ile ölçülmesi için uzak infrared bölgenin taranması gereklidir yani 2500 nm ile 5000 nm aralığını taramak gereklidir. Dolayısıyla β -FeSi₂ filmlerin incelenmesi için IR spektroskopi çok yaygın bir teknik değildir. FT-IR (Fourier-Transform Infrared Transmittance) spektrumları oda sıcaklığında 400–4000 cm⁻¹ aralığında alındı. Silisyum altlıkların ve β -FeSi₂ filmlerin geçirgenlik ve absorbands spektrumları Perkins Elmer Spectrum One FT-IR cihazı kullanılarak elde edildi. Biz bu çalışmada, IR spektrumlarını Si altlık üzerine manyetik alanda sıçratma tekniği ile Fe atomlarının biriktirilmesi ile elde edilen β -FeSi₂ filmlerin oluşumu sırasında Si-Si ve Si-O-Si bağlarının nasıl etkilendiğini incelemek için kullandık. Şekil 4.14 de nötral moleköl kaynağı ile bombardıman edilerek etc edilmiş silisyum altlıkların üzerinde büyütölen β -FeSi₂ filmlerden alınan IR geçirgenlik spektrumu görölmektedir. Demirin kaplanması ile birlikte IR geçirgenliğinde büyük bir artış olduğı gözlenmiştir ve Si-Si ve Si-O-Si titreşim bantlarına ait olan IR piklerinin ters döndüğü gözlemlenmiştir. Bu etkinin Fe atomlarının yüzeyde belirli bir modifikasyona neden olmasından kaynaklanacağını düşündük fakat bu olayın nedenini anlamak için bu konuda daha fazla inceleme yapmamız gerekmektedir.

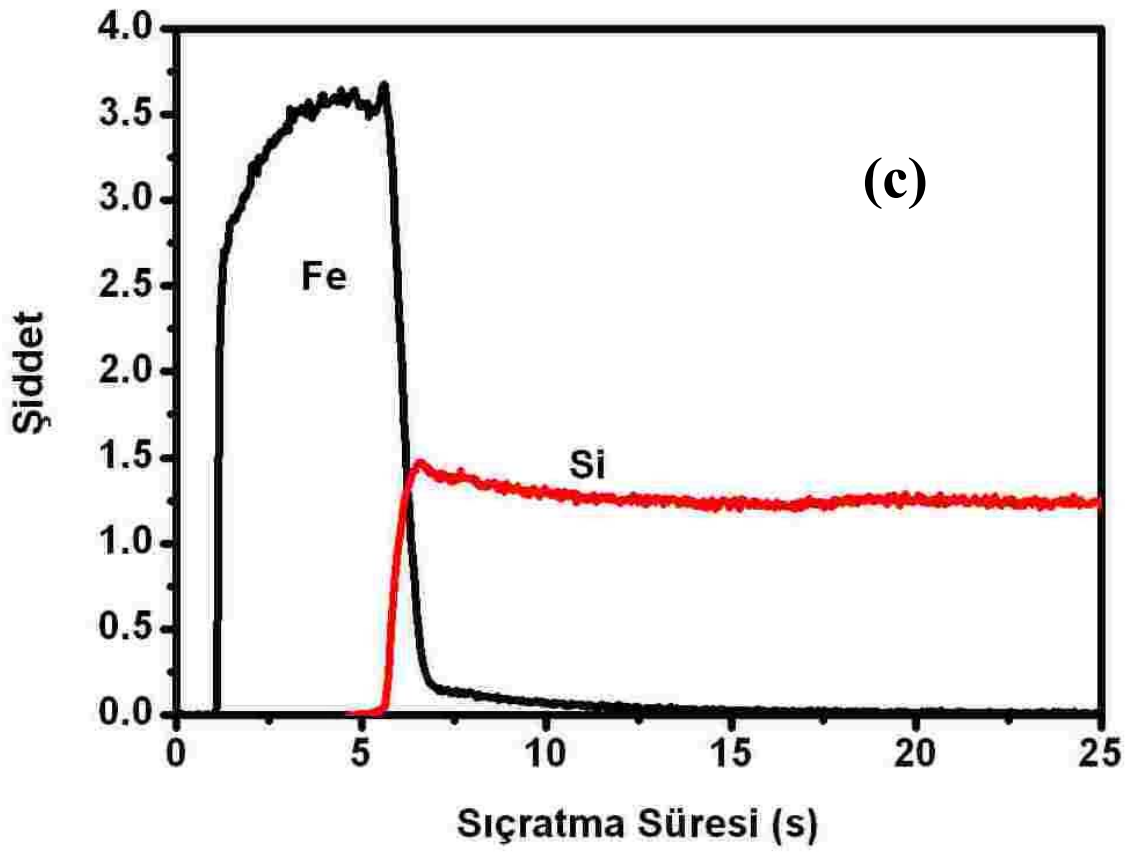
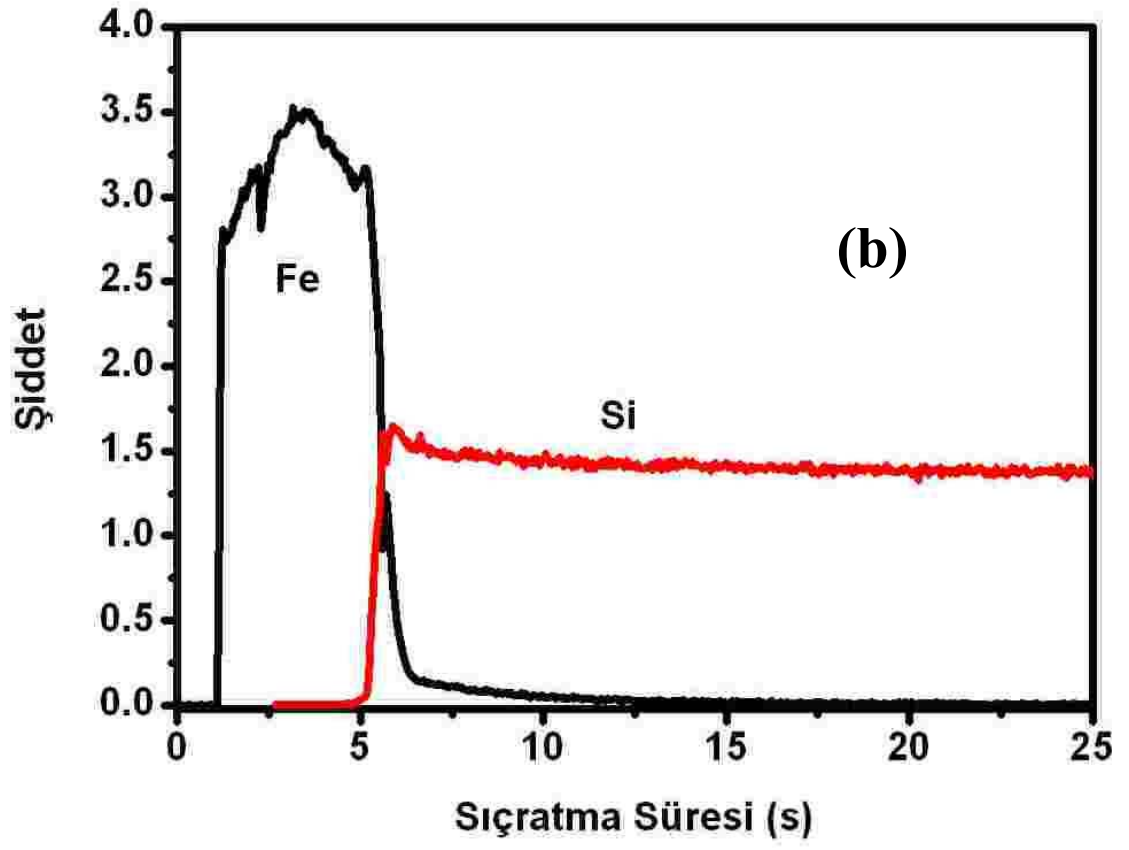


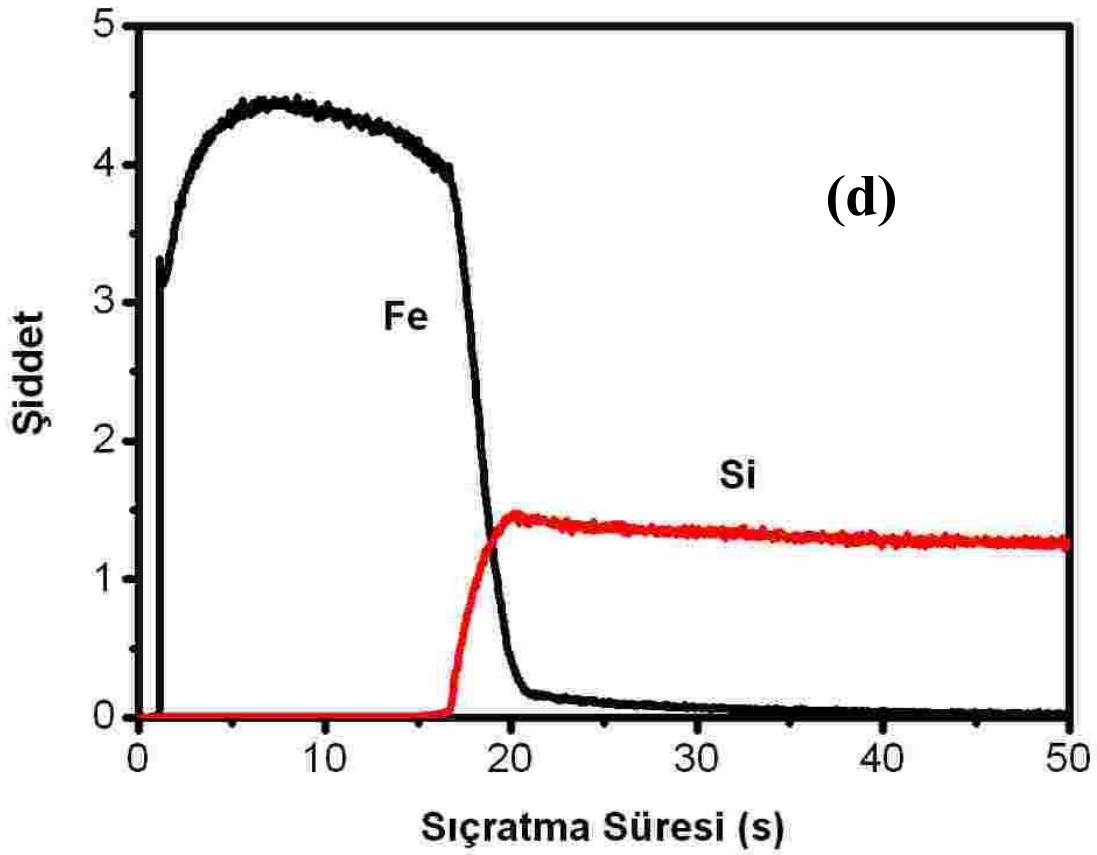
Şekil 4.14 β -FeSi₂ filmlerin oda sıcaklığındaki FT-IR spektrumu

4.3.4 β -FeSi₂ filmlerin GDOES Analizi Sonuçları

Dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma metodu ile n-Si(100) ve p-Si(111) altlıklar üzerine oda sıcaklığında hazırlanan β -FeSi₂ filmlerin yüzeyden altlığa doğru sıçratma süresine karşı elementel analizleri GDOES (Glow Discharge Optical Emission Spectroscopy) cihazı ile alındı. Filmler 3 dk, 4dk, 6dk, 8dk, 9dk ve 30dk kaplama sürelerinde farklı kalınlıklarda hazırlandı. Yapılan XRD ve Raman ölçümlerinden filmin kalınlığının β -FeSi₂ kristal yapısı üzerinde herhangi bir değişikliğe neden olmadığı görüldü, yani β -FeSi₂ filmlerin yapısal özelliği film kalınlığından bağımsızdır. Fakat yapılan GDOES ölçümlerinde önemli olarak gözlenen kaplama süresinin değişimi ile kaplanan Fe film ile Si altlığın ara yüzey bölgesinin kalınlığının değişmesi ve bu sayede o bölgede oluşan β -FeSi₂ filmin kalınlığının artmasıdır. Şekil 4.15 a, b, c, d grafiklerinde farklı kaplama sürelerinde elde edilmiş β -FeSi₂ filmlerin GDOES analizi sonuçları yer almaktadır.

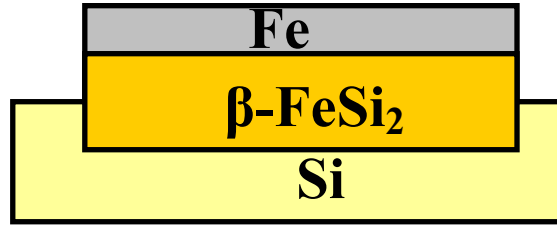






Şekil 4.15 β -FeSi₂ filmlerin oda sıcaklığındaki GDOES spektrumu a) 4dk kaplama kalınlığına sahip β -FeSi₂/n-Si b) 6dk kaplama kalınlığına sahip β -FeSi₂/n-Si c) 8dk kaplama süresine sahip β -FeSi₂/n-Si d) 30dk kaplama süresine sahip β -FeSi₂/n-Si

Şekilde de görüldüğü gibi Ar iyonlarının filmin yüzeyinden sıçratmaya başlaması ile yüzeyde yoğun bir şekilde Fe sinyali alınmaya başlanıyor ve kaplama süresine bağlı olarak Fe sinyali belirli bir sıçratma süresinde ölçülüyor. Daha sonra filmin yüzeyinden içerilere girildikçe Fe sinyalinin yoğun ve düzgün alındığı bir bölgeden itibaren Si sinyali alınmaya başlıyor. Filmin ara yüzeyine doğru gidildikçe Fe sinyali azalmaya başlarken Si sinyali şiddetlenmeye başlıyor. Belirli bir sıçratma süresinden sonra artık sadece altlık içerisine girildiği için düzenli bir Si sinyali alınıyor. Bu grafiklerden anlıyoruz ki β -FeSi₂ film bu kaplama tekniğinde direkt olarak yüzeyde oluşmuyor sadece Fe film ile Si altlığın birleştiği ara yüzeyde oluşuyor. Dolayısıyla bizim ince film yapımız sandviç şeklindedir ve sırasıyla yüzeyde Fe film, ara yüzeyde β -FeSi₂ film ve tabanda Si altlık yapıyı oluşturuyor. Şekil 4.16 da bu yapının şematik görünümü tasarlanmıştır. GDOES sonuçlarına bakıldığında derinlik bağımlı Raman sonuçları ile uyumlu olduğu görülüyor ve aynı zamanda bu sonuçlar bir sonraki kısımda yer alan EDS analizi sonuçları ile de uyumludur.



Şekil 4.16 β -FeSi₂ filmlerin Manyetik alanda sıçratma tekniği ile oda sıcaklığında oluşum yerinin GDOES analizi verileri ile gösterimi

Zaten kaplama sırasında herhangi bir ısıtıl işlem uygulanmadığından dolayı β -FeSi₂ film oluşumunun ara yüzeyde sınırlı kalması beklediğimiz bir sonuçtur. Eğer kaplamadan sonra hazırlanan filmlere bir ısıtıl işlem uygulansaydı, difüzyon mekanizmasının hızlanması ile β -FeSi₂ filmin Fe ve Si bölgesine doğru daha iyi yayınacağını söyleyebilirdik. Fakat ısıtıl işlem yöntemi β -FeSi₂ filmlerin üretimi için çok yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu çalışmada herhangi bir ısıtıl işlem uygulamadan bu filmlerin dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniği ile hazırlanabileceği gösterilmiştir ve ilk defa bizim tarafımızdan rapor edilmiştir. Bu ara yüzeydeki yapı oluşumunun temelinde ise hedeften kopartılarak hızlandırılmış Fe atomlarının, NMK ile dağlanarak aktif hale getirilmiş Si altlığı ulaştığındaki momentum transferi ile Fe ve Si atomlarının birbirleri içerisinde daha iyi yayınması olayı yatmaktadır.

4.3.5 β -FeSi₂ filmlerin EDS Analizi Sonuçları

Kısım 3.1 de anlatıldığı gibi hazırlanan β -FeSi₂ filmlerin Fe ve Si içeriğinin tespiti amacıyla EDS analizleri yapılmıştır. Yapılan EDS (Energy Dispersive Spectroscopy) ölçümleri filmin farklı kalınlık bölgelerinden alınması için 5 keV, 10 keV ve 15 keV enerjili elektronlar kullanılmıştır ve elementlerin hem % atomik hem de % ağırlık oranları tespit edilmiştir. Bu sayede filmin yüzeyinden altlığa doğru girilerek ölçümler alınmıştır. Çizelge 4.1 de n-tipi Si(100) ve p-tipi Si(111) altlık üzerine büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin 5 keV enerjili elektronlarla alınmış EDS analizi sonucu yer almaktadır. Bu enerjili elektronlarla alınan EDS analizi verilerinde % olarak Si elementine rastlanamamıştır. Belirli bir oranda Oksijen elementi ve % 92 ler civarında Demir elementi tespit edilmiştir. Bu sonuçlara göre biz bu analizi filmin yüzeyinden yaptığımız kanaatine varabiliriz.

Fe-nSi	Atom	W(%)
O	23,67	8,16
Fe	76,33	91,84

Fe-pSi	Atom	W(%)
O	22,22	7,56
Fe	77,78	92,44

Çizelge 4.1 β -FeSi₂ yarıiletkenine ait 5 keV elektronlarla alınmış EDS analizi

Çizelge 4.2 de 10 keV enerjili elektronlarla yapılmış EDS analizi sonuçları yer almaktadır. Bu sonuçlara bakıldığında artık O elementinin herhangi bir yüzdesel olarak yapıda kalmadığı ve onun yerine düşük yüzdelerde Silisyum elementi tespit edilmiştir. Dolayısıyla bu enerjili elektronlarla yapılan analizin sonucunda analiz yapılan bölgenin Fe film içerisinde ara yüzeye doğru bir kısım olduğunu söyleyebiliriz.

Fe-nSi	Atom	W(%)
Si	10,51	5,58
Fe	89,49	94,42

Fe-pSi	Atom	W(%)
Si	9,72	5,14
Fe	90,28	94,86

Çizelge 4.2 β -FeSi₂ yarıiletkenine ait 10 keV elektronlarla alınmış EDS analizi

Çizelge 4.3 de ise 15 keV enerjili elektronlarla yapılan EDS analizi verileri yer almaktadır. Bu enerjili elektronlarla alınan veriler incelendiğinde atomik olarak Si %48 civarında ölçülürken Fe %52 civarında ölçülmüştür. Bu sonuçlara bakıldığında ölçümün yapıldığı bölgenin hem demirce zengin hem de silisyumca zengin olduğundan dolayı Fe film ile Si altlığın ara yüzey bölgesi ve aynı zamanda β -FeSi₂ filmlerin oluşum bölgesi olduğunu söyleyebiliriz. Şekil 2.20 de verilen Fe-Si faz diyagramı incelendiğinde β -FeSi₂ fazının oluşumu için gerekli olan yüzde demir ve silisyum oranının çizelge 4.3 deki oranlarla uyduğu görülüyor. Bu bölgeden alınan β -FeSi₂ filmlerin EDS analizindeki Fe ve Si oranları göz önünde bulundurulduğunda

bu bölgede stokiyometrik oranda β fazda bir oluşumdan söz edebiliriz.

Fe-nSi	Atom	W(%)
Si	47,60	31,36
Fe	52,40	68,64

Fe-pSi	Atom	W(%)
Si	48,84	30,70
Fe	51,16	69,30

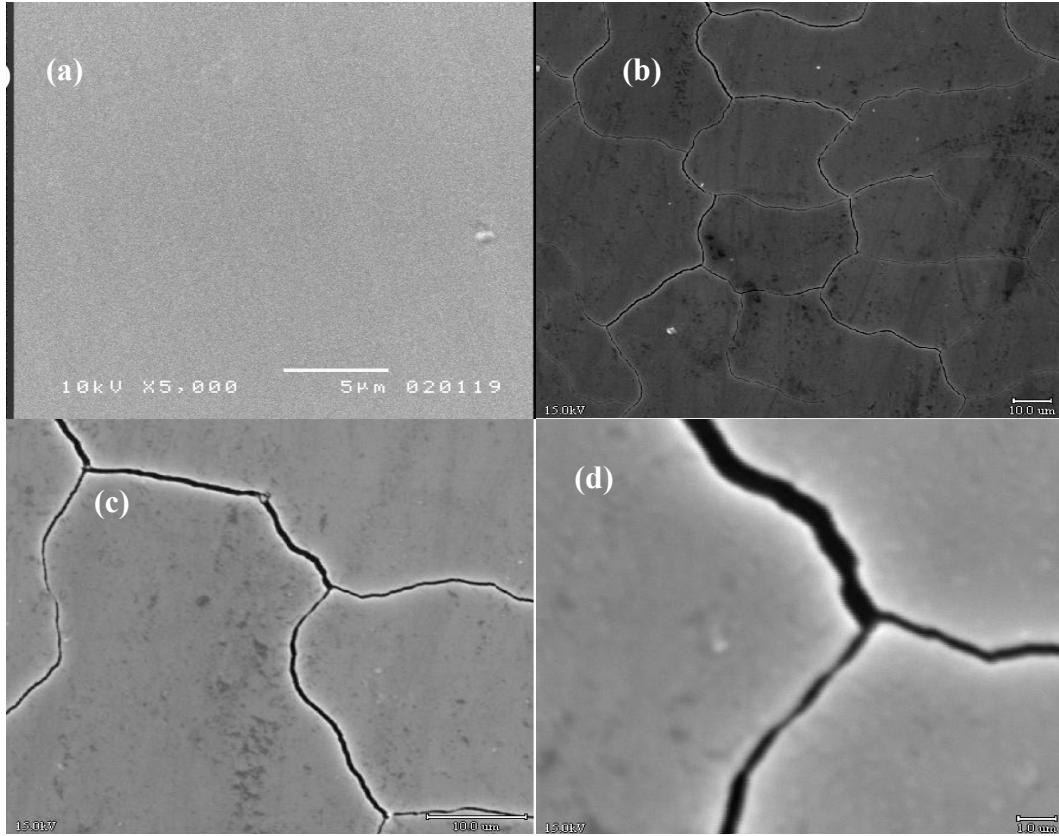
Çizelge 4.3 β -FeSi₂ yarıiletkenine ait 15 keV elektronlarla alınmış EDS analizi

Fe ve Si elementlerinin oranlarındaki değişme filmin yüzeyinden içeri doğru derinliğe bağlıdır. EDS ölçümlerinde kullanılan elektronların enerjilerindeki artışla birlikte silisyum miktarındaki artış ve demir miktarındaki azalış bir önceki kısımda anlatılan GDOES analiz ölçümleri ile de oldukça uyumlu ve birbirini doğrulayan niteliktedir. Her iki teknikle de alınan sonuçlar β -FeSi₂ filmlerin oluşumu sırasında demir ve silisyum elementlerinin bir biri içerisine düfüz ettiği sonucuna varırız. Buda ara yüzeydeki oluşan β -FeSi₂ filmin kalınlığının bu yayınmaya bağlı olduğu anlamına gelir.

4.4 β -FeSi₂ filmlerin Yüzey Özellikleri

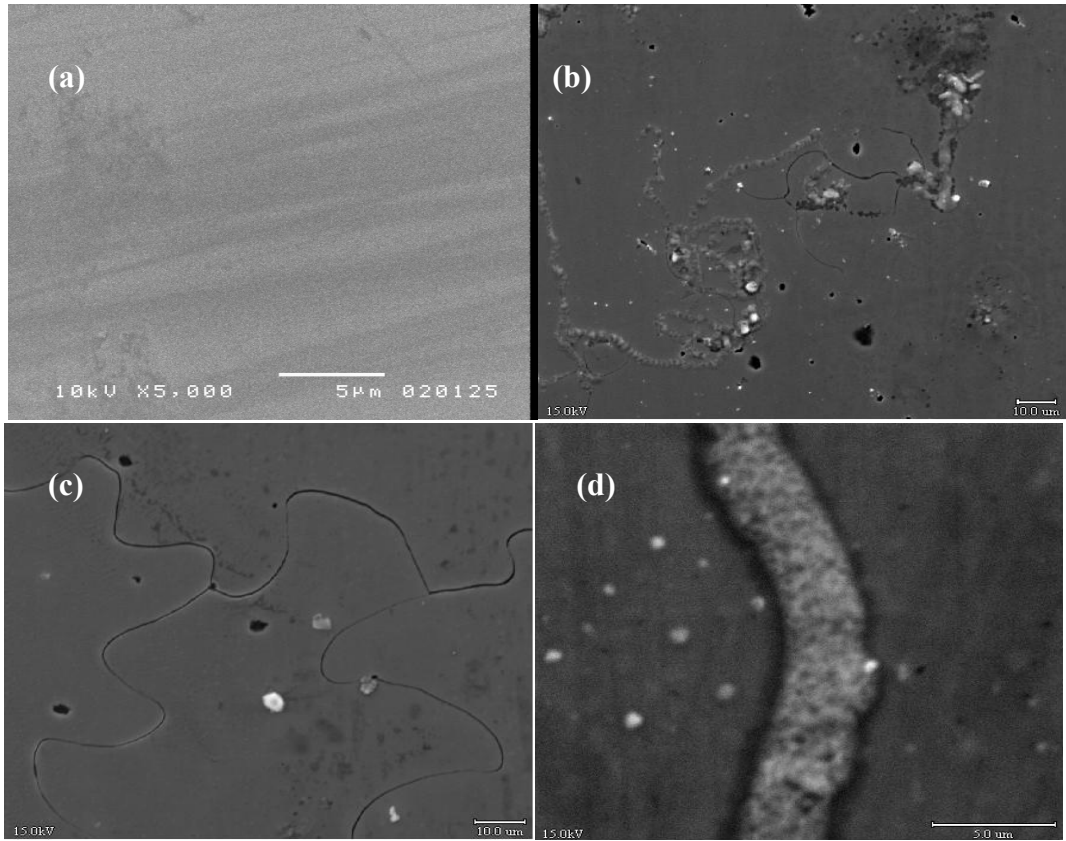
4.4.1 β -FeSi₂ filmlerin SEM Görüntüleri ve Yüzey Morfolojisi

Oda sıcaklığında p-tipi ve n-tipi silisyum altlıklar üzerine dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniği ile Fe atomlarının kaplanması ile oluşturulan β -FeSi₂ filmlerle iki farklı heteroeklem elde edilir. Şekil 4.17 de β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin yüzey görüntüleri SEM fotoğrafları ile verilmiştir. Şekil a'da β -FeSi₂ filmlerin hemen Fe kaplanmasından sonra elde edilen görüntüleri yer almaktadır. Filmlerin yüzeylerinin çok düzgün ve pürüzsüz olduğu açıkça görülüyor. Şekil b'de ise aynı filmlerin 1 sene sonra çekilmiş SEM fotoğrafları görülüyor. Burada filmin yüzeyinde oluşan taneler ve tane sınırları belirli bir şekilde gözükmemektedir. Bu tanelerin sınırlarının büyütülmüş fotoğrafları şekil c ve d verilmiştir. Ayrıca filmin yüzeyinde çeşitli dropletler ve pislikler gözlemlenmiştir.



Şekil 4.17 n-Si(100) altlık üzerinde büyütülen β -FeSi₂ filmlerin SEM görüntüleri a) kaplamadan hemen sonra b) kaplamadan yaklaşık 1 sene sonra c) ve d) tane sınırlarının büyütülmüş fotoğrafları

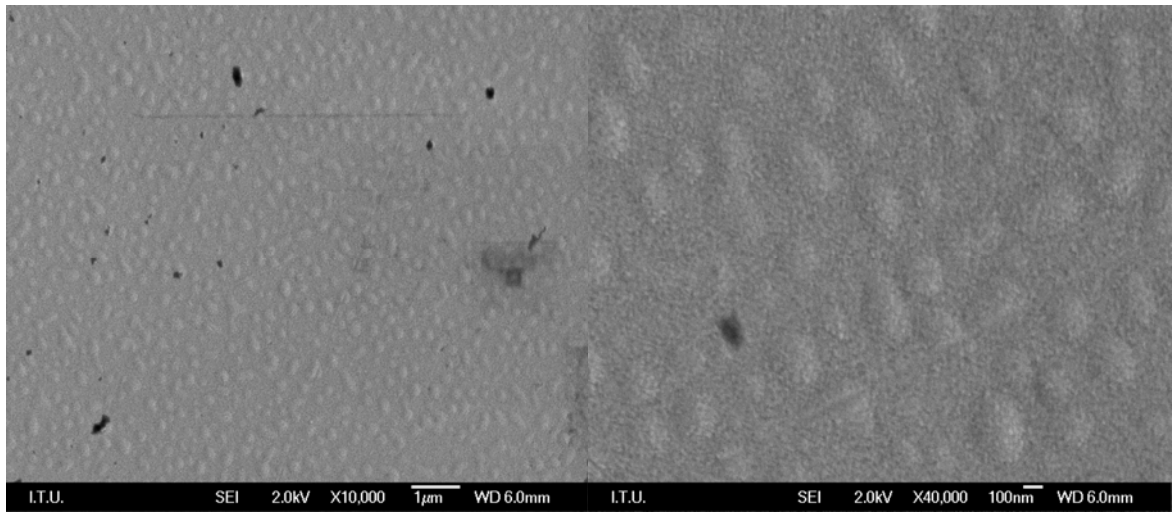
Aynı şekilde β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemlerin yüzey görüntüleri de şekil 4.18’de verilmiştir. Bu eklemlerin yüzey görüntüleri de yine β -FeSi₂/n-Si(100) eklemlerle benzerlik göstermiştir. İki altlık üzerinde de büyütülen β -FeSi₂ filmlerin yüzey fotoğrafları benzer özellik göstermektedir. Belirli bir süre sonra yüzeyde tane sınırlarının oluşması ve bu tane duvarlarının aralarının açılmasını kaplama sırasında filmin içerisinde oluşan β -FeSi₂ dışındaki diğer oluşumlar ve safsızlıkların yapı dışına atılması ile meydana geldiği söylenebilir. Aynı zamanda bu safsızlıklar tane sınırlarına doğru atılarak tane duvarlarının açılmasına ve filmlerin yüzeyinde mikro çatlaklara neden olabileceği düşünülmektedir.



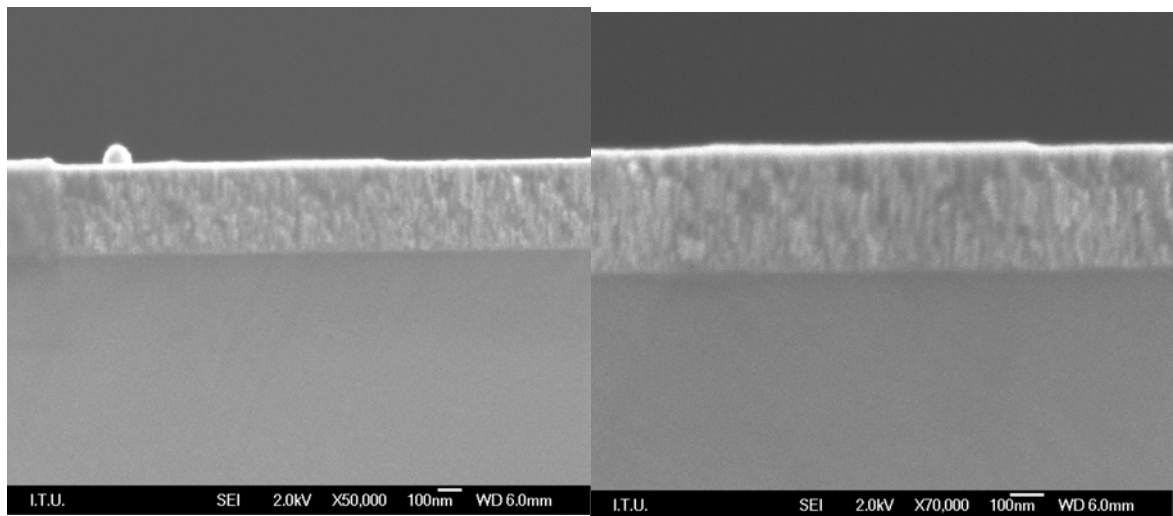
Şekil 4.18 p-Si(100) altlık üzerinde büyütülen β -FeSi₂ filmlerin SEM görüntüleri a) kaplamadan hemen sonra b) kaplamadan yaklaşık 1 sene sonra c) tane sınırlarının d) filmin yüzeyindeki dropletlerin büyütülmüş fotoğrafları

4.4.2 β -FeSi₂ filmlerin FE-SEM Görüntüleri

Şekil 4.19 a ve b' de β -FeSi₂ filmlerin sırasıyla x10000 ve x40000 büyütmedeki FE-SEM yüzey görüntüleri yer almaktadır. Filmlerin yüzeyinde görüldüğü gibi elips şeklinde ve yaklaşık 100 nm büyüklüğündeki β -FeSi₂ nano-adacıklar görüldü. β -FeSi₂ nanoadacıkların meydana geldiği benzer görüntüler daha önce literatürdeki bir çok çalışmada rapor edilmiştir (K. Okajima, 2001), (M. Haraguchi, 2003), (A. Yamamoto, 2004). Şekil 4.20 a ve b'de dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniği ile oda sıcaklığında büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin ara kesit görüntüleri farklı büyütmelerde görülmektedir. Filmin arakesit görüntülerinden kolunsal bir yapı oluştuğu görülmektedir.



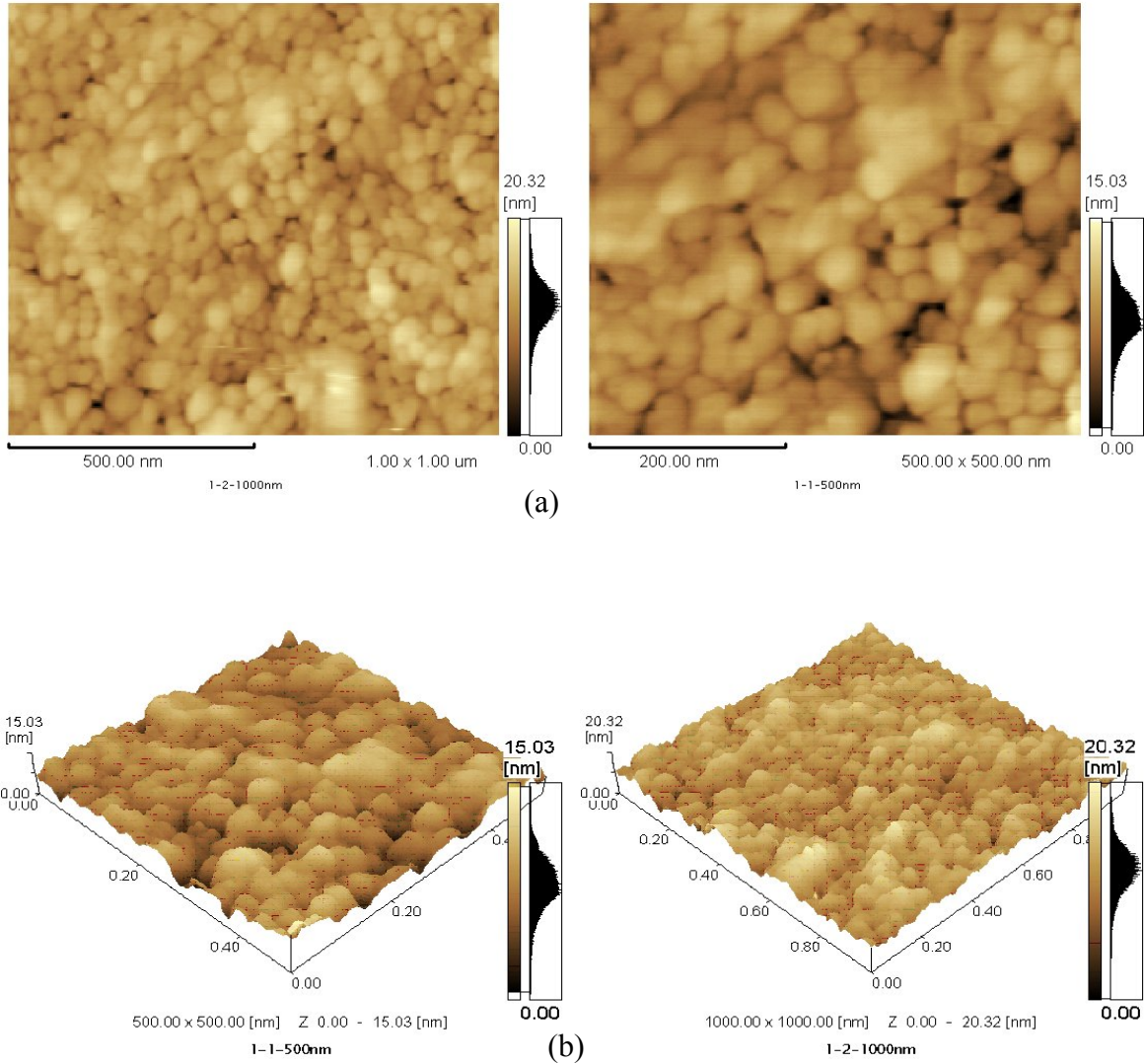
Şekil 4.19 β -FeSi₂ filmlerin FE-SEM yüzey görüntüleri a) x10000 b)x40000 büyütme



Şekil 4.20 β -FeSi₂ filmlerin FE-SEM arakesit görüntüleri a) x50000 b) x70000 büyütme

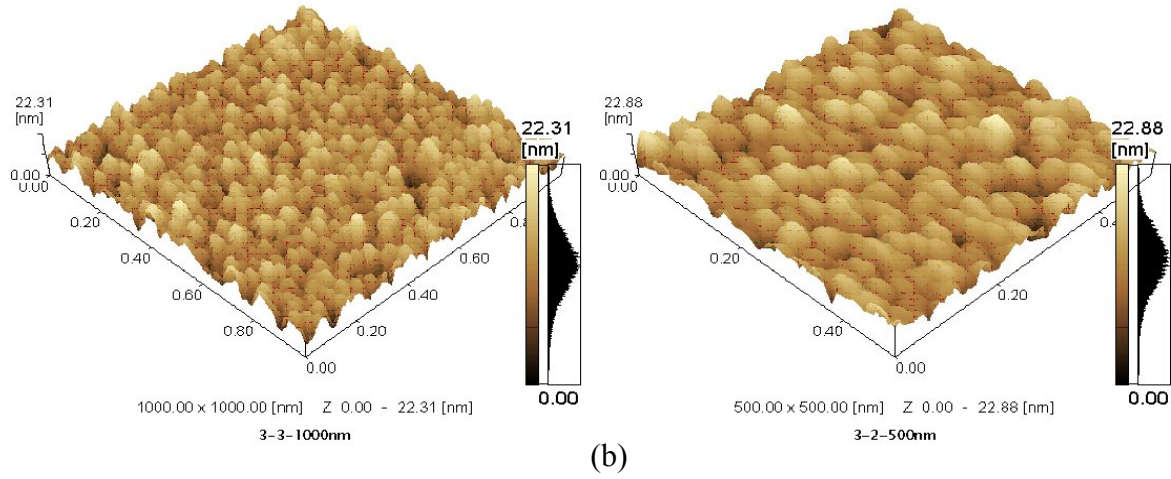
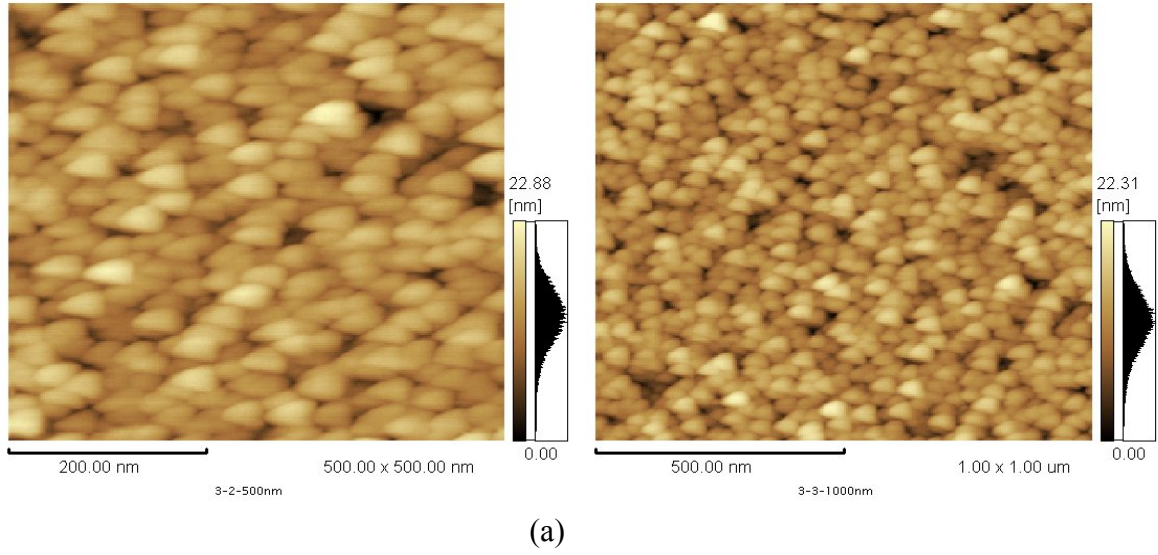
4.4.3 β -FeSi₂ filmlerin AFM Görüntüleri ve Yüzey Topografyası

Şekil 4.21 a ve b’de (100) yönelimli n-tipi Si altlıklar üzerine büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin yüzey topografyalarını AFM görüntülerinden incelendi ve tane boyutları ve yönelimleri ile birlikte filmlerin yüzey pürüzlülükleri de tespit edildi. Bu örneğin AFM görüntülerinden farklı boyutlarda β -FeSi₂ tanelerin oluştuğu (30 nm ile 100 nm aralığında) ve bu filmlerin yüzey pürüzlülükleri 1,85 nm civarında olduğu RMS (Root Mean Square) ölçümleri ile tespit edildi.



Şekil 4.21 n-Si(100) altlıklar üzerine hazırlanmış β -FeSi₂ filmlerin farklı büyütmelerdeki AFM fotoğrafı görüntüleri a) iki boyutlu görüntüsü b) üç boyutlu görüntüsü

Şekil 4.22 a ve b’ de p-tipi Si (111) yönelimli altlıklar üzerinde büyütülen β -FeSi₂ filmlerin AFM görüntüleri yer almaktadır. Bu örneğin yüzey pürüzlülüğü RMS ile 2,1 nm civarında ölçüldü ve yüzeyin daha düz ve hemen hemen aynı boyuttaki tanelerden (~50 nm) meydana geldiği gözlemlendi.

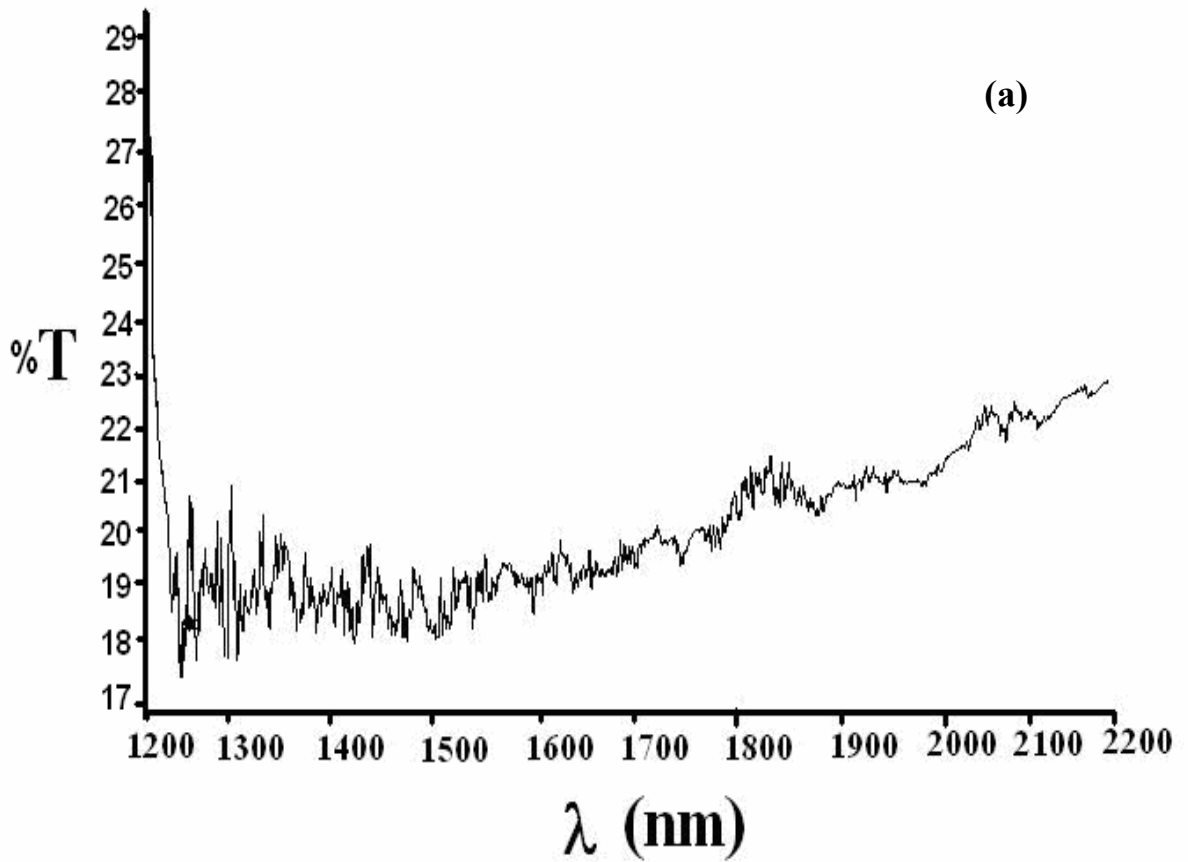


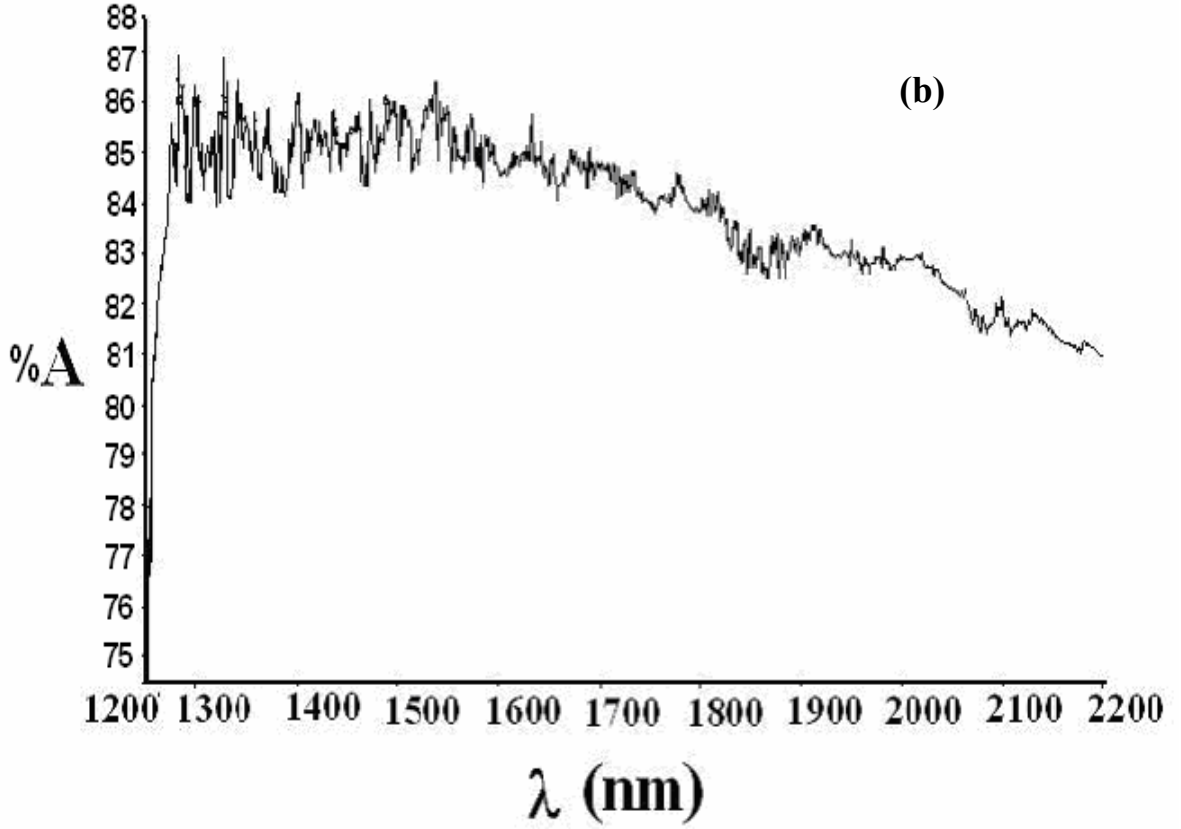
Şekil 4.22 p-Si(111) altlıklar üzerine hazırlanmış β -FeSi₂ filmlerin farklı büyütmelerdeki AFM fotoğrafı görüntüleri a) iki boyutlu görüntüsü b) üç boyutlu görüntüsü

Bütün örneklerin AFM görüntüleri incelendiğinde (111) yönelimli altlıklar üzerine büyütülen filmlerin yüzeylerinin (100) yönelimli altlıklar üzerinde elde edilen filmlere göre daha düzgün bir yüzeye sahip olduğu ve oluşan tane boyutları ve yönelimlerinin altlığa bağlı değişim gösterdiği görülmüştür. Aynı zamanda kaplama koşullarının da üretilen β -FeSi₂ filmlerin yüzey özelliklerine direkt bağlı olduğu yapılan mikroskobik çalışmalarda anlaşılmıştır. Literatürde yapılan birçok çalışmada silisyum altlıklara büyütülen β -FeSi₂ filmlerin yüzey özelliklerinin kaplama koşullarına ve altlığa direkt bağlı olduğu rapor edilmiştir ve bizim sonuçlarımızda bunlarla uyum içindedir (A. Yamamoto,2004), (Q. Wan, 2003), (T. Suemasu, 2001), (M. Tanaka, 2003).

4.5 β -FeSi₂ filmlerin Optik Özellikleri ve Yasak Bant Aralığının Hesaplanması

Kaplama sürelerine bağlı olarak çeşitli kalınlıklarda dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma metodu ile oda sıcaklığında n-Si(100) ve p-Si(111) altlıklar üzerine hazırlanan β -FeSi₂ filmlerin optik özelliklerinin incelenmesi için optiksel geçirgenlik spektrumları ölçümleri 1–2 μ m aralığında Perkin Elmer Spektrum One FT-IR cihazı ile oda sıcaklığında alınmıştır. Optiksel soğurma spektrumları da 0.6-1eV foton enerji aralığında yine bu cihaz yardımı ile belirlendi. Şekil 4.23 a ve b’de β -FeSi₂ filme ait bir optik geçirgenlik ve soğurma spektrumu görülmektedir. β -FeSi₂ filmler için alınan bütün optiksel geçirgenlik ve soğurma grafikleri benzer çıkmıştır. β -FeSi₂ filmin optiksel geçirgenlik spektrumu incelendiğinde uzak kızılötesi (Far-Infrared) bölgeye doğru geçirgenliğin yüksek olduğu ve yakın kızılötesi (near –Infrared) bölgede ise geçirgenliğin gittikçe azaldığı gözlemlendi. Aynı şekilde optiksel soğurma spektrumunda ise yine yakın kızılötesi bölgede soğurmanın maksimum olduğu görülmektedir.



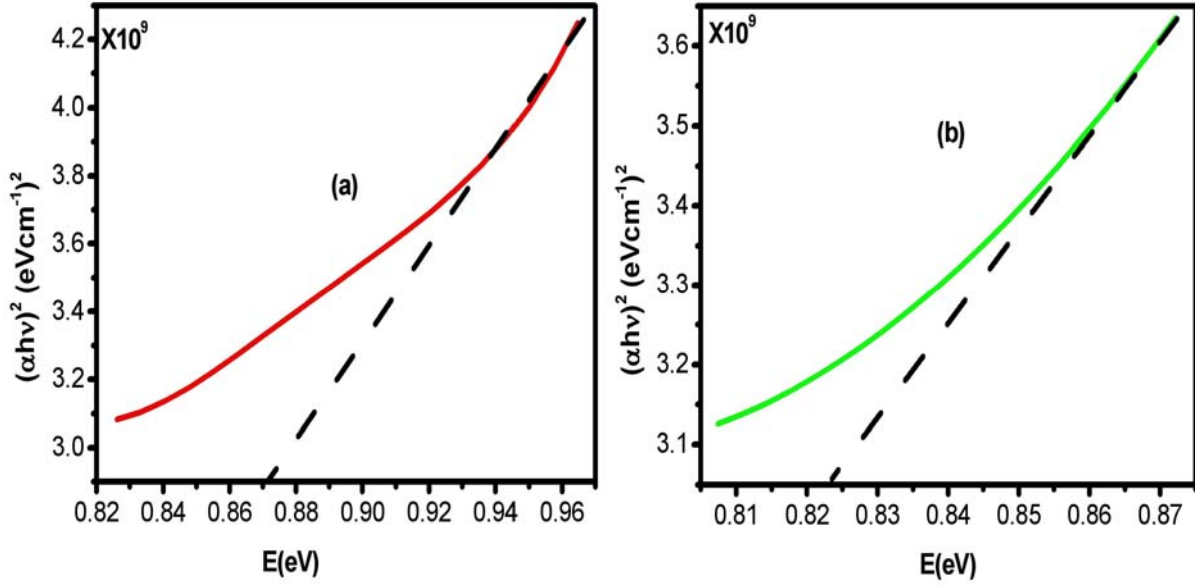


Şekil 4.23 β -FeSi₂ filmlerin optiksel a) geçirgenlik b) soğurma spektrumları

İki spektrumda da yakın kızılötesi bölgede geçirgenlikteki azalmanın ve soğurmadaki artmanın durmaya başladığı bölge 1400 nm ile 1500 nm (0,89 eV ile 0,82 eV) aralığındadır ve bu aralıktan sonra spektrum daha stabildir. Bu bölgedeki foton etkileşmelerinin maksimum olduğu sonucunu çıkarabiliriz. Bu bölgenin enerji aralığı da β -FeSi₂ yarıiletkeninin yasak bant aralığının bulunduğu bölge olması filmin optik özelliklerinin literatürle uyum içerisinde olduğunu göstermektedir.

Yarıiletken β -FeSi₂ filmlerin yasak bant aralıklarının belirlenmesi için oda sıcaklığında geçirgenlik ve soğurma spektrumlarından α soğurma katsayısı hesaplandı ve bu değerden de $(\alpha h\nu)^2$ optiksel soğurma karakteristiği ve foton enerjisi ($h\nu$) belirlendi. Şekil 4.23 a ve b' de $(\alpha h\nu)^2$ optik soğurma katsayısına karşı ($h\nu$) foton enerjisinin sırasıyla n-tipi ve p-tipi Si altlıklar üzerine büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin grafiği verilmiştir. Bu grafiklere çizilen teğetin enerji ekseninde kestiği noktada elde edilen değer bu yarıiletkenin optiksel yasak enerji bant aralığını gösterir. β -FeSi₂ filmlerin yasak bant aralığı 0,824 eV ve 0,867 eV olarak bulundu ve

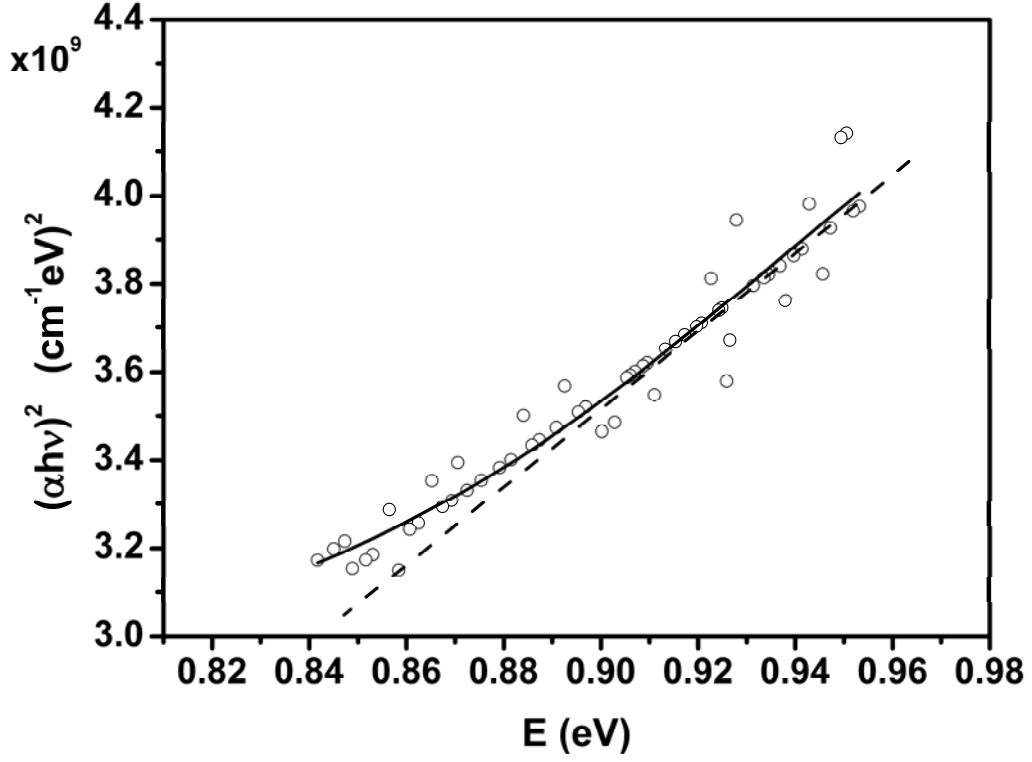
direkt bant yapısına sahip olduğu belirlendi (B.Tatar, 2006). Kullanılan Si altlıklara bağlı olarak β -FeSi₂ filmlerin yasak bant değerlerinde bir miktar değiştiği gözlemlendi. Literatürde yapılan birçok deneysel ve teorik çalışmada β -FeSi₂ yarıiletkeninin optiksel yasak bant bölgesi 0,82- 0,9 eV aralığında tespit edilmiştir (M.C. Bost, 1985), (Z. Yang, 1995), (D. Leong, 1997), (T. Suemasu, 2000), (N.G. Galkin, 2002).



Şekil 4.24 β -FeSi₂ filmlerin optiksel yasak bant aralığı için çizilen $(\alpha h\nu)^2 \propto (E)$ grafiği a) n-Si(100) altlık b) p-Si(111) altlık üzerinde büyütülen filmler için

Daha önceki kısımlarda β -FeSi₂ filmlerin farklı kalınlıklarda n-tipi ve p-tipi Si altlıklar üzerine oda sıcaklığında dengelenmemiş manyetik alanda nasıl üretildiğinin anlatmıştık. Toplam 6 farklı kalınlıkta β -FeSi₂ film ürettik ve bunların yapısal ve yüzeysel özellikleri incelendi. Bu filmlerin yapılan optiksel incelemeleri ve diğer özellikleri incelendiğinde en iyi özellik gösteren filmlerin 6 dk kaplama süresinde n-Si(100) altlık üzerine üretilen filmler olduğu görüldü. Bunun için hazırlanan β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin özellikleri ve sentezi ile ilgili daha detaylı bir çalışma yaptık ve Thin Solid Films dergisinde 2007 yılında yayınlandı. Bu çalışmadaki β -FeSi₂ filmin direkt bant bölgesine sahip olduğu ve optik yasak bant aralığını 0.85 eV olarak bulunduğunu rapor ettik. Şekil 4.25' de bu çalışmada hazırlanan β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin bant kıyı bölgesi içerisindeki soğurma katsayılarının foton

enerjisi ile nasıl değiştiğini gösteren grafik bulunmaktadır. Grafiğin teğetinin foton enerji eksenini kestiği noktanın 0,85 eV olduğu açıkça görülmektedir.



Şekil 4.25 β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin bant kıyı bölgesi içerisindeki soğurma katsayılarının foton enerjisi ile değişimi

4.6 β -FeSi₂ Filmlerin Elektriksel Özellikleri

4.6.1 β -FeSi₂ Filmlerin Yüzey Özdirenç ve İletkenlik özellikleri

Farklı kalınlıklarda hazırlanmış β -FeSi₂ filmlerin özdirençlerinin ve iletkenliklerinin belirlenmesi için 4-nokta kontak yöntemi kullanıldı. β -FeSi₂ filmlerin R_s yüzey dirençleri ve ρ elektriksel özdirençleri filmlerin kalınlıklarına bağlı olarak hesaplandı. Kısım 3.4.2' de bu hesaplamalar ayrıntılı olarak nasıl yapıldığı anlatılmıştır. Çizelge 4.4 ve 4.5' de n-Si(100) ve p-Si(111) altlıklar üzerine büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin farklı kalınlıklar için direnç ve iletkenlik değerleri verilmiştir.

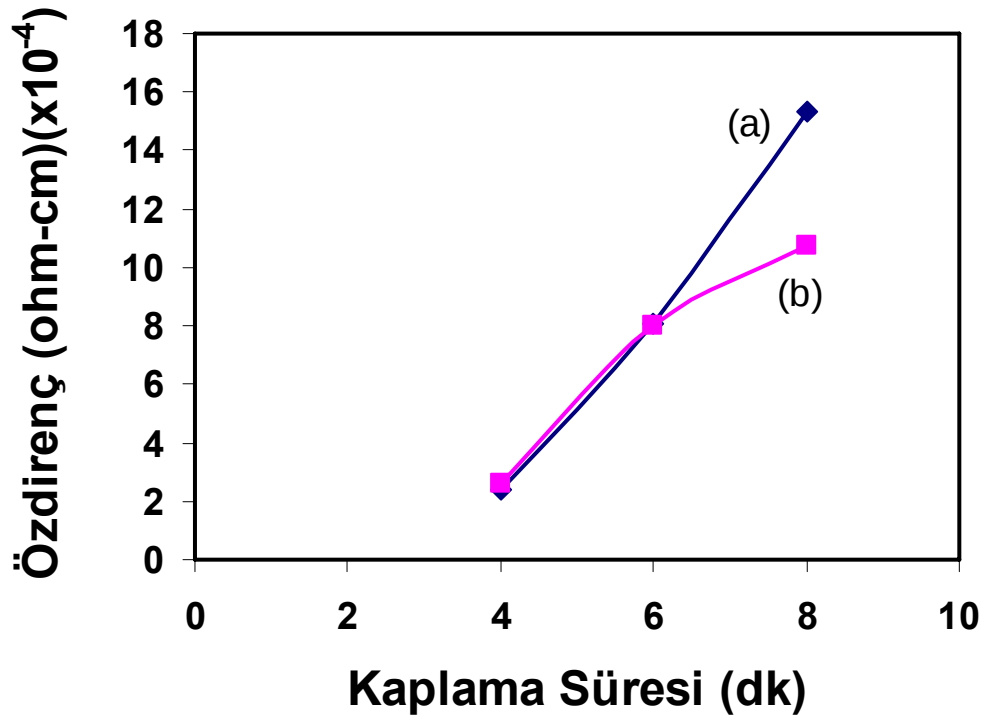
β -FeSi ₂ /n-Si(100)	R_s (Ω)	K_a	ρ (Ω -cm)	σ (Ω -cm) ⁻¹
t=4dk	15,878	3,308	2,38.10 ⁻⁴	4199
t=6dk	26,99	3,850	8,1.10 ⁻⁴	1236
t=8dk	30,56	5,162	15,3.10 ⁻⁴	654
t=30dk	3,41	3,589	3,41.10 ⁻⁴	2932

Çizelge 4.4 β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemine ait bazı elektriksel parametreler

β -FeSi ₂ /p-Si(111)	R_s (Ω)	K_a	ρ (Ω -cm)	σ (Ω -cm) ⁻¹
t=4dk	17,22	3,845	2,58.10 ⁻⁴	3869
t=6dk	26,78	3,87	8,03.10 ⁻⁴	1245
t=8dk	21,5	4,072	10,75.10 ⁻⁴	930
t=30dk	3	3,8	3.10 ⁻⁴	3227

Çizelge 4.5 β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemine ait bazı elektriksel parametreler

Şekil 4.26 a ve b' de β -FeSi₂/n-Si(100) ve β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemlerin öz dirençlerinin kaplama süresi (film kalınlığı) ile değişimi görülüyor. Görüldüğü gibi hem n-tipi Si(100) hemde p-tipi Si(111) altlıklar üzerine büyütülmüş β -FeSi₂ filmlerin kalınlığı artıkça öz dirençleri artıyor ve buna bağlı olarak iletkenlikleri azalıyor. Çizelge 4.4 ve 4.5' de 30 dk kaplama kalınlığında yukarıda söylediğimiz aksine bir durum oluşmuştur. Bu durum 30 dk kaplama kalınlıklı filmlerdeki Fe film kalınlığının diğer β -FeSi₂ filmlerden daha fazla olduğundan kaynaklandığı şeklinde açıklanabilir.



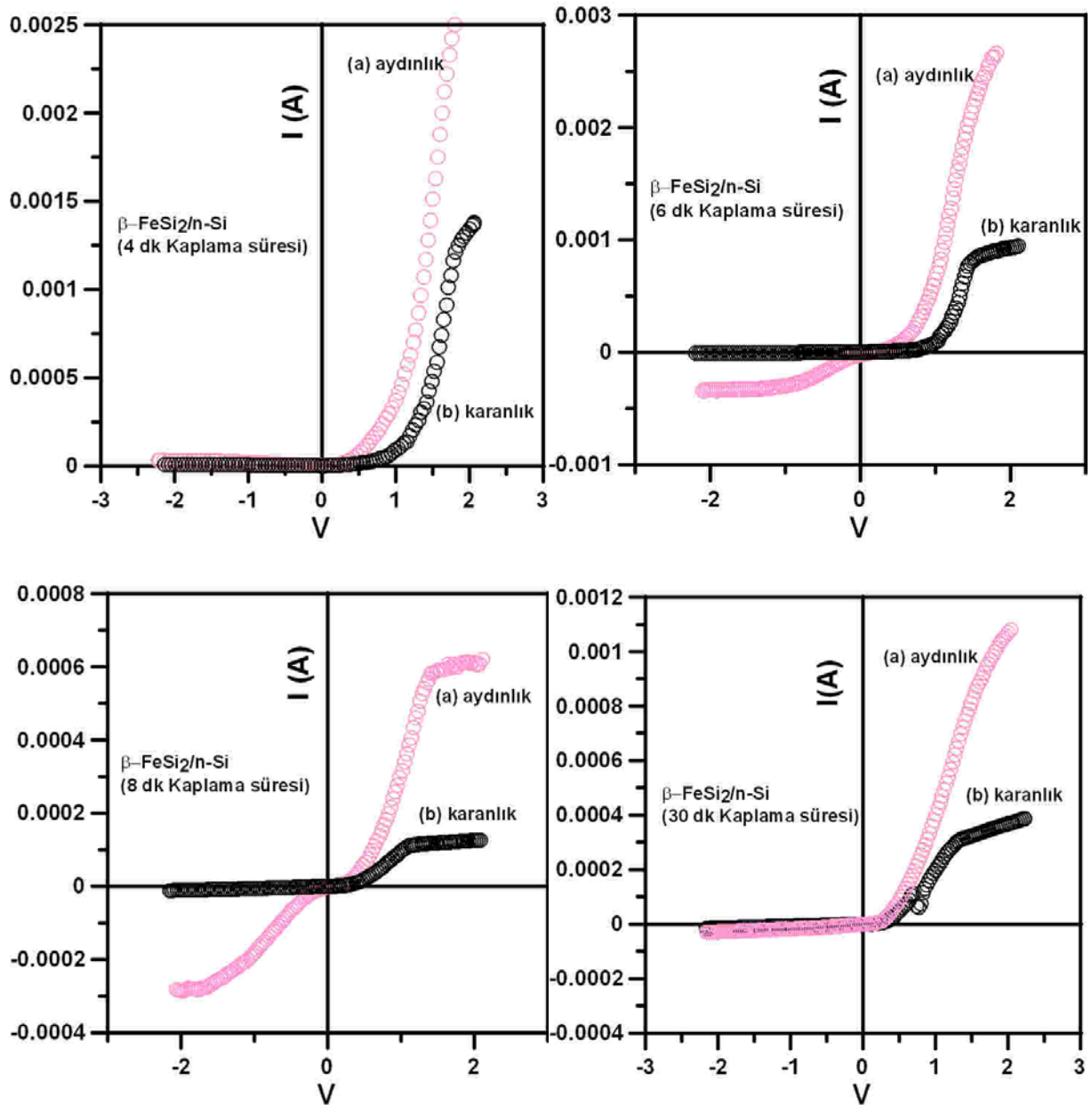
Şekil 4.26 β -FeSi₂ filmlerin öz dirençlerinin kalınlıkla değişimi a) n-Si(100) altlık b) p-Si(111) altlık üzerinde büyütülen filmler için

4.6.2 β -FeSi₂ Filmlerin İletkenlik Tipleri

Oda sıcaklığında p-tipi ve n-tipi silisyum altlıklar üzerine dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniği ile Fe atomlarının kaplanması ile oluşturulan farklı kalınlıklardaki β -FeSi₂ filmlerle iki farklı heteroeklem elde edilir. Bu metotla elde edilen β -FeSi₂ filmlerin TEMK yöntemi ile yapılan iletkenlik tipi ölçümlerinde bu filmlerin hepsi p-tipi özellik göstermiştir. Dolayısıyla oluşan heteroeklemler p- β -FeSi₂/n-Si(100) ve p- β -FeSi₂/p-Si(111) olmak üzere p-n ve p-p heteroeklemlerdir. Bütün kalınlıklarda β -FeSi₂ filmler p-tipi özellik göstermektedir.

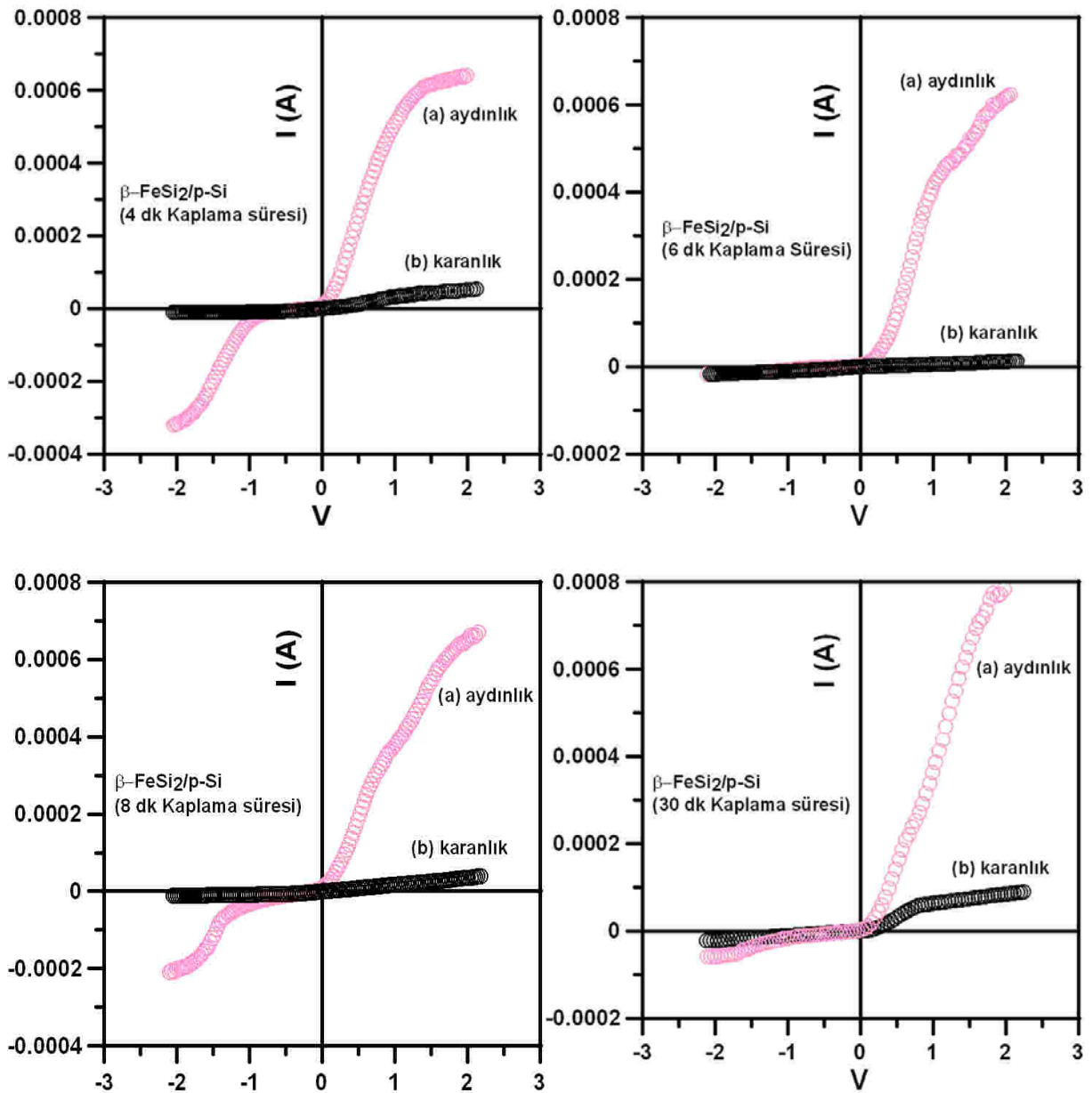
4.6.3 β -FeSi₂ Filmlerin Akım-Gerilim Karakteristikleri

Manyetik alanda sıçratma tekniği ile oda sıcaklığında üretilmiş p- β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin üzerine omik kontaklar hazırlanarak karanlık ve aydınlık akım-gerilim karakteristikleri ölçüldü. Şekil 4.27’ de farklı kalınlıkta hazırlanmış bu eklemlerin karanlık ve aydınlıktaki I-V karakteristikleri verilmiştir. Karanlıkta yapılan I-V incelemeleri sonucunda bu eklemlerin hepsi doğrultma özelliğine sahip ve diyod karakteristiği göstermişlerdir. Aynı zamanda bu eklemlerin hepsinde ışığa duyarlılık tespit edilmiştir.

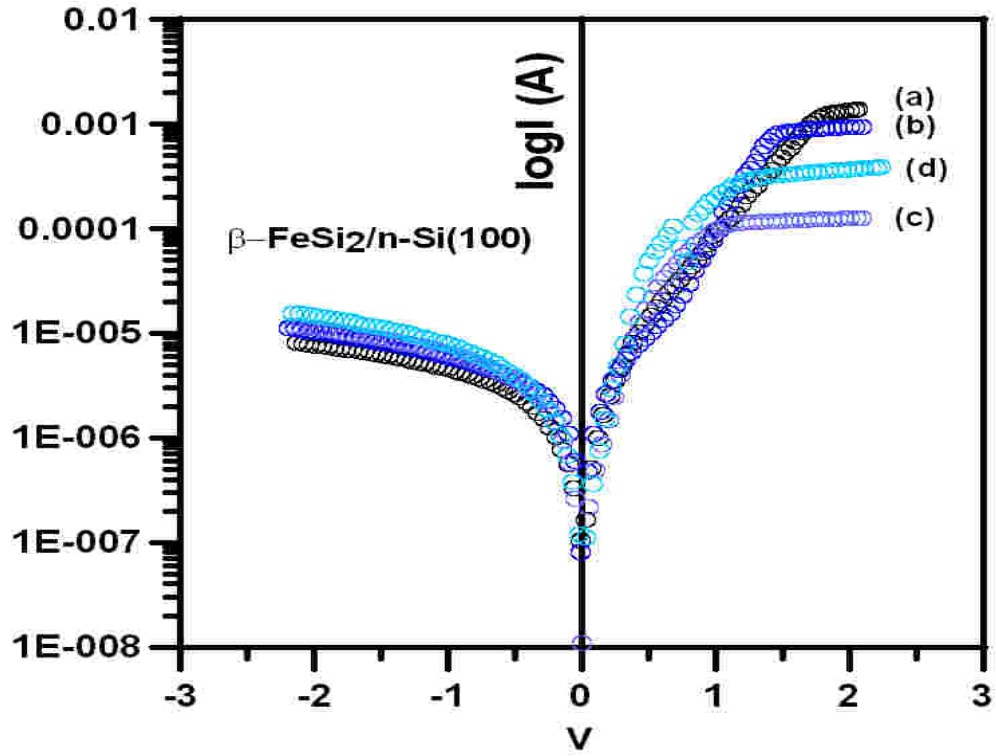


Şekil 4.27 Farklı kalınlık sürelerinde büyütülmüş β -FeSi₂/n-Si heteroeklemlerin I-V karakteristikleri a) aydınlıkta b) karanlıkta

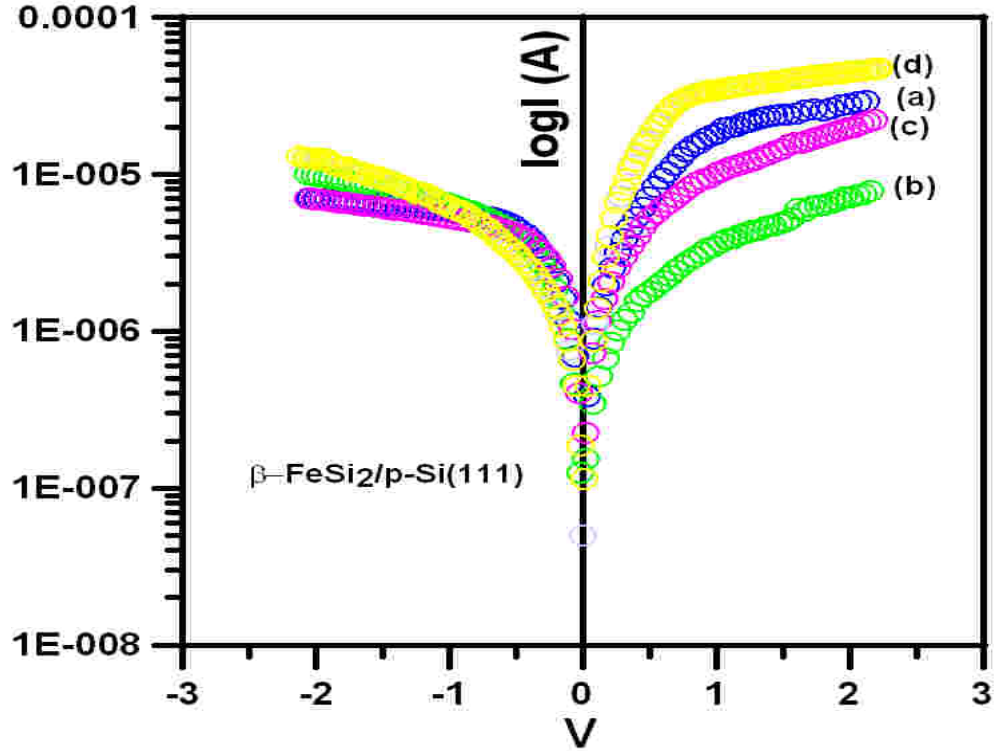
Şekil 4.28’de farklı kalınlıkta hazırlanan p- β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemlerin karanlık ve aydınlıktaki akım-gerilim karakteristikleri verilmiştir. Bu eklemlerin karanlıktaki doğrultma özellikleri n-Si üzerine büyütülmüş p-n heteroeklemler kadar iyi özellikte olmadığı fakat ışığa duyarlılığı yüksek olduğu gözlenmiştir. Karanlıkta yapılan I-V incelemeleri sonucu bu eklemlerin iyi ve ideal diyod özelliği göstermemiştir. Aydınlıktaki I-V karakteristiklerinde ise burada görülen p-p heteroeklemlerden 4 dk kaplama süresine sahip eklemler en iyi ters yönde ışığa duyarlılık göstermiştir.



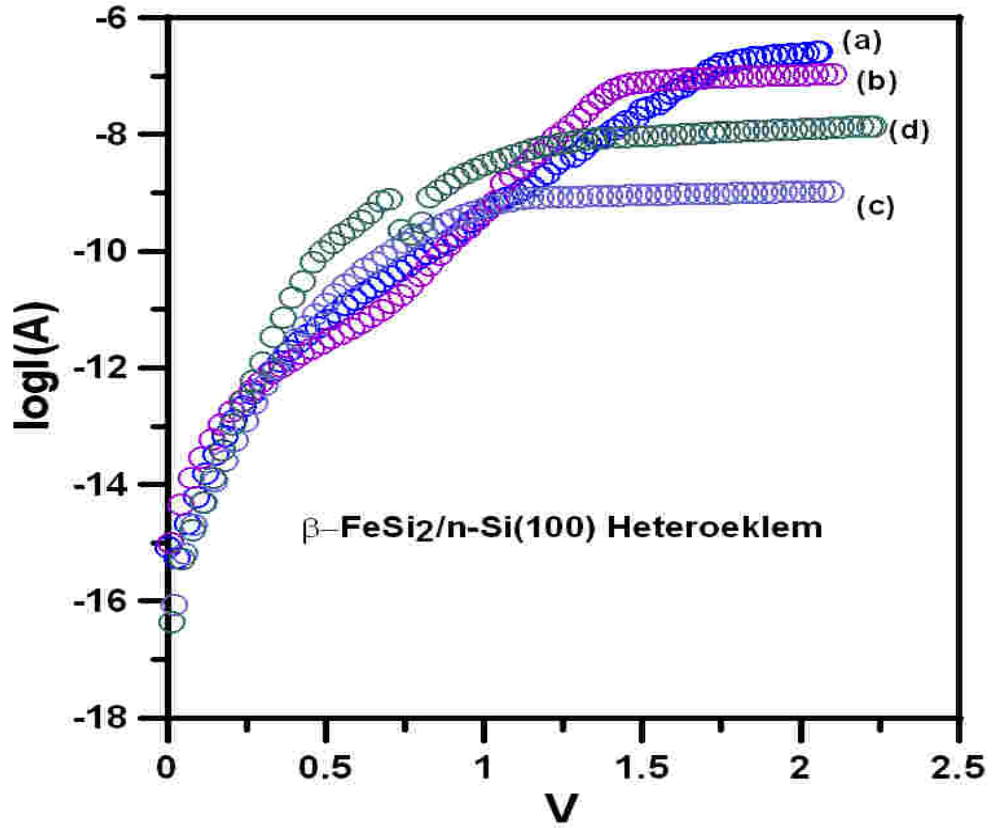
Şekil 4.28 Farklı kalınlık sürelerinde büyütülmüş β -FeSi₂/p-Si heteroeklemlerin I-V karakteristikleri a) aydınlıkta b) karanlıkta



Şekil 4.29 Farklı kalınlık sürelerinde büyütülmüş $\beta\text{-FeSi}_2/\text{n-Si}$ heteroeklemlerin karanlıkta ters ve düz yön I-V karakteristiği a) 4dk b) 6dk c) 8dk ve d) 30dk kaplama süreleri



Şekil 4.30 Farklı kalınlık sürelerinde büyütülmüş $\beta\text{-FeSi}_2/\text{p-Si}$ heteroeklemlerin karanlıkta ters ve düz yön I-V karakteristiği a) 4dk b) 6dk c) 8dk ve d) 30dk kaplama süreleri

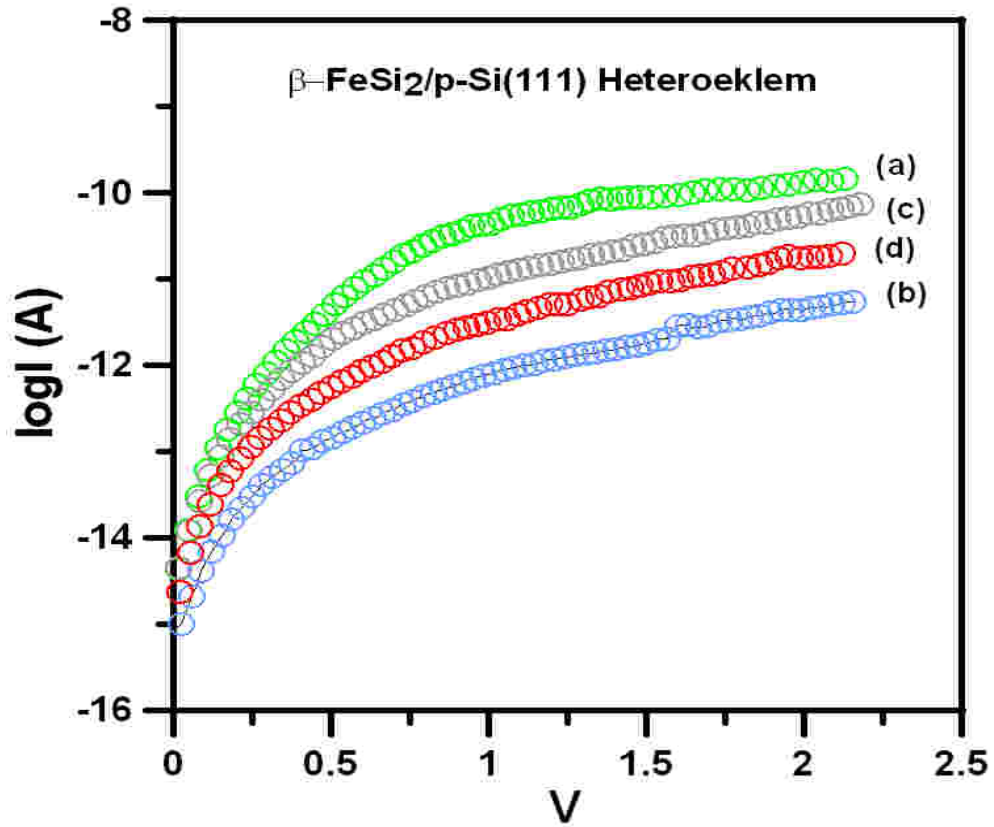


Şekil 4.31 β -FeSi₂/n-Si heteroeklemlerin karanlıkta doğru yön gerilimindeki I-V karakteristiği a) 4dk b) 6dk c) 8dk ve d) 30dk kaplama süreleri

Şekil 4.31' de verilen grafikte p- β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin doğru yön LogI-V grafikleri yer almaktadır. Bu grafiğin termoiyonik emisyonun geçerli olduğu (uygulanan gerilim sıfıra giderken) kısımdan doğrusal bir fit yaparak ve bu fitin eğimi ve akım eksenini kestiği noktadan alınan değerler yardımı ile bölüm 3.4.4' de anlatıldığı şekilde diyot parametreleri hesaplandı. Bu eklemlerin ϕ_B bariyer yükseklikleri ve n ideallik faktörleri gibi parametreleri çizelge 4.6' da verildi ve farklı kalınlıklar için bu diyot parametrelerinin değiştiği gözlemlendi.

β -FeSi ₂ /n-Si(100)	t=4dk	t=6dk	t=8dk	t=30dk
I_0 (doyma akımı, A)	$5,98 \times 10^{-8}$	$1,121 \times 10^{-7}$	$3,942 \cdot 10^{-8}$	$3,437 \times 10^{-8}$
n (ideallik faktörü)	1,5	1,44	1,36	1,3
Φ_B (bariyer yüksekliği, eV)	0,6	0,75	0,617	0,621

Çizelge 4.6 β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemine ait bazı diyot parametreleri

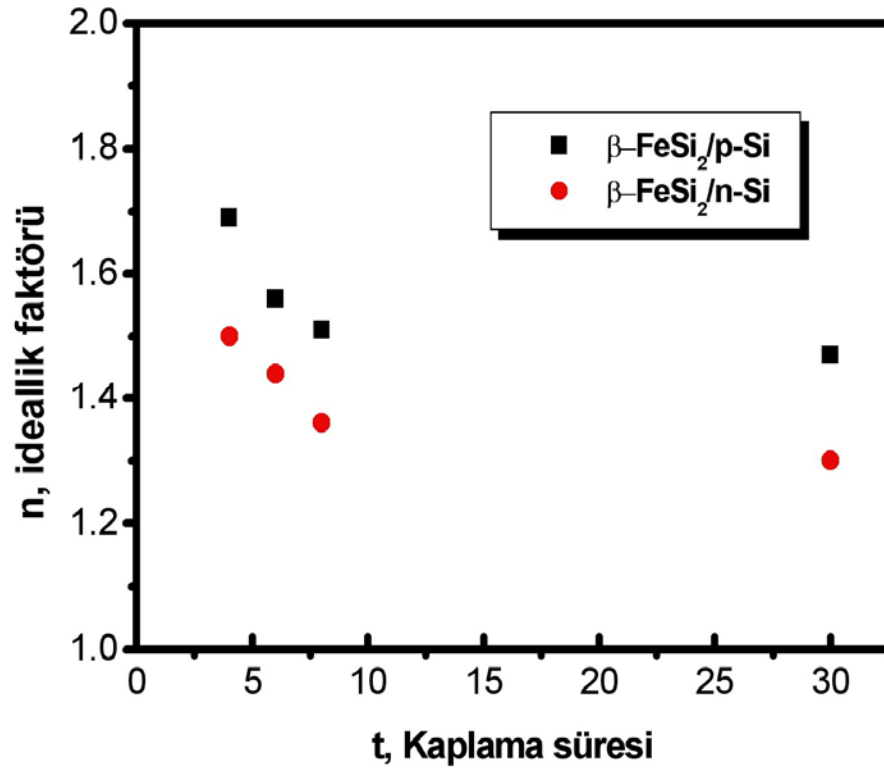


Şekil 4.32 β -FeSi₂/p-Si heteroeklemlerin karanlıkta doğru yön gerilimindeki I-V karakteristiği a) 4dk b) 6dk c) 8dk ve d) 30dk kaplama süreleri

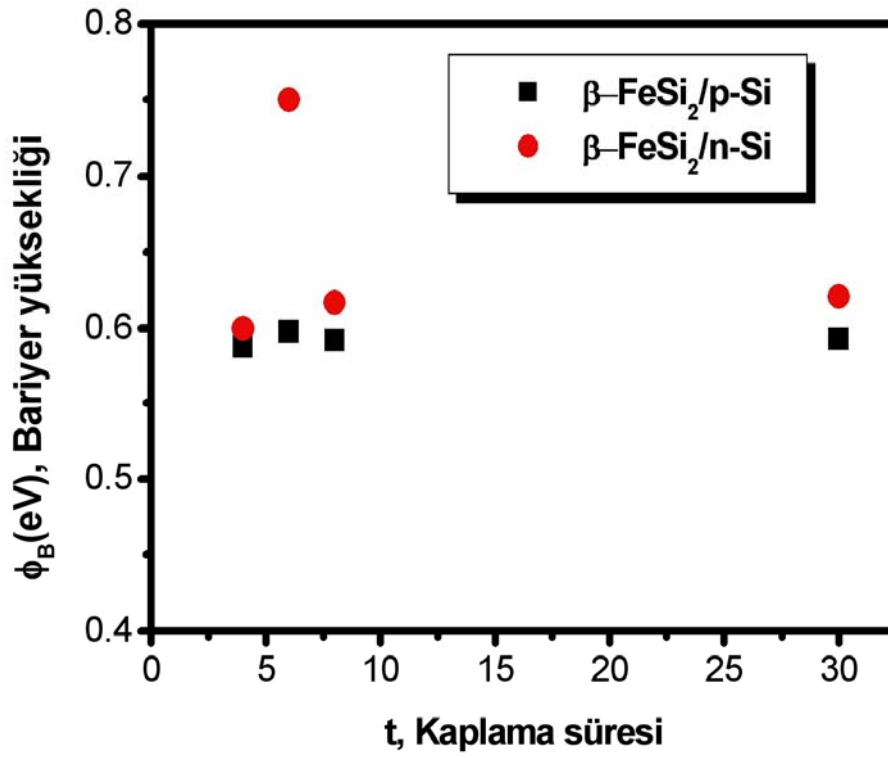
Şekil 4.32' de verilen grafikte p- β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemlerin doğru yön LogI-V grafikleri yer almaktadır. Bu grafikten hesaplanan çeşitli diyot parametreleri (ϕ_B bariyer yükseklikleri ve n ideallik faktörleri gibi) çizelge 4.7' de verildi. Eklemlerin ideallik faktörleri filmlerin kaplama kalınlığı ile azaldığı görülmektedir. p- β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemlerin bariyer yüksekliği ~0,59 eV civarında hesaplanmıştır. p- β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin bariyer yüksekliği ise ~0,63 eV civarında hesaplandı.

β -FeSi ₂ /p-Si(111)	t=4dk	t=6dk	t=8dk	t=30dk
I_0 (doyma akımı, A)	$5,98 \times 10^{-8}$	$1,121 \times 10^{-7}$	$3,942 \cdot 10^{-8}$	$3,437 \times 10^{-8}$
n (ideallik faktörü)	1,69	1,56	1,5	1,47
Φ_B (bariyer yüksekliği, eV)	0,588	0,598	0,592	0,593

Çizelge 4.7 β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemine ait bazı diyot parametreleri

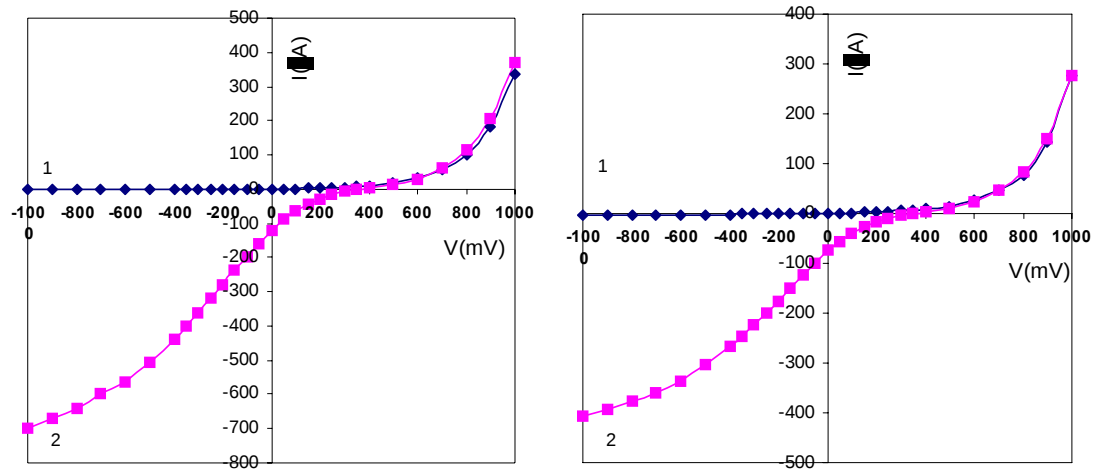


Şekil 4.33a β -FeSi₂ filmden üretilmiş çeşitli kalınlıktaki heteroeklemlerin ideallik faktörünün kalınlıkla değişimi



Şekil 4.33b β -FeSi₂ filmden üretilmiş çeşitli kalınlıktaki heteroeklemlerin bariyer yüksekliğinin kalınlıkla değişimi

Şekil 4.34 a ve b’de RF güç kaynağı ile üretilen p- β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin her iki tarafından yapılan aydınlatma neticesinde elde edilen I-V karakteristikleri görülmektedir. Yapılan ölçümler neticesinde eklemin iki tarafı da yüksek doğrultma özelliği ve ışığa duyarlılık göstermişlerdir. Bu eklemin fotovoltaiik parametreleri de $V_{oc}=354\text{mV}$, $I_{sc}=120\mu\text{A}$ ve $ff=0,18$ olarak hesaplanmıştır. Bu heteroeklemlerin başka bir dikkat çeken özelliği ve doğrultma katsayısının ($I_{doğru}/I_{ters} = 120$) ve ters yöndeki aydınlıkdaki akımın, karanlıkdaki akıma oranının (yani fotoduyarlılığın) yüksek olmasıdır ($I_{aydınlık}/I_{karanlık} = 250$). Bu özellik p- β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemleri fotodiyod gibi kullanılmasına imkân sağlar. Sonuç olarak bu çalışmada incelenen eklemler arasında en yüksek fotovoltaiik parametreler çizelge 4.8’de görüleceği gibi 6 dk kaplama süresinde üretilen p- β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerden elde edilmiştir.



Şekil 4.34 β -FeSi₂/n-Si heteroeklemlerin I-V karakteristikleri a) β -FeSi₂film tarafından b) Si altlık tarafından 1-aydınlıkta 2-karanlıkta

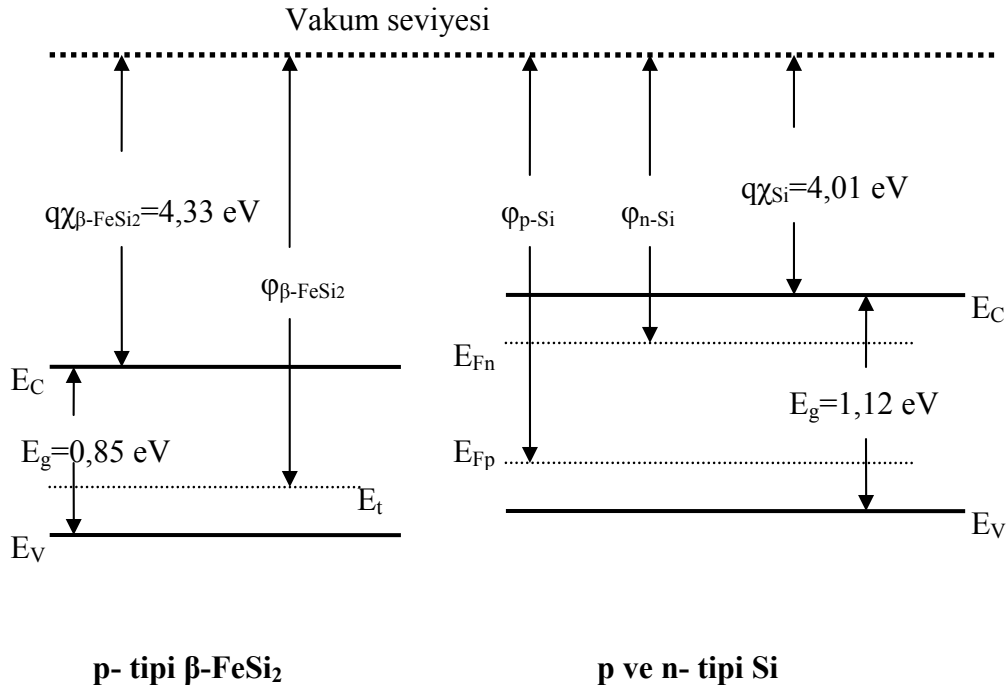
Eklemin Türü	Fotovoltaiik parametreleri					
	3 dk kaplama süresi		6 dk kaplama süresi		9 dk kaplama süresi	
	$V_{oc}(\text{mV})$	$I_{sc}(\mu\text{A})$	$V_{oc}(\text{mV})$	$I_{sc}(\mu\text{A})$	$V_{oc}(\text{mV})$	$I_{sc}(\mu\text{A})$
β -FeSi ₂ /n-Si (100)	80	2,9	354	120	252	36,5
β -FeSi ₂ /p-Si (111)	0	0	58	5,2	20	0,4

Çizelge 4.8a Silisyum üzerinde elde edilmiş farklı tür eklemlere ait fotovoltaiik parametreler (RF güç kaynağı kullanılarak büyütülen)

Eklemin Türü	Fotovoltaik parametreleri					
	4 dk kaplama süresi		6 dk kaplama süresi		8 dk kaplama süresi	
	$V_{oc}(mV)$	$I_{sc}(\mu A)$	$V_{oc}(mV)$	$I_{sc}(\mu A)$	$V_{oc}(mV)$	$I_{sc}(\mu A)$
$\beta\text{-FeSi}_2/n\text{-Si (100)}$	294	19,2	322	17,5	330	40
$\beta\text{-FeSi}_2/p\text{-Si (111)}$	200	21,5	181	3,7	178	10

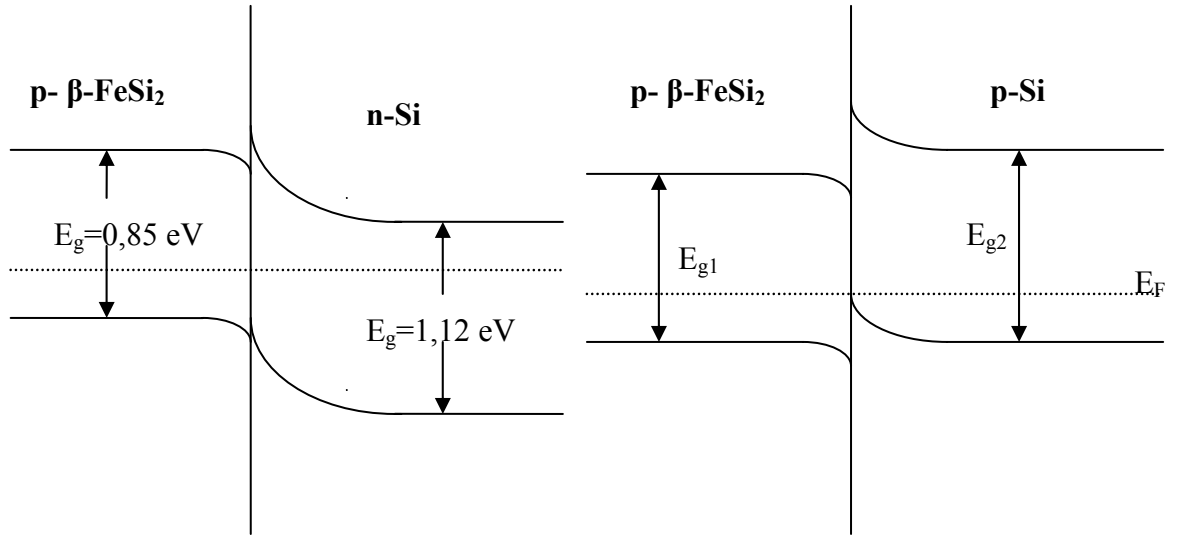
Çizelge 4.8b Silisyum üzerinde elde edilmiş farklı tür eklemlere ait fotovoltaik parametreler (DC güç kaynağı kullanılarak büyütülen)

Bu çalışmada kullanılan Si altlıkların ve üretimini gerçekleştirdiğimiz $\beta\text{-FeSi}_2$ filmlere ait enerji seviyeleri şekil 4.35’ de verilmiştir. Burada görüldüğü gibi yarıiletkenlerin elektron afiniteleri sırasıyla $\chi_{\beta\text{-FeSi}_2}=4,33$ eV ve $\chi_{\text{Si}}=4,01$ eV olup bu yarıiletkenlerin yasak bant genişlikleri ise $E_{g1}=0,85$ eV ve $E_{g2}=1,12$ eV olarak verildi. Altlık olarak kullanılan silisyum yarıiletkenlerinin öz dirençleri $\rho_{n\text{-Si}}=4,5\text{-}10$ ohm-cm ve $\rho_{p\text{-Si}}= 10,5\text{-}19$ ohm-cm civarındadır. $\beta\text{-FeSi}_2$ yarıiletkenin termodinamik çıkış işi $\Phi_{\beta\text{-FeSi}_2}= 4,97$ eV ve n-Si yarıiletkeninin çıkış işi ise $\Phi_{n\text{-Si}}=4,15$ eV değerindedir.



Şekil 4.35 $\beta\text{-FeSi}_2$ ve Si için enerji seviyelerinin şematik gösterimi

Şekil 4.35’ de enerji seviyeleri ayrı olarak verilen bu iki farklı yarıiletkenler kontak haline getirildiğinde oluşan heteroeklem termik dengeye gelene kadar eklemenden karşılıklı olarak elektron- boşluk akışı olacaktır. Şekil 4.36’ da bu iki farklı yarıiletkenin kontak haline getirilmesi ile oluşan p- β -FeSi₂/n-Si(100) ve p- β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemlerin enerji bant diyagramları şematik olarak verilmiştir. Sistem dengeye ulaştığı zaman ekleminden her iki yarıiletkenin fermi düzeyi çakışmıştır ve vakum seviyesi her yerde bant kenarlarına paralel ve süreklidir. Eklemdeki yarıiletkenlerin yasak enerji aralıkları farklı olması nedeniyle iletim bandı sınırında bir süreksizlik oluşur ve bu nedenle bir bariyer yüksekliği oluşur.

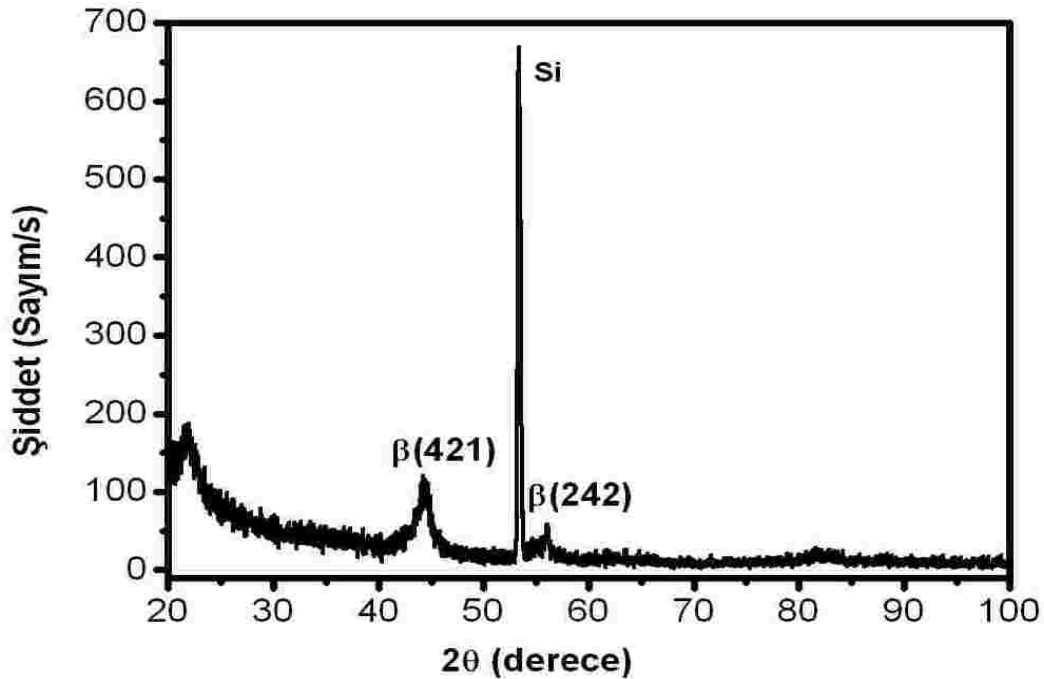


Şekil 4.36 β -FeSi₂/n-Si ve β -FeSi₂/p-Si heteroeklemlerinin enerji bant diyagramının şematik gösterimi

Şekilde enerji bant diyagramı görülen p-n heteroeklemi incelersek p-tipi β -FeSi₂ yarıiletkeninden n-tipi Si yarıiletkeni tarafına geçen elektronlar, n tipi geniş bant bölgesinden p tipi dar bant bölgesine geçen boşluklardan daha büyük bir engel yüksekliği ile karşılaşılır. Bu durumda akım n tipinden p tipi bölgeye doğru olmakla birlikte, bu iki yarıiletkenin enerji bant değerleri yeterince büyük farklılıkta olmadığından enjeksiyon akımlarını da ihmal edemeyiz. Bazı durumlarda arınma bölgesindeki jenerasyon ve rekombinasyon akımları önemli olabilir. Çoğu zaman ekleminden geniş bölgesindeki ara yüzey durumlarından ve bant bölgesinin devamsızlığından dolayı elektronların kuantum mekaniksel tünellemesinden oluşan akımda baskın olabilir. Genel olarak p- β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemler (p-p heteroeklemler) için baskın akım taşıma mekanizması bariyeri geçen termiyonik emisyon taşıyıcılarıdır.

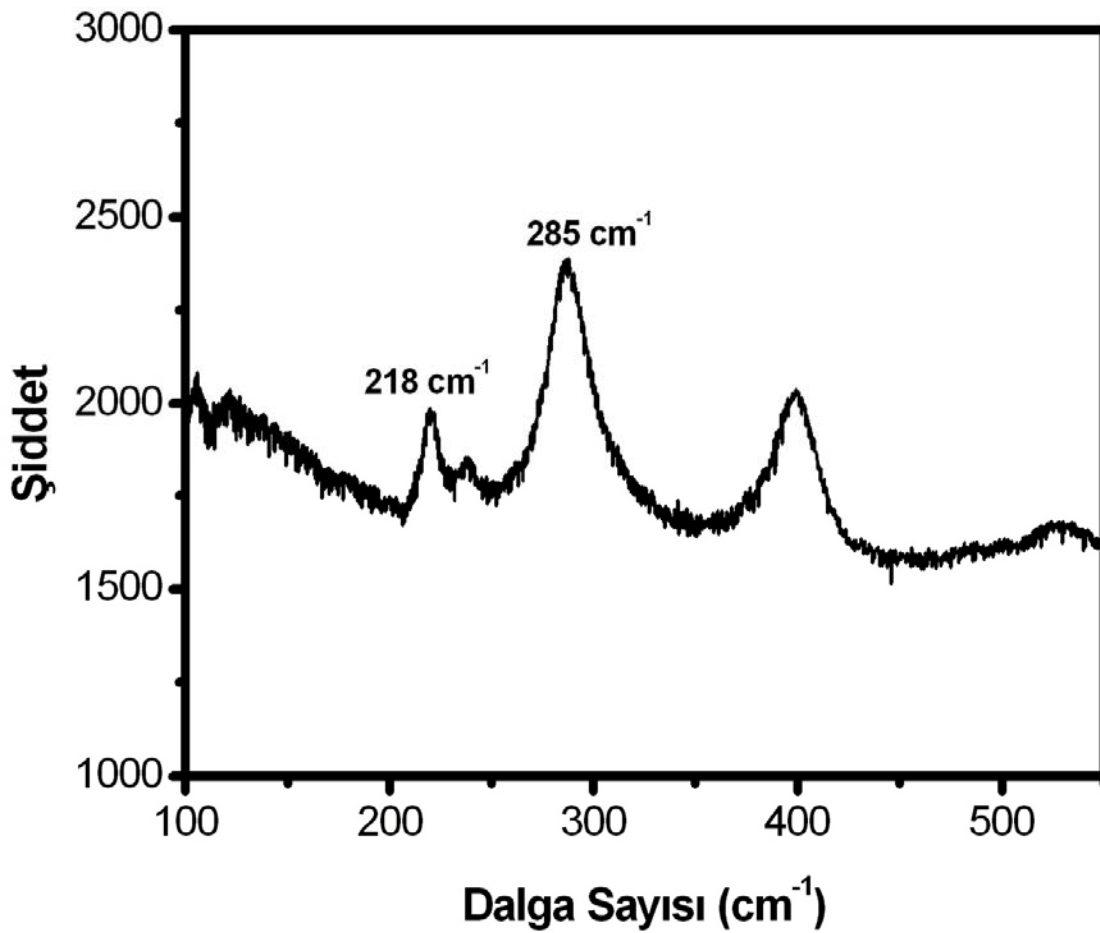
4.7 End-Hall Tipi İyon Kaynağı Kullanılarak Bombardıman Edilmiş β -FeSi₂ Filmlerin Özelliği

Bölüm 3.1’ de detaylı olarak üretim prosesi anlatılan β -FeSi₂ filmlerden bazıları bu işlemten sonra üzerinde hiçbir işlem yapmadan ayrılarak End-Hall tipi iyon kaynağı yardımıyla bombardıman edildi. Kaplama işleminden sonra End-Hall tipi iyon kaynağını kullanarak filmlere uygulanan bombardıman işleminin detaylı parametreleri çizelge 3.2’ de verilmiştir. İyon bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmlerin yapısal özelliklerini incelemek için XRD analizi ve Raman analizi kullandık. Şekil 4.37’ de kaplamadan sonra iyon bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmlerin X-ışınları kırınım deseni verilmiştir. X-ışınları kırınım deseninde ilk elde edilen filmlerle karşılaştırdığımızda bazı piklerin kaybolduğu, diğer piklerde konumlarında kayma, şiddetlerinde azalma ve piklerin genişliklerinin arttığı gözlemlendi. Kırınım desenindeki bu değişimin film üzerindeki stres ve β -FeSi₂ filmin tane boyutlarının incelmesi anlamına gelir. Bu değişim ile β -FeSi₂ filmin kristal yapıdan amorf yapıya dönüştüğünün sonucunu çıkartabiliriz.

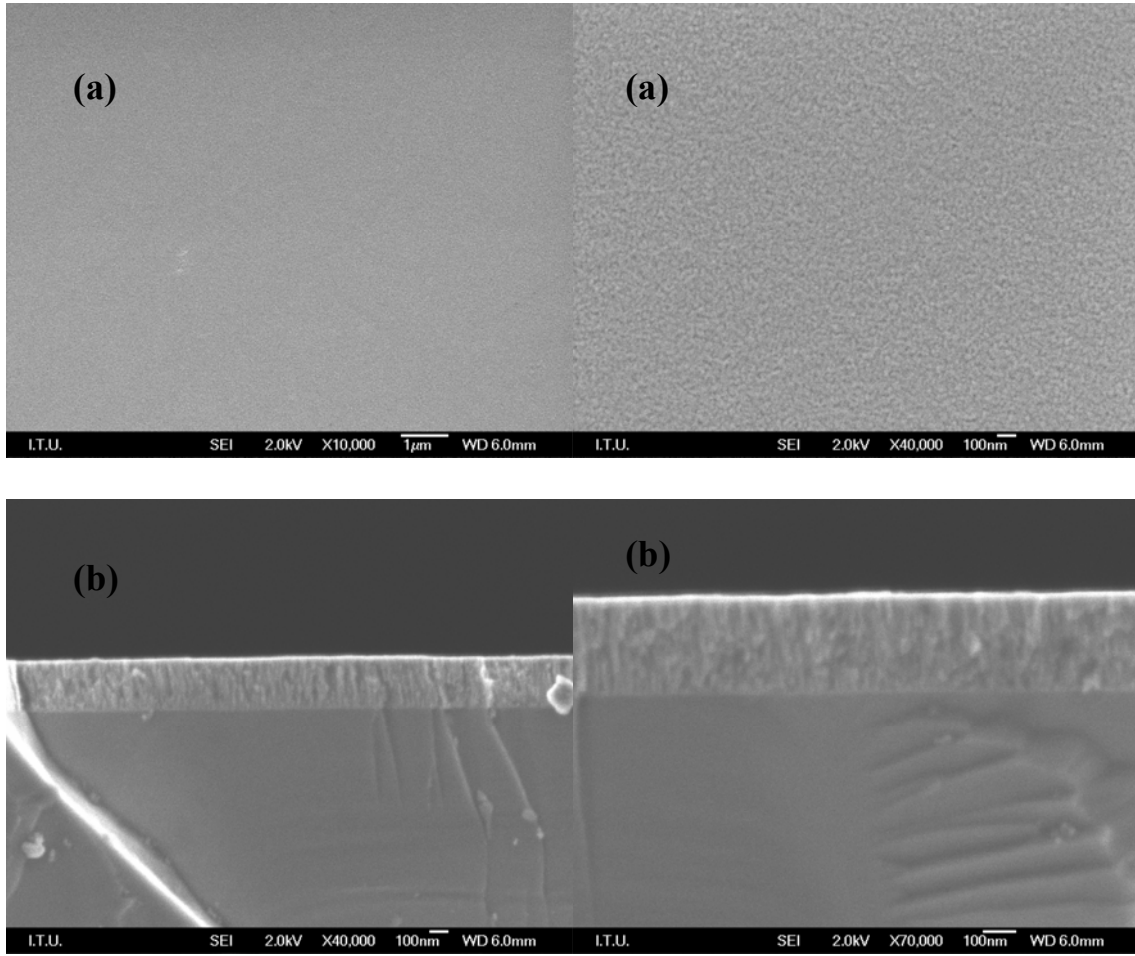


Şekil 4.37 Kaplamadan sonra bombardıman edilen β -FeSi₂ filmlerin XRD Analizi

Şekil 4.38’ de kaplamadan sonra bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmin Raman spektrumu verilmiştir. Bu grafikte görüldüğü gibi β -FeSi₂ yapının A_g kiplerine ait 215 cm⁻¹ ve 280 cm⁻¹ deki iki pik, bombardıman edildikten sonra bu pikler 218 cm⁻¹ ve 285 cm⁻¹ konumlarına kaymıştır. Aynı zamanda piklerin şiddetlerinde azalma ve pik genişliklerinde artma olduğu açıkça görülüyor. Kaplamadan sonra yapılan iyon bombardımanının etkisi ile β -FeSi₂ filmin yapısındaki stresin arttığı, kristalliğin azaldığı ve daha kusurlu bir yapı olduğu Raman spektrumunun sonucu olarak açıklayabiliriz. Kristalliğin azalması nedeniyle β -FeSi₂ filmin yapısında amorf yapı oluşması anlamına gelir.

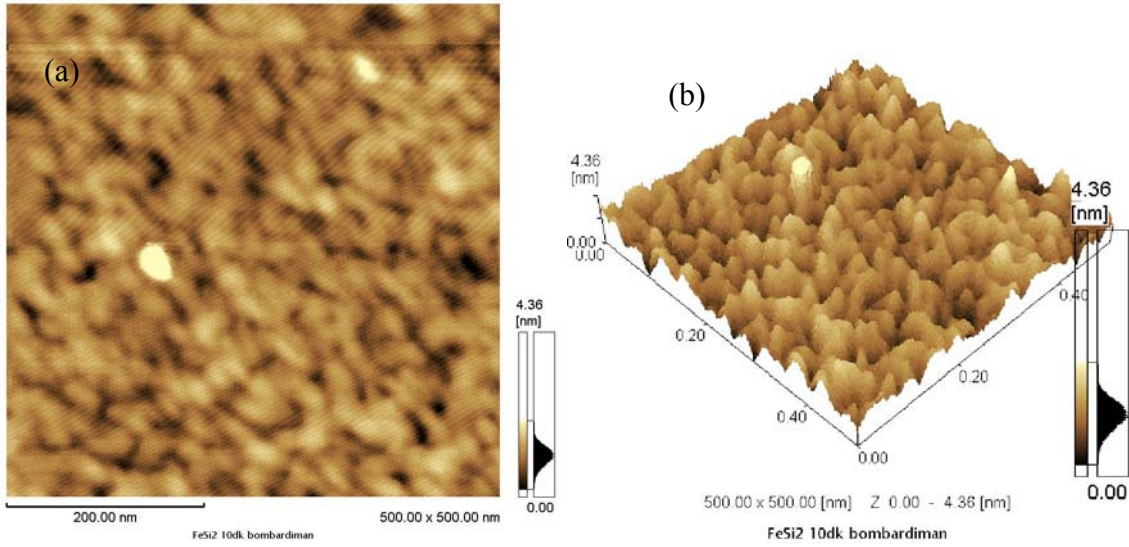


Şekil 4.38 Kaplamadan sonra bombardıman edilen β -FeSi₂ filmlerin Raman spektrumları



Şekil 4.39 β -FeSi₂ filmlerin FE-SEM resimleri a) yüzey görüntüleri b)ara kesit görüntüleri

Şekil 4.39 a ve b' de kaplamadan sonra bombardıman edilmiş β -FeSi₂ örneğe ait FE-SEM görüntüleri yer almaktadır. Şekil a'da filmin x10000 ve x40000 büyütmedeki yüzey görüntüsü yer alıyor. Şekil b'de ise bombardıman edildikten sonra β -FeSi₂ filmin ara kesit görüntüsü x40000 ve x70000 büyütmede verilmiştir. Bombardıman edilmiş örneğin FE-SEM resimlerine bakıldığında yüzey morfolojisi β -FeSi₂ filmlerin yüzey morfolojisine göre farklılıklar gösterdiği görülüyor. Öncelikle β -FeSi₂ filmlerin yüzeyindeki adacıklı yapının iyon bombardımanının neticesinde kaybolduğunu ve daha pürüzsüz bir yüzeye sahip olduğunu söyleyebiliriz. Bunun yanında ara kesit FE-SEM görüntüsünde görüldüğü gibi bombardıman edilmiş örneğin büyüme morfolojisi ile β -FeSi₂ filmlerin büyüme morfolojileri benzer özellik göstermektedir. Bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmin kolansal yapısı ise bombardıman edilmemiş örneğe göre daha kötüdür.



Şekil 4.40 Bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmin AFM fotoğrafı a) iki boyutlu görüntüsü b) üç boyutlu görüntüsü

Şekil 4.40 a ve b' de hızlandırılmış Ar⁺ iyonları ile bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmin yüzey topografyası AFM görüntüleri ile sırasıyla iki boyutta ve üç boyutta verilmiştir. Bombardıman edildikten sonra filmlerin RMS ile ölçülen yüzey pürüzlülüğü 1,85 nm den 0,65 nm değerine düşmüştür. Aynı zamanda bombardımandan önce farklı tane boyutlarına sahip olan β -FeSi₂ filmlerin, bombardımandan sonra tane boyutlarının hemen hemen aynı boyutta (~50 nm) olduğu görüldü. Sonuç olarak iyon bombardımanı β -FeSi₂ filmlerin yüzeylerini daha düzleştirdiği ve yüzeydeki tanelerin daha küçülmesi ve daha homojen boyutta olmasına neden olmuştur.

Bombardıman edilmiş β -FeSi ₂ film	Atom(%)	W(%)
Si	55,03	38,10
Fe	44,97	61,90

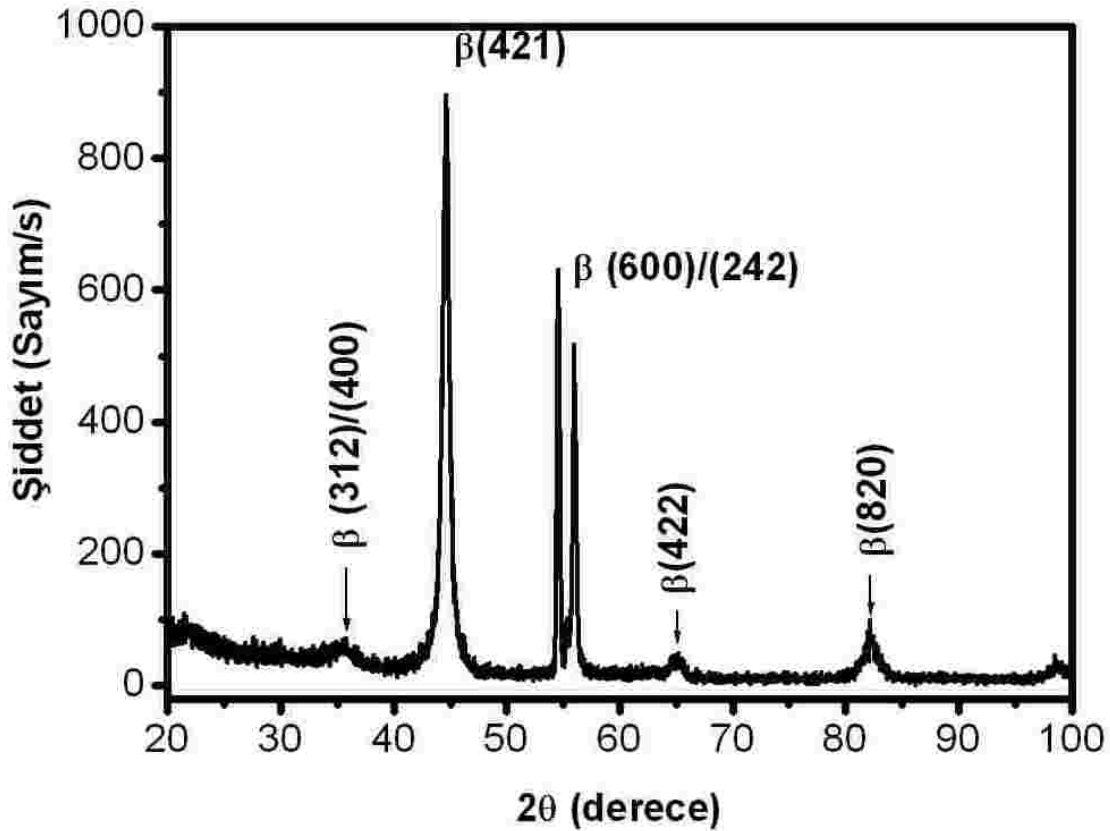
Çizelge 4.9 Kaplamadan sonra bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmin EDS analizi verileri

Bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmin 15 keV enerjili elektronlarla EDS analizi yapılmıştır. Filmlerdeki Fe ve Si oranları çizelge 4.9’ da görüldüğü gibi değişmiştir. β -FeSi₂ filmlerdeki atomik Fe miktarı bombardımandan sonra azalmış, Si miktarı ise artmıştır. Bu filmlerin bombardımandan sonra atomik oranlarının β -Faz için gerekli olan atomik oranlardan uzaklaştığımızı gösteriyor.

Genel olarak yorumlayacak olursak dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma metodu ile oda sıcaklığında üretilen β -FeSi₂ filmlerin, hızlandırılmış Ar⁺ iyonları ile bombardıman edilmesiyle yaptığımız incelemeler sonucunda filmlerin yapı ve yüzey özelliklerinin değiştiğini görüyoruz. Yapılan XRD, Raman ve EDS analizleri ile yapının β -Fazdan uzaklaştığı, kristal özelliğinin azalarak amorf bir film oluşmaya başladığı, filmlerin tane boyutlarının küçüldüğü ve daha kusurlu bir yapı oluştuğu gözlemlendi. FE-SEM ve AFM ile yapılan incelemeler de yüzey özelliklerinin değiştiğinin ve tane yapısının küçüldüğünü göstermiştir. Bu analizlerin hepsinin sonuçları bir birleri ile uyumludur.

4.8 End-Hall Tipi İyon Kaynağı Kullanılarak İyon Bombardıman Yardımı ile Üretilmiş β -FeSi₂ Filmlerin Özelliği

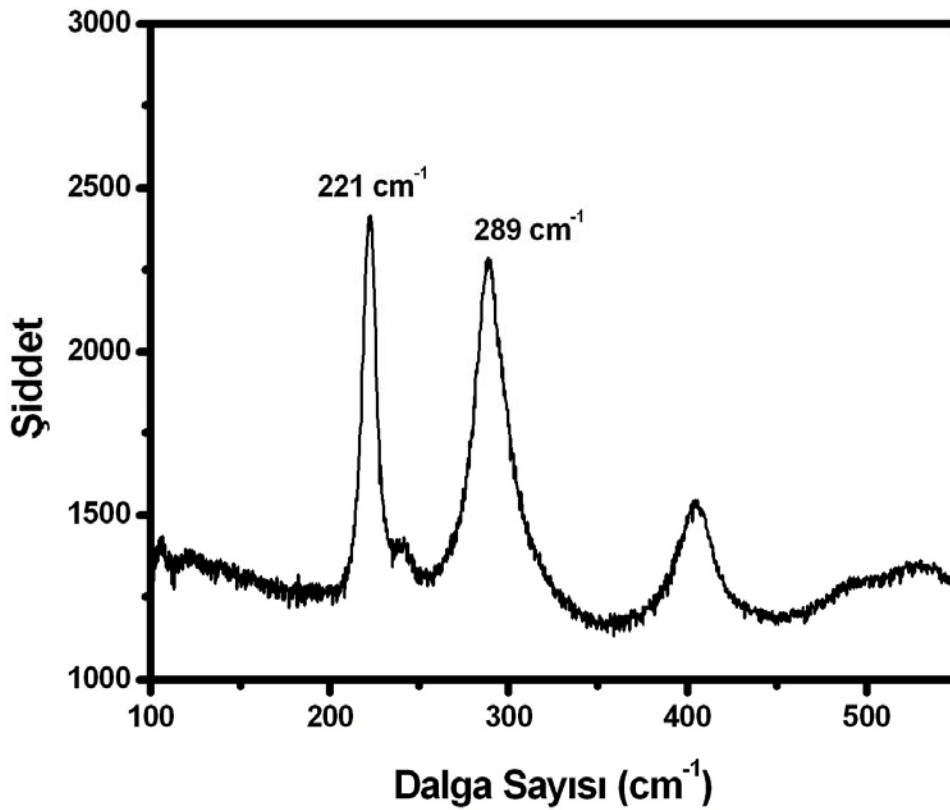
Bu filmlerin üretilmesi için kaplama sistemi yeniden tasarlanmıştır. Bunun için vakum odasında bir iyon kaynağı birde Fe hedef uygun bir şekilde yerleştirilmiştir. Altlıklar yerleştirildikleri taşıyıcı sayesinde belli bir hızda dönerek sırasıyla önce Fe hedefin sonra da iyon kaynağının önünden geçerek oda sıcaklığında n-Si(100) ve p-Si(111) altlık üzerine diğer basınç şartları aynı tutularak $t=6$ dk kaplama süresinde β -FeSi₂ filmler büyütülmüştür. Kaplama sırasında iyon kaynağı kullanılarak film büyütülmesi ile ilgili birçok çalışma literatürde yer almaktadır. Fakat bizim tasarladığımız sistemde ve bu kaplama tekniği ile β -FeSi₂ filmler yine ilk defa bu tez kapsamında üretildi ve literatüre kazandırıldı (B. Tatar, 2007). Kaplama sırasında iyon bombardımanı ile üretilen β -FeSi₂ filmlerin yapı ve yüzey özellikleri yine kısım 4.7’ de anlatılan kaplamadan sonra bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmler gibi incelenmiştir.



Şekil 4.41 Kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi₂ filmlerin XRD analizi

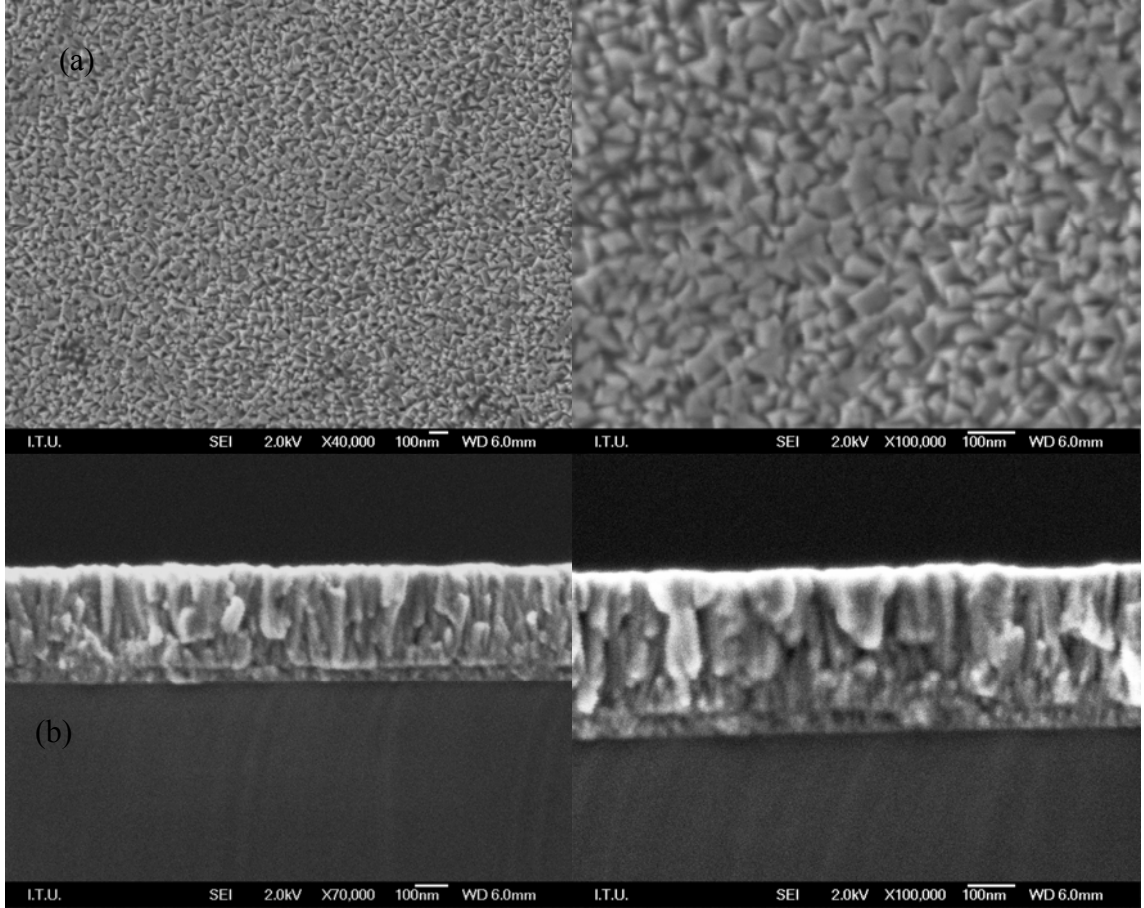
Şekil 4.41’ de iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi₂ filmlerin X-ışınları kırınım deseni verilmiştir. Bu iyon bombardımanı yardımı ile büyütülen β -FeSi₂ filmlerin XRD şekline baktığımızda polikristal bir yapıda ve hiçbir işlem yapılmadan elde edilmiş filmlerle aynı desene sahip olduğu görülmüştür. Bu filmlerde bazı piklerin şiddetlerinin arttığı ve pik genişliklerinin değiştiği görülmektedir. Yine bu şekilde üretilen β -FeSi₂ filmlerin genel yönelimi (600)/(424) düzleminden (421) düzlemine kaydığı görülüyor. Ayrıca X-ışınları kırınım deseninden bu şekilde üretilen filmlerin kristal özelliğinin daha iyi olduğunu da söyleyebiliriz.

Kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma metodu ile üretilen β -FeSi₂ filmlerin Raman spektrumu şekil 4.42’ de görülüyor. Bu örneğe ait A_g kipinin iki karakteristik piki net bir şekilde görülmektedir ve β -FeSi₂ filmlerin Raman spektrumun da çıkan piklerin konumlarında sağa doğru bir kayma görülmüştür (221 cm⁻¹ ve 289 cm⁻¹). Piklerin konumlarındaki benzer kayma kaplamadan sonra bombardıman edilmiş filmlerde de görülmüştür ve bunun sebebi olarak filmin kristal yapısındaki stres ve periyodikliğin bozulması gösterilebilir.



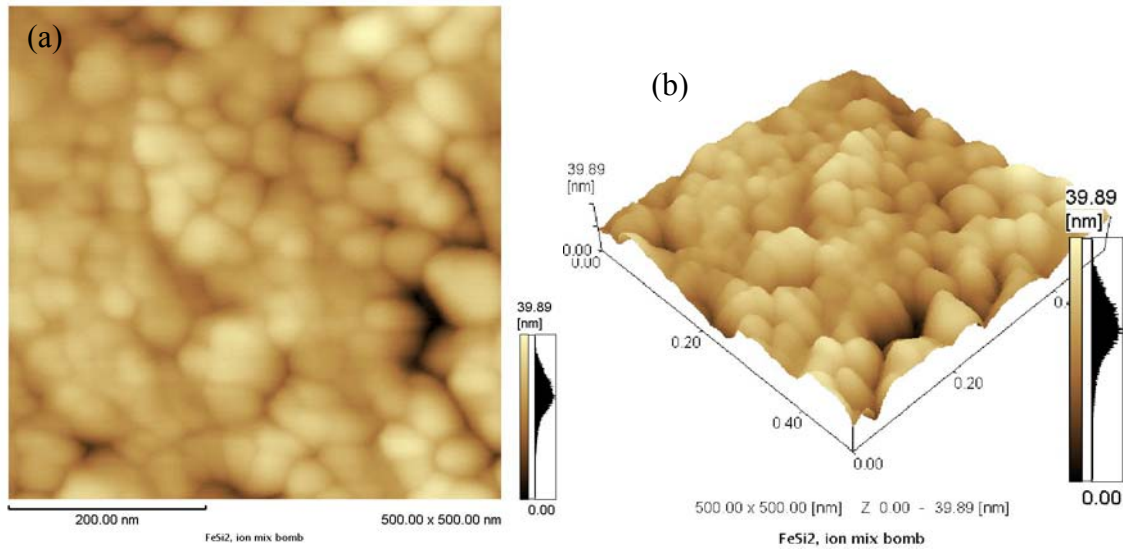
Şekil 4.42 Kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi₂ filmlerin Raman spektrumları

Şekil 4.43 a ve b' de kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilmiş β -FeSi₂ örneğe ait FE-SEM görüntüleri yer almaktadır. Şekil a'da filmin x40000 ve x100000 büyütmedeki yüzey görüntüsü yer alıyor. Şekil b'de ise bombardıman edildikten sonra β -FeSi₂ filmin ara kesit görüntüsü x70000 ve x100000 büyütmede verilmiştir. Bu örneklerin yüzeyi üzerinde hiçbir işlem yapılmamış β -FeSi₂ örneğe göre poruslu (boşluklu) ve pürüzlü bir yüzey görünümüne sahiptir. Ara kesit görüntüsünde ise kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi₂ filmlerin çok daha iyi bir kolonsal yapıya sahip olduğu ve bu kolonların diğer örneklere göre daha kalın olduğu açıkça görülmektedir. Buda filmlerin büyüme morfolojisinin kaplama süresince yapılan iyon bombardımanının etkisi ile iyileştiği anlamına gelir.



Şekil 4.43 Kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi₂ filmlerin FE-SEM resimleri a) yüzey görüntüleri b)ara kesit görüntüleri

Şekil 4.44 a ve b’ de kaplam süresince End-Hall tipi iyon kaynağı ile iyon bombardımanına tabi tutularak üretilen β -FeSi₂ filmlere ait AFM resmi sırasıyla iki ve üç boyutlu olarak yer almaktadır. Bu örneğin AFM görüntülerinden yüzey topografyasını incelediğimizde yüzeyin diğer büyüttüğümüz örneklerle göre çok daha pürüzlü ve iri tanelere sahip olduğunu açıkça söyleyebiliriz. Filmin RMS ile ölçülen yüzey pürüzlülüğü değeri 5,12 nm olarak belirlendi. Filmlerin genel görünümünde nano-oyukların sayısındaki artma ile birlikte filmin büyük ve yoğun tane yapısı direkt gözlenmektedir.



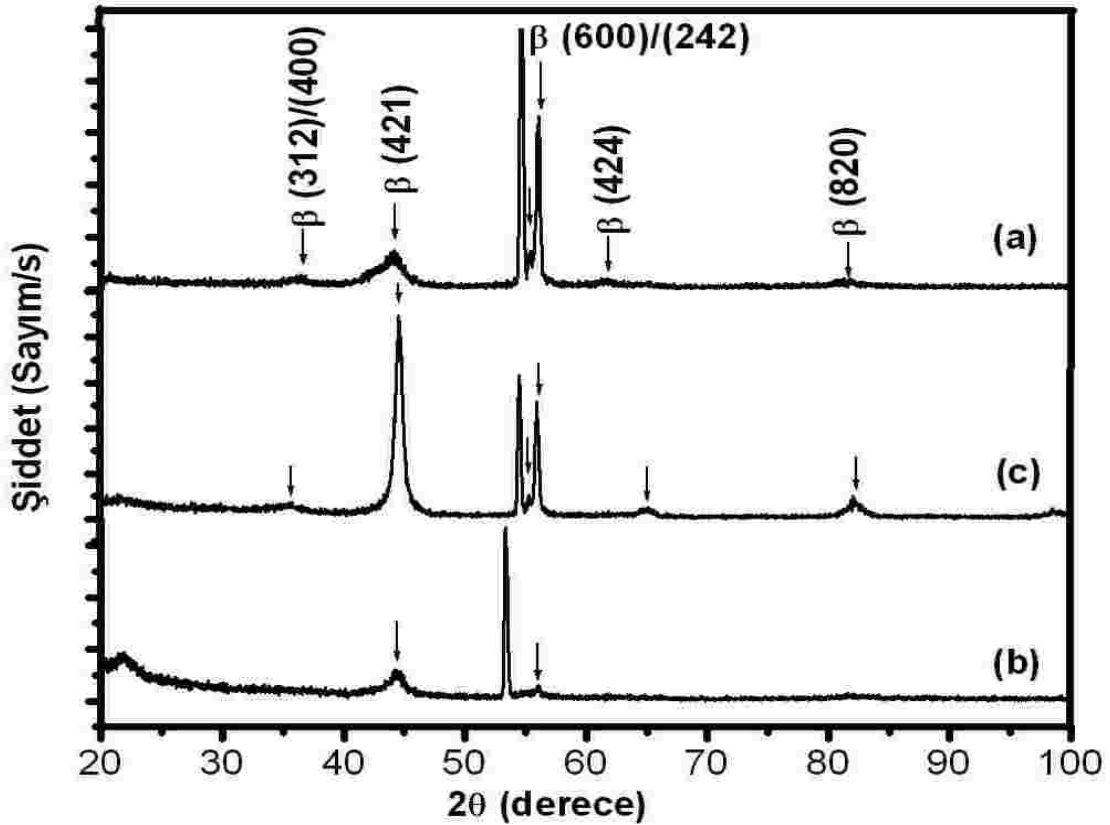
Şekil 4.44 İyon bombardımanı yardımı ile elde edilmiş β -FeSi₂ filmin AFM fotoğrafı a) iki boyutlu görüntüsü b) üç boyutlu görüntüsü

Kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilmiş β -FeSi₂ filmin 15 keV enerjili elektronlarla EDS analizi yapılmıştır ve çizelge 4.10’ da verilmiştir. Filmlerdeki Fe ve Si oranları tabloda görüldüğü gibi değişmiştir. İyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi₂ filmlerdeki atomik Fe miktarı hiçbir işlem uygulanmamış β -FeSi₂ filmlere göre artmış, Si miktarı ise azalmıştır. Bu filmlerin kaplama süresince bombardımandan edilmesini ile üretilen β -FeSi₂ filmlerde Fe/Si atomik oranlarının β -Faz için gerekli olan atomik oranlara yakın olduğu gözlenmiştir.

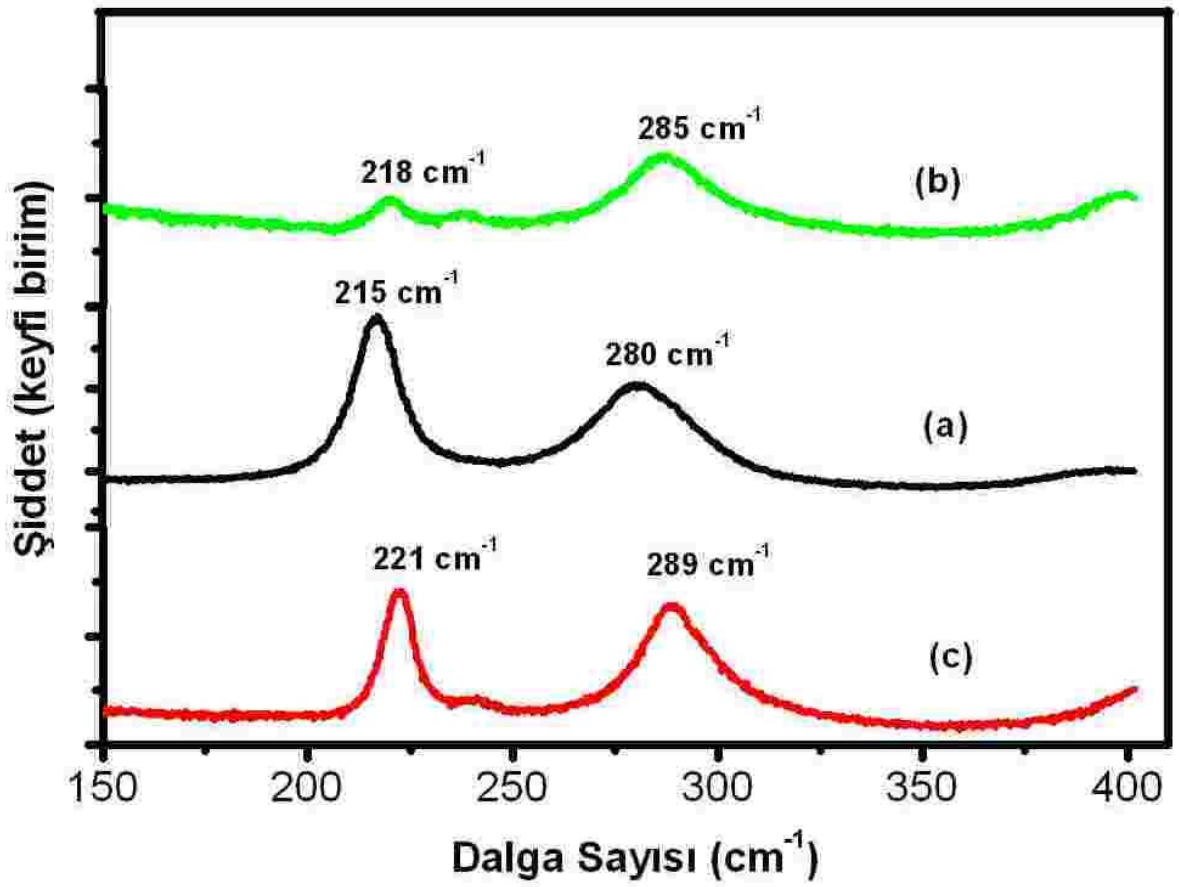
İyon yardımcı β -FeSi ₂ film	Atom(%)	W(%)
Si	44,12	28,43
Fe	55,88	71,57

Çizelge 4.10 Kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi₂ filmin EDS analizi verileri

Tüm bu yapı ve yüzey incelemelerinin sonuçları birbirleri ile uyumlu çıkmıştır. Bu incelemelerin neticesinde kaplama süresince iyon bombardımanına tabi tutulan filmler daha iyi kristal yapıya sahip olduğu fakat yapı üzerindeki stresin arttığı gözlenmiştir. Bu filmlerin yüzey özelliklerinde ise çok farklılaşmalar olmuştur ve yüzeyin genel morfolojisi ve topografyası değişmiştir.



Şekil 4.45 Farklı işlemler uygulanmış filmlerin XRD analizi a) β -FeSi₂ film b) kaplamadan sonra bombardıman edilmiş film c) kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilmiş film



Şekil 4.46 Farklı işlemler uygulanmış filmlerin Raman spektrumu a) β -FeSi₂ film b) kaplamadan sonra bombardıman edilmiş film c) kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilmiş film

Bu tez kapsamında manyetik alanda sıçratma metodu kullanılarak oda sıcaklığında üretilen β -FeSi₂ filmlerin yapı ve yüzey özelliklerini iyileştirmek için kısım 4.8 ve 4.9' de anlatılan uygulamalar yapıldı ve bu kısımlarda detaylı olarak yapı ve yüzey özelliklerinin nasıl değiştiği anlatıldı. Tezde anlatılan bu kısım "Effect of ion beam modifications on the surface and structural properties of β -FeSi₂ thin films" başlıkla, JOURNAL OF PHYSICS D: APPLIED PHYSICS, 40, 5995–5999, 2007' de yayınlandı. Şekil 4.45 ve 4.46' da burada yer alan karşılaştırmalı XRD ve Raman analizi grafikleri ter almaktadır.

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR

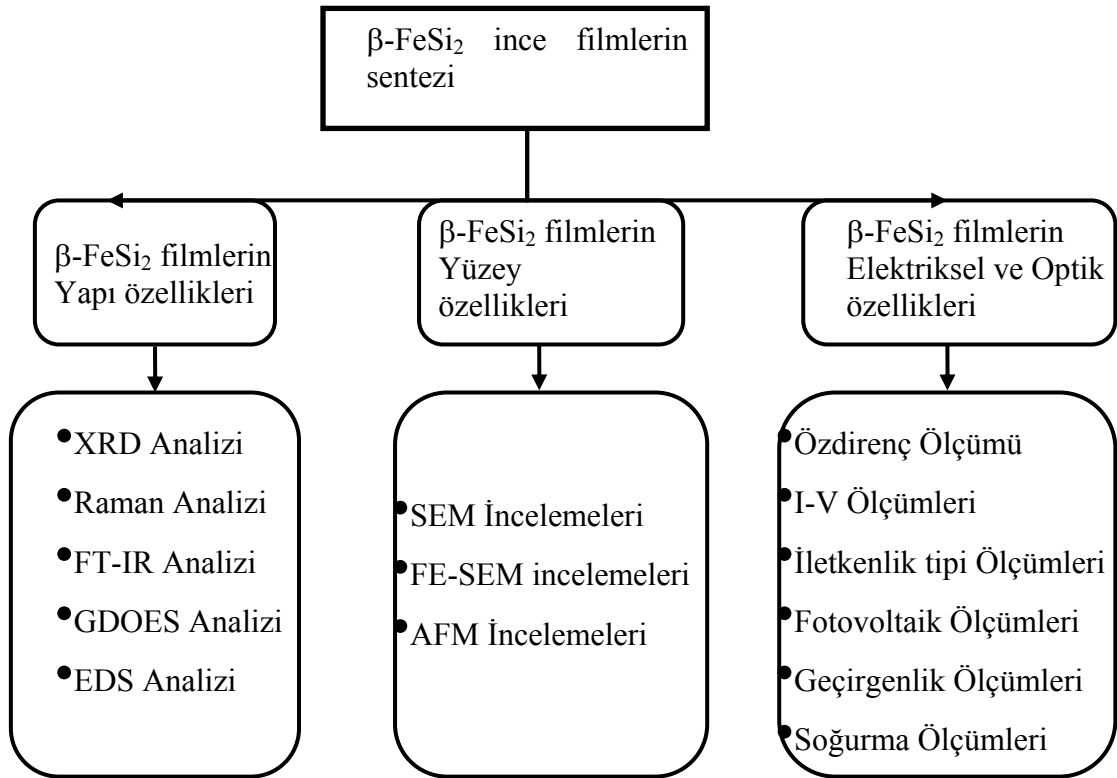
Bu tez kapsamında, yarıiletken özellik gösteren ve optoelektronik, termoelektronik, nanoelektronik ve fotovoltaiik aletlerde çok yaygın olarak kullanıma sahip β -FeSi₂ filmler üretildi, bu üretilen filmlerin detaylı analizleri yapıldı. Silisyum temelli β -FeSi₂ yarıiletken silisitler:

- düşük band aralığına ve direk bant geçiş özelliğinde olmaları,
- yüksek optik soğurma katsayısına sahip olmaları,
- termo elektrik gücü ve yüksek taşıyıcı mobilitesine sahip olmaları,
- silisyumla uyumlu olmaları,
- yapılarına bağlı olarak metalikten –yarıiletken’e kadar değişebilen özellikleri,
- göreceli olarak basit üretilibilmeleri,
- toksik etkilerinin olmaması

gibi özellikleri ile elektronik devre teknolojisinde önemli uygulamalara sahip olabileceği günümüze kadar yapılan birçok bilimsel ve teknolojik çalışma ile ortaya konulmuştur. β -FeSi₂ yarı iletkeni ışığı güçlü emiciliği ile yeni bir güneş pili malzemesi için kullanılabileceği bir çok çalışmada rapor edilmesine rağmen hali hazırda istenilen verimde ve özelliklerde bir pil yapılamadığından günümüzde bu konuyla ilgili çalışmalarda yoğun bir şekilde devam etmektedir. Bu malzemenin yarıiletken özelliklerinden dolayı literatürde β -FeSi₂ filmlerin ve β -FeSi₂ /Si heteroeklemlerin üretimi için çok çeşitli kaplama teknikleri kullanılmıştır. IBS yöntemi, atımlı lazer kaplama metodu (PLD), radyoaktif epitaksiyel büyütme (RDE), moleküler epitaksiyel büyütme (MBE), termal buharlaştırma, elektron beam buharlaştırma metodu ve sıçratma metotları başlıca kullanılan büyütme tekniklerindendir. Silisyum üzerinde β -FeSi₂ film oluşturmak için kaplamadan sonra yaygın olarak ısıtım işlem uygulanmaktadır. Bu işlem difüzyon mekanizmasını hızlandırarak yapı oluşumunu sağlar. Burada söz edilen bütün tekniklerde demir silisid oluşumu için bir ısıtım işlem adımı gerekmektedir.

Ancak demir silisitlerin yapı-özellik-üretim prosesleri ilişkileri henüz tam olarak açıklığa kavuşturulamamıştır ve bu konuda çalışmalar halen devam etmektedir. 2007 yılında şimdiye kadar sadece demir silisitlerle ilgili SCI’de taranan dergilerde yapılan yayın sayısı 80 civarındadır.

Bu çalışmada β -FeSi₂ filmler hiçbir ısıtım işlem uygulanmadan n-Si(100) ve p-Si(111) altlıklar üzerine oda sıcaklığında dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniğı kullanılarak üretildi. Bu kaplama yöntemi ile β -FeSi₂ filmlerin üretilebileceğı yapılan yapı analizleri ile gösterildi ve ilk defa literatürde bu filmlerin herhangi bir ısıtım işlem uygulanmadan bu kaplama yöntemi ile elde edilebileceğı rapor edildi. Bu tez kapsamında yapı-özellik-üretim proseslerinin ilişkileri anlaşılmalı çalışıldı. Bu ilişkilerin anlaşılmasına yönelik yapılan çalışmalar için şöyle bir diyagram takip edildi:



Yapılan XRD incelemeleri sonucunda; elde edilen FeSi₂ filmlerin çeşitli yönelimlerde ve β -Fazda olduğu, β -FeSi₂ filmlerin polikristal yapıda olduğu, β -FeSi₂ filmlerin yapısal özelliklerinin altlık yönelimine ve tipine direkt bağlı olduğu ve hazırlanan β -FeSi₂ filmlerin yapısal özelliklerinin kaplama kalınlıklarına bağlı olmadığı yani film kalınlığından bağımsız olduğu belirlendi. Raman spektrumu incelemeleri sonucunda, β -FeSi₂ yarıiletkeninin kristal yapısına ait literatürde rapor edilen en karakteristik pikler A_g kipine ait olan $\sim 200\text{ cm}^{-1}$ ve $\sim 250\text{ cm}^{-1}$ de yer alan piklerdir ve bizim ölçümlerimizde de bu iki şiddetli piki gözlemledik. Bu piklerin orijinal konumlarından kaymalar gösterdikleri tespit edildi. β -FeSi₂ filmlerin kaplama tekniğinden dolayı yapısında oluşabilecek safsızlıklar yüzey periyodikliğini bozacaktır. Aynı zamanda bu safsızlıklar ve yapıdaki oluşacak diğer Fe-Si faz oluşumları β -

FeSi₂ kristal yapısına belirli bir basınç uygular ve bu basınç nedeniyle örgü periyodikliğinde de bozulmalar oluşur. β -FeSi₂ yapısının haricindeki diğer oluşumların kristal örgü üzerindeki oluşturduğu bu basınç nedeniyle molekülün titreşim hareketinde değişimler meydana gelir. Raman spektrumundaki görülen bu piklerinin orijinal yerlerindeki kaymaların nedenini bu şekilde açıklayabiliriz. Yapılan GDOES ölçümlerinde kaplama süresinin değişimi ile kaplanan Fe film ile Si altlığın ara yüzey bölgesinin kalınlığının değişmesi ve bu sayede o bölgede oluşan β -FeSi₂ filmin kalınlığının arttığı gözlemlendi. Dolayısıyla elementel analiz sonuçlarına göre bizim ince film yapımız sandviç şeklindedir ve sırasıyla yüzeyde Fe film, ara yüzeyde β -FeSi₂ film ve tabanda Si altlık yapıyı oluşturuyor. 15 keV enerjili elektronlarla alınan EDS verileri incelendiğinde atomik olarak Si %48 civarında ölçülürken Fe %52 civarında ölçülmüştür. Bu sonuçlara bakıldığında ölçümün yapıldığı bölgenin hem demirce zengin hem de silisyumca zengin olduğundan dolayı Fe film ile Si altlığın ara yüzey bölgesi ve aynı zamanda β -FeSi₂ filmlerin oluşum bölgesi olduğunu söyleyebiliriz. Şekil 2.20 de verilen Fe-Si faz diyagramı incelendiğinde β -FeSi₂ fazının oluşumu için gerekli olan yüzde demir ve silisyum oranının çizelge 4.3 deki oranlarla uyduğu görülüyor. Bu bölgeden alınan β -FeSi₂ filmlerin EDS analizindeki Fe ve Si oranları göz önünde bulundurulduğunda bu bölgede stokiometrik oranda β fazda bir oluşumdan söz edebiliriz.

β -FeSi₂ filmlerin yüzey özelliklerini araştırmak için SEM, FE-SEM ve AFM görüntüleri incelendi. SEM analizi sonucunda n-Si(100) ve p-Si(111) altlıklar üzerine büyütülen β -FeSi₂ filmlerin yüzeylerinin benzer şekilde olduğu ve çok pürüzsüz ve düzgün bir yapıda olduğu görüldü. Fakat zamanla filmlerin yüzeylerinde safsızlıklar ve farklı faz oluşumlarından dolayı tane sınırlarının belirginleştiği ve yüzeyde çeşitli çatlaklar olduğu gözlemlendi. FESEM görüntülerinde aslında bu filmlerin yüzey morfolojilerinin yaklaşık 100 nm büyüklüğündeki elips şeklindeki nano-adacıklardan oluştuğu tespit edilmiştir. FESEM ara kesit görüntüsünden β -FeSi₂ filmlerin büyüme morfolojilerinin çok iyi kolansal özellik göstermediği tespit edildi ve film kalınlıkları yaklaşık olarak bu görüntülerden belirlendi. Bütün örneklerin AFM görüntüleri incelendiğinde (111) yönelimli altlıklar üzerine büyütülen filmlerin yüzeylerinin (100) yönelimli altlıklar üzerinde elde edilen filmlere göre daha düzgün bir yüzeye sahip olduğu ve oluşan tane boyutları ve yönelimlerinin altlığa bağlı değişim gösterdiği görülmüştür. Aynı zamanda kaplama koşullarının da üretilen β -FeSi₂ filmlerin yüzey özelliklerine direkt bağlı olduğu yapılan mikroskobik çalışmalarda anlaşılmıştır. Bu sonuçlar ışığında kaplama prosesi ile β -FeSi₂ filmlerin yüzey özelliklerinin istenildiği şekilde ayarlanabileceği de görülmüştür. β -FeSi₂ filmlerin kristallliği ve yüzey özelliklerinin altlığın

yüzey şartlarına bağlı olduğu belirlendi. Kaplama parametreleri ve altlığın yüzey özelliklerinin optimizasyonu ile çok daha düzgün yüzey ve yapı özelliklerine sahip β -FeSi₂ filmler elde edilebilir.

FT-IR spektrumu yardımı ile yapılan geçirgenlik ve soğurma spektrumlarından β -FeSi₂ filmlerin optik özellikleri incelendi. β -FeSi₂ filmler için alınan bütün optiksel geçirgenlik ve soğurma grafikleri benzer çıkmıştır. β -FeSi₂ filmin optiksel geçirgenlik spektrumu incelendiğinde uzak kızılötesi (Far-Infrared) bölgeye doğru geçirgenliğin yüksek olduğu ve yakın kızılötesi (Near –Infrared) bölgede ise geçirgenliğin gittikçe azaldığı gözlemlendi. Aynı şekilde optiksel soğurma spektrumunda ise yine yakın kızılötesi bölgede soğurmanın maksimum olduğu görülmektedir. β -FeSi₂ filmlerin bant kıyılarındaki optiksel soğurmalarından, β -FeSi₂ filmlerin direkt geçiş karakteristiğine sahip bir yarıiletken olduğu ve yasak enerji aralığı 0,85 eV olarak belirlenmiştir.

Elektriksel özelliklerini incelemek amacıyla p- β -FeSi₂/n-Si(100) ve p- β -FeSi₂/p-Si(111) olmak üzere iki çeşit p-n ve p-p heteroeklemler hazırlandı. β -FeSi₂ filmlerin iletkenlik tipleri p tipi olarak belirlendi ve öz dirençlerinin filmlerin kalınlığına bağımlı olarak arttığı görüldü. Yapılan karanlık I-V ölçümlerinde p- β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin doğrultma özelliklerinin p- β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemlere göre daha iyi olduğu, ideal diyot karakteristiğine yakın davranış sergilediği ve bu eklemlerin diyot parametrelerinden ideallik faktörleri ve bariyer yükseklikleri belirlendi. İdeallik faktörlerinin kalınlıkla birlikte azaldığı 1 değerine yaklaştığı görüldü. p- β -FeSi₂/p-Si(111) heteroeklemlerin bariyer yüksekliği ~0,59 eV civarında hesaplanmıştır. p- β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlerin bariyer yüksekliği ise ~0,63 eV civarında hesaplandı. Aydınlıkta yapılan akım-gerilim ölçümlerinde bu eklemlerin hepsinin ışığa duyarlı olduğu ve hem silisyum tarafından hem de silisit tarafından yapılan aydınlatma neticesinde her iki tarafında ışığa duyarlılığı belirlendi. Bu eklemlerin fotovoltaiik parametreleri incelendiğinde en yüksek parametrelerin 6 dk kaplama süresinde üretilen p- β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemlere ait olduğu ve Voc=354mV, Isc=120 μ A ve ff=0,18 olarak hesaplanmıştır. Bu heteroeklemlerin başka bir dikkat çeken özelliği ve doğrultma katsayısının (Idoğru/Iters =120) ve ters yöndeki aydınlıkdaki akımın, karanlıkdaki akıma oranının (yani fotoduyarlılığın) yüksek olmasıdır (Iaydınlık/Ikaranlık =250). Bu özellik p- β -FeSi₂/n-Si(100) heteroeklemleri fotodiyod gibi kullanılmasına imkân sağlar. Bu çalışmada kullanılan Si altlıkların ve üretimini gerçekleştirdiğimiz β -FeSi₂ filmlere ait enerji seviyeleri şematik olarak çizilmiştir. Burada yarıiletkenlerin elektron afiniteleri sırasıyla $\chi_{\beta\text{-FeSi}_2}$ =4,33 eV ve χ_{Si} =4,01 eV

olup bu yarıiletkenlerin yasak bant genişlikleri ise $E_{g1}=0,85$ eV ve $E_{g2}=1,12$ eV olarak verildi. Altlık olarak kullanılan silisyum yarıiletkenlerinin öz dirençleri $\rho_{n-Si}=4,5-10$ ohm-cm ve $\rho_{p-Si}=10,5-19$ ohm-cm civarındadır. β -FeSi₂ yarıiletkenin termodinamik çıkış işi $\Phi_{\beta-FeSi_2}=4,97$ eV ve n-Si yarıiletkeninin çıkış işi ise $\Phi_{n-Si}=4,15$ eV değerindedir.

Dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniği kullanılarak oda sıcaklığında hızlandırılmış Fe atomlarının, daha önce (glow discharge) Ar iyonları ile temizlenmiş ve NMK ile bombardıman edilerek (dağlanarak) aktif hale getirilmiş Si altlıkların yüzeylerine çarpması ve bu çarpışma neticesindeki momentum transferi ile kaplama işlemi gerçekleştirilmiştir. Üretilen filmlerin yapı, yüzey, elektrik ve optik özellik incelemeleri ile β -FeSi₂ filmler detaylı olarak incelendi. Bu filmlerin oda sıcaklığında ve hiçbir ısı işlem uygulamadan üretiminin başarılması önemlidir. Kaplamadan önce yapılan temizlik işlemi ve nötral molekül kaynağı ile hızlandırılmış Ar⁺ iyonları ile bombardıman edilerek altlıkların yüzeyleri dağlanmıştır. Bu işlem Fe atomları ile kaplanacak Si altlıkların yüzeylerinde nano-oyuklar gibi çeşitli hatalar ve kusurlar oluşturur. Silisyum altlıklar içindeki bu nano-oyuklar tuzakların merkezinde olup Fe atomlarının Si içerisine çok daha hızlı ilerlemesini sağlayarak difüzyonu hızlandırır ve β -FeSi₂ oluşumuna neden olur. Ayrıca dengelenmemiş manyetik alanda sıçratma tekniği çok güçlü bir manyetik alan sağladığı için bu manyetik alanda Fe atomları çok daha hızlı ve enerjili bir şekilde Si altlığına ulaşır ve yüzeye çok güçlü bir şekilde çarpar. Bu olayda yine Si altlık yüzeyinde iyon bombardıman etkisi yaparak Fe atomlarının silisyum içerisine daha iyi yayınmasını sağlar ve bu şekilde β -FeSi₂ oluşum mekanizmasına katkıda bulunur. FeSi₂ filmlerin β - fazda ısı işlem uygulamadan direkt üretilmesini açıklayan hipotezimiz bu şekildedir.

β -FeSi₂ filmlerin yapı özelliklerini iyileştirmek için farklı şekillerde bombardıman işlemi uygulandı ve etkileri incelendi. İki çeşit bombardıman işlemi yapıldı bu işlemlerden ilkinde kaplamadan sonra üretilen β -FeSi₂ filmler iyon bombardımanına tabi tutuldu, diğer işlemde ise β -FeSi₂ filmlerin üretimi sırasında yardımcı olarak iyon bombardımanı kaplama sırasında kullanıldı.

Kaplamadan sonra filmlere hızlandırılmış Ar⁺ iyonları uygulanan iyon bombardımanı neticesinde β -FeSi₂ filmlerin yapı özellikleri XRD, Raman ve EDS analizleri ile incelendi ve bu bombardıman işlemi neticesinde β -FeSi₂ filmlerin kristalliğin azaldığı ve yapının amorf yapıya döndüğü belirlendi. Bu işlemin β -FeSi₂ filmlerin yapısal özelliklerini kötüleştirdiği belirlendi. β -FeSi₂ yarıiletkenin tane boyutları sonradan yapılan bombardıman neticesinde

küçüldüğü ve spektrum piklerindeki kaymalardan yapı üzerinde stresin arttığını da söyleyebiliriz. Bombardıman edilmiş örneğin FE-SEM resimlerine bakıldığında yüzey morfolojisi β -FeSi₂ filmlerin yüzey morfolojisine göre farklılıklar gösterdiği görülüyor. Öncelikle β -FeSi₂ filmlerin yüzeyindeki adacıklı yapının iyon bombardımanının neticesinde kaybolduğunu ve daha pürüzsüz bir yüzeye sahip olduğunu söyleyebiliriz. Bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmin kolansal yapısı ise bombardıman edilmemiş örneğe göre daha kötüdür. Sonuç olarak iyon bombardımanı β -FeSi₂ filmlerin yüzeylerini daha düzleştirdiği ve yüzeydeki tanelerin daha küçüldüğü ve daha homojen boyutta olmasına neden olduğu saptanmıştır.

Kaplama sırasında iyon bombardımanı ile üretilen β -FeSi₂ filmlerin yapı ve yüzey özellikleri yine kaplamadan sonra bombardıman edilmiş β -FeSi₂ filmler gibi incelenmiştir. Kaplamadan sonra bombardıman edilmiş filmlerin tersine kaplama sırasında iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi₂ filmlerin yapısal özellikleri çok daha iyileşmiştir. Bu filmlerin kristalliginde artma olduğu ve daha iri tane yapılarına sahip olduğunu piklerin şiddet ve spektral genişliklerine bakarak söyleyebiliriz. Fakat bu piklerin Raman spektrumuna bakıldığında yine piklerin konumlarında belirli kaymalar gözlemlendi ve bu kaymaların iyon bombardımanının yapı üzerinde stresi arttırdığından kaynaklandığını söyleriz. Ayrıca yapılan EDS elementsel analizi sonuçları da Fe ve Si atom oranlarının β -FeSi₂ yapının stokiometrik oranına yakın olduğu görülmüştür. Bu örneklerin yüzeyi üzerinde hiçbir işlem yapılmamış β -FeSi₂ örneğe göre poruslu (gözenekli) ve pürüzlü bir yüzey görünümüne sahiptir. Ara kesit görüntüsünde ise kaplama süresince iyon bombardımanı yardımı ile üretilen β -FeSi₂ filmlerin çok daha iyi bir kolonsal yapıya sahip olduğu ve bu kolonların diğer örneklerle göre daha kalın olduğu açıkça görülmektedir. Bu da filmlerin büyüme morfolojisinin kaplama süresince yapılan iyon bombardımanının etkisi ile iyileştiği anlamına gelir. Bu örneğin AFM görüntülerinden yüzey topografyasını incelediğimizde yüzeyin diğer büyüttüğümüz örneklerle göre çok daha pürüzlü ve iri tanelere sahip olduğunu açıkça söyleyebiliriz. Filmin RMS ile ölçülen yüzey pürüzlülüğü değeri 5,12 nm olarak belirlendi. Filmlerin genel görünümünde nano-oyukların sayısındaki artma ile birlikte filmin büyük ve yoğun tane yapısı direkt gözlenmektedir.

Bu sonuçlar β -FeSi₂ filmlerin yapısının iyon bombardımanı işlemine bağlı olarak ciddi şekilde etkilendiği gözlemlendi. Bu işlem ile β -FeSi₂ filmlerin yapısal özellikleri istenilen şekilde değiştirilerek optoelektronik, termoelektronik, nanoelektronik ve fotovoltaiik aletlerde kullanımına uygun şekilde üretilmesi sağlanabilir.

KAYNAKLAR

- Ayache R., Bouabelou A., Richter E., (2004) "Optical Characterization of β -FeSi₂ Layers Formed by Ion Beam Synthesis" *Materials Science in Semiconductor Processing* 7, 463-466
- Borisenko V.E. (Ed.), (2000) "Semiconducting Silicides, Springer" Berlin
- Bost M.C. and Mahan J.E., (1985) "Optical properties of semiconducting iron disilicide thin films" *J. Appl. Phys.* 58, 2696
- Behar M., Bernas H., Desimoni J., Lin X.W., Maltez R. L., (1996) "Sequential phase formation by ion-induced epitaxy in Fe-implanted Si(001)" Study of their properties and thermal behavior, *J. Appl. Phys.* 79, 752
- Caferov, T., (1998) Yarıiletken Fiziği 1, Yıldız Teknik Üniversitesi Matbaası, İstanbul
- Chiristensen N.E., (1990) "Electronic structure of β -FeSi₂" *Phys. Rev. B* 42 7148
- Chu S., Hirohada T., Kan H., Hiruma T., (2004) "Electroluminescence and response characterization of β -FeSi₂ -Based Light-Emitting Diodes" *Jpn. J. Appl. Phys., Part 2* 43 L154
- Daractchieva V., (2000) Beleva M., Garanova E., Angelov Ch., "Ion beam synthesis of beta-FeSi₂ " *Vacuum* 58, 415
- Dusaosoy Y., Protas J., Wandiji R., Roques B., (1971) "Structure cristalline du disiliciure de fer, FeSi₂ β " *Acta Cryst. B* 27 1209
- Dreseed R.J. and Wuttig M., (2005) "Stress evolution during growth in direct-current-sputtered zinc oxide films at various oxygen flows" *J. Appl. Phys.* 98, 073514
- Ehara T., (2001) " β -FeSi₂ Base MIS Diodes Fabricated by Sputtering Method" *Applied Surface Science* 175-176, 96-100
- Galkin N.G., Maslov A.M., Talanov A.O., (2002) "Electronic structure and simulation of the dielectric function of beta-FeSi₂ epitaxial films on Si(111)" *Physics of the Solid State* 44 714-719
- Goss N. P., (1935) *Trans. Am. Soc. Metals*, 23, 515
- Green M.A., (1982) "Solar Cells" Englewood Cliffs, New Jersey
- Grigoriev S., Melnik Y., Metel A., (2002) "Broad Fast Neutral Molecule Beam Sources for Industrial-Scale Beam Assisted Deposition" *Surface and Coatings Technology* 156, 44
- Hinze J., and Ellmer K., J. (2000) "In situ measurement of mechanical stress in polycrystalline zinc-oxide thin films prepared by magnetron sputtering" *Appl. Phys.* 88, 2443
- Homewood K.P., Reeson K.J., William R. M. G., Kewell A.K., Lourenço M.A., Shao G., Chen Y.L., Sharpe J. S., McKintey C.N., Butler T., (2001) "Ion Beam Synthesized Silicides : Growth, Characterization and Devices" *Thin Solid Films* 381, 188-193
- Kuroda R., Liu Z., Fukozawa Y., Suzuki Y., Osamura M., Wang S., Otagawa N., Ootsuka T., Mise T., Hoshino Y., Nakayama Y., Tanoue H., Makita Y., (2004) "Formation of Thin β -FeSi₂ Template Layer for the Epitaxial Growth of Thick Film on Si(111) Substrate" *Thin Solid Films* 461, 34-39

- Kasap S.O., (2001) "Optoelectronics and Photonics: Principles and Practices" Prentice-Hall Inc., New Jersey
- Kaufman H., Robinson R. S., Seddon R. I., (1987) "End-Hall Ion Source" J. Vac. Sci. Technol.A5 (4), 2081-2084
- Kubaschewski O., (1982) "Iron-Binary Phase Diagram" Springer-Verlag, New York
- Lange H., (1997) "Electronic Properties of Semiconducting Silicides" Physics State Solid (b) 2013
- Lange H., (2001) "Electronic Structure and Interband Optical Properties of β -FeSi₂" Thin Solid Films 381, 171-175
- Lefki K. and Muret P., (1993) "Photoelectric study of β -FeSi₂ on silicon: Optical threshold as a function of temperature" J. Appl. Phys. 74, 1138
- Lefki K., Muret P., Bustarret E., Boutarek N., Madar R., Chevrier J., Derrien J., Brunel M., (1991) "Infrared and Raman characterization of beta iron silicide" Solid State Communications 80, 791-795
- Leong D., Harry M., Reeson K.J., Homewood K.P., (1997) "A silicon/iron-disilicide light-emitting diode operating at a wavelength of 1.5 μ m" Nature 387, 686
- Liu Z., Watanabe M. and Hanabusa M., (2001) "Electrical and photovoltaic properties of iron-silicide/silicon heterostructures formed by pulsed laser deposition" Thin Solid Films, Volume 381, 262-266
- Lourenço M.A., Butler T.M., Kewell A.K., Gwilliam R.M., Kirkby K.J., Homewood K.P., (2001) "Electrical, Electronic and Optical Characterisation of Ion-Beam Synthesized β -FeSi₂ Light Emitting Devices" Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 175-177, 153-163
- Lourenço M.A., Gwilliam R.M., Shao G., Homewood K.P. (2003) "Dislocation Engineered β -FeSi₂ Light Emitting Diodes" Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 206, 436-439
- Maeda Yoshito, Umezawa Kenj, Hayshi Yoshikazu, Miyake Kiyoshi, Ohashi Kenya, (2001) "Photovoltaic Properties of Ion-beam Synthesized β -FeSi₂ /n-Si Heterojunctions" Thin Solid Films 381, 256-261
- Maeda Y., Umezawa K., Hayshi Y., Miyake K., (2001) "Raman spectroscopic study of ion-beam synthesized polycrystalline β -FeSi₂ on Si (100)" Thin Solid Films 381, 219-224
- Maeda Y., Terai Y. and Itakura M., (2005) "Enhancement of photoresponse properties of β -FeSi₂/Si heterojunctions by Al doping" Optical Materials, Volume 27, 920-924
- Makita Y., (1997) "Materials Availability for Thin Film Solar Cells" 1997 The American Institute of Physics 1-56396, 704-9
- Markvart T. (Ed.), (2000), Solar Electricity, John Wiley & Sons, England
- McKinty C.N., Kirkby K.J., Homewood K.P., Edwards S.P., Shao G., Valizadeh R., Colligon J.S., (2002) "The properties of beta-FeSi₂ fabricated by ion beam assisted deposition as a function of annealing conditions for use in solar cell applications" Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms 188:

179-182

Miglio L., Tavazza F., Malegori G., (1995) "Stability hierarchy of the pseudomorphic FeSi₂ phases: α , γ , and defected CsCl" Appl. Physics Letter 67, 2293

Miglio L., Malegori G., (1995) "Origin and nature of the band gap in β -FeSi₂" Phys. Rev. B52 1448

Mahan J., US Patent No. 4782377, US Patent No 4914042

Matsubara K., Kawamura K., Nagao K., Kadonaga Y., Miki T., (1991) "Characterization of Fe x SiO (0 < x < 3) Granular Films by Electron Spin Resonance" Jpn. J. Appl. Phys. 30, 2569

Mori Y., Ikai T., Teranishi R., Takarabe K., (2002) "Electronic and structural study of β -FeSi₂ under Pressure", www.das.aus.ac.jp/mori/

Morosov A. I., (1978) "Physical Principles of Cosmic Electro-Jet Engines" (Atomizdat Moscow, Vol. 1, 13-15

Minami T., (2000) "New n-Type Transparent Conducting Oxides" MRS Bull. 25, 38

Ozvolt M., Bohac V., Gasparic V., Leggieri G., Luby S., Luches A., Majkova E., Mrafko P., (1995), "The optical band gap of semiconducting iron disilicide thin films" Thin Solid films 263, 92

Okajima K., Yamatsugu H., Wen C., Sudoh M., Yamada K., (2001) "Spectral Sensitivity Enhanced by Thin Film of β -FeSi₂ – Si Composite Prepared by RF-Sputtering Deposition" Thin Solid Films 381, 267-275

Onaran K., (2003) "Malzeme Bilimi" Bilim Teknik Yayınevi, İstanbul

Ohring M., (1992) "The Materials Science of Thin Films" Academic Press Inc., New Jersey

Powalla M. and Herz K., "Crystallization of coevaporated β -FeSi₂ thin films" (1993) Appl. Surf. Sci. 65/66, 482–488

Reeson K.J., Finny M.S., Harry M.A., Hutchinson S.V., Tan Y.S., Leong D., Bearda T.R., Yang Z., Curello G., Homevood K.P., Gwilliam R.M., Sealy B.J., (1995) Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B106, 364

Rousseau D. L., Bauman R.P., Porto S.P.S., (1981) "Normal mode determination in crystals" J. Raman Spectroscopy 10, 253

Schuller B., Carius R., Lenk S., Monti S., (2001) "Optical Properties of β -FeSi₂ Precipitate Layers in Silicon" Optical Materials 17, 121-124.

Schuller B., Carius R., Lenk S. and Mantl S., (2002) "Luminescence lifetime of the 1.5- μ m emission of β -FeSi₂ precipitate layers in silicon" Microelectronic Engineering, Volume 60, 205-210

Senthilarasu S., Sathyamoorthy R., Lalitha S., (2004) "Synthesis and Characterization of β -FeSi₂ Grown by Thermal Annealing of Fe/Si Bilayers for Photovoltaic Applications" Solar Energy Mat.&solar Cell 82, 299-305

Shimura K., Yamaguchi K., Yamamoto H., Sasase M., Shamoto S., Hojou K., (2006), "Photoluminescence of β -FeSi₂ thin film prepared by ion beam sputter deposition method" Nuclear Ins. And Methods in Phys. Research B 242, 673-675

Siber A. (2003) www.nanotech-now.com

Smith D.L., (1995) "Thin film deposition -principles & practice" McGraw-Hill Inc., New York

Starke U., Weiss W., Kutschera M., Bandorf R., Heinz K., (2002) "High quality iron silicide films by simultaneous deposition of iron and silicon on Si (111)" J. Appl. Physics, 91, 6154

Suemasu T., Fujii T., Takakura K. and Hasegawa F., (2001) "Dependence of photoluminescence from β -FeSi₂ and induced deep levels in Si on the size of β -FeSi₂ balls embedded in Si crystals" Thin Solid Films, Volume 381, 209-213

Sugiyama M., Maeda Y., (2001) "Microstructure Characterization of Ion-Beam Synthesized β -FeSi₂ Phase by Transmission Electron Microscopy" Thin Solid Films 381, 225-230

Sze, S.M., (1981) "Physics of Semiconductor Devices" John Wiley & Sons, New York.

Takakura K., Suemasu T., Hasegawa F., (2000) "Growth of Mn doped epitaxial β -FeSi₂ films on Si(001) substrates by reactive deposition epitaxy" Thin Solid Films 369, 253

Takakura K., Seki N., Suemasu T., Hasegawa F., (2002) "Comparison of Donor and Acceptor or Levels in Undoped, High Quality β -FeSi₂ Films Grown by MBE and Multi-Layer Method" Int. J. Mod. Phys. B16, 4314

Tanaka M., Zhang Q., Takeguchi M. and Furuya K., (2003) "In situ characterization of Mn and Fe silicide islands on silicon" Surface Science, Volumes 532-535, 946-951

Tanaka S., Yamamoto A., Makiuchi S., Matsuyama T., Rebien M., Henrion W., Tatsuoka H., Tanaka M., Liu Z.-Q., Kuwabara H., (2005) "Growth and morphological properties of β -FeSi₂ layers" Applied Surface Science 244, 326-329

Takauji M., Li C., Suemasu T., Hasegawa F., (2005) "Fabrication of p-Si/-FeSi₂/n-Si Double-Heterostructure Light-Emitting Diode by Molecular Beam Epitaxy" Jpn. J. Appl. Phys., Part 1 44 2483

Terai Y., Maeda Y., (2004) "Enhancement of 1.54 μ m Photoluminescence Observed in Al-Doped β -FeSi₂" Applied Physics Letters 84, 6 903

Tyagi M.S., (1991) Introduction to Semiconductor Materials and Devices, John Wiley & Sons Canada

Tatar B., (2003) "FeSi₂ Eklemlerin Elektriksel Karakteristikleri" Yüksek Lisans Tezi, İstanbul

Tatar B., Kutlu K., and Urgen M., (2007) "Surface characterization of β -FeSi₂/Si heterojunctions prepared by magnetron sputtering" Surface & Coatings Technology 201, 8373-8376

Tatar B., Kutlu K., and Urgen M., (2007) "Synthesis of β -FeSi₂/Si heterojunctions for photovoltaic applications by unbalanced magnetron sputtering" Thin Solid Films 516, 13-16

Tatar B., Kutlu K., and Urgen M., (2007) "Effect of ion beam modifications on the surface and structural properties of β -FeSi₂ thin films" J. Phys. D: Appl. Phys. 40, 5995-5999

Tatar B., Kutlu K., Urgen M., (2006) "The FT-IR and RAMAN Spectroscopic Studies of β -FeSi₂ Growth on Si(100) and Si(111) Substrates", 28TH European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS XXVIII), İstanbul, Türkiye

- Tatar B., Kutlu K., (2006) "Optical Properties of β -FeSi₂ Thin Films Grown By Magnetron Sputtering", Sixth International Conference of the BPU (Balkan Physics Union), American Institute of Physics Conference Proceedings CP899/661
- Tatar B., Kutlu K., Urgan M., (2006) "Modification of Surface and Structural Properties of β -FeSi₂ Thin Films Induced by Ion Source", International Nanomat Conference, Antalya, Türkiye
- Tatar B., (2005) "Electrical Characterization of β -FeSi₂ /Si Junctions Prepared by Electron Beam Deposition", 23. International Turk Physics Conference, Muğla, Türkiye
- Tatar B. and Kutlu K., (2005) "Morphological Properties of β -FeSi₂ Films Prepared by Magnetron Sputtering Method", 23. International Turk Physics Conference, Muğla, Türkiye
- Tatar B., Kutlu K. and Urgan M., (2005) "Surface Characterization of β -FeSi₂/Si Heterojunctions Prepared by Magnetron Sputtering", 14th International Conference on Surface Modification of Materials by Ion Beams (SMMIB), Kuşadası, Türkiye
- Tatar B., Kutlu K., (2004) "FeSi₂/Si Eklemlerin Elektriksel Özellikleri", 22. Türk Fizik Derneği Kongresi, Bodrum, Türkiye
- Ugajin Y., Takauji M., Suemasu T., (2006) "Annealing Temperature Dependence of EL Properties of Si/ β -FeSi₂/Si(111) Double-heterostructures Light-Emitting Diodes" Thin Solid Films 508, 376
- Wan Q., Wang T.H., Lin C.L., (2003) "Synthesis and optical properties of semiconducting beta-FeSi₂ nanocrystals" Applied Physics Letters 82, 3224-3226
- Yang Z., Homewood K.P., Finney M.S., Harry M.A., Reeson K.J., (1995) "Optical-Absorption Study of Ion-Beam Synthesized Polycrystalline Semiconducting FeSi₂" J. Appl. Phys. 78, 1958
- Yang Z., Curello G., Homewood K.P., Gwilliam R.M., Sealy B.J., (1995) Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B106, 364
- Yoshitake T., Nagamoto T., Nagayama K., (2001) "Microstructure of β -FeSi₂ thin films prepared by pulsed laser deposition" Thin Solid Films 381, 236
- Yamamoto A., Tanaka S., Matsubayashi D., Makiuchi S., Tatsuoka H., Matsuyama T., Tanaka M., Liu Z., Kuwabara H., (2004), "Morphological modification of β -FeSi₂ on Si(111) by high temperature growth and post-thermal annealing" Thin Solid Films 461, 28-33
- Yamaguchi K., Haraguchi M., Katsumata T., Shimura K., Yamamoto H., Hojou K., (2004) "Effect of Substrate Temperature and Deposited Thickness on The Formation of Iron Silicide Prepared by Ion Beam Sputter Deposition" Thin Solid Film 461, 13-16

EKLER

Yayınlar

- Beyhan Tatar, Kubilay Kutlu and Mustafa Urgan, "Surface characterization of β -FeSi₂/Si heterojunctions prepared by magnetron sputtering", Surface & Coatings Technology, 201 - 8373–8376, 2007.
- Beyhan Tatar, Kubilay Kutlu and Mustafa Urgan, "Synthesis of β -FeSi₂/Si heterojunctions for photovoltaic applications by unbalanced magnetron sputtering", Thin Solid Films, 516/1, 13-16, 2007.
- Beyhan Tatar, Kubilay Kutlu and Mustafa Urgan, "Effect of ion beam modifications on the surface and structural properties of β -FeSi₂ thin films", JOURNAL OF PHYSICS D: APPLIED PHYSICS, 40, 5995–5999, 2007.

Uluslar arası Bildiriler

- B. Tatar, D. Yılmaz, P. Gökdemir, O. Özdemir and K. Kutlu, "Electrical properties of Cr/p-type Si schottky barrier diodes at room temperatures", 24. International Turk Physics Conference, Malatya, Türkiye, , 2007.
- B. Tatar, P. Gökdemir, D. Yılmaz, O. Özdemir and K. Kutlu, "The current-voltage characteristics of Al/SiO₂/p-Si MIS type schottky diodes", 24. International Turk Physics Conference, Malatya, Türkiye, , 2007.
- B. Tatar, K. Kutlu, M. Urgan, "The FT-IR and RAMAN Spectroscopic Studies of β -FeSi₂ Growth on Si(100) and Si(111) Substrates", 28TH European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS XXVIII), İstanbul, Türkiye, , 2006.
- B. Tatar, K. Kutlu, M. Urgan, "The Structurel Properties of CeO₂ Thin Films Grown on Silicon and Glass Substrates by Pulsed e-Beam", 28TH European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS XXVIII), İstanbul, Türkiye, , 2006.
- B. Tatar, K. Kutlu, "Optical Properties of β -FeSi₂ Thin Films Grown By Magnetron Sputtering", Sixth International Confarence of the BPU (Balkan Physics Union), İstanbul, Türkiye, American Institute of Physics Conference Proceedi, 2006.
- B. Tatar, K. Kutlu, M. Urgan, "Modification of Surface and Structural Properties of β -FeSi₂ Thin Films Induced by Ion Source", International Nanomat Conference, Antalya,

Türkiye, , 2006.

B.Tatar, "Electrical Characterization of β -FeSi₂ /Si Junctions Prepared by Electron Beam Deposition", 23. International Turk Physics Conference, Muğla, Türkiye, 2005.

B.Tatar, K.Kutlu and M.Urgen,, "Surface Characterization of β -FeSi₂/Si Heterojunctions Prepared by Magnetron Sputtering", 14th International Conference on Surface Modification of Materials by Ion Beams (SMMIB), Kuşadası, Türkiye, , 2005.

B.Tatar ve K.Kutlu, "Morphological Properties of β -FeSi₂ Films Prepared by Magnetron Sputtering Method", 23. International Turk Physics Conference, Muğla, Türkiye, , 2005.

Ulusal Bildiriler

B. Tatar, K, Kutlu M. Ürgen, "CeO₂ Film Growth on ITO Substrates with Pulsed Electron Beam Deposition", NanoTR3 Nanoscience and Nanotechnology 2007 Conference, Ankara, Türkiye, , 2007.

B.Tatar, K.Kutlu, "FeSi₂/Si Eklemlerin Elektriksel Özellikleri", 22. Türk Fizik Derneği Kongresi, Bodrum, Türkiye, , 2004.

Projeler

Arş.Gör. Beyhan Tatar (Araştırmacı) “Fotovoltaik Uygulamalar İçin β -FeSi₂/Si Heteroelemlerin İncelemeleri” Bilimsel Araştırma Proje Koordinatörlüğü (BAPK), 27-01-01-04

Arş. Gör. Beyhan Tatar (Araştırmacı) “Metal-Yarıiletken Yapıların Elektriksel Özelliklerinin İncelenmesi” Bilimsel Araştırma Proje Koordinatörlüğü (BAPK), 27-01-01-05

ÖZGEÇMİŞ

Doğum tarihi 22.11.1977

Doğum yeri Elazığ

Lise 1991–1994 Ahmet Rasim Lisesi

Lisans 1994–1998 Fırat Üniversitesi Fen-Edebiyat Fak.
Fizik BölümüYüksek Lisans 2000–2003 Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Bölümü Anabilim Dalı, Fizik ProgramıDoktora 2003–2007 Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Bölümü Anabilim Dalı, Fizik Programı**Çalıştığı kurum(lar)**

1999-Devam ediyor YTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Araştırma Görevlisi