T.C

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ISISAL UYARIMLI İLETKENLİK METODU

ve

TABAKALI TEK KRİSTAL YAPILI YARIİLETKENLERİNDEKİ UYGULAMASI

Hüseyin KAVAS

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Konya, 2006

T.C

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ISISAL UYARIMLI İLETKENLİK METODU

ve

TABAKALI TEK KRİSTAL YAPILI YARIİLETKENLERİNDEKİ UYGULAMASI

Hüseyin KAVAS

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez **24.05.2006** tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği / o~~yçokluğu~~ ile kabul edilmiştir

Doç.Dr. Haluk ŞAFAK	**Doç.Dr. Oğuz Doğan**	**Yrd.Doç.Dr. Ö.Faruk Yüksel**
(Danışman)	**(Üye)**	**(Üye)**

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

ISISAL UYARIMLI İLETKENLİK METODU ve TABAKALI TEK KRİSTAL YAPILI YARIİLETKENLERDEKİ UYGULAMASI

Hüseyin KAVAS

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman : Doç.Dr.Haluk ŞAFAK

2006

Jüri:

Doç.Dr. Haluk ŞAFAK

Doç.Dr. Oğuz DOĞAN

Yrd.Doç.Dr. Ö.Faruk YÜKSEL

Bu çalışma, optik ve elektriksel özellikleri nedeniyle optoelektronik aletlerde yaygın kullanımı olan talyum kalgonitlerinden $TlGaSe_2$ ve $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ kristallerindeki kusurların Isısal Uyarımlı İletkenlik (TSC) yöntemi ile tespiti amacıyla yapılmıştır. Bu tezde Isısal uyarımlı iletkenlik yönteminin teorisi, gerekli deney düzeneği, numunelerin hazırlanmasının yanısıra ve deney sonuçlarından kristal kusurlarına ilişkin bazı parametrelerinin (aktivasyon enerjisi, tuzak yakalama kesiti ve tuzak yoğunlukları) nasıl elde edildiği incelenmiş ve bulunan sonuçlar açıklanmıştır.

$TlGaSe_2$ numunesinde 98 ve 130 meV (sırasıyla 120.2 ve 153 K) aktivasyon enerjisine sahip kristal kusurlardan kaynaklanan tuzaklanma merkezleri tesbit edilmiştir. Bu tuzak merkezlerine ait tuzak yakalama kesitleri sırasıyla 2.3×10^{-24} ve $1.8\times10^{-24}\,cm^2$; tuzak yoğunlukları ise sırasıyla 1.4×10^{14} ve $3.8\times10^{14}\,cm^{-3}$ olarak bulunmuştur. $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numunesinde ise aktivasyon enerjisi 650 meV (216.8 K) tuzaklanma merkezi tesbit edilmiştir. Bu tuzak merkezine ait tuzak yakalama kesiti sırasıyla $8.55\times10^{-18}\ cm^2$ ve tuzak yoğunluğu ise $7.15\times10^{16}\,cm^{-3}$ olarak bulunmuştur

Anahtar Kelimeler: Isısal Uyarımlı iletkenlik, tabakalı yarıiletken, aktivasyon enerjisi (tuzak derinliği), tuzak yakalanma kesiti, tuzak yoğunluğu.

ABSTRACT

MS Thesis

THERMALLY STIMULATED CONDUCTIVITY (TSC) METHOD AND ITS APPLICATION ON LAYERED SINGLE SEMICONDUCTORS

Hüseyin KAVAS

Selçuk University,

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor : Assoc. Prof. Haluk ŞAFAK

2006

Jury :

Assoc. Prof. Haluk ŞAFAK

Assoc. Prof. Oğuz DOĞAN

Assist. Prof. Ö.Faruk YÜKSEL

Thallium chalcogenides received a great deal of attention due to their optical and electrical properties in view of possible optoelectronic device applications. $TlGaSe_2$ ve $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ crystals' defect centers were analyzed by Thermally Stimulated Current (TSC) method. The theory of TSC, sample experimental setup and sample preparation were explained. Then, some parameters such as; activation energy, capture cross section, concentration of trap centers were found from the results of experiments.

$TlGaSe_2$ has trapping centers casued by crystal defects with activation energies of 98 and 130 meV (respectively 120.2 and 153 K). These trapping centers have capture cross sections of 2.3×10^{-24} ve $1.8\times10^{-24}\,cm^2$ and concentrations of 1.4×10^{14} and $3.8\times10^{14}\,cm^{-3}$ respectively. Only one trapping center was detected in $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ with activation energy of 646 meV (120.2 K). This trapping center has a capture cross section of $8.55\times10^{-18}\,cm^2$ and concentration of $7.15\times10^{16}\ cm^{-3}$.

Key Words : Thermally Stimulated Current, layered semiconductor, activation energy, capture cross section, concentration of traps.

ÖNSÖZ

Bu tezin hazırlanmasında ve diğer aşamalarında yardımlarından dolayı danışmanım Doç Dr. Haluk Şafak'a sonsuz teşekkür ederim. Ve tezdeki deneyler sırasında yardımlarını esirgemeyen Prof. Dr. Nizami Gasanly, Prof. Dr. Hüsnü Özkan ve Araş Gör. N. Sadi Yüksek'e teşekkür ederim.

SEMBOLLER

E_g :Yasak band enerjisi

Ei :İletim band enerjisi

E_V :Valans band enerjisi

ρ :Özdirenç

σ :İletkenlik

μ :Elektronun mobilitesi

e :Elektronun elemanter yükü

n_c :İletim bandındaki (serbest) yük taşıyıcı yoğunluğu

I :TL için yayınım şiddeti, TSC için akım şiddeti

m :Tuzak merkezlerindeki deşik yoğunluğu

A_m :Orantı sabiti

τ :Yük taşıyıcı yarı ömrü

N_t :Elektron tuzaklarının yoğunluğu

S_t :Bir elektron için gerekli tuzak kesti

n_i :Önceden doldurulmuş tuzak yoğunluğu

v_{th} :İletim bandındaki elektronların ısısal hızıdır

E_t :Tuzaklanma (aktivasyon)enerjisi (veya Tuzak derinliği)

v :Tuzaktan kurtulma eğilim frekans çarpanı

P :Tuzaktan kurtulma ihtimalini

T :Sıcaklık

k :Boltzman sabiti

h :Planck sabiti

m_e^* :Elektronun iletim bandındaki etkin kütle

N_c :İletim bandındaki ısısal olarak ulaşılabilen duruların etkin yoğunluğudur

β :Deneysel ısıtma hızı

T_m :Pik maksimum sıcaklığı

İÇİNDEKİLER

ÖZET……. i
ABSTRACT…….. ii
ÖNSÖZ…….. iii
SEMBOLLER…..……..iv
1.GİRİŞ……. 1
2.BAND TEORİSİ VE GEÇİŞLER..... 3
3. ISISAL UYARIMLI İLETKENLİK (TSC) METODU……. 5
3.1.Giriş..... 5
3.2.Teori..... 7
3.2.1 Yavaş yeniden tuzaklanma..... 11
3.2.2 Hızlı yeniden tuzaklanma..... 13
4. DENEYSEL YÖNTEM..... 17
4.1.Numunenin Hazırlanması..... 17
4.2.Deney Düzeneğinin Tanıtımı..... 18
5. DENEYSEL SONUÇLARIN ANALİZİ..... 20
5.1.Başlangıç Yükselmesi (İlk Yükselme) Yöntemi..... 21
5.2.Eğri Uydurma Yöntemi..... 23
5.3.Pik Şekli Yöntemi..... 28
5.4.Değişik Hızlarda Isıtma Yöntemi..... 29
5.5.Isısal Temizleme Yardımcı Yöntemi..... 31
6. SONUÇ ve TARTIŞMA..... 33
KAYNAKLAR..... 34

1. GİRİŞ

Bütün kristaller atomik dizilmelerinde hatalar içermektedirler. Bu hatalar kontrol edilerek çok dayanıklı metaller ve alaşımlar, güçlü manyetikler, geliştirilmiş transistörler, güneş pilleri, çarpıcı renklerde cam eşyaları ve diğer bir çok pratik öneme sahip malzemeler üretilebilir. Yapısal hatalar; noktasal hatalar, çizgi hataları ve yüzey hataları olarak üç temel gruba ayrılırlar. Safsızlık (impurite), boşluk ve fazla atom yerleşmelerinin (dislokasyon) sebep olduğu bu kusurlar, mükemmel olmayan kristal büyütme, ısısal titreşimler, saf halden arıtma veya fabrikasyon süreçlerinde meydana gelebilirler.

Kristaller içindeki kusurların tespiti ve bu kusurlarla ilgili bazı parametrelerin incelenmesi için Isısal Uyarımlı Süreçler (Thermally Stimulated Process TSP) kullanılır. Önemli ısısal uyarımlı yöntemler; Termoluminesans (TL), Isısal Uyarımlı İletkenlik (TSC), Isısal Uyarımlı Elektron Emisyonu (TSEE), Isısal Uyarımlı Depolarizasyon (TSD), Termogravite (TG) ve Diferansiyel Isısal Analiz (DTA) dır.

Bu çalışmada, optik ve elektriksel özellikleri nedeniyle optoelektronik aletlerde yaygın kullanımı olan talyum kalgonitlerinden $TlGaSe_2$ ve $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ kristallerindeki kusurların tespiti Isısal Uyarımlı İletkenlik yöntemi ile incelenecektir[1-4].

$TlBX_2$ (Tl, 3A grubu; B:Ga, In, 3A grubu ve X:S,Se,Te, VIA grubu elementleridir) ailesinin kristallerinde katmanlı ($TlGaS_2$, $TlGaSe_2$, $TlInSe_2$) ve zincir ($TlInSe_2$, $TlInTe_2$, $TlGaTe_2$) kristal yapıları görülmektedir.

Oda sıcaklığında katmanlı talyum kalgonitleri monoklinik sisteme sahiptirler ve C2/c grubuna aittirler. Bu kristallerin hücreleri değişken iki boyutlu katmanlardan oluşurlar ki bu katmanlar (001) yüzeyine paralel olup her birinin bir önceki katmanla aralarında 90^o fark vardır.

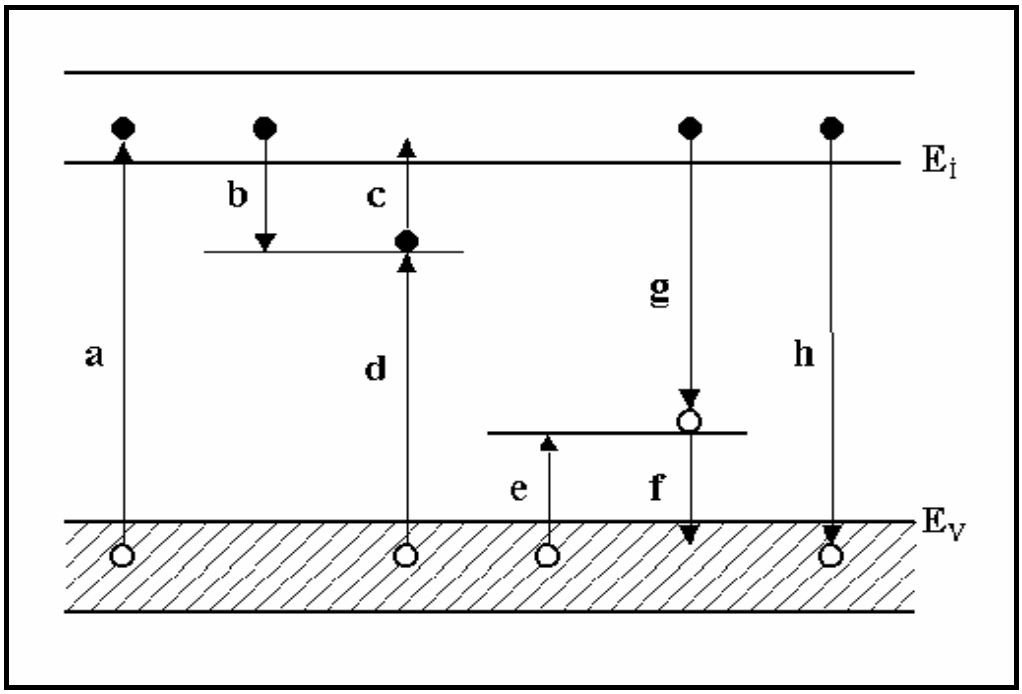
Geçmişte $TlGaSe_2$ numunesinin Raman, Brillouin ve Kızılötesi spektrumları [5-7], optik ve dielektrik özellikleri [8], uyarılma spektrumu ve faz geçişleri [9,10], ve soğurma spektumu [11] incelenmiştir. Bakhyshov ve arkadaşları [12] $TlGaSe_2$ kristallerinde 100-300 K aralığında aktivasyon enerjileri 0,37 0,60 ve 0,68 eV olmak üzere üç derin tuzaklanma merkezini yanlızca başlangıç yükselmesi metodunu kullanarak tesbit etmişlerdir. Bu çalışmada ise ilk olarak, $TlGaSe_2$ için 10-300 K gibi daha geniş bir sıcaklık bölgesinde deneysel çalışma yapılmıştır ve TSC spektrumu farklı metodlarla incelenmiştir.

$TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numunesinin ise daha önce, kristal örgü parametreleri [13], Brillouin spektrumları [14], Raman spektumları ve fotoelektronik faz geçişleri [15] ve bazı elektriksel ve opto-elektriksel özellikleri [16] incelenmiştir. Bu çalışmada ilk kez TSC çalışmasında kullanılmıştır.

Bu çalışmada sırasıyla, Isısal uyarımlı iletkenlik yönteminin teorisine kısaca değinilecek, deney düzeneği, numune hazırlanması anlatılacak ve deney sonuçlarından kristal kusurlarına ilişkin bazı parametrelerin (aktivasyon enerjisi, tuzak yakalama kesiti, tuzaktan kurtulma eğilim frekansı ve tuzak yoğunlukları) nasıl elde edildiği açıklanarak elde edilen sonuçlar verilecektir.

2. BAND TEORİSİ VE GEÇİŞLER

Kristallerin içindeki kusurlar, iletim bandı ile valans bandı arasında tuzak enerji seviyeleri olarak düşünülebilirler. Şekil 1. de bu bantlar ve tuzak seviyeleri arasındaki mümkün bazı geçişler gösterilmektedir. Burada, *(a)* geçişi, valans elektronun iletim bandına uyarılmasıdır. Bunun için yeterli enerji valans ve iletim bantları arasındaki enerji kadar veya daha büyük olmak zorundadır. Uyarılan elektronlar örgüde serbestçe hareket edebilmektedir. İyonizasyon olarak bilinen bu olayın sonucunda valans bantta bir deşik oluşmaktadır. Meydana gelen bu serbest elektron-deşik grupları tekrar birleşmek ve kararlı hale dönmek eğilimindedirler.



Şekil 1. Kristal yapıdaki yarıiletken ve yalıtkanlarda yaygın elektronik geçişler: ***(a)*** iyonizasyon; ***(b)*** elektron tuzaklanması; ***(e)*** deşik tuzaklanması; ***(c)*** elektronun tuzaktan kurtulması; ***(f)*** deşiğin tuzaktan kurtulması; ***(d)*** ve ***(g)*** dolaylı yeniden birleşme; ***(h)*** direkt (doğrudan) yeniden birleşme. Elektronlar koyu dairelerle, deşikler çemberlerle; elektron ve deşik geçişleri ise çubuklarla gösterilmiştir. $E_İ$, iletim bandının enerjisini ve E_V, valans bandının enerjisini ifade etmektedir.

Fakat tuzak seviyelerinin varlığı buna izin vermez ve elektronlar iletim bandına yakın tuzaklara *(b),* deşikler ise valans bandına yakın tuzaklara *(e)* düşerler. Tuzaklanmış elektronlar ve deşikler ısısal veya optik uyarılma sonucu tuzaklarından kurtulabilirler (elektronlar için *(c)* geçişi, deşikler için *(f)* geçişi). Serbest haldeki elektronlar ve deşikler için ikinci bir ihtimalde yeniden birleşme (rekombinasyon) sürecidir. Yeniden birleşme ya direkt olarak (doğrudan) elektronun valans banda ışıma yaparak dönüşü (*(h)* geçişi) yada dolaylı olarak tuzaklarda birleşmeler şeklinde (*(d)* ve *(g)* geçişleri) meydana gelir. Eğer herhangi bir yeniden birleşme sürecinde ışıma meydana gelirse buna "luminesans" denir.

Ara enerji düzeyleri tuzak veya yeniden birleşme merkezleri olarak rol alırlar. Ara seviyeleri birbirinden ayırt edebilmek için yeniden birleşme ve uyarılma olasılıklarına bakılır. Şekil-1. deki elektron geçişleri için, eğer *(c)* geçişinin olasılığı *(d)* geçiş olasılığından yüksek ise, ara enerji düzeyi elektron tuzak merkezi olarak rol alır. Tersi durumda ise yeniden birleşme merkezi olarak adlandırılır. Benzer bir şekilde eğer *(f)* geçişinin olasılığı *(g)* geçiş olasılığından yüksekse, ara enerji düzeyi deşik tuzak merkezi ve tersi durumda yeniden birleşme merkezi olarak rol alırlar.

3. ISISAL UYARIMLI İLETKENLİK (TSC) METODU

3.1.Giriş

Düşük T_0 sıcaklığında, numune uygun bir ışıma ile uyarılır. Böylelikle valans bandındaki elektronlar iletim bandına çıkarılırlar. Serbest kalan elektronlar, sıcaklık düşük olduğu için yeniden birleşme yapamazlar ve tuzaklara düşerler. Sıcaklık kontrollü bir şekilde artırılmaya başlanınca, tuzaktaki elektronlar tekrar iletim bandına uyarılırlar. İletim bandına çıkan elektronlar numunenin iletkenliğinde artışa sebep olurlar. İletkenlikteki bu artış *Akım – Sıcaklık* grafiğinde (Termogram) pikler şeklinde gözlenirler. Aynı şekilde iletkenlik artışına deşikler de sebep olabilirler.

Bu tip ısısal uyarımlı olaylarda bir numunenin (genelde yalıtkan veya yarıiletken), nükleer ışımayla, X-ışınlarıyla, UV veya görünür ışıkla uyarılması sonucu oluşan akım, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak ölçülür. Bu olaydan ilk kez Herman ve Hofstadter'ın [17] kısa bir çalışmasında söz edilmektedir. Bu çalışmada numunenin düşük sıcaklıkta UV ışığa tabi tutulması ve sonra numunedeki iki elektrot üzerinden uygulanan bir elektrik alanı yardımıyla numunenin karanlıkta ısıtılması sonucu -60 ^oC'de karanlık akımında çok büyük bir artış gözlenmiştir. Agarwal ve Fritzsche [18], başlangıç uyarılmasından kaynaklanmayan güçlü bir sıcaklığa bağımlı iletkenliğin üzerindeki küçük TSC sinyallerini ölçmek amacıyla bir yöntem geliştirdiler. Abkowitz ve Pfister [19], PVF_2 deki moleküler durulma ve elektriksel olayları incelediler. Obayashi [20], manyetik alan altındaki numunede ölçülen TSC değişimlerini kaydetmiştir. Henisch [21] çalışmasında kontak etkilerini incelemiştir. Bu araştırmacı kontak etkilerinin azaltılması için "dört nokta prob" yöntemini ortaya atmıştır. Van der Pauw [22] 'ın bulduğu yöntemle dört küçük kontakla numune özdirenci ve fiziksel parametreleri arasında

$$\exp\left(-\pi R_{AB,CD}\, d / \rho\right) + \exp\left(-\pi R_{BC,DA}\, d / \rho\right) = 1 \qquad (3.1)$$

şeklinde bir ilişki olduğu gözlenmiştir. Burada ρ numunenin özdirenci, d numunenin kalınlığıdır. $R_{AB,CD}$ direnci, akımın numuneye A kontağından girmesi ve B üzerinden ayrılması durumunda D ve C kontakları arasındaki $V_D - V_C$ gerilim farkının A ve B kontaklarından geçen birim akıma oranı olarak tanımlanır. Buna göre deney, kontaklara belirli bir (bilinen) akımın uygulanması ile iki ardışık gerilimin ölçülmesinden ibarettir. ρ ve σ değerlerini bulmak için Denklem 1' in sayısal olarak çözülmesi gerekir.

Numuneler üzerinden geçen akımın doğru ölçülebilmesi için kontak etkilerinin en aza indirilmesi gerekir. Bu konuda Henisch [21], aşağıdaki karşılaştırmalı ölçümler yardımıyla, kesin olarak kanıtlanmasa da, kontak ve ara yüzey etkilerinin, uzay yük etkisi problemlerinde sadece küçük bir rol oynadığına işaret etmiştir. Bu ölçümler:

a. Farklı kalınlıklı numuneler üzerinde aynı kontaklarla gerçekleştirilen ölçümler direncin kalınlığına lineer bağlı olması durumunda "iyi" bir sonuç elde edilir.
b. Aynı kalınlıktaki numuneler üzerinde farklı tip kontaklarla yapılan ölçümler; akımın, farklı kontak malzemeleri için aynı olması durumunda olumlu bir sonuç bulunur.
c. Farklı sabit gerilimler ile yapılan ölçümler; eğer TSC eğrisinin şekli gerilimden bağımsız ise bu güçlükler önemsizdir.

Yarıiletkenin iletkenliğinin hesaplanmasında, kontak problemlerini göz ardı eden bir diğer yöntem, Henisch ve Zucker [23], Weingarten ve Rothberg [24], Bryant ve Gunn [25], Müller ve arkadaşları [26] tarafından ortaya atılmış ve geliştirilmiştir. Bu

yöntem, yarıiletkenin iletkenliğinin, radyo–frekans serbest taşıyıcı güç soğurması yardımıyla kontaksız ölçüm yöntemidir. Bu tip bir TSC ölçümü üzerinde literatürde şimdiye kadar çok fazla bilgi mevcut değildir. Ölçüm esnasında numuneyi kontrollü bir şekilde ısıtmada karşılaşılan ek güçlüklere rağmen gelecekte bu tip ölçümleri gerçekleştirme çalışmalarının artması muhtemeldir.

3.2.Teori

Yukarıda tanımlanan güçlükler (problemler) ışığında bakıldığında, bu konuda ortaya atılan teorik görüşler, çeşitli deneysel sonuçlardan çıkarılmaktadır. Bununla birlikte bu görüşler, kontak etkilerinin hacim (bulk) etkilerine baskın olmadığı "şanslı" durumlar ile veya, örneğin Van der Pauw yöntemi gibi bazı yöntemlerin kullanımıyla gerçekleştirilecek olan gelecek ölçümler ile ilişkilidir. Tartışılan teoriler, sadece denge durumunda değil, tuzaklardan denge dışı taşıyıcıların salınması esnasında da, tüm numune boyunca, homojen koşulların geçerli olduğunu (yani herhangi bir boyuna yoğunluk değişiminin olmadığını) kabul eder. Bu ancak sınırlı sayıda numunede doğru olabilir; çünkü gerçek durumlarda, yukarıda da belirtildiği gibi, iletkenlik bağıntılarıyla başa çıkmak zorunluluğu söz konusudur. Bu iletkenlik bağıntıları kullanılan kontak tipine bağlı olabilir. Ancak bunların ortaya çıkışı, "iyi" kontaklar için bile kaçınılmazdır. Farklı numune kalınlıklarının, değişik kontakların ve farklı sabit gerilimlerin test edilmesi gibi, önceki alt kesimde öngörülen ölçümler, denge dışı etkilerin nasıl bozulma (sapma) oluşturduğu hakkında bir fikir verebilir.

Hacimsel (bulk) iletkenlik, σ ile serbest taşıyıcı yoğunluğu, n_c arasındaki oldukça iyi bilinen ilişki

$$\sigma = e \mu n_c \qquad (3.2)$$

şeklindedir; burada e elektronun yükü, μ mobilitedir. Bu sadece lokal (bölgesel) bir ilişki olarak doğrudur ve bunu makroskobik düzeyde tam geçerli hale getirmek için hacimsel (bulk) malzemenin homojen olduğu ve uzay yüklerinin ve azınlık taşıyıcılarının bulunmadığı kabul edilmelidir. Eğer daha ileri giderek, μ'nün sıcaklıktan bağımsız olduğu kabul edilirse (μ nün sıcaklığa bağlı olduğu bazı durumlar ileride tartışılacaktır), n_c(T) ile aynı biçime sahip bir σ(T) eğrisi elde edilir. Bu kabul pratikte, tüm TSC araştırmacıları tarafından yapılmaktadır. Hall mobilite ölçümünde ise, numune üzerine kontakların uygulanması gerekmektedir. Muhtemel kontak problemlerine engel olmak için, 1978'de Molnar ve Kennedy tarafından, magneto-iletkenliğin mikrodalga yardımıyla ölçümü yöntemi ortaya atılmış olup bu, kontaksız bir mobilite ölçümüdür. Bu yöntem ile, GaAs içerisine katkılanmış S ve Se'nin mobiliteleri hesaplanmış ve daha önce bilinen Hall mobiliteleri ile uyumlu mertebede sonuçlar elde edilmiştir.

Birçok araştırmacı (Haering ve Adams[27], Keating[28], Nicholas ve Woods[29], Bube ve arkadaşları[30], Devaux ve Schott[31], Cowell ve Woods[32]; Haine ve Carloy-Read[33], Buehler[34], Garofano ve Morelli[35]), iletim bandındaki ısısal salınmış yük taşıyıcıları için sabit bir τ yarıömrü kabul etmişlerdir. Fosforesans, Termoluminesans (TL), Isısal Uyarımlı İletkenlik (TSC) ve Isısal Uyarımlı Elektron Yayınımı (TSEE) teorilerindeki ortak gösterime göre

$$I = -\frac{dm}{dt} = A_m m \quad n_c \qquad (3.3)$$

yazılabilir. Bu eşitlikte I yayınım şiddeti, m merkezlerdeki deşik yoğunluğu, A_m orantı sabiti olup, ($cm^{-3}s^{-1}$) birimindedir ve yeniden

birleşme olasılığı olarak adlandırılır ve n_c ise iletim bandındaki serbest elektron yoğunluğudur. Sabit bir yük taşıyıcı yarı ömrü τ için Denk.(3.3)'deki m'nin anlamı, pratikte sabit olmasıdır. Bu durumda τ, $1/(mA_m)$ dır. Buradaki τ yük taşıyıcı ömrü aşağıda daha geniş olarak anlatılacak ve TSC kinetiği üzerindeki etkisi incelenecektir. Yukarıdaki kabulün yapılması sonucu, TL eğrileri ile tamamen benzer TSC eğrileri elde edilmektedir. Burada ismi geçen araştırmacıların birçoğu, birinci mertebeden TSC piklerini ölçmüşler ve başlangıçta tekil TL piklerinin analizi için geliştirilen değişik yöntemleri uygulamışlardır.

TSC kinetiğinin açıklanmasında, elektron ve deşik yük taşıyıcılarından yanlızca elektronun tuzaklanma kinetiği kullanılacaktır. Şekil 1'deki (b) geçişi elektronun tuzaklanmasını (c) geçişi ise elektronun tuzaktan kurtuluşunu ifade etmektedir. Bu elektron tuzaklarının yoğunluğu N_t ve bir elektron için gerekli tuzak kesti S_t olarak ifade edilir. Elektronların durgun kabul edildiği durumda tuzakların elektronların kinetiğinde hareket ettiği düşünülür. Daha önceden doldurulmuş tuzak yoğunluğu n_i ise tuzakların yukarıdaki kabule göre v_{th} (iletim bandındaki elektronların ısısal hızıdır) hızı ile hareket ederler. $(N_t - n_i)$ yoğunluğundaki boş tuzaklar birim zamanda kat ettikleri hacim $S_t v_{th}$, iletim bandındaki serbest elektron yoğunluğu ile çarpıldığında bir elektron içn tuzaklanma oranı $n_c(N_t - n_i)S_t v_{th}$ elde edilir. Elektron için, iletim bandının E_t kadar altında varolan tuzaklanma enerjisi ısısal uyarılma sonucu aşılır. Tuzaktan kurtulma kinetiği, v tuzaktan kurtulma eğilim frekans çarpanı ve ısısal uyarılma olasılığı $\exp(-E_t/kT)$ ile ifade edilir ki burada k Boltzman sabitidir ve bu iki terimin çarpımı

$$P = \tau^{-1} = v\exp(-E_t/kT) \qquad (3.4)$$

ısısal uyarılma ile tuzaktan kurtulma ihtimalini verir. Burada τ elektronun yarı ömrü yani elektronun T sıcaklığında tuzakta bulunduğu ortalama süredir. Sonuç olarak elektronun birim zamanda iletim bandına ısısal olarak uyarılma oranı $n_i v \exp(-E_t / kT)$ ile ifade edilir. Tuzaklanan elektron yoğunluğunun zamana bağlı değişimi yukarıda ifade edilen elektron tuzaklanma oranı ile tuzaktan kurtulma (uyarılma) oranının farkına eşittir;

$$\frac{dn_i}{dt} = n_c (N_t - n_i) S_t v_{th} - n_i v \exp(-E_t / kT)$$

veya (3.5)

$$\frac{dn_i}{dt} = n_c (N_t - n_i) S_t v_{th} - n_i N_c S_t v_{th} \exp(-E_t / kT)$$

Bu denklemde v tuzaktan kurtulma eğilim frekans çarpanı $N_c S_t v_{th}$ çarpımına eşittir. Burada N_c iletim bandındaki ısısal olarak ulaşılabilen durumların etkin yoğunluğudur. N_c ve v_{th}

$$N_c(T) = 2\left(\frac{kTm_e^*}{2\pi\hbar^2}\right)^{2/3} \quad (3.6)$$

ve

$$v_{th}(T) = \sqrt{\frac{3kT}{m_e^*}} \quad (3.7)$$

şeklinde verilir m_e^* elektronun iletim bandındaki etkin kütle değeridir.

İletim bandından elektronun ayrılması veya bu banda gelmesi durumlarında iki muhtemel durum vardır: (1) Tuzağa gelen elektron,

iletim bandından ayrılmıştır veya tuzaktan kurtulan (ayrılan) elektron, iletim bandına gelir (serbest kalır); (2) yeniden birleşme (rekombinasyon) durumunda iletim bandındaki elektron oradan ayrılır ve deşikle birleşir. Bu yeniden birleşme oranı n_c / τ dur. Sonuç olarak serbest elektron ve tuzaklanmış elektron (Denk.(3.5) ve Denk.(3.4) kullanılarak yeniden yazılırsa) oran denklemleri aşağıdaki gibi düzenlenebilir;

$$\frac{dn_i}{dt} = n_c \left(N_t - n_i\right) S_t v_{th} - \frac{n_i}{\tau} \tag{3.8}$$

$$\frac{dn_c}{dt} = -\frac{dn_i}{dt} - \frac{n_c}{\tau} \tag{3.9}$$

Sabit τ yük taşıyıcı ömrü için, iki uç durum vardır, bu durumları Nicholas ve Woods [29] birinci ve ikinci mertebeden olarak adlandırırken, Hearing ve Adams[27] yavaş yeniden tuzaklanma ve hızlı yeniden tuzaklanma adları ile incelemişlerdir.

3.2.1 Yavaş yeniden tuzaklanma

Yavaş yeniden tuzaklanma durumunda, iletim bandındaki bütün elektronlar deşiklerle yeniden birleşmektedirler ve yeniden tuzaklanma ihmal edilmektedir. Buna ek olarak denge durumuna yakın sistem kabul edilmelidir. Diğer bir deyişle yeniden birleşme yeniden tuzaklanmadan baskın olduğu denge şartı $\left(N_t - n_i\right) S_t v_{th} << \tau^{-1}$ ve $\left|\frac{dn_c}{dt}\right| << \left|\frac{dn_i}{dt}\right|$ ile karakterize edilir. Bu kabuller yardımıyla Denk.(3.8) ve (3.9) yeniden yazıldığında

$$\frac{dn_i}{dt} \approx -\frac{n_i}{\tau} = -n_i v \exp(-E_t / kT) \qquad (3.10)$$

ve

$$\frac{dn_i}{dt} \approx -\frac{n_c}{\tau} \qquad (3.11)$$

elde edilir. Bu koşullar altında ve $T = T_0 + \beta t$ şeklinde doğrusal (lineer) bir ısınma fonksiyonu kabul edilerek, Denk.(3.10)'in integrali alınır

$$\frac{dn_i / dt}{n_i} = -v \exp(-E_t / kT)$$

$$\int_{t_o}^{t} \frac{dn_i / dt}{n_i} dt = -\int_{t_o}^{t} v \exp(-E_t / kT) dt$$

ve $T(t = 0) = T_o$ şartında $n_i(t = 0) = n_o$, $T = T_0 + \beta t$ ve $dT = \beta dt$ kullanılarak

$$(\ln n_i)\Big|_{t_o}^{t} = -\int_{T_o}^{T} \frac{v}{\beta} \exp(-E_t / kT) dT$$

$$\ln n_i - \ln n_o = -\int_{T_o}^{T} \frac{v}{\beta} \exp(-E_t / kT) dT$$

$$\ln \frac{n_i}{n_o} = -\int_{T_o}^{T} \frac{v}{\beta} \exp(-E_t / kT) dT$$

$$n_i = n_o \exp\left\{ -\int_{T_0}^{T} \frac{\nu}{\beta} \exp\left(-\frac{E_t}{kT} \right) dT \right\} \tag{3.12}$$

elde edilir. Burada n_o önceden tuzaklanmış elektron yoğunluğudur. Denk.(3.11) ve (3.12)'yi Denk.(3.10)'da yerine yazdığımızda

$$n_c = n_o \tau \ \nu \exp\left\{ -\frac{E_t}{kT} - \int_{T_0}^{T} \frac{\nu}{\beta} \exp\left(-\frac{E_t}{kT} \right) dT \right\} \tag{3.13}$$

Buradan Isısal uyarımlı iletkenliği Denk.(3.2) yardımıyla aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\sigma(T) = n_c e\mu = n_o \tau \ e\mu \ \nu \exp\left\{ -\frac{E_t}{kT} - \int_{T_0}^{T} \frac{\nu}{\beta} \exp\left(-\frac{E_t}{kT} \right) dT \right\} \tag{3.14}$$

Burada β ısıtma hızıdır.

3.2.2 Hızlı yeniden tuzaklanma

İkinci durum olan hızlı yeniden tuzaklanmada, iletim bandındaki ve tuzaklardaki elektronların arasında ısısal denge kurulması için gerekli zaman yeniden birleşme yarı ömründen çok küçüktür. Bu sebeple iletim bandı ile tuzaklar arasında etkin bir ısısal denge vardır. Bu denge $(N_t - n_i) S_t \nu_{th} >> \tau^{-1}$ şartını sağlamalıdır. Toplam elektron yoğunluğu $n = n_i + n_c$ olarak yazılır ve bunun yardımıyla Denk.(3.9) tekrar düzenlenirse

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{n_c}{\tau} \tag{3.15}$$

olur ve bu ifade Denk.(3.8) de kullanıldığında elektron yoğunluğundaki değişim

$$\frac{dn}{dt} = -\left[\frac{\frac{dn_i}{dt} + n_i N_c S_t v_{th} \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right)}{(N_t - n_i) S_t v_{th} \tau} \right] \tag{3.16}$$

veya

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{n_c}{\tau} = -\frac{n}{\tau}\frac{N_c}{N_t}\exp(-E_t / kT) \tag{3.17}$$

olarak elde edilir. Denk.(3.17) nin çözümü

$$n = n_o \exp\left\{ -\frac{1}{\beta}\int_{T_0}^{T} \frac{N_c}{N_t \tau}\exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right) dT \right\} \tag{3.18}$$

şeklindedir ve buradan Isısal uyarımlı iletkenliği hızlı yeniden tuzaklanma (ikinci mertebe) için Denk.(3.2) yardımıyla aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\sigma(T) = n_c e\mu = \frac{N_c}{N_t} n_o e\mu \exp\left\{ -\frac{E_t}{kT} - \frac{N_c}{N_t \beta \tau}\int_{T_0}^{T} \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right) dT \right\} \tag{3.19}$$

Her ne kadar Denk.(3.14), Denk.(3.19)'a yol açan varsayımdan tamamen farklı bir yaklaşımın sonucu ise de, bulunan sonuç oldukça benzer olup, $N_c/(N_t\tau)$'nun (ki bu, önceki durumda $N_c S_t v_{th}$ ye benzer şekilde, s^{-1} birimindedir) burada frekans çarpanıyla yer değiştirdiği, birinci mertebeden bir eğridir. Hem $N_c/(N_t\tau)$ hem de $N_c S_t v_{th}$ sıcaklığa bağlı olabilir ve dolayısıyla, hassas bir çalışmada, integral içerisinde yer almalıdır. Bununla birlikte, bu bağımlılığın belirli bazı

durumlarda, bir takım TL ifadelerindekine benzer şekilde, T^a biçiminde bir davranış göstermesi beklenir. Bu sıcaklık bağımlılığı üstel terimden çok daha yavaştır ve bu nedenle, bir ilk yaklaşım olarak bazen ihmal edilir. Buehler[34], bu durumu a=2 için tartışmış olup bu davranış biçimi TSC eğrilerinin analizlerinde kabul görmektedir.

Birinci ve ikinci mertebeden TSC piklerinin oldukça ayrıntılı incelemesi, Nicholas ve Woods[29] tarafından bir araya toplanmıştır. Bu araştırmacılar CdS deki bir takım piklerle ilgili etkin frekans çarpanlarından yararlanarak yeniden tuzaklanma tesir kesitlerini hesaplamışlardır. Daha yeni bir makalede (Rabie ve Rumin[36]), Zn eklenmiş Si ile ilgili çalışma sonuçları verilmiştir. Birinci mertebeli piklerin, ısıtma süreci boyunca sabit kalan bir τ değerine sahip olduğu bulunmuş ise de, τ negatif yüklü Zn iyonlarının yoğunluğuna şiddetli biçimde bağlıdır. Bu nedenle araştırmacılar, aynı E aktivasyon enerjilerine fakat farklı τ değerlerine sahip bir dizi numune hazırladılar. Yavaş yeniden tuzaklanma durumu için Denk.(3.14)'ten türetilen maksimum koşul($d\sigma(T)/dT = 0$)

$$\exp(\ E\ /\ kT_m\ ) = \frac{N_c S_t v_{th} kT_m^{\ 2}}{\beta E} \tag{3.20}$$

şeklinde olacaktır. Bu denklem ise maksimum sıcaklığa bağlı olan, birinci mertebeden TL ve TSC piklerinin maksimum şiddet denklemine oldukça benzerdir. Bu durumda Denk.(3.20),

$$1\ /\ kT_m\ =\ (k\ /\ E)\ \ln(\ T_m^2\ /\ \tau\ )\ +\ A \tag{3.21}$$

biçiminde yazılabilir. Bu yaklaşım değişik ısıtma hızları yönteminde incelenecektir. Burada $\ln(\ T_m^2\ /\ \tau\ )$ nın $(1\ /\ T_m)$ e göre grafiği çizilirse eğimi aktivasyon enerjisi E'yi veren düz bir doğru elde edilir. Değişik τ değerleri, fotoakım ölçümlerinde ayrı ayrı tayin edilebilir. Denk.(3.4)'de bir parametre olarak gözükmediği için, yavaş yeniden

tuzaklanma durumunda bunun bir etkisinin olması beklenmez. Bununla birlikte Zn katkılanmış Si'un yoğunluğuna bağımlılık etkisi hızlı yeniden tuzaklanmanın daha baskın olduğuna işaret eder.

Bunlara ek olarak, τ nun sabit kaldığı durumlar Saunders[37] tarafından tartışılmıştır ve Chen[38] tarafından daha ayrıntılı biçimde incelemiştir. Chen bu araştırmalarında piklerin şekillerinden (maksimum ve yarı şiddet değerlerinden) biçim çarpanı denilen $\mu_g = \delta / \omega$ karakteristik değerine göre pikin hangi mertebeden bir TSC piki olduğunu tanımlamıştır. Bu parametreler pik şekli yönteminde açıklanacaktır. Benzer bir çalışma Braunlich[39] tarafından gerçekleştirmiştir.

Isısal uyarımlı olarak bir numunedeki iletkenlik, iletim bandındaki serbest elektronlar ve valans bandaki deşikler dışında elektron ve deşik sıçraması (Hopping)[40-42] ile yüklü iyonların sıçramasından[42-46] kaynaklanarak artabilir. Bu iki durumda da etkinin sıcaklığa esas bağımlılığı, mobilitenin sıcaklığa üstel bağımlılığından kaynaklanmaktadır. Bu nedenle Chen[47] bu olayı "mobiliteden kaynaklanan TSC" olarak adlandırmıştır.

Deneysel olarak elde edilen TSC spektrumlarının analizi için aşağıdaki yöntemler kullanılabilir.

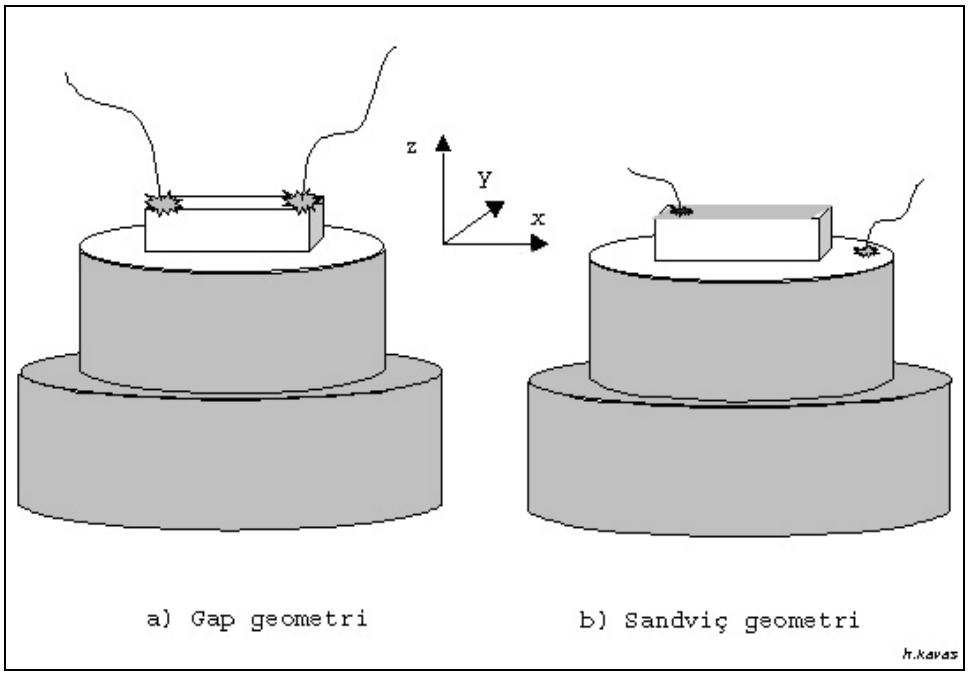
1. Başlangıç yükselmesi yöntemi
2. Eğri uydurma yöntemi
3. Pik şekli (Chen) yöntemi
4. Değişik hızlarda ısıtma yöntemi
5. Isısal temizleme yardımcı yöntemi

Bu yöntemler ileride, TSC spektrumlarının analizleri $TlGaSe_2$ numunesi üzerinde uygulamaları ile anlatılacaktır.

4. DENEYSEL YÖNTEM

4.1.Numunenin Hazırlanması

Numune genellikle yalıtkan veya yarıiletken olup, Czochralski, Bridgman, Kimyasal Buhar Çökeltme (CVD), Sıvı Faz Epitaksi (LPE) veya Moleküler Demet Epitaksi (MBE) yöntemlerinden birisi ile büyütülebilir. Analizlerine yer verdiğimiz $TlGaSe_2$ numunesi p-tipi, Bridgman tekniği ile büyütülmüş ve yasak band enerjisi 300 K'de $E_g \geq 2{,}11eV$ olan tabakalı tek kristal yapıdadır.



Şekil 2. Numunenin katmanları x-y düzlemlerindedir. **a)** Gap geometrisinde kontaklar numunenin aynı yüzeyine yapılır ve x-doğrultusunda (katmanlara paralel) geçen akım ölçülür. **b)** Sandviç geometrisinde kontaklar numunenin farklı ama paralel yüzeylerine yapılır ve z-doğrultusunda (katmanlara dik) geçen akım ölçülür.

Numunenin sahip olduğu yapısal bozuklukları TSC yöntemiyle belirlenmek için numuneye yapılacak kontakların daha önce belirtildiği gibi kristalin direncine etkisi az olacak gerçekleştirilmelidir. Kontaklar kristale iki şekilde yapılabilir; "gap"

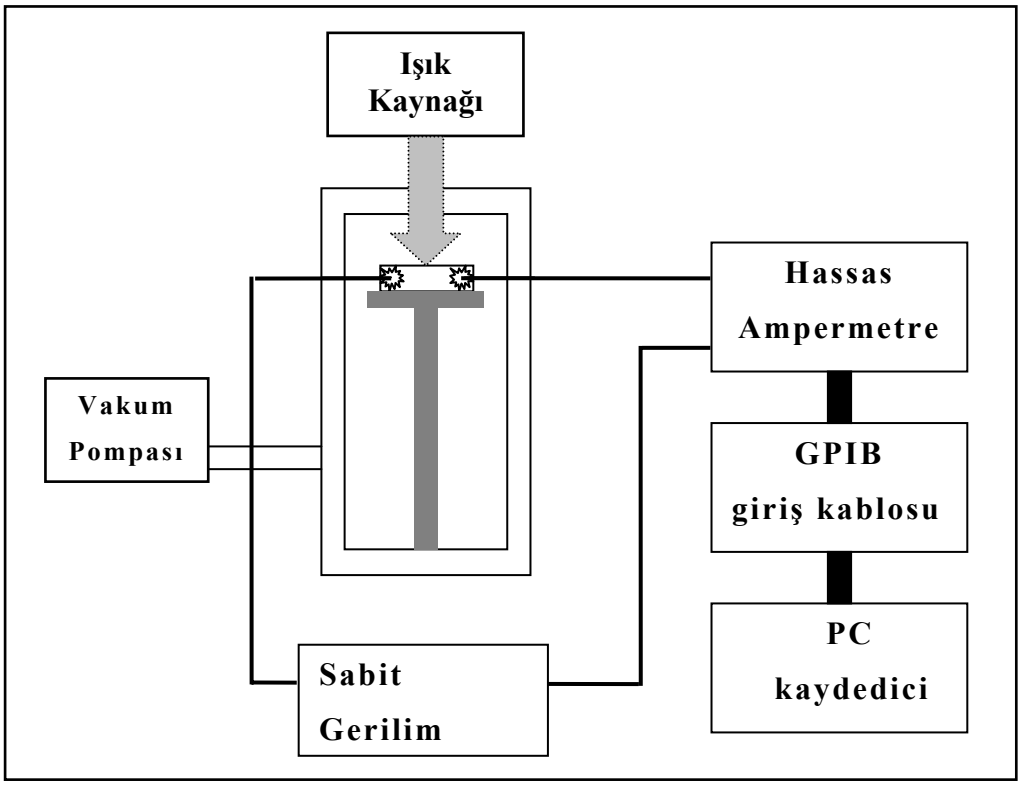
veya “sandviç” kontak türleri (Şekil 2). İlk kontak şekli olan gap geometrisinde bakır para üzerine yapıştırılmış olan numunenin katmanları x-y düzlemleri boyunca uzanmaktadır ve teller numunenin aynı yüzeyine gümüş pasta yardımı ile yapıştırılır. Böylelikle x-doğrultusu boyunca yani katmanlara paralel geçen akım ölçülür. Diğer tip olan sandaviç geometrisinde ise, teller numunenin farklı ama paralel yüzeylerine yapıştırılır ve z-doğrultusunda (tabakalara dik) geçen akım ölçülmüş olur. Bunun için numunenin ışıklandırılacak yüzeyi Altın gibi iyi bir iletkenle mikron mertebesinde kaplanmalıdır. Böylelikle hem saydamlık sağlanır hem de yüzey boyunca geçen akım kontrol edilmiş olur. $TlGaSe_2$ ve $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numunelerine gap geometrisinde kontaklar yapılmıştır.

4.2.Deney Düzeneğinin Tanıtımı

Hazırlanan numune kriyostada ışıklandırılması gereken yüzeyine dikkat edilerek yerleştirilir. Vakum pompası yardımıyla havası alınan kriyostat soğutulmaya bırakılır. Şekil 3’de görüldüğü gibi numune üzerinde sabit bir gerilim geçirmek için bir gerilim kaynağı, numune üzerinden geçen akımı ölçebilmek için hassas bir ampermetre, okunan değerleri kaydetmek için uygun bir program, bu programı destekleyen yardımcı donanım ve yazılım elemanları (giriş kablosu, Labwiew 6.0 vb.) gerekmektedir. Numunedeki valans elektronlarının uyarılması için gerekli enerjiye sahip dalga boylu ışıma yapan ışık kaynağı kullanılmalıdır.

Vakumlu bir şekilde soğutulmuş bir kriyostatın en düşük sıcaklığına inildikten sonra belirli bir süre beklenerek numune sıcaklığınında aynı değerde olması sağlanır. Aydınlatma süreci başlatılır ve akım artışı gözlenir. Akımın sabitlenmesi tuzakların doldurulduğu anlamına geldiği için yeterli uyarılma sağlanmış olur. Bu süreçte ışık kaynağın şiddeti de önemli bir noktadır. Işıklandırma

sonunda foto-iletkenlik etkisi geçinceye kadar beklenir ve sonra kontrollü ve sabit bir oranda ısıtılmaya başlanır. Numuneden geçen akım ve numune sıcaklığı kaydedilir. Her iki numune içinde; Lake-Shore 331 sıcaklık kontrolörü, Keithley 228A Gerilim/Akım kaynağı, Keithley 6485 pikoampermetre, kapalı devre Helyum soğutuculu kriyostat ve 2.6 eV enerjili salınım yapan mavi LED kullanılmıştır.

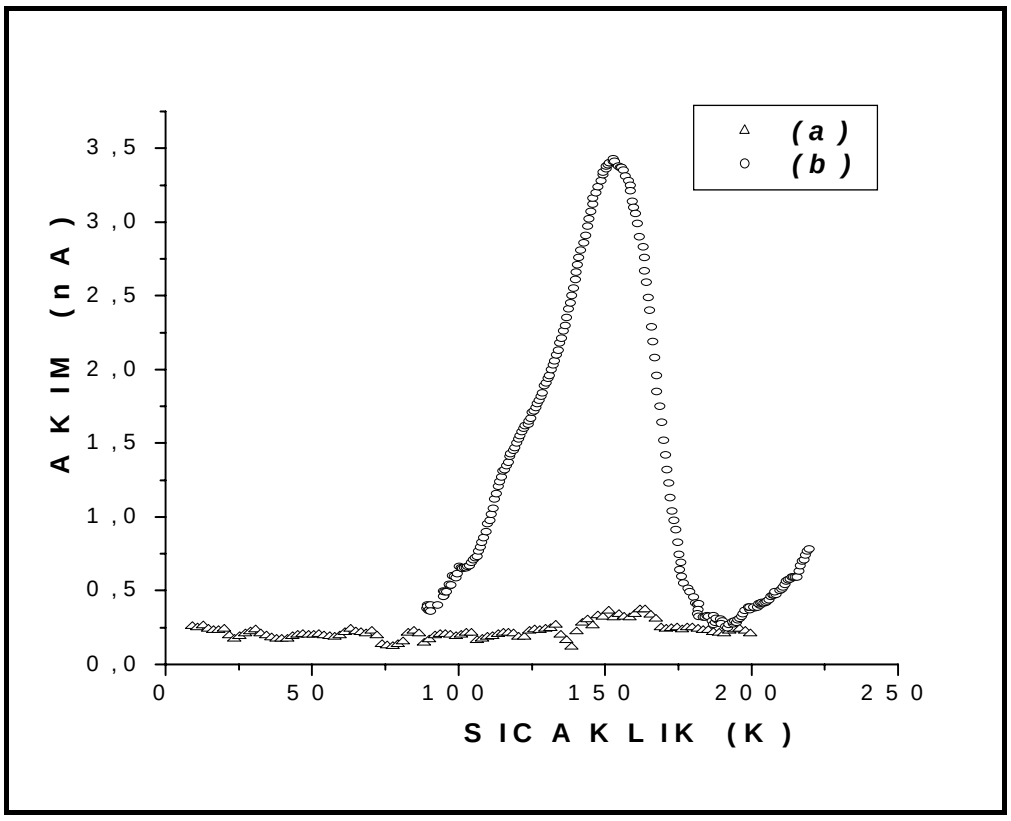


Şekil 3. Örnek bir Isısal Uyarımlı Akım (TSC) ölçüm düzeneği.

5. DENEYSEL SONUÇLARIN ANALİZİ

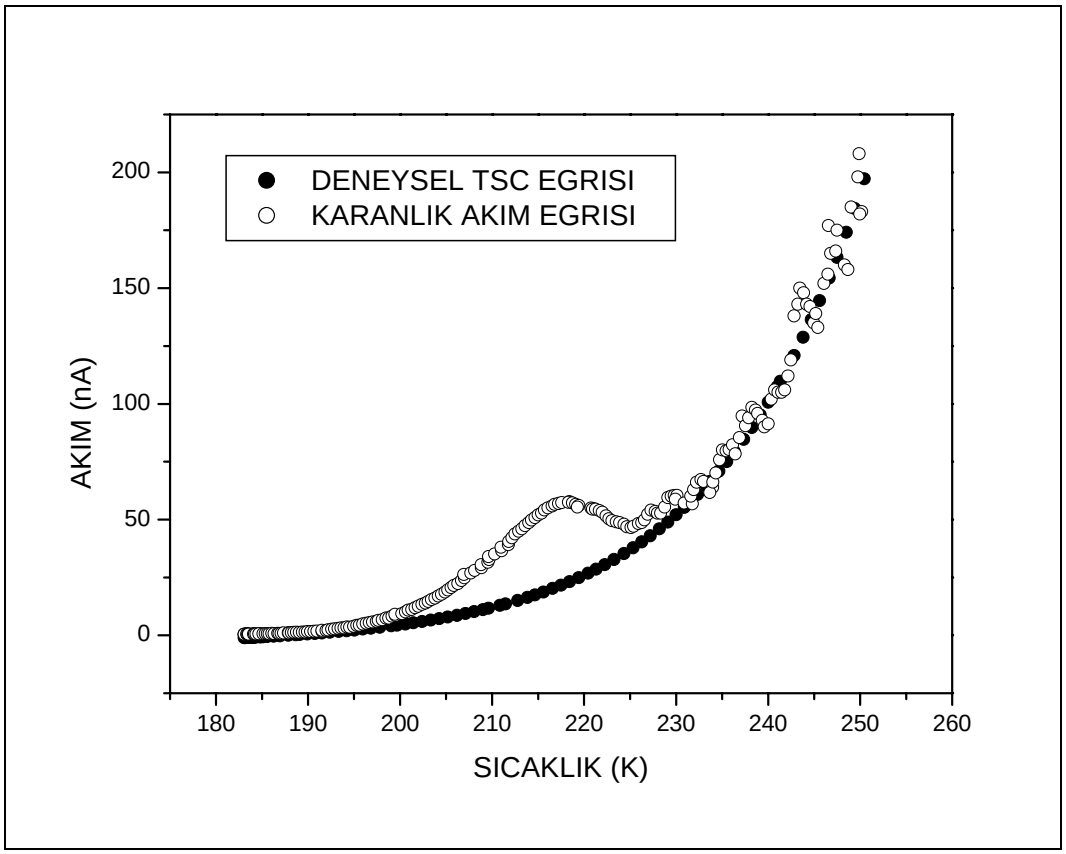
Deney sonucunda elde ettiğimiz Akım-Sıcaklık grafiğinden yukarıdaki analiz yöntemleri kullanılarak E_t, tuzakların aktivasyon enerjileri; N_t, tuzakların yoğunlukları ve S_t, tuzaklanma kesitleri gibi bazı parametreler bulunabilir.

$TlGaSe_2$ numunesinin 8 K/dk ısıtma hızı ile ısıtılarak elde edilmiş deneysel TSC spektrumu Şekil 4'te gösterilmiştir. 120.2 ve 153 K sıcaklıklarında pikler tespit edilmiştir [48].



Şekil 4. $TlGaSe_2$ numunesi için 8 K/dk ısıtma hızı ile ede edilmiş deneysel TSC spektrumları; ***(a)*** eğrisi 10 K de aydınlatılmış ve ***(b)*** eğrisi ise 90 K de aydınlatılmıştır.

$TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numunesinin 1 K/dk ısıtma hızı ile ısıtılarak elde edilmiş deneysel TSC spektrumunda karanlık akımın yüksek değerlere ulaştığı yüksek sıcaklıkta (216.8 K) bir pik elde edilmiştir (Şekil 5).



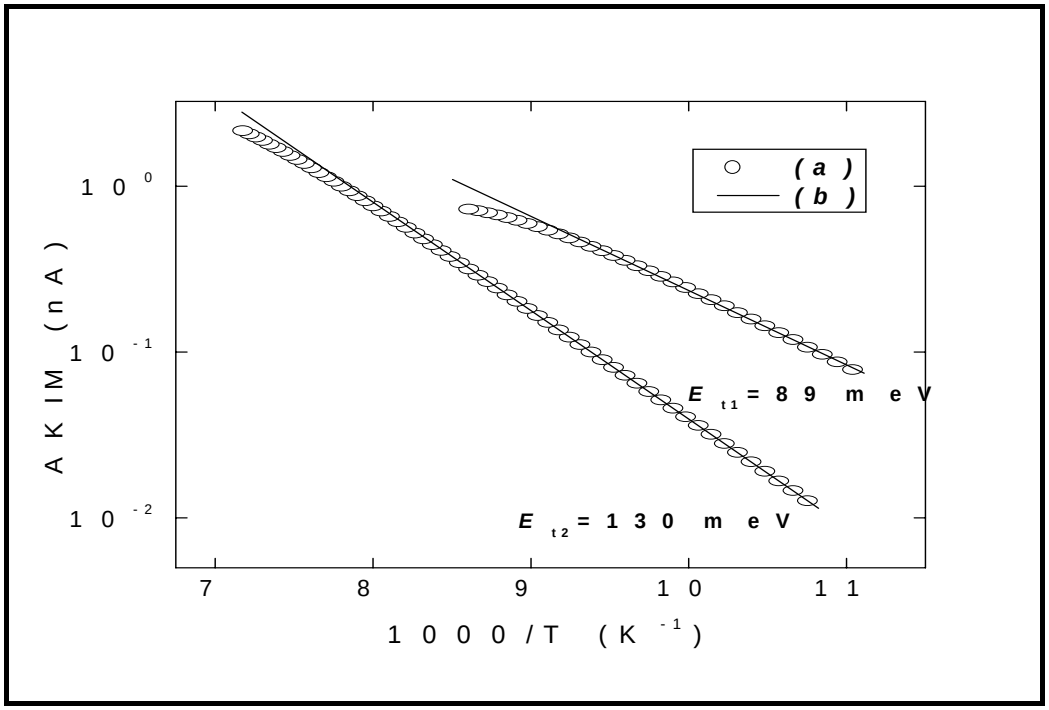
Şekil 5. $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numunesi için 1 K/dk ısıtma hızı ile elde edilmiş deneysel TSC spektrumları; dolu halkalar deneysel TSC eğrisine ait olup 185 K de aydınlatılmış ve boş halkalar ise aydınlatılma olmadan elde eilmiş karanlık akım eğrisidir.

5.1.Başlangıç Yükselmesi (İlk Yükselme) Yöntemi

Bu yöntem Garlick ve Gibson[49] tarafından ortaya konulmuştur ve her tip kinetik için geçerlidir. Bu yönteme göre tuzaklar boşalmaya başladığında Isısal uyarımlı iletkenlik (TSC), $\exp(-E_t/kT)$ ile orantılı

olarak artacaktır. Burada E_t, tuzağın aktivasyon enerjisi ve k, Boltzman sabitidir. Denk.(3.14) için $T \approx T_0$ (ilk yükselme durumunda) integral değeri küçük bir sayı olacak ve ikinci üstel kısmın değeri yaklaşık 1 olacak ve bir sabit gibi davranacaktır. Buradan iletkenlik veya akım $\exp(-E_t / kT)$ ile doğru orantılı değişecektir;

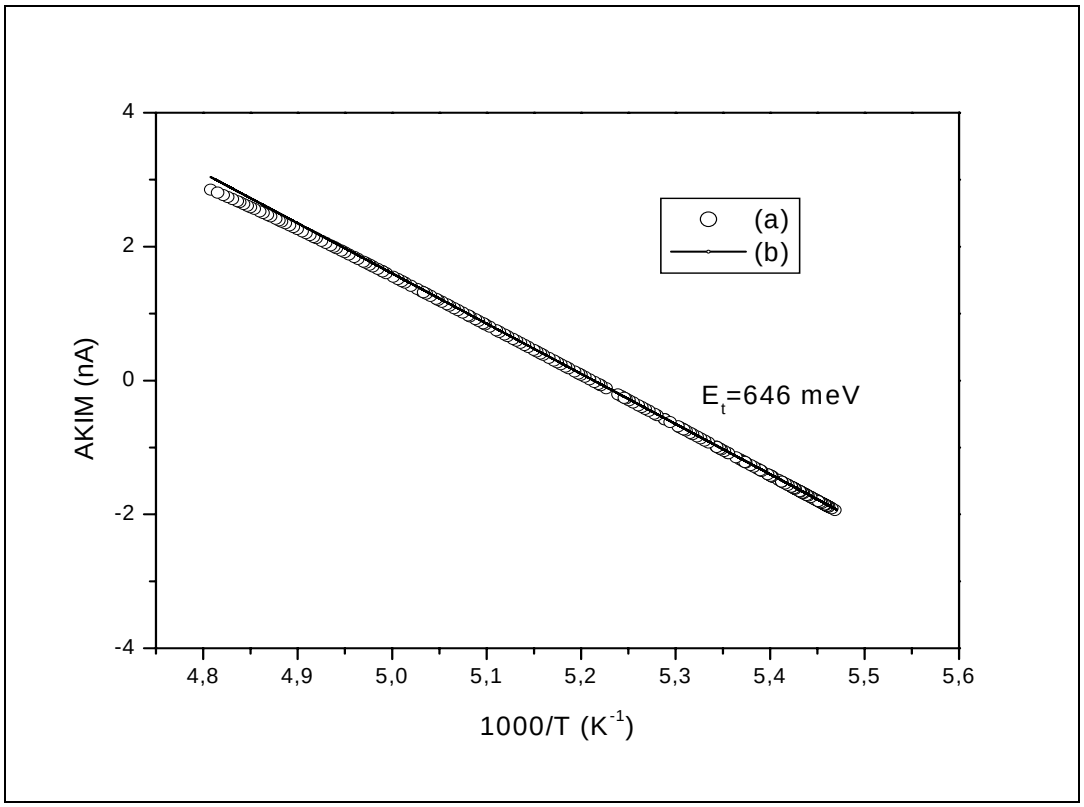
$$I \propto \exp(-E_t / kT) \tag{5.1}$$



Şekil 6. $TlGaSe_2$ numunesinde Isısal uyarımlı akım (TSC)-1000/T grafiği. Başlangıç yükselmesi yöntemine göre; **(a)** Deneysel sonuçlar ve **(b)** Doğrusal (Lineer) fit işlemi sonucu, tuzakların aktivasyon enerjileri 89 ve 130 meV (sırasıyla 120.2 ve 153 K) olarak hesaplanmıştır.

Sonuç olarak $\ln(I)$-1/T grafiği çizildiğinde, elde edilen doğrunun eğimi $-E_t / k$ değerine eşittir ve buradan E_t kolaylıkla hesaplanabilir. Şekil 6'da $TlGaSe_2$ için bu yöntemle çizilmiş grafik görülmektedir. Bu yöntemle tuzakların aktivasyon enerjileri 89 ve 130 meV (sırasıyla 120.2 ve 153 K) olarak hesaplanmıştır.

Şekil 7'de ise $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ için yine aynı yöntemle çizilmiş grafik görülmektedir. Tuzak aktivasyon enerjisi 646 meV (216.8 K) olarak bulunmuştur.



Şekil 7. $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numunesinde Isısal uyarımlı akım (TSC)-1000/T grafiği. Başlangıç yükselmesi yöntemine göre; **(a)** Deneysel sonuçlar ve **(b)** Doğrusal (Lineer) fit işlemi sonucu, tuzakların aktivasyon enerjisi 646 meV olarak hesaplanmıştır.

5.2.Eğri Uydurma Yöntemi

Monomoleküler (yavaş yeniden tuzaklanma) durumlar için iletim bandından E_t kadar az bir enerji değerindeki tuzağa ait TSC eğrisinin, iletkenlik denklemi (Denk.(3.14) Cowel ve Woods[32] tarafından aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$\sigma(T) = n_o \tau \; e\mu \; v \exp\left\{ -\frac{E_t}{kT} - \int_{T_0}^{T} \frac{v}{\beta} \exp\left(-\frac{E_t}{kT} \right) dT \right\} \qquad (5.2)$$

Burada, tuzaktan kurtulma eğilim frekansı $v = N_c v_{th} S_t$ şeklindedir. v'nün sıcaklıktan bağımsız olduğu göz önüne alınır ve μ ve τ parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri ihmal edilirse, Denk.(5.2) aşağıdaki gibi yeniden düzenlenebilir:

$$\sigma = A \exp\left\{ -t - B \int_{t_0}^{t} \exp(-t) t^{-2} dt \right\} \qquad (5.3)$$

burada $t = E/kT$, A ve B sabitleri $A = n_o \tau e \mu v$ ve $B = vE/\beta k$ şeklindedir. Tekrarlı integral çözümü aşağıdaki yakınsak seriyi verir;

$$\sigma = A \exp\left[-t - B \left\{ \exp(-t) t^{-2} - 2\exp(-t) t^{-3} + 3 \times 2 \exp(-t) t^{-4} \ldots \right\}_{t_0}^{t} \right] \qquad (5.4)$$

Burada t, pratik olarak 15-40 aralığında büyük bir değerdedir; dolayısıyla σ hesaplanırken sadece ilk terimi yeterlidir.

$$\sigma \approx A \left\{ -t - B \exp(-t) t^{-2} \Big|_{t_0}^{t} \right\} \qquad (5.5)$$

Eğer TSC eğrisi boyunca t_0 değeri t'nin bütün değerlerinden büyükse Denk.(5.3)'deki alt limit ihmal edilebilir ve

$$\sigma \approx A \left\{ -t - B \exp(-t) t^{-2} \right\} \qquad (5.6)$$

bulunur. Bu ifade elde edilen TSC eğrisini tanımlayan en basit eşitliktir. Denk.(5.6) iletkenliğin en yüksek değeri (piklerin tepe

noktası) için türevi alınıp sıfıra eşitlenirse, en yüksek sıcaklıkta (T_m), $t_m = E/kT_m$ için

$$B = \exp(t_m)\frac{t_m^3}{t_m + 2} \tag{5.7}$$

elde edilir. TSC spektrumundaki bütün pikleri analiz etmek için eğri uydurma fonksiyonu,

$$\sigma(T) = \sum_{i=1}^{m} \sigma_i(T) \tag{5.8}$$

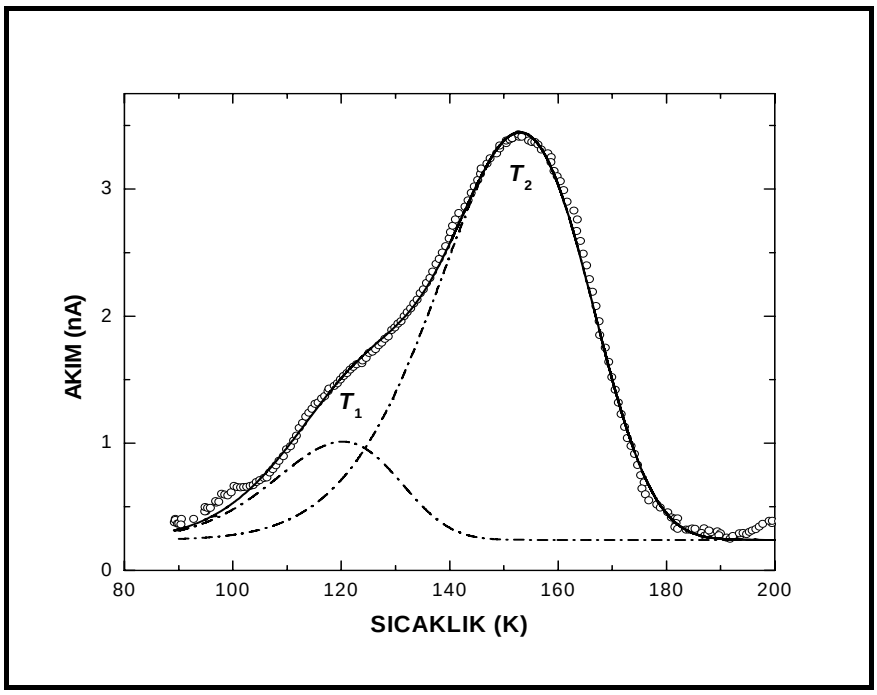
şeklinde ifade edilmelidir. Burada $\sigma_i(T)$ her bir pikin iletkenlik dağılımı ve m tuzakların sayısıdır.

Denk.(5.6) yardımıyla elde edilen teorik eğri, deneysel eğri ile en iyi biçimde uyuşacak şekilde E_g değeri ayarlanır. Şekil 8 de $TlGaSe_2$ için "eğri uydurma yöntemi" ile 98 ve 130 meV enerjili pikler hesaplanmıştır. Şekilde boş daireler deneysel eğriyi, sürekli çizgiler 120 K ve 153 K'de iki pik yardımıyla uydurulmuş teorik eğriyi ve kesikli çizgiler bu iki pikin bağımsız değişimlerini göstermektedir.

Şekil 9 da ise $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ için yine aynı denklem ile 650 meV enerjili pik hesaplanmıştır. Şekilde; boş daireler deneysel eğriyi, sürekli çizgiler Denk.(5.6) yardımıyla uydurulmuş teorik eğriyi göstermektedir.

Buradan bulunan E_t ve T_m değerleri için t_m değeri hesaplanabilir. Bu değer Denk.(5.7)'de yerine konularak B değeri bulunur. $B = vE/\beta k$ eşitliğinden v tuzaktan kurtulma eğilim frekansı hesaplanır. Elektronun ısısal hızı $1/2m_e v_{th}^2 = 3/2kT_m$ eşitliğinden, N_c,

iletim bandındaki ısısal olarak ulaşılabilen durum yoğunluğu ise $N_c = 2(2\pi m_e^* kT / h^2)^{3/2}$ eşitliğinden $m_e^* = m_0$ kabulü ile hesaplanır.

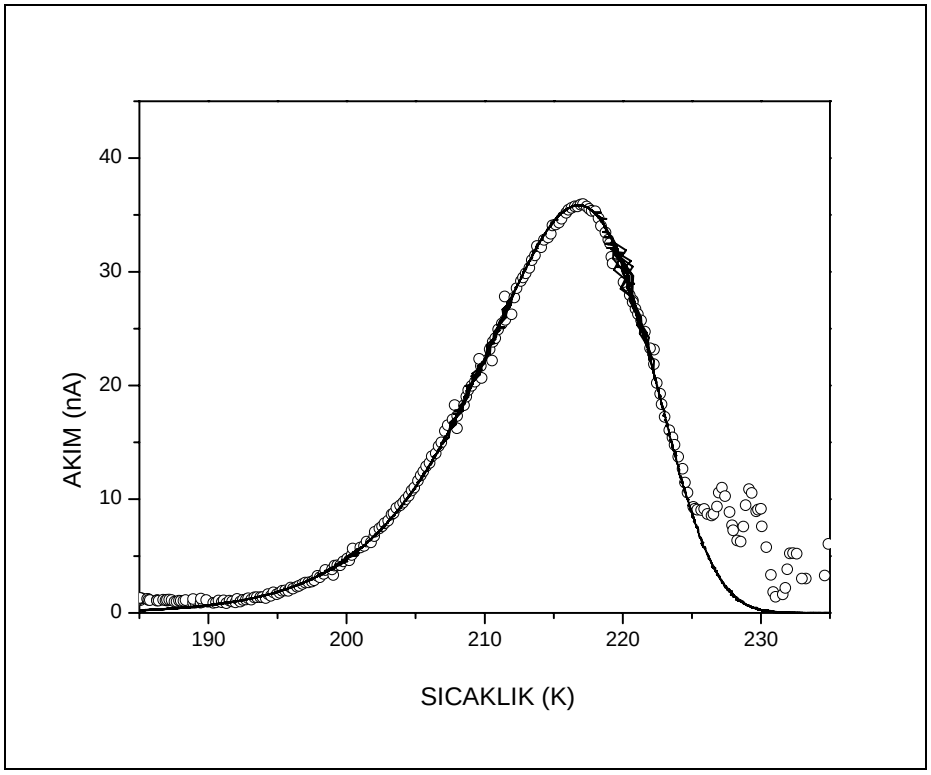


Şekil 8. $TlGaSe_2$ numunesi için deneysel eğri boş daireler, uydurulmuş teorik eğri sürekli çizgi ve uydurulmuş eğrinin ayrıştırılması sonucu elde edilmiş pikler kesikli çizgiler ile göstermektedir.

Sonuç olarak $v = N_c v_{th} S_t$ eşitliğinden de S_t tuzaklanma kesiti hesaplanabilir. S_t değerleri $TlGaSe_2$ numunesinde birinci ve ikinci tuzaklar için, 2.3×10^{-24} ve $1.8\times10^{-24}\,cm^2$ olarak ve $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numunesinde, 8.55×10^{-18} cm^2 olarak hesaplanmıştır (Çizelge 1). Tuzak yoğunluğu N_t ise Manfredotti ve arkadaşları[50] tarafından

$$N_t \frac{Q}{ALeG} \qquad (5.9)$$

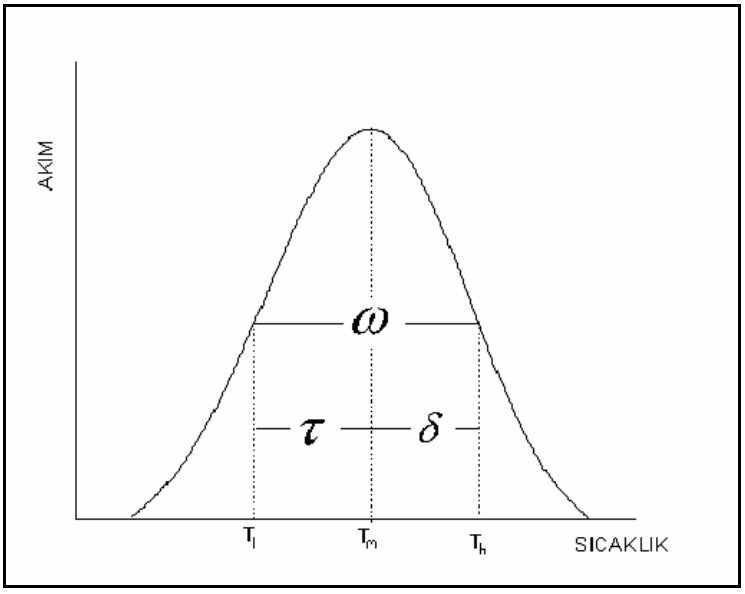
ifadesi ile bulunabileceği bildirilmiştir. Burada Q, TSC deneyi esnasında serbest kalan yüklerin miktarıdır ki TSC eğrilerinin altında kalan alan yardımıyla hesaplanabilir. A numunenin yüzey alanı, L numunenin uzunluğu ve e elektronun yüküdür. G fotoiletkenlik kazancı olup, her bir soğurulan foton için numuneden geçen elektron sayısına eşittir. N_t hesaplanırken $G = 1$ alınır çünkü TSC deneyi ile aynı anda G'nin ölçümü mümkün değildir. Boyutları $9 \times 4 \times 0.5$ mm^3 olan $TlGaSe_2$ için hesaplanan N_t değerleri 1.4×10^{14} ve 3.8×10^{14} cm^{-3} iken $10 \times 5 \times 1$ mm^3 boyutlu $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ için hesaplanan N_t değeri 7.15×10^{16} cm^{-3} olarak bulunmuş ve Çizelge 1'de verilmiştir.



Şekil 9. $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numunesi için deneysel eğri boş daireler ile, uydurulmuş teorik eğri ise sürekli çizgi ile gösterilmektedir.

5.3.Pik Şekli Yöntemi

Chen'in[51] bulduğu bu yöntemde her bir tuzak için üç ayrı aktivasyon enerjisi hesaplanır. Bu hesaplamalar için kullanılan parametreler $\tau = T_m - T_l$, $\delta = T_h - T_m$, $w = T_h - T_l$, $\mu_g = \delta / w$ dır. Burada T_m maksimum (iletkenlik) şiddet sıcaklığı, T_l ve T_h ise yarı-şiddet değerindeki düşük ve yüksek sıcaklık değerleridir (Şekil 10).



Şekil 10. Pik şekli yöntemindeki parametreler; $\tau = T_m - T_l$, $\delta = T_h - T_m$, $w = T_h - T_l$, $\mu_g = \delta / w$, burada T_m maksimum (iletkenlik) şiddet sıcaklık, T_l ve, T_h ise yarı-şiddet değerindeki düşük ve yüksek sıcaklıklardır.

Tuzakların aktivasyon enerjileri:

$$E_\tau = [1.51 + 3.0(\mu_g - 0.42)]kT_m^2/\tau - [1.58 + 4.2(\mu_g - 0.42)]2kT_m,$$

$$E_\delta = [0.976 + 7.3(\mu_g - 0.42)]kT_m^2/\delta, \qquad (5.10)$$

$$E_w = [2.52 + 10.2(\mu_g - 0.42)]kT_m^2/w - 2kT_m,$$

denklem setinden hesaplanır. Birinci mertebeden kinetikler için μ_g tahmini olarak 0.42, ikinci mertebeden kinetikler için ise 0.52 olarak alınır. $TlGaSe_2$ çalışmalarında μ_g değerleri ilk pik için 0.44 ve ikinci pik için ise 0.45 olarak hesaplanmıştır. Bununla birlikte Denk.(5.10) kullanılarak tuzakların aktivasyon enerjileri E_τ, E_δ ve E_w hesaplamış olup ortalama değerleri sırasıyla $TlGaSe_2$ için 107 ve 142 meV ve $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ için 662 meV olarak Çizelge 1'de verilmiştir.

5.4.Değişik Hızlarda Isıtma Yöntemi

Bütün parametreler sabit tutularak, farklı ısıtma hızlarında çok sayıda ölçüm alınması ve bu farklı ısıtma hızlarındaki kinetik denklemlerin karşılaştırılması esasına dayanan bir yöntemdir. Denk.(3.20), $\nu = N_c/(N_t\tau)$ eşitliğindeki ν frekans çarpanı yerine konularak yeniden düzenlenirse,

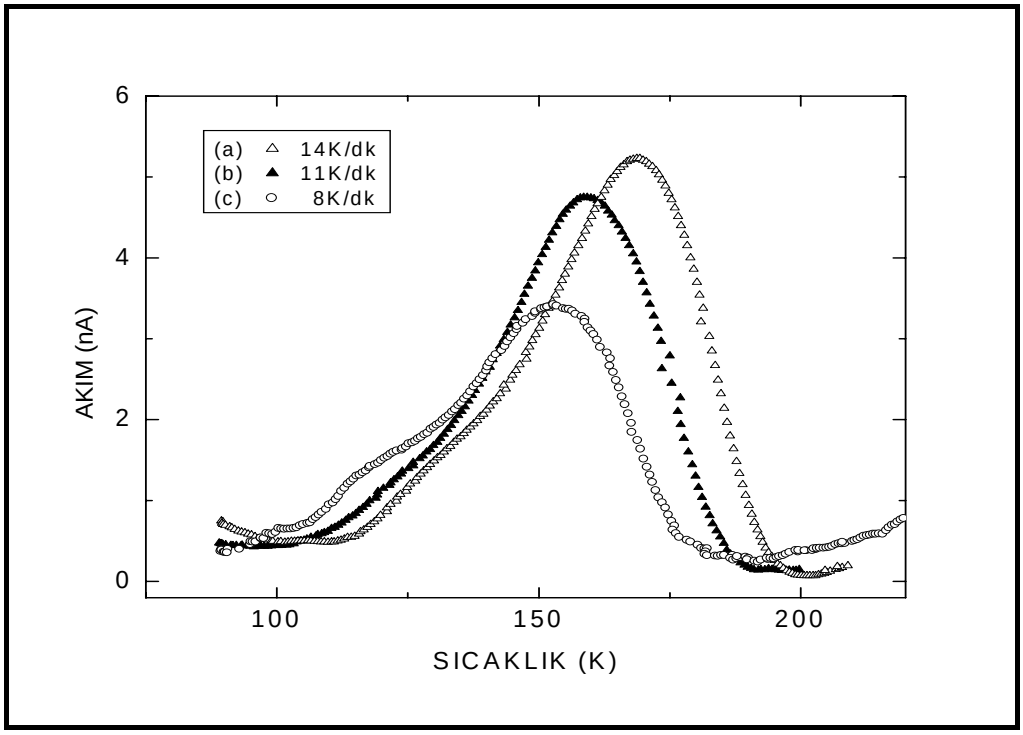
$$\beta = \left(\frac{\nu k}{E}\right) T_m^2 \exp(E / kT_m) \qquad (5.11)$$

eşitliği elde edilir. İki farklı ısıtma (β_1 ve β_2) için iki farklı T_{m1} ve T_{m2} elde edilir. Denk.(5.11) bu ısıtma hızlarına göre yazılıp birbirlerine oranlanır. Daha sonra elde edilen eşitlik düzenlenirse,

$$E = \left[kT_{m1}T_{m2}/(T_{m1} - T_{m2})\right] \ln\left[(\beta_1/\beta_2)(T_{m2}/T_{m1})\right] \qquad (5.12)$$

eşitliğine ulaşılır. Bu son eşitlikten tuzağın aktivasyon enerjisi E hesaplanabilir. E değerinin de Denk.(5.11)'de yerine konmasıyla ν frekans çarpanının değeri hesaplanır. Değişik ısıtma hızları denerek

elde edilen $TlGaSe_2$ numunesinin TSC spektrumu Şekil 11 de gösterilmektedir.

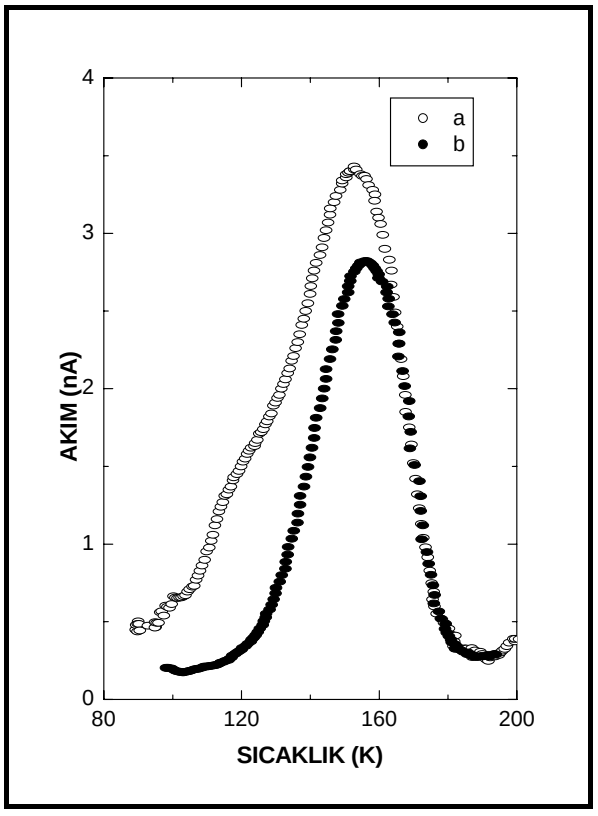


Şekil 11. $TlGaSe_2$ numunesi için farklı ısıtma hızlarında elde edilmiş TSC eğrileri (a) 14K/dk, (b) 11 K/dk ve (c) 8 K/dk.

$TlGaSe_2$, numunesinin tuzak enerjilerinin hesaplanmasında bu yöntem fazla uygun bulunmamıştır. Bunun sebebi, Şekil 8'de de görüldüğü gibi, ısıtma hızı arttıkça piklerin birbirlerine yaklaşması ve ayrıştırmadan doğacak farklılıkların kontrol edilememesidir. Düşük ısıtma hızlarında ise pik şiddetinin düşük olup temel düzey akımına yakın olduğu için analizde kötü sonuçlar vermektedir. $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ den elde edilen eğrininde karanlık akım eğrisine yaklaşmasından dolayı bu yöntem kullanılamamıştır.

5.5.Isısal Temizleme Yardımcı Yöntemi

Bu yöntem kendi başına bir analiz yöntemi olmayıp sadece üst üste gelen piklerin ayrıştırılması için kullanılır. Isısal temizleme yönteminin uygulanabilmesi için numune ilk pikin maksimum sıcaklığına kadar ısıtılır ve ilk tuzağın boşaltılması sağlanır. Daha sonra sıcaklık başlangıç sıcaklığına getirilip tekrar aynı ısıtma hızı ile numune ısıtılmaya başlanır. Birinci pike sebep olan tuzak boşaltılmış olduğu için spektrumu görünmeyecektir ve sadece ikinci pikin görülmesi beklenir.



Şekil 12. $TlGaSe_2$ numunesi için normal ve ısısal temizlemenin uygulandığı TSC eğrileri (a) ısısal temizleme olmaksızın elde edilen TSC eğrisi, (b) ısısal temizleme sonrası elde edilen ve yalnız ikinci piki içeren TSC eğrisi.

Yalnız $TlGaSe_2$ için kullanılan bu yöntemle elde edilen spektrumların eğri uydurma yöntemi ile analizi sonucu ikinci tuzağın

aktivasyon enerjisi hesaplanabilir ve önceki (yani ısısal temizleme olmadan elde edilen) aktivasyon enerji değeri ile karşılaştırılır. $TlGaSe_2$, numunesi için 120-121 K sıcaklıklarında ısısal temizleme uygulanmış ve Şekil 12 elde edilmiştir. Bu uygulama sonucu ikinci pikin aktivasyon enerjisinin, diğer yöntemlerde elde edilen değer ile iyi bir uyum gösterdiği görülmüştür.

6. SONUÇ ve TARTIŞMA

Kristallerin içindeki yapısal bozuklukların tespiti ve analizi için geliştirilen yöntemlerden Isısal uyarımlı iletkenlik (TSC) yöntemini, bu yöntemin değişik kinetiklerini ve $TlGaSe_2$ ve $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numuneleri üzerindeki uygulamalarını incelemeye çalıştık. Çizelge 1'de uygulanan değişik yöntemlerde elde edilen sonuçlar topluca sunulmaktadır. Ölçüm sistemlerinin hassalığı ve analiz yöntemlerinin uygunluğu bu teorinin iyi bir uygulamasına yardımcı olmuştur.

Çizelge 1. $TlGaSe_2$ ve $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numunesinin TSC spektrumlarının analizleri sonucunda çeşitli yöntemlerle bulunan tuzak aktivasyon enerjileri E_t, tuzak yakalanma kesitleri S_t ve tuzak yoğunlukları N_t listelenmiştir[48].

Numune	Sıcaklık (K)		E_t (meV)		S_t (cm^2)	N_t (cm^{-3})
		Başlangıç Yükselmesi Yöntemi	Eğri Uydurma Yöntemi	Pik Şekli Yöntemi		
$TlGaSe_2$	120.2	89	98	107	2.3×10^{-24}	1.4×10^{14}
	153.0	130	130	142	1.8×10^{-24}	3.8×10^{14}
$TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$	216.8	646	650	662	8.55×10^{-18}	7.15×10^{16}

$TlGaSe_2$ numunesinde bulunan 98 ve 130 meV enerjili tuzak merkezleri yasak band enerjisine göre kıyas edildiğinde sığ düzeyler olduğu gözlenmektedir. Bu tuzak merkezlerinin sebep olduğu pikler brirınci mertebeden diğer bir deyişle yavaş yeniden tuzaklanma kinetiğine uyan ve iç içe geçmiş geniş bir pik olarak gözlenmiştir. $TlGaS_{0.5}Se_{1.5}$ numunesinde yüksek sıcaklıklarda bulunan pik, karanlık akım eğrisine yakın olması sebebiyle gerçek pik bu iki eğrinin farkından elde edilmiştir. Bu pik ise 650 meV enerjiye sahip derin bir tuzak merkezinin varlığını göstermektedir.

KAYNAKLAR

1. Yee K.A., Albright A., J.Am. Chem. Soc.113, 6474 (1991).
2. Hanias M.P., Anagnostopoulos A.N., Kambas K., Spryidelis J., Matter Res. Bull. 27, 25 (1992).
3. Abdullaeva S.G., Belenkii G.L., Mamedov N.T., Sov. Phys. Semicond. 15, 540 (1981).
4. Kalomiros J.A., Kalkan N., Hanias M., Anagnostopoulos A.N., Kambas K., Solid State Commun. 96, 601 (1995).
5. Henkel W., Hochheimer H.D., Carlone C., Werner A., Ves S., von Schnering H.G., Phys. Rev. B26, 3211 (1982).
6. Abdullaev G.B., Allakhverdiev K.R., Nani R.Kh., Salaev E. Yu., Sardarly R.M., Phys. Stat. Sol. (a) 34, K115 (1976).
7. Gasanly N.M., Akinoglu B.G., Ellialtıoglu S., Laiho R., Bakhyshov A.E., Physica B 192, 371 (1993).
8. Yoon C.S., Kim B.H., Cha D.J., Kim W.T., J. Appl. Phys. 32, 555 (1993).
9. Abutalybov G.I., Akopyan I.Kh., Neimanzade I.K., Novikov B.V., Salaev E.Yu., Sov. Phys. Solid State 27, 1710 (1985).
10. Abdullaeva S.G., Mamedov N.T., Sov. Phys. Solid State 28, 499 (1986).
11. Yoon C.S., Chung S.J., Nam S.J., Kim W.T., Cryst. Res. Technol. 31, 229 (1996).
12. Bakhyshov A.E., Natig B.A., Safuat B., Samedov S.R., Abbasov Sh.M., Sov. Phys. Semicond. 27, 828 (1990).
13. Gasanly N.M.,Akınoglu B.G., Ellialtioglu S., et al. Cryst. Res Technol 29 (3): K51-K55 (1994).
14. Gasanly N.M., Culfaz A., Ozkan H., et al. ,Jpn. J. Appl. Phys. 1 32: 541-542 Suppl. 32-3 (1993).
15. Demidova L.I., Chervova A.A., Karaseva L.A., et al. Fiz. Tverd. Tela+ 32 (1): 54-59, (1990).

16.Guseinov G.D., Seidov F.M., Kerimova E.M. ,Izv. Vuz. Fiz+ (3): 134-136, (1978).
17.Herman, R. C. Ve Hofstadter, R., Phys. Rev. 57, 936, (1940).
18.Agarwal, S. C. ve Fritzsche, H., Phys. Rev. B10, 4351, (1974).
19.Abkowitz, M. ve Pfister, G., J. Appl. Phys. 46, 2559, (1975).
20.Obayashi, C., J. Phys. Soc. Japan 38, 1787, (1975).
21.Henisch, H. K., J. Electrostatics 3, 233, (1977).
22.Van der Pauw, L. J., Phil. Res. Repts. 13, 1, (1958).
23.Henisch, H. K. ve Zucker, J., Rev. Sci. Inst. 27, 261 (1956).
24.Weingarten, I. R. ve Rothberg, M., J. Electrochem. Soc. 108, 167, (1961).
25.Bryant, C. A. ve Gunn, J. B., Rev. Sci. Inst. 36, 1614, (1965).
26.Müler, J. C., Stuck, R., Berger, R. ve Siffert, P., Sol. Stat. Elect. 17, 1293, (1974).
27.Haering, R. R. ve Adams, E. N.,Phys. Rev. 117, 451, (1960).
28.Keating, P. N., Proc. Phys. Soc. 1408, (1961).
29.Nicholas, K. H. ve Woods, J., Brit. J. Appl. Phys. 15, 783, (1964).
30.Bube, R. H., Dussel, G. A., Ho, C. T. Ve Miller L. D., J. Appl. Phys. 37, 21, (1966).
31.Devaux, P. ve Schott, M., Phys. Stat. Sol. 20, 301, (1967).
32.Cowell, T. A. T., ve Woods, J., Brit. J. Appl. Phys. 18, 1045, (1967).
33.Haine, M. E. ve Carloy-Read, R. E., Brit. J. Appl.(J. Phys. D.) 1, 1257, (1968).
34.Buehler, M. G., Sol. Stat. Elect. 15, 69, (1972).
35.Garofano, T. ve Morelli, S., Nuovo Cim. 13B, 174, (1973).
36.Rabie, S. ve Rumin, N., Appl. Phys. Lett. 27, 29, (1975).
37.Saunders, I. J., Brit. J. Appl., Phys. 18, 1219, (1967).
38.Chen, R., Brit. J. Appl. Phys.(J. Phys. D.) 2, 371, (1969).
39.Braunlich, P. Ve Kelly, P., Phys. Rev. B1, 1956, (1970).
40.Chen, I.ve Slowik, J. H., Sol. Stat. Comm. 17, 783, (1975).

41.Chen., I., J. Appl. Phys. 47, 2988, (1976).
42.Slowik, J. H., J. Appl. Phys. 47, 2982, (1976).
43.Hanley, P. R., Haberl, A. W. and Taylor, A., Solid. State. Comm. 6, 893, (1968).
44.Fuchs, W. Ve Taylor, A.,Phys. Stat. Sol. 38, 771, (1970).
45.Fuchs, W. Ve Taylor, A., Phys. Rev. B2., 3393, (1970).
46.Taylor, A., Phys. Stat. Sol. 37, 401, (1970).
47.Chen, R., J. Mater. Sci. 11, 1521, (1976).
48.Yüksek, N. S., Kavas, H., Gasanly, N. M. ve Özkan, H., Physica B 344, 249 (2004).
49.Garlick, G. F. J. and Gibson, A. F., Proc. Phys. Soc. 60, 574, (1948).
50.Manfredotti, C., Murri, R., Quirini, A. and Vasanelli, L., Phys. Status Solidi (a) 38, 685, (1976).
51.Chen, R. Ve Krish, Y., Analysis of Thermally Stimulated Processes, 159, (1981).