



T.C.
NECMETTİN ERBAKAN
ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



**NİYOBYUM (Nb) KATKILI KALAY-OKSİT
(SnO₂) İNCE FİLMLERİN OPTİK
ÖZELLİKLERİNİN MATEMATİKSEL BİR
METOT İLE BELİRLENMESİ**

Seval YILMAZ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Nanobilim ve Nanomühendislik Anabilim Dalı

Temmuz-2022
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ NİYOBYUM (Nb) KATKILI KALAY-OKSİT (SnO_2) İNCE FİMLERİN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN MATEMATİKSEL BİR METOT İLE BELİRLENMESİ

Seval YILMAZ

Necmettin Erbakan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Nanobilim ve Nanomühendislik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. İbrahim YALÇINKAYA

2022, 88 Sayfa

Jüri

Prof. Dr. İbrahim YALÇINKAYA

Prof. Dr. Berna GÜLVEREN

Prof. Dr. Oğuz DOĞAN

Başta optik cihazların bileşenleri olmak üzere nano teknolojinin pek çok alanında kendine yer edinmiş kalay-oksit (SnO_x) malzemelerin geliştirilmesi ve kullanılabilirliğinin artırılması için pek çok çalışma yapılmış ve yapılmaya devam etmektedir. Metal katkılarının da SnO_2 'nin özelliklerini geliştirmeye yönelik çalışmalar içindedir. Geçiş metallerinden olan Nb, oksijenle yaptığı farklı bileşiklerle farklı özellikler gösterebilen ilginç bir elementtir. Bu element manyetik alan saçırma sistemi ile SnO_2 malzemenin içine farklı oranlarda katılanmıştır. Yapılan yapısal analizlerde Nb'nin yapı içinde çok az olduğu dolayısı ile SnO_2 'nin yapısında bir değişiklik meydana getirmediği tespit edilmiştir. Tez çalışmasında bu üretilen filmlerin optik parametrelerinin hesaplanması için matematiksel Swanepoel metodu kullanılmıştır. Deneysel geçirgenlik spektrumlarından hareketle yapılan matematiksel yaklaşımlar sonucu, filmlerin kırılma indisi n ve film kalınlığı d başarılı bir şekilde hesaplanmıştır. Hesaplamalar deneysel ölçümler ile karşılaştırılmıştır. Swanepoel metodu ile yapılan hesaplamalarda kırılma indisi deneysel sonuçlardan biraz az hesaplanmıştır. Kalınlık ölçümleri ise yaklaşık olarak deneysel sonuçlara yakındır ancak tam bir örtüşme elde edilememiştir. Kalın ve saydam filmlerin optik parametrelerinin hesabı için Swanepoel metodu uygun bir matematiksel yaklaşım sunmuştur.

Anahtar Kelimeler: İnce Film, Kalay-oksit, Manyetik Alan Sıçratma, Niyobyum, Swanepoel Metodu

ABSTRACT

MS THESIS

DETERMINATION OF OPTICAL PROPERTIES OF NIOBIUM (Nb) DOPED TIN-OXIDE (SnO₂) THIN FILMS BY MATHEMATICAL METHOD

Seval YILMAZ

**THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF
NECMETTİN ERBAKAN UNIVERSITY
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE
IN NANOSCIENCE AND NANOENGINEERING**

Advisor: Prof. Dr. İbrahim YALÇINKAYA

2022, 88 Pages

Jury

Advisor Prof. Dr. İbrahim YALÇINKAYA

Prof. Dr. Berna GÜLVEREN

Prof. Dr. Oğuz DOĞAN

Many studies have been and continue to be made to develop tin-oxide (SnO_x) materials, which have a place in many areas of nanotechnology, especially the components of optical devices, and to increase their usability. Metal doping is also in the works to improve the properties of SnO₂. Nb, one of the transition metals, is an interesting element that can show different properties with different compounds it makes with oxygen. This element was added to the SnO₂ material at different rates by the magnetron sputtering system. In the structural analysis, it was determined that Nb was very low in the structure, so it did not cause a change in the structure of SnO₂. In the thesis study, the mathematical Swanepoel method was used to calculate the optical parameters of these produced films. As a result of mathematical approaches based on experimental transmittance spectra, the refractive index n and film thickness d of the films were successfully calculated. Calculations are compared with experimental measurements. In the calculations made with the Swanepoel method, the refractive index was calculated slightly less than the experimental results. Thickness measurements are approximately close to the experimental results, but a complete overlap could not be obtained. The Swanepoel method provides a suitable mathematical approach for the calculation of optical parameters of thick and transparent films.

Keywords: Magnetron sputtering, Niobium, Thin Film, Tin-oxide, Swanepoel Method

ÖNSÖZ

Yüksek lisans eğitimim süresince yardımlarını, deneyim ve bilgi birikimini esirgemeyen, çalışmaların tamamlanabilmesi için gerekli desteği veren değerli hocam Prof. Dr. İbrahim YALÇINKAYA'ya,

Tezim için gerekli olan malzemelerin temininde ve ölçümlerinde yardımlarını esirgemeyen Prof. Dr. Oğuz DOĞAN'a,

Tez çalışmalarım için gerekli deneysel çalışmalarda özveriyle yardımlarını esirgemeyen Ayşegül SEZGİN'e,

Son olarak bende büyük emekleri olan, benim için hiçbir fedakarlıktan kaçınmayan ve dualarını esirgemeyen aileme, tezin hazırlanması sırasında gösterdikleri sabır, özveri ve desteklerinden dolayı kızlarım Begüm, Beren ve eşime gönülden teşekkürü bir borç bilir ve şükranlarımı sunarım.

Seval YILMAZ
KONYA-2022

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
ÖNSÖZ.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	ix
1. GİRİŞ.....	1
1.1. Optik Süreçlerin Sınıflandırılması.....	2
1.2. Optik Sabitler (Kırıcılık indisi (n) ve sönümleme katsayısı (κ))......	6
1.3. Optik Materyaller.....	12
1.3.1. Kristal yalıtkanlar ve yarı iletkenler.....	12
1.3.2. Camlar.....	13
1.3.3. Metaller.....	15
1.3.4. Moleküler malzemeler.....	15
1.4. Kırıcılık İndisi ve Dağılım.....	16
1.4.1. Cauchy dağılım ilişkisi.....	16
1.4.2. Sellmeier eşitliği.....	17
1.4.3. Yarı iletkenlerin kırılma indisi.....	17
1.4.4. Camların kırılma indisi.....	19
1.4.5. Grup indisi.....	19
1.5. Nanomalzemelerde Optik.....	20
1.6. İnce Filmler ve Optik Parametrelerinin Belirlenmesinde Kullanılan Matematiksel Yaklaşımlar.....	21
1.6.1. İki bağımsız ölçüm kullanan yöntemler.....	24
1.6.2. Dağılım (Dispersiyon) bağıntılarının eşleştirilmesi.....	25
1.6.3. Sanal Ölçümlerin Kullanılması.....	28
1.7. Matematiksel Yaklaşımların Karşılaştırılması.....	30
1.8. Tez Çalışmasında Kullanılan Malzeme ve Matematiksel Metot.....	32
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI.....	33
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	38
3.1. Nb Katkılı SnO ₂ ince Filmlerin Büyütülmesi ve Ölçümlerinin Alınması.....	38
3.2. Optik Parametrelerin Swanepoel Metodu İle Belirlenmesi.....	41
3.3. Optik Parametrelerin Sonuçlarının Değerlendirilmesi.....	52
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA.....	53
4.1. Nb Katkılı SnO ₂ İnce Filmlerin Yapısal Özellikleri.....	53
4.2. Nb Katkılı SnO ₂ İnce Filmlerin Optik Parametrelerinin Belirlenmesi.....	56
4.2.1. “Saf” Örneğinin Optik Parametreleri.....	59
4.2.2. “24W” Örneğinin Optik Parametreleri.....	61
4.2.3. “36W” örneğinin optik parametreleri.....	63

4.2.4. “48W” örneğinin optik parametreleri.....	64
4.2.5. “60W” örneğinin optik parametreleri.....	66
4.3. Nb Katkılı SnO ₂ İnce Filmlerin Optik Parametrelerinin DeneySEL Sonuçlarla Karşılaştırılması.....	68
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	75
5.1. Sonuçlar.....	75
5.2. Öneriler.....	75
6. KAYNAKLAR.....	76

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

α	: Soğurma katsayısı
θ	: Gelme açısı
ε_0	: Vakum geçirgenliği
ε_r	: Statik dielektrik sabiti
κ	: Sönümlenme katsayısı
λ	: Dalga boyu
μm	: Mikrometre
μ_r	: Ortamın bağıl manyetik geçirgenliği
ω	: Açısal frekans
ν	: Frekans
$\hbar$	: Planck sabiti
Ar	: Argon
c	: Işık hızı
d	: Kalınlık
eV	: Elektron volt
E_g	: Bant aralığı
I	: Işık şiddeti
I_0	: Gelen ışık şiddeti
k	: Dalga vektörü
mm	: Milimetre
n	: Kırılma indisi
nm	: Nanometre
N _{at}	: Birim hacim başına atom sayısı
Nb	: Niyobyum
R	: Reflektans (Yansıtma)
sccm	: Dakikada akan birim santimetre küp gaz
SnO ₂	: Kalay dioksit (Kalay-oksit)
T	: Transmittans (Geçirgenlik)
T_M	: Girişim saçağındaki maksimum geçirgenlik noktası
T_m	: Girişim saçağındaki minimum geçirgenlik noktası
V	: Ortamda ilerleyen dalganın hızı

Kısaltmalar

ALD	: Atomik tabaka biriktirme
BİTAM	: Bilim ve Teknoloji Araştırma ve Uygulama Merkezi
CVD	: Kimyasal buhar biriktirme
EM	: Elektromagnetik
FESEM	: Alan etkili taramalı elektron mikroskobu
GOF	: Goddnes of Fit
FTO	: Flor katkılı kalay oksit
ITO	: Kalay katkılı indiyum oksit
IR	: Infrared (Kızılötesi)
OD	: Optik yoğunluk

PLD : Darbeli lazer biriktirme
PVD : Fiziksel buhar biriktirme
TCO : Saydan iletken oksit
UV : Ultraviyole (morötesi)
XRD : X-ışınları kırınımı

1. GİRİŞ

Malzemelerin ışık ile etkileşimi ve ışık karşısında davranışları insanlık tarihinin başından itibaren ilgi çeken konulardan birisi olmuştur. Işığın doğası 1600’lü yılların ortalarına kadar gizemini korumuştur. Işığın doğası ve davranışını inceleyen en önemli bilim insanlarından birisi Sir Isaac Newton olmuştur. Newton ışığın taneciklerden oluştuğunu ve her renge farklı büyüklükte bir tanecik karşılık geldiğini öne sürmüştür. Newton’dan hemen sonra Huygens ışık kaynaklarının yüksek frekanslı titreşimler oluşturduğunu ve ışığın dalgalar halinde yayıldığını önermiştir. 1800’lü yıllara gelindiğinde ise Young’un girişim deneyi ve Fresnel’in girişim ve polarizasyonu deneyi dalga teorisini desteklemiştir. 1800’lü yılların ortalarında ise Maxwell ışığın yüklü taneciklerinin ivmelenmesi ile oluştuğunu ifade ettiği elektromagnetik teoriyi ortaya atmıştır. 1800’lü yılların sonuna gelindiğinde ise Heinrich Hertz ve Philipp Lenard’ın yaptığı deneylerle fotoelektrik olay farkedilmiştir. Bu olay dalga perspektifi ile açıklanamayan bir olay olarak tanımlanmaktaydı. Einstein’a Nobel Ödülü’nü getiren fotoelektrik olayın açıklanması oldu. Einstein, ışığın “foton” denilen taneciklerden oluştuğunu ileri sürmüştür (Zubairy, 2016).

Işığın hem dalga hem de tanecik özelliği gösterdiği deneylerin ardından ışığın yapısı de Broglie’nin hipotezi ile tek bir çatı altında birleştirilmiştir. Işığın elektromanyetik (EM) dalgalar şeklinde ilerleyen ve adına foton denilen parçacıklardan meydana geldiği ortaya konulmuştur (Zubairy, 2016).

Işık teorileri ile birlikte ışığın malzeme ile etkileşimi de oldukça ilginçtir. Günlük hayatımızda gördüğümüz ve kullandığımız malzemeler ışık ile etkileşime girerek farklı özellikler gösterebilmektedir. Malzemeler saydam, renkli, siyah, beyaz, parlak olmanın yanı sıra insan gözünün algılama sınırları dışındaki ışınlar da malzeme içinden geçebilmekte veya malzeme tarafından soğrulabilmektedir. İlave olarak ışıkla, elektrik, ısı ile uyarılan malzemelerin ışık yayması da gözlemlediğimiz diğer optik olaylardandır.

Malzemelerin ışık karşısındaki davranışlarını belirleyen, malzemenin optik özellikleridir. Bu özellikleri açıklamak için ışığın malzeme ile etkileşime girdiği zaman hangi optik süreçlerin oluştuğunun bilinmesi gerekmektedir. Aynı zamanda bu optik süreçler malzemelerin yapısının aydınlatılmasında da oldukça önem arz etmektedir.

Malzemelerin optik özelliklerini açıklamak için kullandığımız parametrelerin doğru tanımlanması malzemelerin günlük hayata ve teknolojiye entegre edilebilirliğini artırmaktadır.

Bu tez araştırmasında teknolojik gelişmede oldukça önemli bir yere sahip olan ince filmlerin optik özelliklerinin belirlenmesinde kullanılan matematiksel yaklaşımlar sunulmuştur. Bu matematiksel yaklaşımlardan birisi olan Swanepoel Metodu ile niyobyum (Nb) katkılı kalay-oksit (SnO_2) filmlerin optik parametreleri tespit edilmeye çalışılmıştır.

1.1. Optik Süreçlerin Sınıflandırılması

Maddenin katı halinde gözlemlenen geniş kapsamlı optik özellikler, az sayıda olan ve genel fenomenler olarak sınıflandırılabilir. En basit grup, yani yansıma, yayılma ve iletim, Şekil 1.1’de gösterilmektedir. Şekil 1.1 maddeye gelen bir ışık demetine ait olayı göstermektedir. Işığın bir kısmı ön yüzeyden yansıtılırken, geri kalanı ortama girer ve ortam içinde yayılır. Bu ışıklardan herhangi biri arka yüzeye ulaşırsa tekrar yansıtılabilir veya diğer tarafa geçebilir. Bu nedenle iletilen ışığın miktarı, ön ve arka yüzeylerdeki yansıtıcılıkla ve ayrıca ışığın ortam boyunca yayılma şekli ile ilgilidir.

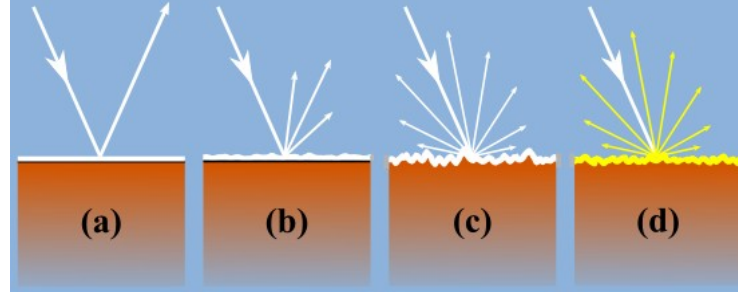


Şekil 1.1. Optik bir ortama gelen ışık demetinin, yansıması, ortamda yayılması ve iletilmesi (geçirilmesi) olayları (Fox & Fox, 2001).

Gelen ışık optik ortam yüzeyinden geri döndüğünde buna ışığın yansıması denir. Yüzeye gelen ışına, gelen ışın ve geri dönen ışına yansıyan ışın denir. Işıklar yansıma esnasında yansıma kanunlarına uyarak yansır. Yansıma kanunları:

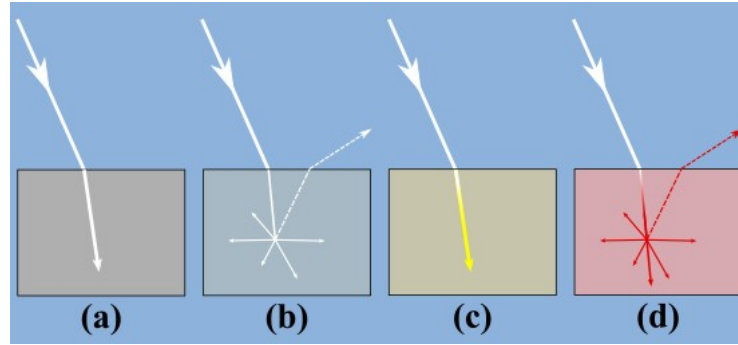
- Gelen ışın, yansıyan ışın ve normal (gelen ışının yansıtıcı yüzeye dokunduğu noktada yüzeye çizilen dik) aynı düzlemindedir.
- Gelme açısı (gelen ışın ile normal arasındaki açı), yansıma açısına (yansıyan ışın ile normal arasındaki açı) eşittir.

Yansıma olayı farklı şekillerde meydana gelebilir. Yansıma düzgün, dağınık olabildiği gibi sadece ışığın belli dalga boyları da yansımaya uğrayabilmektedir. Yansıma şekillerine ilişkin şematik gösterim Şekil 1.2’de gösterilmektedir.



Şekil 1.2. Beyaz ışığın yüzeylerle etkileşimlerinden bazıları. (a) Pürüzsüz bir yüzeyde düzgün yansıma. (b) Hafif pürüzlü bir yüzeye sahip beyaz yüzeyden parlak yansıma. (c) Pürüzlü bir yüzeyden soğrulma olmadan meydana gelen dağınık yansıma. (d) Pürüzlü sarı bir yüzeyden kısa dalga boylarının soğurulmasıyla birlikte dağınık yansıma (Flammer ve ark., 2013).

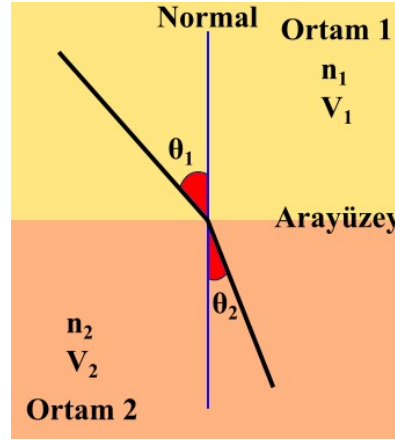
Optik ortama giren ışık, ortamda yayılırken bir takım olaylar da beraberinde gelişir. Bu olaylara ilişkin şematik gösterim Şekil 1.3’te gösterilmektedir.



Şekil 1.3. Beyaz ışığın ortam içindeki davranışları (a) Gelen ışığın doğrultu değiştirerek kırılması (Refraction). (b) Gelen ışığın ortam içinde ortamla etkileşimi sonucu farklı yönlerde dağılarak saçılması (Scattering). (c) Gelen ışığın sarı hariç diğer dalga boylarının ortam tarafından saçılma olmadan soğurulması (Absorption). (d) Gelen ışığın kırmızı hariç diğer dalga boylarının soğurulması ve kalan ışığın saçılmaya uğraması (Flammer ve ark., 2013).

Kırılma (Şekil 1.3.(a)), ışık dalgalarının ortam değiştirdiği zaman mevcut doğrultusunu ve hızını değiştirme olayı olarak tanımlanmaktadır. Işık dalgası mevcut ortamından daha yoğun bir ortama girdiğinde sahip olduğu hız azalacaktır. Ortamları ayıran arayüzde bu ani hız değişimine bağlı olarak ışık dalgasının doğrultusunda sapma meydana gelecektir. Bu sapma ışık dalgasının yoğunluğunu etkilemez. Tersisi de mümkündür. Yoğun bir ortamda ilerleyen ışık dalgası mevcut ortamına göre daha az yoğun bir ortama geçtiği anda hızını artıracaktır. Hızdaki bu ani değişim ışık ışınlarının

doğrultusunu değiştirecektir. Kırılma olayı Snell'in Kırılma Yasası tarafından tanımlanır (Şekil 1.4).



Şekil 1.4. Snell Yasasının şematik gösterimi. $n_2 > n_1$ ile farklı kırılma indislerine sahip iki ortam arasındaki arayüzeyde ışığın kırılması. Ortam 2’de hız daha düşük olduğu için ($V_2 < V_1$) kırılma açısı θ_2 , gelme açısından θ_1 daha küçüktür.

Kırılma Yasası olarak da bilinen Snell Yasası eşitlik 1.1’deki gibi formülize edilmektedir (M Born & Wolf, 1959).

$$\frac{\sin \theta_2}{\sin \theta_1} = \frac{n_1}{n_2} = \frac{V_2}{V_1} \quad (1.1)$$

burada “ n ” ortamın kırılma indisi, “ V ” ortamda ilerleyen EM dalganın yayılma hızı ve “ θ ” ışının arayüzeye dik olan normal ile yaptığı açıdır.

Saçılma (Şekil 1.3.(b), (d)), ışığın yansımaları ve kırılmasından tamamen farklıdır. Işığın yansımada ve kırılmasında ışık düz bir çizgide giderken, ışığın saçılmasında ışık ışını, içinden geçtiği ortam tarafından farklı yönlerde dağıtılır. Bir ışık ışını bir ortamdan geçtiğinde, içinde bulunan parçacıklara çarpar. Bu nedenle ışınların bir kısmı soğurulurken bir kısmı da her yöne saçılır. Saçılmada ileri yönde foton sayısının azalır çünkü ışık başka yönlerde yönlendirilir. Saçılma bu nedenle soğrulma ile aynı zayıflatıcı etkiye sahiptir. Saçılan ışığın frekansında değişiklik meydana gelmezse saçılmanın elastik (esnek), frekansta değişiklik meydana gelirse inelastik (esnek olmayan) olduğu söylenir. İnelastik bir saçılma sürecindeki foton enerjisindeki fark, frekans arttıkça ortamdan alınır veya frekans azalırsa ortama verilir. Işığın yoğunluğu çok yüksekse, ışık ortam içinde yayılırken bir dizi başka fenomen meydana gelebilir. Bunlar doğrusal olmayan optiklerle tanımlanır. Saçılmada ışığın dalga boyu ve ışığı saçan parçacığın

boyutu, saçılmanın şiddetinin belirlenmesine yardımcı olur. Örneğin, güneş ışınları dünya atmosferine girdiğinde atmosferde bulunan parçacıklara çarpar. Bu ışınların bir kısmı parçacıklar tarafından soğrulurken bir kısmı da her yöne saçılır (Carminati & Schotland, 2021). Işığın saçılmasının farklı türleri vardır:

- Rayleigh saçılması: Gelen ışığın dalga boyundan daha küçük bir boyuta sahip parçacıklardan ışığın elastik saçılmasıdır. Yani gelen ışığın saçılırken dalgaboyu değişmez. Optik fiber üzerinden sinyal saçılması bu saçılmaya örnektir.
- Mie saçılması: Mie'nin Maxwell denkleminin çözümüdür. Bu tür saçılmada parçacığın boyutu ışığın dalga boyundan daha fazladır. Bu nedenle, homojen olmayan bir saçılma söz konusudur. Aynı zamanda elastik bir saçılma türüdür. Gökyüzünün mavi ve bulutun beyaz görünmesinin nedeni bu saçılmadır.
- Elektromanyetik saçılma: EM dalgaların sürekli olarak saptığı yaygın bir saçılma türüdür. İkiye ayrılır. Bunlar: Rayleigh ve Mie tipi saçılmayı içeren elastik saçılma ile Raman ve Compton'un saçılmasını içeren inelastik saçılmadır.

Soğrulma (Şekil 1.3.(c)), ışığın frekansının ortamdaki atomların geçiş frekansları ile rezonansta olması durumunda meydana gelir. Bu durumda, ışın ilerledikçe zayıflayacaktır. Ortamın geçirgenliği soğurma ile ilgilidir, çünkü yalnızca soğurulmamış ışık geçebilecektir. Seçici soğurma, birçok optik materyalin renklendirilmesinden sorumludur. Örneğin yakutlar kırmızıdır çünkü mavi ve yeşil ışığı soğururlar buna karşın kırmızı ışığı yansıtırlar ve/veya iletirler (Fox & Fox, 2001).

Işık madde etkileşiminde madde içine giren ışığın gerçekleştirebileceği bir diğer fenomen ise lüminesans (ışıldama) olarak ifade edilebilir. Işıldama, katı haldeki bir malzemede uyarılmış atomlar tarafından kendiliğinden ışık yayma sürecine verilen genel addır. Soğuk cisim radyasyonu olarak da ifade edilebilir. Atomların kendiliğinden yayılmadan önce uyarılmış hallere yükseltilmesinin yollarından biri, ışığın soğrulmasıdır. Işıldama böylece ışığın soğurucu bir ortamda yayılmasına eşlik edebilir. Işık her yöne yayılır ve gelen ışıdan farklı bir frekansa sahiptir. Işıldamaya her zaman soğurma eşlik etmek zorunda değildir. Işıldama sadece ışık ile uyarım sonucu değil kimyasal reaksiyonlar, elektrik enerjisi, atom altı hareketler veya bir kristal üzerindeki stres ile meydana da gelebilmektedir. Işıldama, ısıtma sonucunda bir madde tarafından yayılan ışıktan farklılık arz eder. Uyarılmış atomların kendiliğinden emisyonla yeniden yayılması karakteristik bir süre alır. Bu, uyarılmış atomların, ışıının yeniden yayılması işlemi gerçekleşmeden önce uyarma enerjisini ısı olarak dağıtmasının mümkün olabileceği anlamına gelir. Işıldama sürecinin verimliliği bu nedenle atomlardaki

uyarılma mekanizmalarının dinamikleriyle yakından bağlantılıdır (Valeur & Berberan-Santos, 2011).

1.2. Optik Sabitler (Kırıcılık indisi (n) ve sönümleme katsayısı (κ))

Optik fenomenler makroskopik seviyede ortamın özelliklerini belirleyen bir dizi parametre ile ölçülebilir. Yüzeylerdeki yansıma, yansıma veya yansıtma katsayısı ile tanımlanır. Bu parametre genellikle Reflection ifadesindeki “ R ” sembolü ile ifade edilir ve yansıyan gücün yüzeydeki güce oranı olarak tanımlanır. İletim veya aktarım katsayısı Transmittance ifadesindeki “ T ” harfi ile ifade edilir ve iletilen gücün gelen ışığın gücüne oranı olarak tanımlanır. Soğurma veya saçılma yoksa, enerjinin korunumundan;

$$R+T=1 \quad (1.2)$$

yazılabilir. Işının saydam bir ortam boyunca yayılması, kırılma indisi n ile tanımlanır. Saydam ortamlarda ışık ile malzemeler arasındaki etkileşimler devam eder ancak bu yalnızca ışığın bir boşlukta olduğundan daha yavaş hareket etmesine neden olur. Bu yavaşlama, kırılma indisi n olarak ölçülmektedir. Eşitlik 1.3’te gösterildiği gibi bu indis ışığın boş uzaydaki hızının yayıldığı ortam içindeki hızına oranı olarak tanımlanmakta olup en küçük değeri 1’dir.

$$n = \frac{c}{v} \quad (1.3)$$

Burada c ışığın boşluktaki hızını ve v ışığın yayıldığı ortamdaki hızını göstermektedir. Saf su, cam, kornea vb. ortamlar görünür ışık için neredeyse saydamdır. Bununla beraber bir ortam her zaman EM spektrumun yalnızca belirli bir bölümüne saydamdır. Örnek olarak, su kızılötesi bölgedeki EM dalgalara karşı opaktır, cam ise ultraviyole bölgedeki EM dalgaları engeller (Fox & Fox, 2001).

Bir malzemenin en önemli optik sabiti genel olarak EM dalganın dalga boyuna, dispersiyon adı verilen bir ilişki yoluyla bağlı olan kırılma indisidir (n). Bir EM dalganın yayılması sırasında enerjisinin bir kısmını kaybettiği malzemelerde kırılma indisi kompleks bir hale gelir. Bu kompleks ifadenin gerçek kısmı kırılma indisi n ve imajiner kısmı ise sönümlenme katsayısı κ olarak isimlendirilir (J Singh ve ark., 2020).

Optik veya dielektrik bir ortamın kırıcılık indisi (n), Eşitlik 1.3'teki gibi tanımlanmaktadır. Bu denklem ve Maxwell Denklemleri kullanılarak bir maddenin kırıcılık indisi için:

$$n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r} \quad (1.4)$$

elde edilir. Burada ϵ_r statik dielektrik sabiti veya bağıl geçirgenlik, μ_r ortamın bağıl manyetik geçirgenliğini ifade etmektedir. Manyetik olmayan maddeler için $\mu_r=1$ olur. Bu durumda Eşitlik 1.4:

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (1.5)$$

şeklinde ifade edilir. Bu, herhangi bir frekansta malzemelerin dielektrik özellikleri ile optik özellikleri arasında ilişki kurmak için oldukça kullanışlıdır. ϵ_r ışığın dalga boyuna bağlı olduğu için kırılma indisi de ışığın dalga boyuna bağlıdır ve bu bağımlılığa dispersiyon denir. Dispersiyona ek olarak, ışık enerjisinin kaybolabileceği (yitirimli) bir ortamda yayılan bir EM dalgası, fonon üretimi (kristallerde örgü titreşim dalgaları), fotojenerasyon (ışık ile elektronun uyarılması ve elektronların girebileceği boşlukların meydana getirilmesi), serbest taşıyıcı soğurulması, saçılma vb. gibi çeşitli kayıp mekanizmaları nedeniyle enerjisini kaybettiği anlamına gelen zayıflama yaşar. Bu tür malzemelerde kırılma indisi n , ışık dalgasının frekansının kompleks bir fonksiyonu haline gelir. n^* , kompleks kırılma indisi olmak üzere fonksiyonun gerçekte kısmı n , imajiner kısmı κ ile temsil edilir. Bu fonksiyon aynı zamanda kompleks bağıl geçirgenlik ϵ_r ile de Eşitlik 1.6'da olduğu gibi ilişkilidir.

$$n^* = n + i\kappa = \sqrt{\epsilon_r} = \sqrt{\epsilon_r' + i\epsilon_r''} \quad (1.6)$$

burada ϵ_r' ve ϵ_r'' sırasıyla kompleks bağıl geçirgenlik fonksiyonunun gerçekte ve imajiner kısmını ifade etmektedir.

$$(n + i\kappa)^2 = \epsilon_r' + i\epsilon_r'' \quad (1.7)$$

$$n^2 - \kappa^2 + i(2n\kappa) = \epsilon_r' + i\epsilon_r'' \quad (1.8)$$

Buna göre $n^2 - \kappa^2 = \varepsilon_r'$ ve $2n\kappa = \varepsilon_r''$ eşitliği oluşmaktadır. n ve κ daha açık şekilde yazılacak olursa:

$$n = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \left[\left(\varepsilon_r'^2 + \varepsilon_r''^2 \right)^{1/2} + \varepsilon_r' \right]^{1/2} \quad (1.9)$$

$$n = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \left[\left(\varepsilon_r'^2 + \varepsilon_r''^2 \right)^{1/2} - \varepsilon_r' \right]^{1/2} \quad (1.10)$$

elde edilir. Bu analiz n ve ε_r ifadelerinin bağımsız değişkenler olmadığını göstermektedir. ε_r' ve ε_r'' biliniyorsa n ve κ veya tam tersi hesaplanabilmektedir. Ortam zayıf soğurmaya sahip bir ortam ise κ 'nın çok küçük olduğu kabul edilerek ihmal edilebilir. Bu durumda Eşitlik 1.9 ve 1.10 aşağıdaki gibi basitleştirilir (J Singh ve ark., 2020).

$$n = \sqrt{\varepsilon_r'} \quad (1.11)$$

$$\kappa = \varepsilon_r'' / 2n \quad (1.12)$$

Optik sabitler n ve κ , polarizasyonun ve gelme açısının bir fonksiyonu olarak bir malzemenin yüzeyinden yansıma ölçülerek belirlenebilir. Normal geliş için, yansıma katsayısı R , aşağıdaki eşitlikle ifade edilir:

$$R = \left| \frac{n^* - 1}{n^* + 1} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + \kappa^2}{(n + 1)^2 + \kappa^2} \quad (1.13)$$

Bu eşitlik ortam ile hava (veya vakum ortamı) arasındaki yansıma katsayısını verir. Spektrumun görünür bölgesindeki cam gibi şeffaf bir malzemede soğurma katsayısı çok küçüktür. Bundan dolayı hem n^* hem de ε_r için kompleks ifadenin gerçek kısımları alınabilir. Bu nedenle, şeffaf optik malzemelerin özellikleri ifade edilirken genellikle kırılma indisinin ve dielektrik sabitinin yalnızca gerçek kısımları verilir. Öte yandan, eğer önemli bir absorpsiyon varsa, o zaman n^* ve ε_r 'nin hem gerçek hem de imajiner kısımlarının bilinmesi gereklidir (Max Born ve ark., 1999; Fox & Fox, 2001).

Malzemelerin optik özellikleri tipik olarak ya n ve κ ya da ε_r' ve ε_r'' nin frekans bağımlılıklarını (dağılım ilişkileri) göstererek sunulur. Yalıtkanlardaki dağılımı açıklamak için ışıktaki elektrik alanının malzemede zorunlu dipol salınımlarını indüklediği (pozitif çekirdek etrafında salınım yapmak için bir atomdaki elektron kabuklarını yer değiştirir) tek bir rezonans frekansına sahip osilatör modelinden faydalanılır. ε_r' ve ε_r'' frekans bağımlılıkları aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\varepsilon_r' = 1 + \frac{N_{at}}{\varepsilon_0} \alpha_e' \quad (1.14)$$

$$\varepsilon_r'' = \frac{N_{at}}{\varepsilon_0} \alpha_e'' \quad (1.15)$$

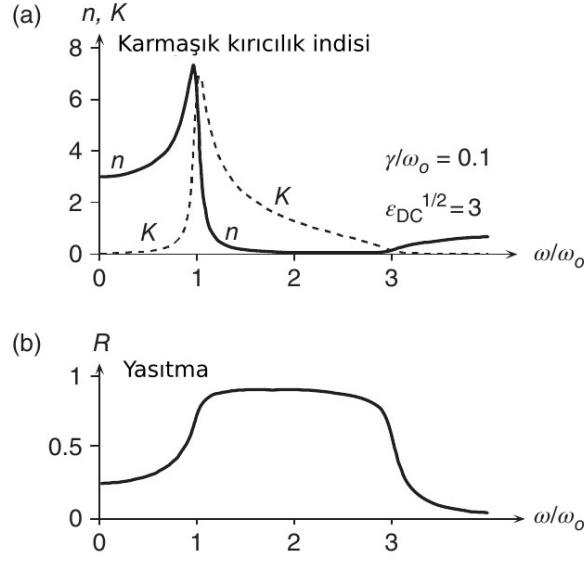
Burada N_{at} birim hacim başına atom sayısıdır, ε_0 vakum geçirgenliğidir ve α_e' ve α_e'' sırasıyla elektronik polarize edilebilirliğin gerçek ve imajiner kısımlarıdır ve sırasıyla şu şekilde verilir:

$$\alpha_e' = \alpha_{e0} \frac{1 - (\omega/\omega_0)^2}{[1 - (\omega/\omega_0)^2]^2 + (\gamma/\omega_0)^2 (\omega/\omega_0)^2} \quad (1.16)$$

$$\alpha_e'' = \alpha_{e0} \frac{(\gamma/\omega_0)(\omega/\omega_0)}{[1 - (\omega/\omega_0)^2]^2 + (\gamma/\omega_0)^2 (\omega/\omega_0)^2} \quad (1.17)$$

Burada ω , frekans ve ω_0 , rezonans frekansı olup α_{e0} , $\omega=0$ 'a karşılık gelen polarize edilebilirliği ve γ , malzeme sistemi içindeki EM dalga kayıplarını karakterize eden kayıp katsayısıdır. Eşitlik 1.6, 1.9, 1.10, 1.16 ve 1.17 kullanılarak n ve κ 'nın frekans bağımlılığı incelenebilir. Şekil 1.5(a), rezonans frekansı ω_0 olan basit tek bir elektronik dipol osilatörü için n ve κ 'nın normalize edilmiş frekansa ω/ω_0 bağımlılığını göstermektedir. Şekilde n ve κ 'ya ait pikler $\omega=\omega_0$ 'a yakındır. Şekil 1.5(b), R yansımalarının frekansa bağımlılığını göstermektedir. R 'nin maksimum değerine $\omega=\omega_0$ frekansının biraz üzerindeki bir frekansa ulaştığı ve daha sonra ω yaklaşık $3\omega_0$ 'a ulaşınca kadar yüksek kaldığı görülmektedir; bu nedenle, absorpsiyon güçlüyken yansıma önemlidir. ω_0 altındaki normal dağılım bölgesinde, frekans azaldıkça n 'nin

azaldığı yani n azaldıkça λ dalgaboyunun arttığı ifade edilebilir. ω_0 altındaki anormal dağılım bölgesinde ω arttıkça n 'nin azaldığı ifade edilebilir.



Şekil 1.5. Tek bir elektronik dipol osilatör modelinden elde edilen kırılma indisi n ve sönümlenme katsayısı κ . (a) n ve κ , normalleştirilmiş frekansa karşı ve (b) normalleştirilmiş frekansa karşı yansıma (J Singh ve ark., 2020).

Bir malzemenin bağlı geçirgenliğinin ϵ_r' olarak ifade edilen gerçekte kısmının frekans bağımlılığı biliniyorsa, gerçekte ve imajiner kısımlar arasındaki Kramers-Kronig ilişkilerini kullanarak, ϵ_r'' olarak ifade edilen imajiner kısmının frekans bağımlılığını belirleyebiliriz veya tam tersini yapabiliriz. Dönüşüm, ideal olarak sıfırdan sonsuza kadar mümkün olduğu kadar geniş bir frekans aralığında gerçekte veya imajiner parçanın frekans bağımlılığını bilmemizi ve malzemenin doğrusal davranışa sahip olmasını, yani göreceli geçirgenliğin uygulanan alandan bağımsız olmasını gerektirir. Göreceli geçirgenlik ($\epsilon_r = \epsilon_r' + i\epsilon_r''$) için Kramers-Kronig bağıntıları aşağıdaki gibi ifade edilmektedir (Kramers, 1927; de L. Kronig, 1926).

$$\epsilon_r'(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \epsilon_r''(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (1.18)$$

$$\epsilon_r''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\epsilon_r'(\omega') - 1}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (1.19)$$

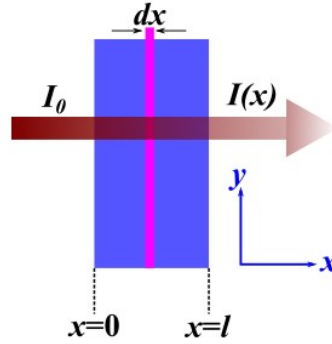
burada ω' integral değişkeni, P integralin Cauchy ana değerini temsil eder.

Sönümlenme katsayısı κ , yayılan EM dalga tarafından taşınan enerjinin bir ortam içindeki kaybını, ortamın kırılma indisine imajiner kısım olarak dahil ederek enerjideki kaybı temsil eder. Optik sönümlenme katsayısı veya soğurma katsayısı olarak ifade edilen α , yayılan EM dalgadan kaynaklanan bu kaybın oranını ölçer. Saçılma olmaması durumunda, sönümlenme ortam içindeki soğrulmadan kaynaklanacaktır. Işığın bir optik ortam tarafından soğrulması α soğurma katsayısı ile nitelenir ve Şekil 1.6 'da gösterildiği gibi bir ortamın birim uzunluğunda soğrulan gücün kesri olarak tanımlanır. l kalınlıklı bir ortama gelen ışın şiddeti I_0 olmak üzere, ışın x yönünde ilerliyorsa ve x konumundaki şiddeti (birim alan başına optik güç) $I(x)$ ise, o zaman artan bir dx kalınlık dilimindeki şiddetteki azalma şu şekilde verilir:

$$dI = -\alpha dx \times I(x) \quad (1.20)$$

bu Beer-Lambert Yasasını elde etmek için düzenlenebilir (Perkampus ve ark., 1992).

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha l} \quad (1.21)$$



Şekil 1.6. Beer-Lambert Yasasının temsili şekli.

burada I_0 , $x = 0$ 'daki optik şiddeti göstermektedir. Soğurma katsayısı frekansın güçlü bir fonksiyonudur. Yani malzeme bir rengi soğururken bir başka rengi soğurmayabilir. Hem soğurmanın hem de kırılmanın, karmaşık kırılma indisi adı verilen tek bir niceliğe dahil edilmesi, yansıtıcılığı R 'nin ve dolayısıyla geçirgenlik olan T 'nin hesaplanmasını sağlar. Soğurucu l kalınlıklı bir ortamının geçirgenliği şu şekilde verilir.

$$T = (1 - R_1) e^{-\alpha l} (1 - R_2) \quad (1.22)$$

burada R_1 ve R_2 sırasıyla ön ve arka yüzeylerin yansıtıcılığıdır. Bu formül, ışığın Şekil 1.1’de gösterilene benzer bir optik ortamdan geçirilmesi için uygulanabilir. Eşitlik 1.22’nin sağ tarafındaki birinci ve üçüncü terimleri sırasıyla ön ve arka yüzeylerin geçirgenliği açıklarken orta terim Beer-Lambert Yasasına göre soğurma nedeniyle yoğunluğun üstel olarak azalmasını ifade etmektedir. Ön ve arka yüzeyler eşit yansıtma oranlarına sahipse, bu durumda Eşitlik 1.22 şu şekilde basitleşir:

$$T = (1 - R)^2 e^{-\alpha l} \quad (1.23)$$

Bir optik ortamın soğurulması, bazen optik yoğunluk (OD) olarak ifade edilen bir nicelik açısından da incelenebilir. Bu, soğurum olarak adlandırılır ve şu şekilde tanımlanır:

$$OD = -\log_{10} \left(\frac{I(l)}{I_0} \right) \quad (1.24)$$

Burada l , soğurum yapan ortamın uzunluğudur. Eşitlik 1.21’teki Beer-Lambert Yasasını kullanarak;

$$OD = \frac{\alpha l}{\log_e(10)} = 0.434 \alpha l \quad (1.25)$$

eşitliğine ulaşılabilir (Fox & Fox, 2001).

1.3. Optik Materyaller

Genel olarak bulk optik materyaller 4 kategoride incelenmektedir.

1.3.1. Kristal yalıtkanlar ve yarı iletkenler

Yalıtkanların optik özelliklerinin en belirgin olanı hepsinin görünür spektral bölgede renksiz ve şeffaf olma eğiliminde olmalarıdır. Yalıtkanlarda renk olmasının temel nedeni yapılarındaki safsızlıklardır ve şeffaflıkları aldatıcıdır. Ultraviyole (UV) ve kızılötesini (IR) çok kuvvetli bir şekilde soğurur ancak bu olay insan gözü tarafından algılanmaz. IR ve UV soğurma bantları arasındaki şeffaf bölge ki bu bölge spektrumda görünür bölge olarak bilinir, özellikle optik pencereler ve lensler yapmak için

kullanışlıdır. Optik özellikler anizotropiktir ve kırılma indisinin değeri, kristalografik eksenlere göre ışığın yayılma yönüne bağlıdır.

Yarı iletkenlerin optik özellikleri, elektronik ve titreşim geçişlerinin daha uzun dalga boylarında meydana gelmesi dışında, kavramsal olarak yalıtkanlarınkine benzerdir.

Yarı iletkenlerin yalıtkanlardan ayrıldığı temel nokta valans bandı (Katılarda atomların en dış orbitalindeki valans elektronlarının bulunduğu banttır.) ile iletkenlik bandı (İçinde bulunan elektronların atomdan ayrılarak madde içinde serbest yük taşıyıcısı haline gelebildiği, yüksek enerjili elektronları taşıyabilen enerji bandıdır.) arasındaki bant aralığının (E_g) yalıtkanlardan daha küçük olması ve gerek ısı gerek optik uyarımlar ile kolayca valans bandından elektron koparılabilmesidir. Yasak bant aralığı küçüldükçe yani valans bandından iletken bandına optik uyarım yapacak ışının dalga boyu büyüdükçe kırılma indisi de artmaktadır. Oda sıcaklığında yarı iletkenlerdeki serbest taşıyıcılar, yasak bant aralığı boyunca elektronların ısı uyarılması yoluyla veya safsızlıkların varlığı nedeniyle meydana gelir. Yalıtkanlar ise geniş bant boşlukları nedeniyle çok küçük serbest taşıyıcı yoğunluklarına sahiptirler. Yarı iletkenlerin optik özelliklerinin çok önemli bir yönü de doğrudan yasak bant boşluklarına sahip olan yarı iletkenlerde elektronlar iletkenlik bandına yükseltildiğinde güçlü bir şekilde ışıltama (lüminesans) özellik göstermesidir. Bu, optoelektronik endüstrisinde kullanılan ışık yayan cihazların fiziksel temelidir. Buradaki önemli nokta, ışıltamanın dalga boyunun yarı iletkenin bant boşluğu ile çakışmasıdır. Bant boşluğu kristal oluşumuna ve kristalin boyutlarına bağlı olup, yayının dalga boyunu istenilen değere getirmek için kristal büyütme ve boyut ayarlama yöntemleri kullanılmaktadır (Fox & Fox, 2001; Wood & of Materials (Great Britain), 1993).

1.3.2. Camlar

Camlar son derece önemli optik malzemelerdir. Cam eşyalarda yaygın kullanımlarının yanı sıra, optik aletler için prizmalar ve merceklerde de yüzyıllardır kullanılmaktadırlar. Yakın geçmişte optik fiber teknolojisinde yeni uygulamalarda da kullanılmaya başlanmıştır. Vitraylar haricinde, genellikle görünür spektrumda saydamdırlar. Çoğu cam türü, kumun diğer kimyasallarla eriyik halinde bir araya getirilmesi ile elde edilir. Saf eriyikten elde edilen silika bir yalıtkandır ve yalıtkanların tüm karakteristik özelliklerini gösterir. Görünür bölgede saydam olan SiO_2 moleküllerinin elektronik geçişleri ve ultraviyole ile titreşim absorpsiyonu nedeniyle

kızılötesi bölgesinde soğurucudur. Bu nedenle, saydamlık aralığı UV’de yaklaşık 200 nm’den kızılötesinde 2000 nm’nin ötesine uzanır. Eriyikten elde edilen silika, fiber optik endüstrisinde, birçok fiberin yapıldığı ana malzeme olarak yaygın şekilde kullanılmaktadır. Soğurma ve saçılma kayıpları o kadar küçüktür ki, ışık tam olarak zayıflatılmadan önce fiberde kilometrelerce yol kat edebilmektedir. Saydamlık aralığındaki silikanın kırılma indisi incelendiğinde saydam olduğu spektral bölgede kırılma indisinde çok az bir değişim olup 213.9 nm’de 1.5343 iken 2325 nm’de 1.4333 olarak gözlenmektedir. Kırılma indisinin dalga boyuyla bu varyasyonuna dağılım denir. n tüm görünür spektral bölgede %1’den daha az değişmektedir. Ayrıca dağılım, temel soğurma kenarına yakın en kısa dalga boylarında en büyük değerini almaktadır. Dağılım, tüm optik malzemelerde mevcuttur. Başka cam türü üretmek için eritme işlemi sırasında kimyasallar genellikle silikaya eklenir. Bu katkı maddelerinin varlığı, kırılma indisini ve geçirgenlik aralığını değiştirebilmektedir. Katkı maddeleri, UV soğurumunu artırmanın yanı sıra kırılma indisini de artırmaktadır. Yansıtıcılığı arttırdığından dolayısıyla cam eşyaya daha parlak bir görünüm kazandırdığından, kesme cam ürünleri için yüksek bir kırılma indisi istenir. Eritme işlemi sırasında görünür spektral bölgede bant boşluklu yarı iletkenler eklenerek vitray ve renkli cam filtreler yapılmaktadır (M. Lee, 2019; Wood & of Materials (Great Britain), 1993).

Renkli cam filtreler ve vitray ise silikanın eriyik halden elde edilme işlemi sırasında uygun şekilde seçilmiş yarı iletkenlerin silikaya eklenmesiyle elde edilmektedir. Bu, erimiş silika gibi renksiz bir malzemenin, optik olarak aktif maddelerle kontrollü katkılama yoluyla nasıl yeni özellikler kazanabileceğinin tipik bir örneğidir. Renkli cam filtrenin rengi iki farklı şekilde kontrol edilebilir.

- Katkı maddesinin bileşiminin değişmesidir.
- Camın içindeki yarı iletken kristalitlerin boyutu çok küçük olabilir ve bu üretilen camın rengini de etkileyebilir. Normalde, bir malzemenin optik özellikleri kristalin boyutundan bağımsızdır ancak boyutlar elektron dalga boyuyla karşılaştırılabilir seviyede ise “kuantum boyutu etkisi” ortaya çıkar ve elektronların enerjisini artırır ve dolayısıyla etkili bant aralığı daha yüksek enerjiye kayar.

1.3.3. Metaller

Metallerin karakteristik optik özelliği parlak olmalarıdır. Gümüş ve alüminyum gibi metallerin ayna yapımında yüzyıllardır kullanılmasının nedeni budur. Parlak görünüm, çok yüksek yansıma katsayılarının bir sonucudur. Yansıtıcılık ışığın metalde bulunan serbest elektronlarla etkileşiminden kaynaklanmaktadır. Gümüşün IR spektral bölgeden UV bölgeye yansımaları incelendiğinde IR bölgede yansıtıcılığın %100'e çok yakın olduğunu ve tüm görünür spektral bölge boyunca %80'in üzerinde kaldığı tespit edilmiştir. Yansıtma daha sonra UV bölgede keskin bir şekilde düşer. Bu genel davranış tüm metallerde görülmektedir. Plazma frekansı adı verilen karakteristik bir kesme frekansının altındaki tüm frekanslar için güçlü bir yansıma vardır. Plazma frekansı, UV spektral bölgedeki bir dalga boyuna karşılık gelir ve bu nedenle metaller kızılötesi ve görünür dalga boylarını yansıtır, ancak UV dalga boylarını geçirir. Bu etkiye metallerin UV geçirgenliği denir. Bazı metallerin karakteristik renkleri vardır. Örneğin bakır pembemsi bir renge sahipken, altın sarımsı renktedir. Bu renkler, yansımaya neden olan serbest taşıyıcı etkilerine ek olarak meydana gelen bantlar arası elektronik geçişlerden kaynaklanmaktadır (Fox & Fox, 2001; Wakaki, 2018).

1.3.4. Moleküler malzemeler

Moleküler malzeme terimi prensipte herhangi bir molekülün katı fazını kapsasa da vurgulanmak istenen malzeme sınıfı inorganik veya gaz fazındaki küçük moleküller olmayıp organik büyük moleküllerdir. Bazı organik bileşikler yoğunlaştırılmış fazda kristaller oluştururlar. Katılar, kendileri güçlü kovalent bağlarla bir arada tutulan moleküller arasındaki nispeten zayıf van der Waals etkileşimleriyle bir arada tutulur. Bu nedenle, bu malzemelerin katılarının optik özellikleri, tek molekülün optik özelliklerine benzer olma eğilimindedir. Organik bileşikler genellikle doymuş veya konjuge sistemler olarak sınıflandırılabilir. Bu sınıflandırma, moleküldeki bağlanma türüne bağlıdır.

Doymuş bileşiklerde, değerlik elektronları, komşu atomlar arasındaki güçlü, lokalize bağlara dahil edilir. Bu, tüm elektronların bağlarında sıkıca tutuldukları ve yalnızca UV spektral aralıktaki yüksek frekanslarda yanıt verebilecekleri anlamına gelir. Bu nedenle, doymuş bileşikler genellikle renksizdir ve görünür bölgede soğurum yapmaz. Özellikleri genellikle camlara benzer. Sırasıyla titreşim ve elektronik geçişler nedeniyle IR ve UV ışınlarını soğururlar ve görünürde bölgede saydamdırlar. Polimetil-metakrilat veya polietilen gibi plastikler tipik örneklerdir. Konjuge moleküller, aksine çok daha ilginç optik özelliklere sahiptir. Karbon atomlarının *p*-benzeri atomik

durumlarından gelen elektronlar, tüm molekül boyunca yayılan π orbitali adı verilen büyük yerelleştirilmiş orbitaller oluşturur. Konjuge bir molekülün standart örneği, π elektronlarının karbon ve hidrojen atomlarının düzleminin üstünde ve altında halka benzeri bir yörünge oluşturduğu benzendir (C_6H_6). Diğer örnekler arasında diğer aromatik hidrokarbonlar, boya molekülleri ve konjuge polimerler yer alır (Fox & Fox, 2001; Simmons & Potter, 1999).

1.4. Kırıcılık İndisi ve Dağılım

Bir malzemede (n) kırılma indisinin spektral bağımlılığını açıklayan birkaç popüler model vardır. Bunların bazıları spektrumun kızılötesi bölgesindeki örgü titreşimlerine bağlı olup farklı bir soğurma olarak değerlendirilir. Optik malzemelerdeki en popüler dağılım ilişkisi Sellmeier ilişkisidir, çünkü mümkün olduğu kadar geniş bir dalga boyu aralığında tanımlanmaktadır. Ancak en büyük dezavantajı, dar bant aralıklı veya katkılı yarı iletkenlerde serbest taşıyıcılardan kaynaklanan bir katkı olduğunda kırılma indisini doğru bir şekilde temsil edememesidir.

1.4.1. Cauchy dağılım ilişkisi

Cauchy bağıntısında, kırılma indisi (n) ile ışığın dalga boyu (λ) arasındaki dağılım ilişkisi genel olarak aşağıdaki biçimde ifade edilir:

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4} \quad (1.26)$$

burada A , B ve C malzemeye bağlı spesifik sabitlerdir. Eşitlik 1.26, Cauchy formülü olarak bilinir ve tipik olarak çeşitli optik camlar için görünür spektrum bölgesinde kullanılır (Smith ve ark., 2001). Artan λ ile n azaldığında normal dağılım için geçerlidir. Orijinal ifade, ışığın dalga boyu λ , frekansı ω veya foton enerjisi $\hbar\omega$ cinsinden bir dizidir.

$$n = a_0 + a_2 \lambda^{-2} + a_4 \lambda^{-4} + a_6 \lambda^{-6} + \dots \lambda > \lambda_e \quad (1.27)$$

veya

$$n = n_0 + n_2 (\hbar\omega)^2 + n_4 (\hbar\omega)^4 + n_6 (\hbar\omega)^6 + \dots \hbar\omega > \hbar\omega_e \quad (1.28)$$

burada $\hbar\omega$ foton enerjisi, $\hbar\omega = \hbar c/\lambda_e$ olup optik uyarım eşiği (bant aralığı enerjisi) a_0 , a_2 , ... ve n_0 , n_2 , ... sabitlerdir. Çok farklı foton enerjileri için kullanabilecek formda Cauchy ilişkisi aşağıdaki şekilde tanımlanabilir (Smith ve ark., 2001).

$$n = n_{-2}(\hbar\omega)^{-2} + n_0 + n_2(\hbar\omega)^2 + n_4(\hbar\omega)^4 + n_6(\hbar\omega)^6 + \dots \quad \hbar\omega > \hbar\omega_e \quad (1.29)$$

Eşitlik 1.26-28'de verilen Cauchy dağılım bağıntıları orijinal olarak kırılma indisinin elastik eter teorisi olarak isimlendirilmiştir. Son yıllarda birçok araştırmacı Sellmeier eşitliğini kullanmayı tercih etmesine rağmen pekçok materyal için yaygın olarak kullanılmıştır.

1.4.2. Sellmeier eşitliği

Sellmeier eşitliği (Tatian, 1984), bir maddenin kırılma indisi n ile ışığın dalga boyu λ arasındaki ampirik bir ilişki olup, her biri genel olarak $\lambda^2/(\lambda^2 - \lambda_i^2)$ bağımlılığına sahip olan bir dizi tek dipol osilatör terimi biçimindedir ve aşağıdaki şekilde ifade edilir.

$$n^2 = 1 + \frac{A_1 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_1^2} + \frac{A_2 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_2^2} + \frac{A_3 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_3^2} \quad (1.30)$$

burada A_1 , A_2 , A_3 ve λ_1 , λ_2 , λ_3 bu ifadenin deneysel verilere uydurulmasıyla belirlenen, Sellmeier katsayıları olarak adlandırılan sabitlerdir. Gerçek Sellmeier formülü daha karmaşıktır. $A_i \lambda^2/(\lambda^2 - \lambda_i^2)$, burada $i = 4, 5, \dots$ gibi benzer formda daha fazla terime sahiptir ancak bunlar genellikle ilgilenilen tipik dalga boyları üzerinde Eşitlik 1.30'da yer alan üç terimin sağlanmasıyla n 'ye karşı λ davranışını temsil ederken ihmal edilebilir (Tatian, 1984). Camlardan yarı iletkenlere kadar bir dizi malzemeye Sellmeier dağılım ilişkisinin uygulanmasına ilişkin çalışmalar literatürde yer almaktadır (Efimov, 1995; Simmons & Potter, 1999; Tatian, 1984).

1.4.3. Yarı iletkenlerin kırılma indisi

Yarı iletkenlerde optoelektronik uygulamalar için E_g bant aralığından daha büyük enerjili foton gönderilmesi durumunda n ve κ basit terimlerle ifade edilememektedir. Forouhi ve Bloomer (Forouhi & Bloomer, 1988) bu rejimde n ve κ 'yı modellemek için faydalı ve izlenebilir ifadeler sağladılar. Forouhi-Bloomer denklemleri

n ve κ 'yı foton enerjisi $\hbar\omega$ cinsinden Kramers–Kronig ilişkilerine uyacak şekilde tutarlı bir şekilde ifade eder.

$$n = n(\infty) + \sum_{i=1}^q \frac{B_{0i}(\hbar\omega) + C_{0i}}{(\hbar\omega)^2 - B_i(\hbar\omega) + C_i} \quad (1.31)$$

$$\kappa = \sum_{i=1}^q \frac{A_i(\hbar\omega - E_g)^2}{(\hbar\omega)^2 - B_i(\hbar\omega) + C_i} \quad (1.32)$$

burada $\hbar\omega$ foton enerjisini, E_g bant aralığını, A_i , B_i , C_i , B_{0i} ve C_{0i} sabitleri göstermektedir. B_{0i} ve C_{0i} sabitleri A_i , B_i , C_i ile E_g parametrelerine bağlıdır.

Afromowitz (Afromowitz, 1974), Adachi (Adachi, 1988), Campi ve Papuzza (Campi & Papuzza, 1985) tarafından başka faydalı teorik veya yarı deneysel dağılım ilişkileri de önerilmiştir. Bu modeller, çeşitli yarı iletkenlere ve bunların alaşımlarına, belirli foton enerji aralıklarında göreceli başarı ile uygulanmıştır. Dağılımı modellemeye yönelik yararlı ve basit yaklaşımlardan birisi de $\epsilon_r(\hbar\omega)$ ile gösterilen karmaşık bağıl geçirgenliği bir dizi sönümlü harmonik osilatörün (harmonik osilatör yaklaşımı olarak adlandırılır) sonlu bir toplamı olarak yazmaya dayanmaktadır. Ancak bu eğri uydurma işleminin dikkatli bir şekilde seçilmesine rağmen birçok terime ihtiyaç duyulmaktadır. Bununla birlikte, şimdiye kadar ele alınan en iyi modellerden biri, yalnızca harmonik osilatörlerin toplamının değil, aynı zamanda karmaşık bağıl geçirgenliğin dağılımını temsil etmek için Gauss genişletilmiş polinomlarının da kullanıldığı parametrik modellemedir (Hwang ve ark., 2013).

Bir yarı iletkenin kırılma indisi n , ($\hbar\omega < E_g$) artan bant aralığı E_g ile azalır. n ile E_g arasında ilişki kuran çeşitli ampirik ve yarı ampirik kurallar ve ifadeler vardır. Bununla birlikte n 'nin sıcaklığa bağımlılığı, E_g 'nin T sıcaklığı ile değişmesinden kaynaklanır ve tipik olarak artan sıcaklıkla artar. Yarı iletkenlerin sıcaklık kırılma indisi katsayısı (TCRI), Hervé-Vandamme ilişkisinden aşağıdaki eşitlikle bulunabilir (Hervé & Vandamme, 1995).

$$TCRI = \frac{1}{n} \cdot \frac{dn}{dT} = \frac{-(n^2 - 1)^{3/2}}{13.6 n^2} \left[\frac{dE_g}{dT} + \frac{dB}{dT} \right] \quad (1.33)$$

1.4.4. Camların kırılma indisi

Üç terimli Sellmeier denkleminin çoğu cam ve seramik için n 'nin dağılımını oldukça iyi temsil ettiği bulunmuştur. Bunun yanı sıra Gladstone-Dale eşitliği (Gladstone & Dale, 1863), bir oksit camın ortalama kırılma indisi n 'nin, yoğunluğu ρ ve bileşenlerinden hesaplanmasına izin veren ampirik bir denklemdir ve sıklıkla aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$\frac{n-1}{\rho} = \frac{n_1-1}{\rho_1} w_1 + \frac{n_2-1}{\rho_2} w_2 + \dots \quad (1.34)$$

burada n ve ρ , tüm karışımın sırasıyla etkin kırılma indisi ve etkin yoğunluğudur. $n_1, n_2, \dots$ bileşenlerin kırılma indisleridir. $\rho_1, \rho_2, \dots$ her bileşenin yoğunluğunu temsil eder ve $w_1, w_2, \dots$ bileşenlerin ağırlık fraksiyonlarıdır.

Bunlara ilave olarak tek osilatör modeline dayanan Wemple-Di Domenico (WD) modeli, çeşitli malzemelerde bantlar arası soğurma kenarının altındaki foton enerjilerinde kırılma indisini belirlemek için yarı deneysel bir dağılım sunar (Wemple, 1973).

$$n^2 = 1 + \frac{E_0 E_d}{E_0^2 - (h\nu)^2} \quad (1.35)$$

burada ν frekansı, h Planck sabitini, E_0 tek osilatör enerjisini ve E_d bantlar arası optik geçişin ortalama gücünün bir ölçüsü olan dağılım enerjisini temsil etmektedir. WD eşitliği yaklaşık bir sonuç sunmasına rağmen basit basitliği nedeniyle deneysel çalışmalar arasında geniş bir kabul görmüştür.

1.4.5. Grup indisi

Grup indisi, dielektrik ortamdaki bir grup dalganın grup hızının, boş uzaydaki yayılma hızına göre azalmasını belirleyen faktördür. N_g ile gösterilir ve $N_g = V_g/c$ ile tanımlanır. Burada V_g grup hızıdır, $V_g = d\omega/dk$ ile tanımlanır. k dalga vektörünü temsil etmektedir. Grup indisi, sıradan kırılma indisi n 'den aşağıdaki ifade ile belirlenebilir (Kasap, 2013).

$$N_g = n - \lambda \frac{dn}{d\lambda} \quad (1.36)$$

burada λ ışığın boş uzaydaki dalga boyudur. Grup indisi N_g , bir cam veya şeffaf ortam içinde yayılan bir ışık atmasının grup hızını belirleyen faktör olduğundan, optik fiberlerdeki dağılımın hesaplanmasında sıklıkla kullanılır. n bir dalga boyu aralığı boyunca λ ile monoton olarak azalabilmesine rağmen, aynı aralıkta N_g , $dN_g/d\lambda$ 'nin sıfır olduğu yerde bir minimum sergileyebilir. $dN_g/d\lambda = 0$ noktası, sıfır-malzeme dağılım dalga boyu olarak adlandırılır.

1.5. Nanomalzemelerde Optik

Boyutları 1-1000 *nm* arasında olan malzemelere nanomalzemeler denilmektedir (Zhang, 2009). Bu malzemeler yüksek yüzey/hacim oranları, hızlı yük iletimi, ilginç yapıları gibi özelliklerinden dolayı eşsiz fiziksel, kimyasal, mekanik, optik, elektronik ve manyetik özelliklere sahip olabilmektedir. Bundan dolayı nanomalzemelerin bilimde, mühendislikte ve teknolojide oldukça geniş uygulamaları mevcuttur (Dwivedi ve ark., 2011; Makhlouf & Tiginyanu, 2011; Pillai ve ark., 2006; Rao & Shekhawat, 2013; Sanger ve ark., 2015). Araştırmalar ve bu alandaki ilerlemeler mikro ve nano yapısı kontrol edilebilen, yeni nesil aygıt konseptine uygun, yeni üretim yöntemleri ve teknolojik fonksiyonlara sahip nanomalzemelerin keşfine yol açmıştır. Nano ölçekli malzemeleri ve bu malzemelerle ilişkili aygıtları üretmek ve özelliklerini tespit etmek için yeni teknikler geliştirme üzerine yoğun çalışmalar devam etmektedir. Nanomalzemelerin optik özellikleri, temel ilgi alanlarının yanı sıra, algılama ve optik dedektör, optik fiberler, lazerler, sensörler, güneş pili, görüntüleme aygıtları, ekranlar, ışık enerjisi dönüşümü, çevre koruma, biyotıp, gıda güvenliği gibi bilimsel ve teknolojik uygulamalar için çok önemli ve kullanışlı özellikler arasındadır (Babar ve ark., 2016; Bakkali ve ark., 2017; Baraton, 2012; Jain ve ark., 2008; Kumar ve ark., 2014; Mandia ve ark., 2015; Jaspal Singh ve ark., 2017; Suresh, 2013). Bu nedenle, nanomalzemelerin ilginç ve faydalı özelliklerinden biri de optik özellikleridir.

Nanomalzemelerin ışığa maruz kaldıklarında tepkilerini tahmin edebilmek ve değiştirebilmek, nanomalzeme kullanılarak üretilen aygıtların işleyişini kontrol edebilmek için önem arz etmektedir. Bu durum, malzemenin optik özellikleri iyi belirlendiğinde ve farklı teknolojik uygulamalardaki optik davranışlarından sorumlu mekanizmalar açıklandığında mümkündür. Kimya, fizik, malzeme bilimi ve mühendisliği, elektrik/elektronik mühendisliği, biyoloji, tıp disiplinlerine uzanan çeşitli uygulamalarda malzemelerin optik özelliklerinden sıkça faydalanan aygıtlar

geliştirilmiştir. Bu nedenle, bu çeşitli bilim ve mühendislik alanlarındaki araştırmacılar/bilim adamları için temel optik özelliklerin ve ilgili spektroskopik tekniklerin anahtar bir şekilde anlaşılması gereklidir.

Işığın birkaç ila birkaç yüz nanometre arasındaki nanomalzemeler ile etkileşiminin incelenmesi nanofotonik olarak isimlendirilir ve bu durum materyallerin eşsiz optik özelliklerini gösteren yeni bir optik fenomeni ortaya çıkarır (Dwivedi ve ark., 2011; Kovalenko, 1999; Wang ve ark., 2005; Zhang, 2009). Bu etki kuantum sınırlılık etkisi olarak bilinir.

Bulk malzemelerde, eksiton (elektron-hole çifti) her yöne serbestçe hareket edebilir. Öte yandan, bir malzemenin uzunluğu birkaç nanometreye indirildiğinde, kuantum hapsedme etkisi meydana gelir ve malzeme özelliklerini değiştirir. Hapsedilmenin boyutuna bağlı olarak, üç tür kapalı yapı tanımlanır: Kuantum kuyusu (QW), kuantum teli (QWR) ve kuantum noktası (QD). Bir QW’de malzeme boyutu yalnızca bir yönde küçültülür ve eksiton diğer iki yönde serbestçe hareket edebilir. Bir QWR’de malzeme boyutu iki yönde küçültülür ve eksiton yalnızca bir yönde serbestçe hareket edebilir. Bir QD’de malzeme boyutu her yöne küçültülür ve eksiton herhangi bir yönde serbestçe hareket edemez. Özellikle, sınırlı boyutlar, kendi içinde kesiksiz olan elektronik bantların kuantize olmasına ve boyuta bağlı olan değerlik bandı ile iletkenlik bandı arasındaki boşluğun genişlemesine neden olur. Bu durum maviye kayma olarak da bilinmektedir. Sonuç olarak bir malzemenin optik özelliğini belirleyen, malzeme içinde kuantum mekaniksel denklemlerle oluşmuş olan enerji bantları arasındaki boşluklardır. Çünkü bir malzeme ışıkla veya başka dış etkilerle uyarıldığı zaman bu enerji bant aralığı kadar enerjideki ışığı absorblamakta ya da foton salınımı yapmaktadır. Bant aralığı, E_g malzemenin boyutları azaldıkça artmaktadır. Bu da malzemenin boyutu azaldıkça daha farklı ışığı absorblaması veya foton salınımı yapması yani optik özelliklerinin farklılaşması anlamına gelmektedir.

1.6. İnce Filmler ve Optik Parametrelerinin Belirlenmesinde Kullanılan Matematiksel Yaklaşımlar

Teknolojik anlamda nanomalzemelerin en ilgi çekicilerinden birisi olan ve taşıdığı özellikler ile direkt teknolojik uygulamalarda kendine yer bulabilen bir diğer yapılar ise ince filmlerdir.

İnce filmlerin optik davranışı iki bakış açısından değerlendirilebilir. Mevcut yöntemlerle büyütülen ince film yapılar üzerinde yapılan çalışmalar göstermiştir ki

filmlerin genellikle deęişken boyut, yönelim ve farklı boşluk derecelerine sahip kristalitlerin birikmesiyle oluştuęu tespit edilmiştir. Böyle bir sistemin optik davranışının açıklaması esasen bir saçılma problemidir ve bu yaklaşım, genellikle, örnek olarak bir katının yüzeyindeki bir geçiş katmanının etkilerinin incelenmesinde kullanılır. Bununla ilgili matematik problemleri genellikle zordur ancak kalınlığı moleküler aralıklar düzeyinde olan katmanlar için izlenebilir hale gelir. Onlarca mikrondan meydana gelmiş daha kalın tabakayı kırılma indisi ve bir soęurma katsayısı tanımlayarak çözmek mantıklı bir yaklaşımdır. Tabakanın optik özellikleri daha sonra klasik elektromanyetik teori kullanılarak hesaplanabilir. Bu yaklaşımın çoklu film (çok tabakalı) sistemlere genişletilmesinde hiçbir zorluk ortaya çıkmaz ve yansıma, geçirgenlik, optik sabitler ve film kalınlıkları kolaylıkla hesaplanabilir. Bunun matematięi hantal olmasına rağmen basittir, problemler dijital bilgisayarlar tarafından kolaylıkla ele alınır veya grafiksel yöntemler ile bulunabilir. Bazı malzemelerin filmlerinin deneysel olarak gözlemlenen özelliklerinin elektromanyetik teorisinin öngörülerıyla yakından uyumlu olduęu ve böylece ince film probleminde bu yaklaşımı doğrulandığı bulunmuştur. Bununla birlikte, moleküler boyutlar mertebesindeki kalınlıktaki tabakalar için, saçılma teorisi, bu tür filmlerin kırılma indisi ve soęurma katsayısı açısından tanımlanamayacağını göstermektedir. Kalın filmlerde, film kalınlığıyla film yapısındaki bir deęişiklikten kaynaklanan farklılıklar genellikle yapının homojen olmayışına atfedilir. Bazen, film yapısı hakkında optik inceleme bilgilerinden bir sonuç çıkarmak mümkündür. Filmlerin kalınlığının ve optik sabitlerinin ölçümü için şimdiye kadar çok sayıda yöntem geliştirilmiştir. Filmlerin pürüzsüz olması ve düzgün bir alt tabaka üzerinde olması şartıyla, interferometrik ve fotometrik yöntemler $1\text{ }\mu\text{m}$ 'den daha iyi bir hassasiyetin elde edilmesini sağlar. Şeffaf filmler için kırılma indisi, uygun koşullar altında doğrudan ± 0.002 dahilinde ölçülebilir. Soęurucu filmlerin optik sabitlerinin kesin olarak saptanması genellikle daha zordur, mevcut yöntemlerle yaklaşık %2'lik bir doğruluk elde edilebilir. Buharlaştırılmış metal filmler üzerindeki ölçümlerde, optik sabitlerin hassasiyetinin film oluşturma baęlılığı oldukça yüksektir. Optik cihazlarda filmlerin artan geniş uygulama alanıyla, film kalınlığını izleme yöntemleri etkileyici bir standarda göre geliştirilmiştir. Sofistike tasarımlı çok katmanlı filtrelerin yapımı için kalınlık kontrolünün hassasiyeti artık elde edilebilmekte ve çok sayıda katman içeren filtrelerin yapılmasını sağlamaktadır. Çok katmanlı sistemlerde kullanıma uygun daha fazla malzeme keşfedildikçe, filtreler (neredeyse) istenen herhangi bir amaç için özel olarak üretilebilmektedir (Heavens, 1960).

İnce katı filmlerin dalga boyuna bağılı karmaşık kırılma indisinin doğru değerlerinin bilgisi hem temel hem de teknolojik açıdan çok önemlidir. Optik bilgiler optik yasak bant aralığı (yarı iletkenler ve yalıtkanlar için), kusur seviyeleri, fonon ve plazma frekansları, vb. hakkında temel bilgiler verir. Ayrıca, kırılma indisi, optik bileşenlerin ve girişim filtreleri gibi optik kaplamaların tasarımı ve modellemesi için gereklidir. Bu kapsamda ince filmlerin optik özelliklerini belirleyebilmek adına pek çok yöntem geliştirilmiştir. Bu yöntemlerden birisi “Yansıma Spektroskopisi (Reflectance Spectroscopy)”dır. Yansıma spektroskopisi incelendiği zaman altında pek çok farklı teorilerin olduğu göze çarpmaktadır. Temelde yansıma spektroskopisi Süreklilik Teorisi ve İstatistiksel Teori olmak üzere ikiye ayrılmaktadır. Süreklilik Teorisi de kendi altında Tabaka Modeli, Kubella-Munk Teorisi, Rozenberg Çözümleri, Kesin Çözümler olmak üzere dört alt kategoride incelenirken İstatistiksel Teori; Bodó Modeli, Johnson Modeli, Antonov-Romanovsky Modeli, Melamed Modeli, Fassler-Stodolski Modeli ve Simmons Modeli altı alt kategoride incelenmektedir. Burada bahsi geçen modellemeler ve çözümler referans alınan geometrik yaklaşımlar için yapılan çözümler sonucu elde edilmiş olup farklı şartlar altında doğru sonuçlardan sapmalar gösterebilmektedir (Hecht, 1976). Diğer bir yöntem ise Geçirgenlik Spektroskopisidir (Transmittance Spectroscopy). Özellikle saydam alttaşlar üzerine büyütülen ince filmlerin optik özelliklerini belirlemede sıkça başvurulmuş bir yöntemdir.

İzotropik, homojen ve düzlemsel-paralel ince bir film modeli kabul edildiği takdirde her dalga boyundaki kırılma indisinin gerçek ve hayali kısımları filmin optik özelliklerini tamamen belirler. Bu nedenle, $n(\lambda)$ ve $k(\lambda)$ bilinmeyenlerini çözmek için her dalga boyunda iki bağımsız ölçüm gereklidir. Eğer filmler homojen olma, izotropik ve düzlemsel-paralel özellik gibi gereklilikleri karşılamıyorsa yani pürüzlü (Nowak, 1995; Szczyrbowski, 1978), anizotropik ve/veya heterojen (Bah ve ark., 1993; De Caro & Ferrara, 1999; Ying ve ark., 1990) ise çoğu durumda “ideal olmayan” ince filmlerin optik özelliklerini modellemek daha karmaşık olmasına rağmen mümkündür. İnce filmlerin kırılma indisinin belirlenmesi için çok sayıda yöntem geliştirilmiştir. En önemli yöntemler

- (1) En az iki farklı optik ölçüm
- (2) Dalga boyuna bağılı kırılma indisinin davranışını yaklaşık olarak belirlemek için dağılım (dispersiyon) ilişkileri veya genel fiziksel kısıtlamalar
- (3) İkinci değişken olarak “sanal” bir ölçüm

olarak üç farklı grupta toplanabilir. Yalnızca tek bir geçirme (transmittance) spektrumu kullanan (2) ve (3) grupları daha az deneysel çaba gerektirdiği için daha çok tercih edilmektedir (del Pozo & Díaz, 1992; Laaziz & Bennouna, 1996; Stichauer & Gavaille, 1993).

1.6.1. İki bağımsız ölçüm kullanan yöntemler

Uzun yıllardan beri, normal (film yüzeyine dik) gelen ışının ölçümü ve normale yakın ışının geçirgenlik yansıtma ölçümünün kombinasyonu - kısaca (R, T) yöntemi - (n, κ) tayini için kullanılmaktadır (Bringans, 1977; Denton ve ark., 1972; Nilsson, 1968; Paulick, 1986). Bu yöntemin birkaç dezavantajı vardır. Bunlar:

(a) Yeterince doğru mutlak dik açılı yansıma verilerini elde etmek çok zordur. Spektrofotometrik ölçümlerde, dik yansımayı ölçmek için iki yaygın yöntem vardır. En basit deneysel kurulum kullanılarak numune yüzeyindeki tek bir yansıma üzerine ışık zayıflaması ölçülür ve bu daha sonra kalibre edilmiş bir aynanın yansıması ile karşılaştırılır. Mutlak yansımayı ölçmenin daha zarif bir yolu, düzenekte hareket edebilen bir ayna önce bir referans konumuna yerleştirilir ve iki sabit aynanın ve hareketli aynanın karşılık gelen birleşik yansıması elde edilir. Daha sonra, hareketli ayna ölçüm konumuna getirilir ve incelenecek film yerleştirilir. Bu yönteminin tek belirgin dezavantajı örnek üzerindeki iki yansımanın farklı noktalarda meydana gelmesidir (Strong, 1938; Tatian, 1984).

(b) Genellikle, geçirgenliği ve yansımayı filmin tam olarak aynı noktasında ölçmek neredeyse imkansızdır. Film tamamen homojen değilse (film içeriği veya kalınlık açısından) yöntemin doğruluğunu bir hayli azaltmaktadır.

(c) Normal gelen ışın yansımasını ölçmenin kolay bir yolu yoktur. Olağan yöntemlerde çok küçük olan gelme açısı maksimum doğruluk için sonraki hesaplamalarda dikkate alınmalıdır. Ayrıca bu durum ölçümleri polarizasyon etkilerine de duyarlı hale getirmektedir (Tatian, 1984).

(d) (R, T) 'den (n, κ) tespiti sayısal bir ters çevirmeye dayanır. Farklı ters çevirme yöntemleri (Paulick, 1986) ve tekniğin doğruluk sınırları (Hazelwood, 1970; Ward, 1982) hakkında çok sayıda makale yayınlanmıştır.

İnce bir filmin optik geçirgenliği aşırı soğurma nedeniyle aşırı derecede düşükse yansıma ölçümlerini tek seçenek olmaktadır. Bu durumda, farklı gelme açıları ve/veya farklı polarizasyon kullanılarak iki yansıma ölçümünün kombinasyonu kullanılabilir. İki farklı ölçüm kullanan çok sayıda başka yöntem de mevcuttur. Bunlar arasında en çok

bilineni farklı film kalınlığındaki (Hazelwood, 1970) iki film üzerinde geçirgenlik ölçümleri ve elipsometri ölçümleridir. İlk durumda ince filmlerin bu analiz için özel olarak iki farklı kalınlıkta büyütülmesi gerekmektedir. Bu yöntem, kısmen metalize alttaş (Hjortsberg, 1981) üzerine yerleştirilen filmler üzerindeki ölçümlere dayanır. Elipsometri yöntemi ince filmlerin ve alttaşların optik sabitlerinin belirlenmesi için oldukça güçlü bir tekniktir (Palik, 1998). Mikroelektronik endüstrisinde (Irene, 1993), yarı iletken levhalar üzerindeki tek tabakalı kalın oksit tabakalarının analizi için yaygın bir kullanım bulmuştur. Tekniğin gücü ki bu aynı zamanda zayıflığıdır, aşırı yüzey hassasiyetine sahip olmasıdır. İnce bir film üzerindeki çok ince bir kirlenme tabakası, film için büyük ölçüde farklı optik sabitler verecektir. Elipsometrik ölçümlerin analizi için incelenen katman sisteminin dikkatli bir şekilde modellenmesi sonuçların doğruluğu açısından oldukça önemlidir.

1.6.2. Dağılım (Dispersiyon) bağıntılarının eşleştirilmesi

Yaygın olarak kullanılan bir yöntem olarak dalga boyuna bağlı karmaşık kırılma indisi için spesifik – az ya da çok ampirik – bir dispersiyon denklemi kabul etmektedir. Bu yöntem, ince film optik tasarımı ve analizi için çeşitli ticari yazılım paketlerinde kullanılmaktadır. En sık kullanılan denklemler;

(a) Cauchy denklemleri (Jenkins & White, 2018): Bu denklemler tamamen ampiriktir ve ilk olarak Cauchy (1789-1827) tarafından önerilmiştir. SiO_2 , Al_2O_3 , Si_3N_4 , BK7 cam gibi şeffaf malzemeleri modellemek için çok uygundur.

(b) Sellmeier ilişkisi (Jenkins & White, 2018; Nilsson, 1968): Kızılötesi şeffaf malzemelere (Cauchy denklemleri gibi) ve yarı iletkenlere (Si, Ge, GaAs, vb.) uygulanabilmektedir. Sellmeier denklemi, Cauchy formüllerinin bir genellemesidir. Orijinal Sellmeier ilişkisi tamamen şeffaf malzemeler için kullanılır ($\kappa = 0$); bununla birlikte bazen $\kappa(\lambda)$ için ek bir formül kullanılarak soğurucu rejimi kapsayacak şekilde genişletilir.

(c) Lorentz klasik osilatör modeli (E. Hecht, 2002; Jenkins & White, 2018): Yaklaşım ile elde edilen denklem n ve κ için kolayca çözülür ancak oldukça kullanışsız ifadeler verir. Cauchy ve Sellmeier'den eşitliklerine göre avantajlarından biri Kramers-Kronig (KK) ilişkileriyle tutarlı bir şekilde n ve κ için bir dizi bağlı denklem sunmalarıdır. Forouhi – Bloomer denklem seti de bunu hesaba katar.

(d) Forouhi-Bloomer dağılım ilişkileri, kristal yarı iletkenlerin ve dielektriklerin karmaşık kırılma indeksini titiz bir temelde modellemek için geliştirilmiştir (Bloomer &

Mirsky, 2002; Forouhi & Bloomer, 1986). Forouhi-Bloomer dağılım denklemleri, yansıma ölçümleri kullanılarak bir dizi ince film analiz aracında uygulanmış ve esas olarak yarı iletken endüstrisine odaklanmıştır. Forouhi-Bloomer denklemleri esasen yalnızca malzemelerin bantlar arası bölgesini modellemek için yani bant aralığı enerjisinden daha yüksek foton enerjileri için uygulanmıştır. Bununla birlikte, alt bant aralığı bölgesinde de uygulamaları mevcuttur (K. Zhang ve ark., 1999).

(e) Drude modeli: Metaller için dielektrik işlevi serbest taşıyıcılara bağlı olarak ifade edilir. Genellikle, dağılım denklemlerindeki parametreler deneysel geçirgenlik spektrumundan hareketle en küçük kareler metodu kullanılarak belirlenir. Çoğu durumda, film kalınlığı uygun bir parametre olarak basitçe dahil edilebilir (Ashcroft & Mermin, 1976). Forouhi-Bloomer denklemleri gibi Sellmeier ve Lorentz-osilatör dağılım denklemleri gerekirse birden fazla osilatöre genişletilebilir (Morrissey & Powell, 1973). Bazı malzemeler için osilatör tipi bir dağılım ilişkisinin Drude modeli ile birleştirilmesi gerekmektedir.

Dispersiyon denklemlerinden herhangi biri çok sayıda malzeme için ve oldukça geniş bir dalga boyu bölgesinde çok iyi sonuçlar verebilir. Bir denklemin uygulanabilirliği deneysel geçirgenlik spektrumu ile dağılım denklemlerinden hesaplananlar arasındaki uyuma bağlıdır. Aslında, tüm bu dağılım denklemleri dalga boyunun yavaşça değişen işlevleridir ve yanlış bir (n, κ) veri seti kullanarak geniş bir dalga boyu aralığında iyi bir uyum elde etmenin hiçbir yolu yoktur. Bunun nedeni, n ve κ 'nın (film kalınlığı d ile birlikte) bir geçirgenlik spektrumunun şeklini doğrudan belirlemesidir. Ayrıca, Şekil 1.7'deki gibi girişim saçaklarının aralığı film kalınlığı ve kırılma indisine bağlıdır. Kırılma indisi dağılımı ihmal edilebilir düzeydeyse (ki bu genellikle soğurma kenarından oldukça uzaktadır), λ_1 dalga boyunda geçirgenlik maksimumundaki girişim sırası m ;

$$m = \left\lceil \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \right\rceil \quad (1.37)$$

olarak ifade edilir. Burada λ_1 ve λ_2 iki bitişik geçirgenlik maksimumunun ($\lambda_1 > \lambda_2$) dalga boylarıdır. Maksimum geçirgenlik d 'nin çarpımı ve sönümlenme katsayısı κ ile belirlenir ve saçakların yüksekliği ilk yaklaşımda n ile belirlenir. Bu şekilde, kalınlık ve (n, κ) genellikle ilk bakışta bir geçirgenlik spektrumundan tahmin edilebilir. Şekil

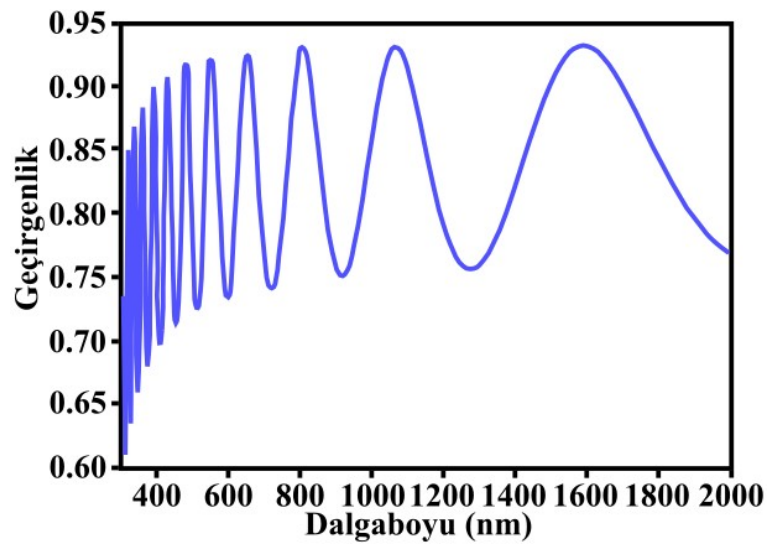
1.7'deki geçirgenlik spektrumu böyle bir manuel yaklaşıma kolayca izin verir. Bu durumda, κ o kadar düşüktür ki ekstrema aktarımı

$$nd = m \frac{\lambda}{2} \quad (1.38)$$

$$nd = \frac{(m+1)\lambda}{4} \quad (1.39)$$

denkleminde sırasıyla geçirgenliğin maksimumu ve minimumu için bulunur. Kırılma indisinin gerçek kısmının yalnızca bir dalga boyunda (örneğin, soğurmanın ihmal edilebilir olduğu bir noktada) doğru belirlenmesi her bir uç dalga boyunda hem film kalınlığını hem de n 'yi belirlemeyi mümkün kılar (Poelman & Smet, 2003). Bununla birlikte, çok ince veya kuvvetli soğurucu filmler söz konusu olduğunda dikkatli olunmalıdır çünkü bunlar girişim saçaklarını göstermezler. Maalesef film kalınlığının en genel durumu için n ve κ 'nın hata limitlerini ölçmek kolay değildir.

Dağılım ilişkisi yöntemi oldukça güçlüdür ve özellikle bilinen bazı parametrelerle (film kalınlıkları veya önceki deneylerden malzeme verileri gibi) ince filmler (hatta ince film yığınları) için çok doğru sonuçlar verebilir. Yöntemin tek sınırlaması eşleştirme işlemine başlamadan önce dağılım ilişkisinin türü hakkında varsayımlar yapmak zorunda olmasıdır.



Şekil 1.7. Elektron demeti buharlaştırma ile kuvars üzerine büyütülmüş SrS ince filminin geçirgenlik spektrumu (Poelman & Smet, 2003).

Tartışılan tüm yöntemler, araştırmacıların ilgili kırılma indisi dağılımının doğası hakkında belirli varsayımlar yapmasını gerektirir. Bu, yaygın malzemelerin çoğu için sorun değildir ancak yeni veya egzotik malzemeleri (çoklu fazlar, lokalize soğurma bantları, alışılmadık bant kenarı soğurumu, vb.) içeren araştırma çalışmalarında bir takım problemleri de beraberinde getirmektedir. İki farklı ölçüme dayanan yöntemlerde varsayımlar gerektiği için dağılım bağıntılarının eşleştirilmesi bu noktada farklılık gösterir.

1.6.3. Sanal Ölçümlerin Kullanılması

1.6.3.1. Geçirgenlik Verilerinin Kramers-Kronig (KK) Analizi

Bir malzemenin geçirgenliği ve geçirgenlik ardından meydana gelen faz kayması

$$\varphi(\lambda_0) = \frac{2\lambda_0}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln t_f(\lambda)}{\lambda_0^2 - \lambda^2} d\lambda - \frac{2\pi d}{\lambda_0} \quad (1.40)$$

ile verilir. Burada P integralin Cauchy temel değeri ve t_f filmin geçirgenliğini ifade etmektedir. Bu denklem tüm dalga boylarında herhangi bir malzemenin geçirgenliği verildiğinde buna karşılık gelen faz kaymasının hesaplanabileceğini ifade eder. Geçirgenlik ve faz kayması daha sonra iki bağımsız değişken olarak kullanılabilir ve herhangi bir dalga boyunda malzemenin n ve κ 'sının hesaplanmasını sağlar. Yukarıdaki integrali hesaplamak için Nilsson (Zhang ve ark., 1999) aşağıdaki ekstrapolasyon prosedürünü uygulamıştır. Ortalama değer teoremini kullanarak:

$$\varphi(\lambda_0) = A(\lambda_0) \ln \left| \frac{\lambda_L + \lambda_0}{\lambda_L - \lambda_0} \right| + \frac{2\lambda_0}{\pi} P \int_{\lambda_L}^{\lambda_H} \frac{\ln t_f(\lambda)}{\lambda_0^2 - \lambda^2} d\lambda + B(\lambda_0) \ln \left| \frac{\lambda_H + \lambda_0}{\lambda_H - \lambda_0} \right| + \frac{2\lambda_0}{\pi} \quad (1.41)$$

eşitliği yazılmıştır. Burada λ_L ve λ_H ölçüm aralığının alt ve üst dalga boyu sınırlarıdır. Yaklaşım olarak, A ve B 'nin sabit olduğu varsayılır (Poelman & Vennik, 1988; Roessler, 1966). Filmin karmaşık kırılma indisi iki farklı dalga boyu için biliniyorsa karşılık gelen faz kayması hesaplanabilir ve yukarıdaki integralden A ve B belirlenebilir. İntegraldeki tekillik, integralin bir kısmını çıkararak ve onu entegre formuna geri ekleyerek kaldırılabilir (Poelman & Vennik, 1988):

$$P \int_{\lambda_L}^{\lambda_H} \frac{\ln t_f(\lambda)}{\lambda_0^2 - \lambda^2} d\lambda = \int_{\lambda_L}^{\lambda_H} \frac{\ln t_f(\lambda) - \ln t_f(\lambda_0)}{\lambda_0^2 - \lambda^2} d\lambda - \frac{1}{2\lambda_0} \ln t_f(\lambda_0) \ln \left| \frac{(\lambda_0 + \lambda_L)(\lambda_H - \lambda_0)}{(\lambda_0 - \lambda_L)(\lambda_H + \lambda_0)} \right| \quad (1.42)$$

Geçirgenlik spektrumlarının analizi için KK ilişkilerini kullanmak teorik olarak çok zarif olsa da (kırılma indisi dispersiyonu ile ilgili herhangi bir ön varsayıma ihtiyaç duymaz) rutin analiz için bir araç olarak uygulanması oldukça zordur. Çünkü;

(a) Verilen denklemlerle, iki farklı dalga boyunda (n, κ) 'nin ayrı olarak belirlenmesi gerekir.

(b) Ölçüm aralığının $[\lambda_L, \lambda_H]$ sınırlarında, A ve B 'nin yaklaşık olarak sabit olmasından kaynaklanan hata oldukça büyüktür. En genel durumda bu hatayı değerlendirmek kolay değildir. Sonuç olarak, geçirgenlik mümkün olan maksimum dalga boyu aralığında ölçülmelidir.

(c) (T, φ) 'den (n, κ) 'nin hesaplanması, en kötü durumda, hatalı bir çözüme yakınlaşabilen sayısal bir yineleme prosedürü gerektirir.

1998'de Palmer ve arkadaşları (Palmer ve ark., 1998) kızılötesi optik verilerin değerlendirilmesi için yeni, çok-çıkarımlı bir KK yöntemi tanımladılar. Bu teknik oldukça ümit verici görünse de belirli dalga boylarında (n, κ) 'nin bağımsız olarak belirlenmesini de gerektirir. Ek olarak, UV ile görülebilen bölgedeki veriler için bant kenarı soğurumu nedeniyle UV tarafında geçirgenliğin genellikle aşırı derecede düşük olduğu veriler için hangi doğruluğun elde edilebileceği açık değildir.

1.6.3.2. Zarf Yöntemi (Swanepoel Metodu)

Bu yöntem 1976'da Manifacier ve arkadaşları (Manifacier ve ark., 1976) tarafından (n, κ) ekstraksiyonu için optik geçirgenlik spektrumlarından hareketle ortaya atılmıştır. Bu yöntem Swanepoel (Swanepoel, 1983) tarafından daha da geliştirilmiş ve ticari ince film yazılımında da kullanılmaya başlanmıştır. Yöntem, kayda değer girişim saçakları gösteren herhangi bir geçirgenlik spektrumuna uygulanabilmektedir. Yöntemde geçirgenlik spektrumundan maksimumları ve minimumları belirleyen zarflar oluşturulur. Daha sonra, maksimum ve minimumun etrafındaki zarflar, sırasıyla $T_M(\lambda)$ ve $T_m(\lambda)$ dalga boyuna karşı sürekli spektrumlar olarak kabul edilir. n ve κ artık her dalga boyunda T_M ve T_m 'den hesaplanabilir. Zarf yöntemi oldukça kullanışlı ve çok basittir. Dikkat edilmesi gereken noktalar:

(a) Girişim sınırları arasında zarf oluşturma doğru bir yolu yoktur. Genellikle, parabolik enterpolasyon kullanılarak oluşturulurlar ancak bu aslında keyfi bir seçimdir.

(b) Zarflar ideal olarak aşırı parazitlerden değil, geçirgenlik eğrisine dokunan teğet noktalardan oluşturulmalıdır. Özellikle geçirgenliğin hızlı değiştiği bir bölgede sınır uçlarının bağlanması sonucu gerçekte birbirine çok yakın olan $T_M(\lambda)$ ve $T_m(\lambda)$ eğrileri bükülecektir.

(c) Film çok kalın değilse yani soğurma bantları girişim saçığının maksimum ve minimumları arasına düşerse yöntem yerel soğurma özellikleriyle baş edemez.

(d) Yöntemin doğruluğu film kalınlığı azaldıkça azalır çünkü daha düşük film kalınlığında enterpolasyon daha da aralıklıdır ve bu uç noktaları tespit etmek zorlaşır.

(e) Filmdeki soğurma, enterpolasyon saçakları görünmeyecek kadar yüksekse ve $T_M(\lambda)$ ve $T_m(\lambda)$ eğrileri çakışırsa yöntem başarısız olur. Yöntem bu durumda orijinal biçiminden (Swanepoel, 1983) bir Cauchy dispersiyon ilişkisine indirgenir.

Dikkatlice uygulandığında, zarf yöntemi rutin bir analiz tekniği olarak uygulanabilir. Yöntemin doğruluğunu değerlendirmek ve birden fazla çözümünden kaçınmak adına yöntemi iyileştirmek için çeşitli çalışmalar yapılmıştır (González-Leal ve ark., 2002; Minkov & Swanepoel, 1993; Sisonyuk, 1996). Son zamanlarda, altta soğurumunun etkisi de yöntemde dahil edilmiştir (González-Leal ve ark., 2002).

1.7. Matematiksel Yaklaşımların Karşılaştırılması

Gerçek bir ince filmin geçirgenlik spektrumundan elde edilen veriler, dispersiyon bağıntılarının eşleştirilmesi (Cauchy denklemleri, Sellmeier ilişkileri (üstel sönümlenme katsayısı ile), Lorentz osilatör (tek osilatör), Forouhi – Bloomer denklemleri (tek terimli)), Swanepoel'in zarf yöntemi, kırılma indisi ve kalınlık ölçümünün manuel yöntemle uygulandığında aşağıdaki sonuçlar elde edilmiştir.

Metotlar arası karşılaştırmada 1 nm kalınlığında silika bir altta üzerine elektron demeti buharlaştırma yöntemi ile büyütülen ince film SrS'nin deneysel geçirgenlik spektrumu kullanılmıştır. SrS, yaklaşık 2.0 kırılma indisine sahip geniş bant aralıklı bir yarı iletkenidir ($E_g \approx 4.3$ eV). Film kalınlığı olarak yaklaşık 800 nm'lik bir kalınlık seçilmiştir. Geçirgenlik verileri 250 ile 2000 nm arasında 1 nm'lik adımlarla alınmıştır (Şekil 1.6). Referans olarak ilk olarak silikanın soğurma spektrumu alınarak altta kaynaklı soğurma elimine edilmiştir. Bağıntıların hesaplanması için Excel ile ticari programlar kullanılmıştır. Eşleştirme işlemlerinde en önemli değer modellenen kırılma indisi dağılımdan elde edilen deneysel geçirgenlik spektrumu ile spektrum arasındaki

ortalama karekök (RMS) sapmasıdır. Deneysel geçirgenlik spektrumunun gürültü seviyesi sadece % 0.02 (RMS) olmuştur. Sonuç olarak;

Cauchy denklemleri optimum bir sonuç vermemiş ve altı parametre kullanmaya devam ederken % 0.71'lik oldukça büyük bir RMS sapması vermiştir.

Sellmeier ilişkileri mevcut malzeme türü için oldukça iyi bir sonuç vermiştir. Sellmeier ilişkileri, Lorentz klasik osilatör modelinin basitleştirilmesi anlamında yarı ampiriktir.

Klasik osilatör modeli de çok iyi sonuçlar vermiştir. Çok geniş bir dalga boyu aralığı yalnızca dört eşleştirme parametresiyle belirlenmiştir.

Dispersiyon denklemlerinde yalnızca tek bir terim kullanan Forouhi – Bloomer modeli 300-2000 nm aralığı için iyi sonuçlar vermemiştir. Yalnızca daha küçük bir aralık için diğer dispersiyon ilişkileriyle karşılaştırılabilir iyi sonuçlar elde edilmiştir. Bu modelin tek terimli versiyonu görünüşe göre mevcut veri seti için uygun olmasa da Forouhi-Bloomer denklemleri çeşitli soğurma bantlarını kapsayan optik spektrumların analizi için ideal olarak uygundur.

Zarf yöntemi (genellikle Swanepoel Metodu olarak adlandırılır) diğer yöntemlerle hemen hemen aynı sonuçları vermiştir ancak sadece girişim saçaklarının uç noktalarına karşılık gelen dalga boylarında kırılma indisi değerleri vermiştir.

Manuel yöntem de ideale yakın geçirgenlik spektrumunun mevcut türü için oldukça iyi sonuç vermiştir. Ancak, Swanepoel yönteminde olduğu gibi sadece iyi çözülmüş girişim ekstremaları görünür olduğunda uygulanabilir.

Test edilen tüm yöntemlerin film kalınlığı ve kırılma indisi değerlerinin standart sapması bu yöntemler için bir hata tahmini olarak kabul edilmesi gereken %0.25 düzeyindedir.

Tüm yöntemler kırılma indisinin gerçek kısmı olan n için aynı tür dispersiyon davranışı yeniden üretebilmektedir. Hayali kısım olan κ değerlerinin bir miktar saçılması vardır. Ancak bu esas olarak çok düşük sönümlenme katsayısının nispeten küçük bir film kalınlığı ile birleşmesinde kaynaklanmaktadır. Bu nedenle, κ 'daki görünüşte büyük göreceli farklılıklar geçirgenlikteki yalnızca çok küçük değişikliklerden sorumludur.

1.8. Tez Çalışmasında Kullanılan Malzeme ve Matematiksel Metot

Kalay-oksit yapısı, özellikle gaz algılama ve fotokatalitik uygulamalarının yanı sıra saydam iletken-oksit (TCO) yapısında da en çok tercih edilen malzeme olup opto-elektronik uygulamalarda da önemli bir yere sahiptir. Niyobyum kalay da dahil olmak üzere çeşitli metaller ile alaşım yapabilen ve oksit formları spesifik olarak katı elektrolitik kapasitörler, şeffaf iletken oksitler, fotokromik cihazlar, memristörler, boyaya duyarlı güneş pilleri ve diğerleri gibi birçok teknolojik uygulamada büyük potansiyel gösteren bir malzemedir. Bu iki malzemenin birleşimi ile meydana gelen yapının optik özelliklerinin tayini için deneysel alınan ölçümlerden hareketle Zarf Metodu olarak da bilinen matematiksel Swanepoel Metodu kullanılarak tayin edilmeye çalışılmıştır. Araştırma laboratuvarında manyetik alan sıçratma tekniği kullanılarak cam üzerinde büyütülen ince filmlerin deneysel optik ölçümler alınmış ve bu ölçümlere Swanepoel Metodu uygulanarak optik parametreleri hesaplanmıştır. Deneysel verilerden hareketle hem basit hem de etkili bir şekilde hesaplama yapmayı sağlayan bu metod ile büyütülmüş ince filmlerin optik parametreleri tayin edilmiştir. Elde edilen sonuçlar deneysel sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. İnce filmlerin uygulamada kullanılabilmesi için özelliklerinin önceden bilinmesi çalışmanın daha doğru temellere oturtulması konusunda önem arzeder. Bu bağlamda farklı etkilerle renk değiştirebilen bu iki malzemenin optik özelliklerinin tayini bu alanda çalışacak araştırmacılar için yol gösterici olacaktır.

Bu çalışma manyetik alan sıçratma ile daha önce yüksek sıcaklık ortamında niyobyum katkılı kalay-oksit büyütülmemiş olmaması ve bu malzemelerin optik parametrelerinin matematiksel Swanepoel Metodu ile tayin edilmemiş olması bu tez çalışmasına özgünlük kazandırmaktadır.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

Nanoteknoloji, bilim ve teknoloji alanında gelişmekte olan bir kavramdır. Nano ölçekli malzemeler her geçen gün hayatımıza daha fazla girmekte ve bu malzemelerin uygulanabilirliği artmaktadır. Güneş enerjisi dönüşümünden, katalize, enerji depolama ve su arıtma alanlarından giyilebilir teknolojiye, uzay araştırmalarından sağlık ve sosyokültürel alanlara kadar pek çok alanda etkisini hissettirmektedir. TiO_2 (P. V. K. Yadav ve ark., 2022), MnO_2 (Liu ve ark., 2022), NiO (Drozowska ve ark., 2022), ZnO (Amjad ve ark., 2022), SnO_2 (Fang ve ark., 2022; Uddin & Yi, 2022) gibi yarı iletken nanomalzemeler elektronik, opto-elektronik, fotovoltaiik, fotokataliz, algılama ve benzeri alanlarda yoğun olarak çalışılmaktadır. Diğer metal oksit yarı iletkenleri arasında SnO_2 'nin nano-kristalleri teknolojik olarak önemli malzemeler olarak kabul edilir ve yüksek enerji yoğunluklu şarj edilebilir lityum piller (R. Li ve ark., 2022; Mou ve ark., 2021), güneş pilleri (Xiong ve ark., 2018; Yang ve ark., 2015), gaz sensörleri (Elger & Hess, 2019; Kong ve ark., 2021), elektrokataliz (Wu ve ark., 2021) ve fotokataliz (Venkatesh ve ark., 2019) gibi çok çeşitli uygulamalar için çalışılmıştır. Uygulamadaki bu çeşitliliğin nanokristallerin boyutu, morfolojisi, fazı ve kristalliğinin bir fonksiyonu olduğu bulunmuştur. Kalay oksitin ince film formlarının yanı sıra nanoküreler, şerit ağları, içi boş mikro küreler, nano boyutlu tabakalar, nanoçiçekler gibi çeşitli geometrik morfolojileri de üretilmiştir (N. Li ve ark., 2019; Masteghin ve ark., 2018; Nagaraju ve ark., 2021; Xu ve ark., 2020). Kalay oksit aynı zamanda saydam bir oksit olup flor ve indiyum ile birleştirilerek saydam iletken oksit (TCO) tabakaları meydana getirebilmektedir. Bu ince film tabakalar hem ışığı geçirmekte hem de elektriksel olarak iletken hale gelmektedir. Bu özelliği sebebi ile yeni nesil güneş hücrelerinde en çok kullanılan malzeme haline gelmektedir. Birçok araştırma faaliyeti, saydam iletken oksitlere büyük önem vermiştir çünkü bunlar görünür bölgede yüksek geçirgenlik ve mükemmel elektriksel iletkenlik gösterirmektedirler. Bu nedenlerle, TCO'lar fotovoltaiikler (Subbiah ve ark., 2018), enerji verimli pencereler (Krishnapriya ve ark., 2015), elektrolüminesans cihazları (Lu ve ark., 2014), gaz sensörleri (Alenezi ve ark., 2014), elektrokataliz (Y. Zhang ve ark., 2015), fotokataliz, lazer diyotları ve ışık yayan diyotlar (LED) (Park ve ark., 2006) gibi geniş bir uygulama yelpazesi için kullanılmıştır. Özellikle kalay oksit ve ilgili bileşikler, doğal p-tipi iletkenliğe, kararlı yapıya ve farklı doping konsantrasyonuna bağlı olarak elektronik ayarlama özelliklerine sahip olması nedeniyle dikkate değer bir ilgi çekmiştir (W. Guo ve ark., 2010). Ayrıca

yüksek elektriksel iletkenliğe ($\sim 10^{-4} \Omega\text{cm}$), optik geçirgenliğe (>85), sertliğe ve elektrokimyasal kararlılığa sahiptirler (Chowdhury ve ark., 2015). SnO_2 ince filmler pek çok farklı teknikle büyütülmektedir. Yüksek özelliklere sahip SnO_2 ince filmler termal buharlaştırma (Kim ve ark., 2021), kimyasal buhar biriktirme (Ma ve ark., 2021), elektron demeti buharlaştırma (M. Li ve ark., 2022), darbeleri lazer biriktirme (Nguyen ve ark., 2021), manyetik alan saçtırma (Gangwar ve ark., 2022), sprey prioliz (Maheswari ve ark., 2021), sol-gel (Meng ve ark., 2022) gibi fiziksel ve kimyasal teknikler ile büyütülmüştür. Bu tekniklerin çoğu pahalıdır, karmaşıktır ve yüksek vakum gerektirir. Bunların içinde fiziksel buhar biriktirme ile büyütülen filmler daha uniform yapıya sahiptirler.

Elektrot olarak kullanılan TCO'lar, modern elektronik ve optoelektronik cihazlarda birçok kritik bileşende bulunur. TCO'nun hızla artan kullanımı ve buna bağlı olarak yüksek üretim maliyeti, performansları iyileştirmek, maliyeti azaltmak ve gelecekteki uygulamalar için birçok potansiyel fırsatı keşfetmek için yoğun bir araştırma yapılmaktadır. TCO'lar görünür ve yakın kızılötesi spektral aralıkta yüksek optik geçirgenlik (yalıtkan benzeri) ile yüksek elektriksel iletkenlik (metal benzeri) sezgisel olarak çelişkili iki özelliği bir araya getirmektedir (Edwards ve ark., 2004; Medvedeva & Freeman, 2005). Bu iki temel özellik birçok uygulama üretmiştir. Görünür spektral aralıkta şeffaf olmak için, TCO'ların 3.0 eV'den büyük bir geniş bant aralığına sahip olması ve aynı zamanda yüksek bir taşıyıcı konsantrasyonuna ve doğal veya ikame edici katkı maddeleri tarafından yüksek hareketliliğe sahip olması gerekir. Araştırmacılar, bazı özel uygulamalarla ilgili kritik optik ve elektriksel özellikleri elde etmek amacıyla birçok eski ve yeni TCO malzemesini araştırmışlardır. İstenen bir malzemenin gerçekleştirilmesi, yapısal, elektronik ve optik özelliklerin ve bunların cihazların içindeki diğer malzemelerle arayüz oluşturma özelliklerinin anlaşılmasına ve bilinmesine bağlıdır. Cazibelerine ve yaygın kullanımlarına rağmen, bu malzemelerin birçok temel optoelektronik özelliği şu anda iyi anlaşılmamıştır. Örneğin, bir cihazın tasarımını ve performansını optimize etmek için optik geçirgenlik ve elektronik arayüz özellikleri gibi malzeme parametrelerinin hala doğru bir şekilde karakterize edilmesi ve belirlenmesi gerekir. Gelecekteki TCO cihaz uygulamaları için bu malzeme parametrelerini uygun şekilde karakterize etmek için yüksek kaliteli tek fazlı ince filmler elde etmek de önemlidir. Şu anda en çok araştırılan ve teknik olarak kullanılan TCO malzemeleri indiyum-oksit (IO), kalay katkılı indiyum-oksit (ITO), ZnO , SnO_2 ve TiO_2 'dir (Levy & Castellón, 2019). Kalay katkılı indiyum-oksit veya indiyum katkılı

kalay oksit şu anda bilinen en iyi TCO'dur. Ancak, indiyumun sınırlı olması bu malzemenin yerine alternatiflerin araştırılmasına neden olmuştur. Flor katkılı kalay-oksit ($\text{SnO}_2\text{:F}$) veya kısaca FTO da yine SnO_2 ile oluşturulan bir diğer TCO olup yüksek sıcaklığa dayanımı ve ucuzluğu nedeniyle tercih edilmektedir (A. A. Yadav ve ark., 2009). SnO_2 yapısının iletken oksit kullanılması amacıyla geçiş metalleri ile katkılanmasına ilişkin pek çok çalışma yapılmıştır. Geçiş grubundan az miktarda malzeme yüzey ve elektriksel iletkenlik özellikleri üzerinde önemli ve net bir etkiye sahip olabilmektedir. Kalay-oksit, kobalt (Bouaine ve ark., 2007), nikel (Kuppan ve ark., 2014), krom (Kuppan ve ark., 2017), demir (Ben Haj Othmen ve ark., 2018), magnezyum (Bendahmane ve ark., 2020), gibi farklı geçiş metalleri ile başarılı bir şekilde katılanmıştır.

Kalay-oksitin optik özellikleri üzerine yapılan çalışmada yansıtma spektroskopisinden hareketle elde edilen deneysel sonuçlar değerlendirilmiş, görünür ışık spektrumunda %70'in üzerinde yüksek geçirgenlik sergiledikleri, kırılma indisi n 'in 2.33 – 2.80 aralığında değiştiği tespit edilmiştir. Bunun yanı sıra sönümlenme katsayısı κ küçük bulunmuştur. Tavlama sıcaklığındaki artışa bağlı olarak bant geçişinin de direkt olduğu tespit edilmiştir. Yapılan başka çalışmalarda kalay-oksit filmlerin rapor edilen optik parametrelerinde (n , κ ve optik enerji bant aralığı E_g) önemli bir saçılma tespit edilmiştir (Goldsmith ve ark., 2009; Reddaway & Wright, 1965).

Bir diğer ilgi çekici malzeme olan niyobyum geçiş metallerinden olup çok sayıda oksit bileşiği de olan bir elementtir. Niyobyum-oksitler birçok farklı ve ilginç özelliğe yol açarak onu çok yönlü bir malzeme grubu haline getirir. Spesifik olarak, niyobyum oksitler, katı elektrolitik kapasitörler (Liao ve ark., 2020), saydam iletken oksitler (Y. Guo ve ark., 2018), elektrokromik ve fotokromik cihazlar (Ejeromedoghene ve ark., 2021; Ong ve ark., 2020), memristörler (Sharma ve ark., 2015), boya duyarlı güneş pilleri (Ücker ve ark., 2019) gibi birçok teknolojik uygulamada büyük potansiyel göstermektedir. Mevcut literatür, niyobyum-oksitlerin birçok fazı ve polimorfu olan karmaşık bir sistem olduğunu ve birçok çalışmanın çelişkili veya tutarsız bilgiler bildirdiğini ortaya koymaktadır. Bu malzemelerin karmaşıklığı, farklı fazları ve polimorflarını tanımlamak, özelliklerini yorumlamak oldukça güçtür (Nico ve ark., 2016). n-tipi yarı iletkenler olan niyobyum-oksitler pek çok farklı yapıda olabilmektedir (NbO , NbO_2 , Nb_2O_5 gibi). Bunlar içinden en kararlı olan Nb_2O_5 'tir (Tanabe, 2003). İletken metallerden yarıiletkenlere kararlı yapısında yalıtkanlara kadar uzanabilen geniş bir elektriksel aralığa sahiptir (Jacob ve ark., 2010; Venkataraj ve ark., 2002).

Venkataraj ve arkadaşları (2002), diğer oksit filmlerin üretimi hakkında hiçbir çalışma yapılmamasına rağmen, Nb_2O_5 yapısına sahip filmin oluşumu için düşük bir oksijen miktarının yeterli olabileceğini belirtmiştir. Bu malzemelerin elektriksel özellikleri oksijen miktarına oldukça hassas olup çok az bir oksijen değişiminde elektriksel iletkenlikte birkaç mertebe büyüme veya küçülme olabilmektedir (Ou ve ark., 2012). Bundan dolayı niyobyum-oksit filmleri, büyütme teknikleri ve üretim parametreleri değiştiğinde elektrik ve optik özellikleri değişebilen malzeme grubunda yer almaktadır (Granqvist, 1992). Nb_2O_5 , yüksek bir 200 gibi bir dielektrik sabiti ve 2.4 gibi yüksek bir kırılma indisi ile 3.2 – 4.0 gibi eV geniş bant aralığına sahiptir (Blanquart ve ark., 2012; Viet ve ark., 2010; Zhou ve ark., 2008). Saydam bir dielektrik malzeme olan Nb_2O_5 , optik sistemlerin uygulamaları için mükemmel bir malzemedir. Niyobyum-oksit, yüksek elektriksel özelliklerinden dolayı kalay, vanadyum, kurşun, tungsten, titanyum, bizmut ve çinko gibi bir dizi malzeme için bir katkı maddesi olarak kullanılmıştır. Bu malzemelerin üretilmesi için sol-gel (Ohtani ve ark., 1994), kimyasal spreylendirme (Fakhri ve ark., 2018), saçtırma (Fernandes ve ark., 2019), darbeli lazer biriktirme (Fakhri ve ark., 2021) elektron demeti buharlaştırma (Prosovskii ve ark., 2021), elektrokimyasal biriktirme (Kuznetsov, 2019), kimyasal buhar biriktirme (CVD) (Shen ve ark., 2021) ve atomik katman biriktirme (ALD) (Aribia ve ark., 2021) gibi pek çok yöntem başarılı bir şekilde uygulanmaktadır.

Niyobyum-oksitin optik özellikleri, spektrofotometri ve spektroskopik elipsometriyi içeren çeşitli tekniklerle deneysel olarak incelenmiştir (Lee ve ark., 2002; Özer ve ark., 1996). Nb_2O_5 kristallliği ve film yapısına bağlı olarak spektrumun yakın UV bölgeleri ve UV bölgeleri içindeki ışığı etkin bir şekilde soğurabildiği gibi UV ışığı geçirgen bir malzeme olarak da kullanılabilir. Nb_2O_5 filmlerin kırılma indisinin 2 ila 2.3 (Xiao ve ark., 2008) aralığında olduğu, filmin kristallliğinin malzemenin kırılma indisine karşı önemli bir fark yarattığı tespit edilmiştir.

Niyobyumyüm kalay-oksitlere katkılmasına ilişkin çalışmalar da yapılmıştır. Anaraki ve arkadaşlarının (Halvani Anaraki ve ark., 2018) yaptığı çalışmada yeni nesil perovskit güneş pillerinde elektron seçici tabaka olarak kullanılmış ve güneş pilinin veriminde artış meydana getirdiği tespit edilmiştir. PLD yöntemi ile büyütülen Nb katkılı SnO_2 ince filmlerin yapısal, optik ve elektriksel özellikleri, katkılama seviyesi, oksijen kısmi basıncı, altlık sıcaklığı ve kalınlığının bir fonksiyonu olarak araştırılmıştır. 500 nm kalınlığında SnO_2 için: 500 °C’de ve 60 mTorr oksijen kısmi basıncında biriktirilen ağırlıkça %4 Nb_2O_5 filminin, görünür aralıkta (400–800 nm) %85

ortalama optik geçirgenliğe, elektriksel direncinin $6.65 \times 10^{-3} \Omega cm$ ve $4.27 eV$ optik bant aralığına sahip olduğu tespit edilmiştir (Seo ve ark., 2011). F ve Nb'un eş zamanlı SnO_2 'ye katkılanması ile elde edilen ince filmlerin $4.21 eV$ bant aralığına sahip olduğu ve $\sim 98\%$ oranında IR bölgede yansıtma yaptığı tespit edilmiştir (Turgut ve ark., 2013).

Literatürde kalay-oksit ve niyobyum katkılı kalay-oksit yapılarının optik özelliklerini incelemek için yapılan çalışmalar çoğunlukla deneysel verilerden elde edilen geçirme, soğurma ve yansıtma spektrumlarının yorumlanmasına dayanmakta olup teorik modeller üzerinden yapılan çalışmalar oldukça azdır.

Tez çalışması için seçilen Nb katkılı SnO_2 ince filmlerin optik parametrelerinin Swanepoel metodu ile hesabına ilişkin literatürde şu ana kadar herhangi bir çalışma tespit edilememiştir. Ayrıca, gerek üretim prosedürünün farklı oluşu gerek geçirgenlik ölçümlerinin Swanepoel metodu ile işlenerek optik sabitlerinin hesaplamalarının yapılması bir ilk olacaktır.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

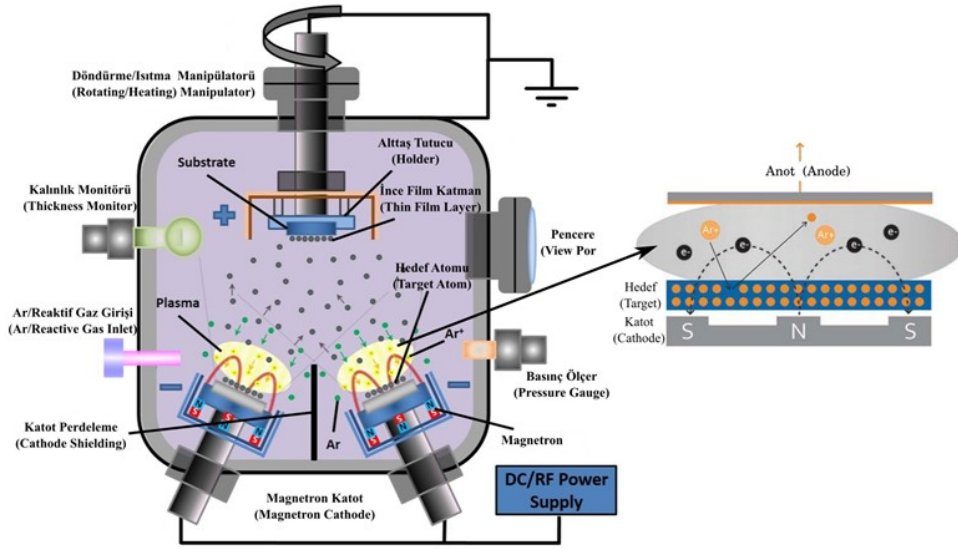
Tez çalışmasında Nb katkılı SnO_2 ince filmlerin optik parametrelerinin Swanepoel metodu ile tespiti yapılmıştır. Daha sonra elde edilen parametrelerin deneysel sonuçlarla uyumu tartışılmıştır. Bu bağlamda tez çalışması malzeme üretimi, hesaplamaların yapılması ve sonuçların değerlendirilmesi olmak üzere üç adımdan meydana gelmektedir.

3.1. Nb Katkılı SnO_2 ince Filmlerin Büyütülmesi ve Ölçümlerinin Alınması

Nb katkılı SnO_2 ince filmleri oluşturma işlemi Necmettin Erbakan Üniversitesi bünyesinde bulunan araştırma laboratuvarında yer alan manyetik alan saçtırma sistemi ile hazırlanmıştır. Burada üretilen filmler ölçümleri alındıktan sonra ölçüm sonuçları matematiksel olarak değerlendirilmek üzere verilmiştir.

Fiziksel buhar biriktirme tekniklerinden en çok kullanılanı saçtırma yöntemi olup farklı tekniklerle yapılabilmektedir. Manyetik alan saçtırma işlemi yine bu saçtırma metodlarının en çok kullanılanıdır. Bu yöntemde bir bulk malzeme (hedef olarak isimlendirilir) magnetron deneni ve içinde güçlü neodmiyum mıknatısların yer aldığı kısma yerleştirilir. Sistemde birden fazla magnetron olabilir bu durumda birden fazla malzeme aynı anda saçtırılır ve farklı stokiometrik oranlarda malzemeler hazırlanabilir. Magnetronların karşısına alttaşı denilen ve üzerinde ince film büyütülecek malzeme yerleştirilir. Sistem vakumu alındıktan sonra içeriye plazma gazı olan argon (Ar) gazı gönderilir. Argon bir soygaz olup sistem içindeki malzemelerle tepkimeye girmedikleri için tercih edilir. Ayrıca, Ar atomları büyük olup çarptığı kısımda atom(lar) kazıyabilir. Ar atomları sistem içine girdikten sonra rastgele hareket ettikleri esnada birbirleri ile çarpışır ve anlık olarak iyonize olurlar. Magnetronların üzerinde iyonize hale gelen Ar atomları manyetik alan etkisi ile hızlanır ve hedef malzemeye hızlı bir şekilde çarparlar. Bu çarpışma sonucu hedef malzemenin yüzeyinden atomlar kopar. Bu kopan atomlar alttaşa doğru hızlandırılır ve alttaşa çarparak yerleşir. Bu şekilde hedef malzemenin yüzeyinden sökülen atomlar alttaşı üzerinde biriktirilerek ince filmler meydana getirilir. Meydana gelen filmlerin homojenliği yüksektir. Eğer hedef malzemenin kopan atomlar alttaşa giderken ortama tepkimeye girebileceği bir gaz verilirse (oksijen, azot gibi) atom alttaşa ulaşmaya kadar ortamdaki gazla bir araya gelerek molekül oluşturur ve alttaşı yüzeyine moleküller halinde yerleşir. Bu işleme de reaktif manyetik alan saçtırma işlemi denilmektedir. Sistemde etkili bir büyütme için

sistem içine verilecek plazma gazının ve reaktif gazın oranlarının iyi belirlenmesi ayrıca sistem iç basıncının sabit ve ideal değerde tutulması önemlidir. Magnetron üzerinde bulunan hedef malzeme ile altaş arasında uygulanan elektriksel gerilimin cinsi de büyütme işleminde etkilidir. Manyetik alan sıçratma yönteminde güç kaynağı olarak RF (Radio Frequency) ya da DC (Direct Current) kullanılabilmektedir. DC ile yapılması planlanan kaplamalarda hedef malzemenin iletkenliğinin olması gerekmektedir. RF ile yapılması planlanan kaplamalarda ise iletken, yarı iletken veya dielektrik malzemelerin kaplaması yapılabilmektedir. Manyetik alan saçırma işleminin şematik gösterimi Şekil 3.1’de gösterilmektedir.



Şekil 3.1. Manyetik alan saçırma sistemi ve magnetron üzerinde oluşan plazmaya ilişkin şematik gösterim.

Tez çalışması için VAKSİS MİDAS 3M1T manyetik alan saçırma sistemi kullanılmıştır. Nb katkılı SnO_2 filmler için iki tane RF güç kaynağı tercih edilmiştir. 3” çapında ve 0.125” kalınlığında %99.99 saflığa sahip Goodwill marka SnO_2 hedef ile 3” çapında 0.25” kalınlığında %99.99 saflığa sahip Plasmaterials marka metalik Nb hedef malzemeleri magnetronlar üzerine yerleştirilmiştir. Altaş olarak ISOLAB marka standart lam kullanılmıştır. Temizlenen altaşlar sistem içine yerleştirildikten sonra vakum alınmış ve basıncın 2×10^{-7} Torr’a düşmesi beklenmiştir. Sistem içinde altaşın yerleştirildiği örnek tutucu 450 °C sıcaklığa kadar kademeli olarak ısıtılmıştır. Bu sıcaklık oluşan filmin kristallenmesi için seçilmiştir. Düşük sıcaklıklarda kalay-oksit yapısında meydana gelebilecek amorf yapının önüne geçmek için bu aşamada sıcaklık yüksek tutulmuştur. Daha sonra sistem içerisine 45 sccm (standard cubic centimeters

per minute) akış oranında Ar ve 5 sccm oranında O₂ (oksijen) gazı gönderilmiştir. Bu şekilde sistem basıncı yaklaşık 5.1×10^{-3} Torr seviyesine çıkartılmıştır. Bu esnada SnO₂ ve Nb hedef malzemelerine uygulanan güçler ile 5 farklı özellikte malzeme büyütülmüştür. Film büyütme esnasında filmin homojen olması için alttaş tutucu dakikada 10 tur atacak şekilde döndürülmüştür. Filmlerin büyütme süresi 3600 saniye olarak belirlenmiştir. Bu süre nispeten kalın bir film tabakası oluşturmak ve geçirgenlik spektrumunda girişim saçakları oluşturmak için seçilmiştir. Büyütülen filmin parametreleri ve isimlendirmeleri Çizelge 3.1’de gösterilmektedir.

Çizelge 3.1. RF reaktif manyetik alan sıçırma sisteminde büyütülen filmlerin büyütülme parametreleri

Malzeme Kodu	SnO ₂ Gücü (Watt)	SnO ₂ Bias (Volt)	Nb Gücü (Watt)	Nb Bias (Volt)	Ar Akış (sccm)	O ₂ Akış (sccm)	Sıcaklık (°C)	Süre (Saniye)	Basınc (Torr)
Saf	230	327	0	0	45	5	450	3600	5.1×10^{-7}
24W	230	332	24	80	45	5	450	3600	5.2×10^{-7}
36W	230	330	36	103	45	5	450	3600	5.2×10^{-7}
48W	230	335	48	124	45	5	450	3600	5.1×10^{-7}
60W	230	239	60	148	45	5	450	3600	5.1×10^{-7}

Filmlerin büyütülmesi araştırma laboratuvarında sistemi kullanan personel tarafından yapılmıştır. Filmlerin büyütüldüğü sistemin görseli Şekil 3.2’de gösterilmektedir.



Şekil 3.2. VAKSİS MİDAS 3MIT manyetik alan sıçırma sistemi.

Büyütülen filmlerin kalay-oksit ve niyobyum-oksit yapılarında olup olmadığını tespit etmek için X-ışınları kırınım (XRD) cihazında yapısal özellikleri ve film yüzeyi hakkında bilgi edinebilmek için alan-etkili taramalı elektron mikroskobu (FESEM) kullanılmıştır. GNR ADP Pro 2000 marka ve modeli XRD cihazında alınan ölçümler meydana gelen filmin hangi özellikte olduğu hakkında bilgiler sunmaktadır. Ölçümler 10° – 90° aralığında $Cu_{K\alpha} = 0.15406 \text{ nm}$ dalga boylu monokromatik X-ışınları kullanılarak 0.01° adımlarla alınmıştır. X-ışınları ile film yüzeyi arasındaki w açısı 1° 'dir. FESEM görüntüleri, Necmettin Erbakan Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Araştırma Ve Uygulama Merkezi (BİTAM) bünyesinde bulunan ZEISS GeminiSEM 500 marka ve model cihazla alınmıştır. FESEM görüntüleri alınırken görüntülenen alandan da Enerji Dağılımlı Spektroskopi (EDX) alınmıştır. Bu yöntem ile film içindeki Sn, Nb ve oksijen miktarları yaklaşık olarak tespit edilebilmektedir. Ayrıca, görüntülenen bölgede bu atomların nasıl dağıldığına ilişkin haritalama da yapabilmektedir. Matematiksel modelleme için kullanılacak optik ölçümlerin alındığı cihaz ise yine BİTAM bünyesinde bulunan Shimadzu UV-3600 Plus UV-Vis-NIR (Ultraviyole, Görünür Bölge ve Yakın Kızılötesi) Spektrometresidir. Burada filmlerin geçirgenlik ve soğurma ve geçirgenlik spektrumları $300 - 1000 \text{ nm}$ aralığında alınmıştır.

3.2. Optik Parametrelerin Swanepoel Metodu İle Belirlenmesi

Büyütülen filmlerin optik parametreleri belirlemek için Swanepoel Metodu olarak da bilinen matematiksel model seçilmiştir. Poelman ve Smet (Poelman & Smet, 2003), ince bir filmin optik sabitlerini çıkarmak için tek bir geçirgenlik spektrumu ölçümünün nasıl kullanılabileceğini eleştirel bir şekilde değerlendirmişlerdir. Genel olarak, ince bir film materyalinden geçirilen ışığın miktarı ışık yolu boyunca meydana gelen yansıma ve soğurma miktarına bağlıdır. Malzeme, orta düzeyde soğurma katsayısı α olan ince bir film ise malzemenin iletilen tarafında birden fazla girişim olacaktır. Bu durumda spektrofotometreden elde edilen iletim spektrumunda bazı girişim saçakları belirgin olacaktır. Malzemenin optik özelliklerini belirlemek için bu girişim saçaklarını kullanan çok kullanışlı bir yöntem, Manifacier ve arkadaşları (Manifacier ve ark., 1976) ile Hall ve Ferguson'un (Hall & Ferguson, 1955) daha önceki çalışmalarına dayanan bu metod Swanepoel metodu (Swanepoel, 1983) olarak adlandırılır.

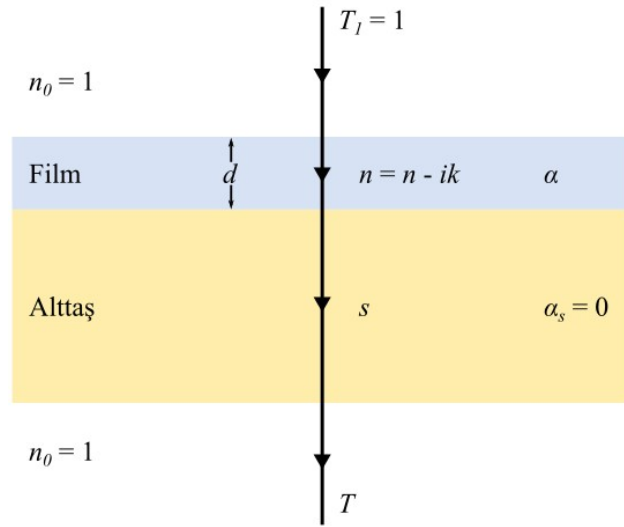
Teori:

Şeffaf bir alttaş üzerindeki ince bir filmin temsili gösterimi Şekil 3.3'te gösterilmektedir. İnce filmin kalınlığı d ve karmaşık kırılma indisi $n = n - i\kappa$ 'dir. Burada n , kırılma indisini ve κ , Eşitlik 3.1 kullanılarak soğurma katsayısı (α) cinsinden ifade edilebilen sönümlenme katsayısıdır. Şeffaf alttaş kalınlığı, d ile gösterilen ince film kalınlığından birkaç büyüklük kertesindedir. Alttaşın kırılma indisi s ve soğurma katsayısı $\alpha_s = 0$ 'dır. İnce film ve alttaşı çevreleyen ortamın indisi $n_0 = 1$ 'dir. Şekil 3.3'te geçirgenlik (T) hesaplanırken üç yüzeydeki çoklu yansımalar hesaba katılmaktadır.

$$\kappa = \alpha\lambda/4\pi \quad (3.1)$$

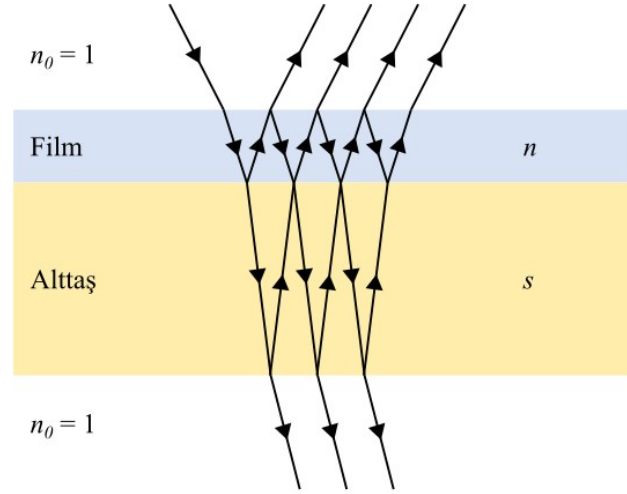
Geçirgenlik (T), bir ince filme gelen ışığın soğurma ve yansımadan sonra ortamdandan ayrılırkenki şiddetinin ince filme gelirkenki şiddetine oranı olarak tanımlanabilir.

$$T = I_{\text{Geçen Işın}} / I_{\text{Gelen Işın}} \quad (3.2)$$



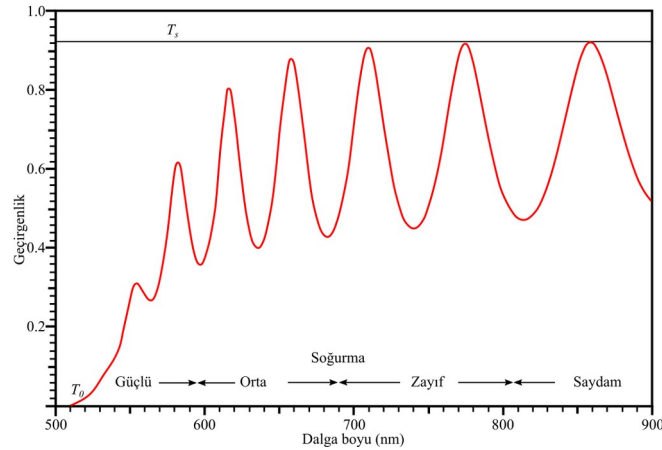
Şekil 3.3. Kalın şeffaf ve sonlu bir alttaş üzerindeki soğurucu ince filmin şematik gösterimi (Swanepoel, 1983).

Eğer ince filmin soğurma katsayısı orta dereceli ise bu durumda gelen ışın bir kısmı ortamdandan geçerken bir kısmı yansımaya uğrar. Bu da geçen ışığın birden fazla kısımdan oluşmasına neden olur. Alttaştan geçen ışınlar spektrometrenin dedektöründe girişim saçakları meydana getirir. Bu durum Şekil 3.4'te gösterilmektedir.



Şekil 3.4. Bir alttaş üzerindeki ince filme dik gelmeyen bir ışının davranışı (Swanepoel, 1983).

Şekil 3.5'te $1 \mu\text{m}$ kalınlığındaki $\alpha\text{-Si:H}$ ince filmine ait bir geçirgenlik spektrumu gösterilmektedir. Spektrumda kırmızı ile gösterilen geçirgenlik dalga boyuna bağlı olarak periyodik azalma ve artma özelliği göstermektedir. Bu durum geçirilen ışığın meydana getirdiği girişim saçaklarıdır. Spektrum incelendiğinde genel olarak dört bölge göze çarpmaktadır. Bunlar güçlü, orta, zayıf ve saydam bölgelerdir. Güçlü bölgede soğurma katsayısı büyüktür ve gelen ışının oldukça büyük kısmı film içinde absorbe edilir. Bu bölgede geçirgenlik oldukça düşük olabilmektedir. Orta soğurmanın olduğu bölgede soğurma katsayısı bir miktar düşmüş ve geçirgenlikte artış söz konusudur. Zayıf soğurmanın olduğu bölgede ise soğurma katsayısı düşük filmin geçirgenliği yüksektir. Saydam bölgede ise soğurma katsayısı sıfır kabul edilebilir. Bu durumda gelen ışının tamamen filminden geçtiği kabul edilebilir. Burada geçirgenlik birden fazla yansımalar ile tayin edilir.



Şekil 3.5. Cam üzerine büyütülmüş $1 \mu\text{m}$ kalınlığındaki $\alpha\text{-Si:H}$ filmine ait geçirgenlik spektrumu (Swanepoel, 1983).

Üzerinde film olmayan kalın bir alttaş düşünülüğünde girişim olmadığını kabul edersek geçirgenlik

$$T_s = \frac{(1 - R)^2}{1 - R^2} \quad (3.3)$$

eşitliği ile verilir. Burada R yansımayı temsil etmekte olup

$$R = \left[\frac{s - 1}{s + 1} \right]^2 \quad (3.4)$$

veya

$$T_s = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (3.5)$$

ile ifade edilmektedir. Buradan

$$s = \frac{1}{T_s} + \sqrt{\left(\frac{1}{T_s^2} - 1 \right)} \quad (3.6)$$

eşitliği elde edilebilir.

Girişim optik sürece dahil edildiğinde girişimin temel denklemi kullanılır. Eşitlik 3.7’de sunulan girişim denkleminde m , maksimum değerler için bir tam sayı iken minimum değerler için bir tam sayının yarısı değerleri almaktadır.

$$2nd = m\lambda \quad (3.7)$$

Şekil 3.5’teki durum için T iletimi karmaşık bir fonksiyondur. $T = T(\lambda, s, n, d, \alpha)$

$$T = \frac{A'x}{B' - C'x + D'x^2} \quad (3.8)$$

Burada

$$A' = 16s(n^2 + \kappa^2) \quad (3.9a)$$

$$B' = [(n + I)^2 + \kappa^2][(n + I)(n + s^2) + \kappa^2] \quad (3.9b)$$

$$C' = [(n^2 - I + \kappa^2)(n^2 - s^2 + \kappa^2) - 2\kappa^2(s^2 + I)]2 \cos\varphi - \kappa[2(n^2 - s^2 + \kappa^2) + (s^2 + I)(n^2 - I + \kappa^2)]2 \sin\varphi \quad (3.9c)$$

$$D' = [(n - I)^2 + \kappa^2][(n - I)(n - s^2) + \kappa^2] \quad (3.9d)$$

$$\varphi = 4\pi nd / \lambda \quad (3.9e)$$

$$x = e^{-ad} \quad (3.9f)$$

$$\alpha = 4\pi k / \lambda \quad (3.9g)$$

s biliniyorsa, yukarıdaki denklemi $n(\lambda)$ ve Eşitlik 3.9f'de tanımlandığı gibi $x(\lambda)$ soğurma cinsinden yazmak uygundur. Eşitlik 3.8 ifadesi, $\kappa = 0$ durumunda çok daha basit hale gelir. Şekil 3.5'teki sepktrum bölgesinin çoğu için gerçekten geçerli olan yaklaşıklık

$$T = \frac{Ax}{B - Cx \cos\varphi + Dx^2} \quad (3.10)$$

olarak ifade edilir. Burada

$$A = 16n^2s \quad (3.11a)$$

$$B = (n + I)^3(n + s^2) \quad (3.11b)$$

$$C = 2(n^2 - I)(n^2 - s^2) \quad (3.11c)$$

$$D = (n^2 - I)^3(n - s^2) \quad (3.11d)$$

$$\varphi = 4\pi nd / \lambda \quad (3.11e)$$

$$x = e^{-\alpha d} \quad (3.11f)$$

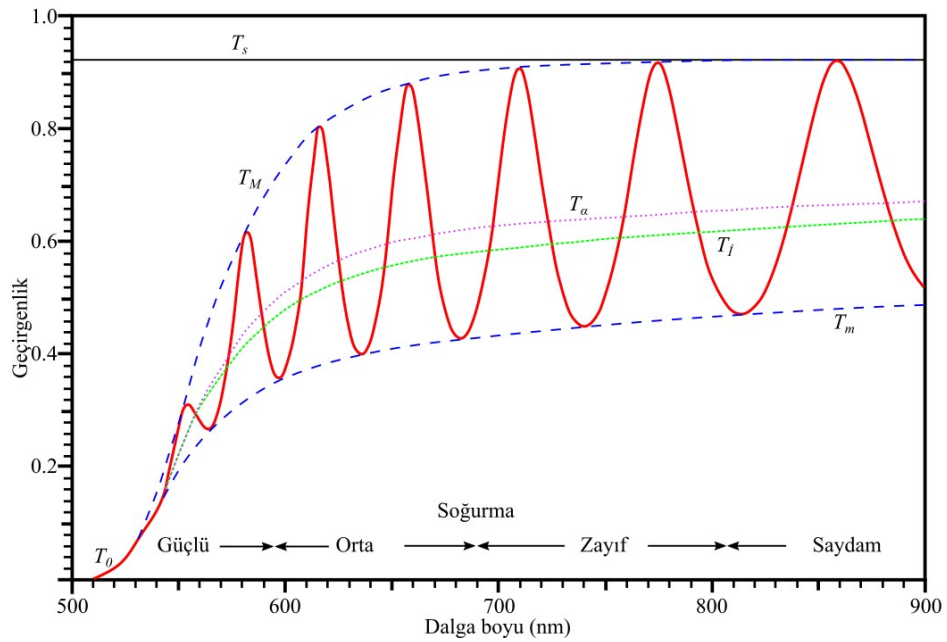
$$\alpha = 4\pi k / \lambda \quad (3.11g)$$

Şekil 3.6'da Şekil 3.5'te gösterilen geçirgenlik spektrumunun maksimum ve minimum noktalarından geçen zarf eğrileri gösterilmiştir. Spektrum üzerindeki maksimum noktalar T_M ve minimum noktalar T_m ile gösterilmiş olup bunlara ilişkin ifadeler sırasıyla Eşitlik 3.12 ve 3.13'te verilmiştir.

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (3.12)$$

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad (3.13)$$

Daha ileri analiz için T_M ve T_m , Şekil 3.6'daki zarf eğrilerinde gösterildiği gibi λ 'nın dolayısı ile $n(\lambda)$ ve $x(\lambda)$ 'nin sürekli bir fonksiyonu olarak düşünülmektedir (Manifacier ve ark., 1976). Herhangi λ için T_M değeri ilişkili bir T_m değerine sahiptir.



Şekil 3.6. Cam üzerine büyütülmüş 1 µm kalınlığındaki α -Si:H filmine ait geçirgenlik spektrumu ve spektruma ilişkin zarf eğrileri (Swanepoel, 1983).

Saydam Bölge: Bu bölgede, Eşitlik 3.12 ve 3.13'te verilen $\alpha = 0$ veya $x = 1$ 'dir. Eşitlik 3.11, Eşitlik 3.12'de yerine konulursa

$$T_M = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (3.14)$$

elde edilir. Eşitlik 3.14, Eşitlik 3.7 ile aynıdır ve girişim saçaklarının maksimumları, yalnızca s 'nin bir fonksiyonu olup ve T_s ile çakışır. Maksimum değer T_s 'den ayrıldığında soğrulma başlar. Eşitlik 3.14, Eşitlik 3.8 formunu kullanarak saydam bölgedeki s 'yi hesaplamak için kullanılabilir.

Eşitlik 3.11, Eşitlik 3.13'te yerine konulursa $x = 1$ için

$$T_m = \frac{4n^2 s}{n^4 + n^2(s^2 + 1) + s^2} \quad (3.15)$$

veya

$$n = [M + (M^2 - s^2)^{1/2}]^{1/2} \quad (3.16)$$

elde edilir. Burada M değeri

$$M = \frac{2s}{T_m} - \frac{s^2 + 1}{2} \quad (3.17)$$

ile ifade edilmektedir. Dolayısıyla T , hem n hem de s 'nin bir fonksiyonudur ve n , Eşitlik 3.16 kullanılarak T 'den hesaplanabilir.

Zayıf ve orta soğurma bölgesi: Bu bölgede $\alpha \neq 0$ ve $x < 1$ 'dir. Eşitlik 3.13'ün tersinden Eşitlik 3.12'nin tersini çıkardığımızda x 'ten bağımsız bir eşitlik elde ederiz. Bu eşitlik Eşitlik 3.18'de verilmektedir.

$$\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T_M} = \frac{2C}{A} \quad (3.18)$$

Eşitlik 3.11, Eşitlik 3.18'te yerine konulup n için çözümlendiğinde

$$n = [N + (N^2 - s^2)^{1/2}]^{1/2} \quad (3.19)$$

elde edilir. Burada N ile ifade edilen kısım

$$N = 2s \frac{T_M - T_m}{T_M T_m} + \frac{s^2 + 1}{2} \quad (3.20)$$

ile ifade edilmektedir.

Eşitlik 3.19, T_M ve T_m 'den $n(\lambda)$ 'nın hesaplanması için kullanılabilir. $n(\lambda)$ bilindiğinde, Eşitlik 3.11'deki tüm sabitler bilinir ve x çeşitli şekillerde hesaplanabilir. Hem Eşitlik 3.12 hem de Eşitlik 3.13, x için çözülebilen ikinci dereceden denklemlerdir ve sonuçlar Eşitlik 11 kullanılarak basitleştirilmiştir. Eşitlik 3.12'nin çözümü

$$x = \frac{E_M - [E_M^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4)]^{1/2}}{(n - 1)^3 (n - s^2)} \quad (3.21)$$

ile verilir. Burada E_M

$$E_M = \frac{8n^2 s}{T_M} + (n^2 - 1)(n^2 - s^2) \quad (3.22)$$

ile ifade edilmektedir. Eşitlik 3.13'ün çözümü

$$x = \frac{E_m - [E_m^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4)]^{1/2}}{(n - 1)^3 (n - s^2)} \quad (3.23)$$

ile verilir. Burada E_m

$$E_m = \frac{8n^2 s}{T_m} - (n^2 - 1)(n^2 - s^2) \quad (3.24)$$

ile ifade edilmektedir. Eşitlik 3.12 ve Eşitlik 3.13'ün terslerini ilave ettiğimizde

$$\frac{2T_M T_m}{T_M + T_m} = \frac{Ax}{B + Dx^2} \quad (3.25)$$

elde edilir. Bu verilenler x için çözümlendiğinde

$$x = \frac{F - \left[F^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4) \right]^{1/2}}{(n - 1)^3 (n - s^2)} \quad (3.26)$$

elde edilir. Burada F

$$F = \frac{8n^2 s}{T_i} \quad (3.27)$$

ve T_i

$$T_i = \frac{2T_M T_m}{T_M + T_m} \quad (3.28)$$

ile ifade edilmektedir. Eşitlik 3.25 ve Eşitlik 3.10'dan, T_i 'nin Şekil 3.6'da gösterildiği gibi saçakların bükülme noktalarından geçen bir eğriyi temsil ettiği görülebilir. Girişimsiz geçirgenlik T_a , maksimum ve bitişik minimum arasındaki girişim saçaklarından Eşitlik 3.10'un entegre edilmesiyle hesaplanabilir.

$$T_a = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{Ax}{B - Cx \cos \varphi + Dx^2} d\varphi \quad (3.29)$$

Tüm parametrelerin sabit olduğu dar bir entegrasyon bölgesi varsayarsak, integral

$$T_a = \frac{Ax}{\left[(B - Cx + Dx^2)(B + Cx + Dx^2) \right]^{21/2}} \quad (3.30)$$

eşitliği şeklinde yazılabilir.

Eşitlik 3.12 ve Eşitlik 3.13, Eşitlik 3.30'da yerine konursa Eşitlik 3.31 elde edilir.

$$T_{\alpha} = \sqrt{T_M T_m} \quad (3.31)$$

Eşitlik 3.31 oldukça kullanışlı bir denklem olup T_{α} , T_M ve T_m 'nin geometrik ortalamasını temsil etmektedir. Eşitlik 3.30, x için çözümlenirse

$$x = \frac{\left\{ G - \left[G^2 - (n^2 - 1)^6 (n^2 - s^4)^2 \right]^{1/2} \right\}^{1/2}}{(n-1)^3 (n-s^2)} \quad (3.32)$$

burada G

$$G = \frac{128 n^4 s^2}{T_{\alpha}^2} + n^2 (n^2 - 1)^2 (s^2 - 1)^2 + (n^2 - 1)^2 (n^2 - s^2)^2 \quad (3.33)$$

ile ifade edilir.

Eşitlik 3.32, genellikle optik ve kızılötesi çalışmalarda kullanılan ve iyi bilinen bir denkleme eşdeğerdir. Ayrıca $\alpha = 0$ olan saydam bölgede T_{α} 'dan n 'yi belirlemek için de kullanılabilir. Eşitlik 3.32'de x yerine 1 değerini verdiğimizde n için çözüm

$$n = \left[H + (H^2 - s^2)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (3.34)$$

olacaktır. Burada H

$$H = \frac{4 s^2}{(s^2 + 1) T_{\alpha}^2} - \frac{s^2 + 1}{2} \quad (3.35)$$

ile ifade edilir. Manificier ve arkadaşları (1976) ayrıca sonsuz kalınlıklı bir alttaş teorisini kullanarak x için bir eşitlik türetmiştir. Bu eşitlik aşağıdaki şekildedir.

$$x = \frac{(n+1)(s+n) \left[1 - (T_M/T_m)^{1/2} \right]}{(n-1)(s-n) \left[1 + (T_M/T_m)^{1/2} \right]} \quad (3.36)$$

Kırılma indisi durumunun aksine, Eşitlik 3.36, Eşitlik 3.21, 3.23, 3.26 ve 3.32'ye eşdeğer değildir.

Güçlü soğurma bölgesi: Bu bölgede girişim saçakları kaybolur ve n ve x 'i yalnızca iletim spektrumundan bağımsız olarak hesaplanan bir yolu yoktur. Spektrumun diğer kısımlarında hesaplanan değerlerin ekstrapolasyonu yapılarak n değerleri tahmin edilebilir. α değerleri herhangi bir uygun eğri kullanılarak hesaplanabilir. Çok büyük x için dört eğri T_M , T_a , T_i ve T_m , tek bir T_0 eğrisine yakınsar. Girişim etkileri göz ardı edilirse, Eşitlik 3.10, $x \ll 1$ için

$$T_0 \approx Ax/B \quad (3.37)$$

veya

$$x \approx \frac{(n-1)^3(n+s^2)}{16n^2s} T_0 \quad (3.38)$$

olarak yazılabilir (Swanepoel, 1983).

Sonsuz alttaş yaklaşımı: T için sonsuz bir alt tabaka olduğunu varsayan ve dolayısıyla alt tabakanın arkasından gelen çoklu yansımaların katkısını göz ardı eden başka bir ifade birçok araştırmacı tarafından kullanılmıştır. Bu ifadenin bir eşdeğeri Eşitlik 3.39'da verilmiştir.

$$T = \frac{A''x}{B'' - C''x + D''x^2} \quad (3.39)$$

Burada

$$A'' = 16s(n^2 + \kappa^2) \quad (3.40a)$$

$$B'' = [(n+I)^2 + \kappa^2](n+s)^2 + \kappa^2 \quad (3.40b)$$

$$C'' = [(n^2 - I + \kappa^2)(n^2 - s^2 + \kappa^2) - 2\kappa^2(s^2 + I)]2 \cos\varphi - \kappa[2(n^2 - s^2 + \kappa^2) + (s^2 + I)(n^2 - I + \kappa^2)]2 \sin\varphi \quad (3.40c)$$

$$D'' = [(n - l)^2 + \kappa^2][(n - s)^2 + \kappa^2] \quad (3.40d)$$

Eşitlik 3.39'dan hesaplanan bir T grafiğinde eşitlik hem T_M hem de T_m için Eşitlik 3.8'den daha yüksek değerler gösterir. Deneysel olarak da doğrulanabilecek bu durum imkansızdır. Eşitlik 3.39 veya eşdeğer formlar kullanılarak hesaplanan geçirgenlik eğrilerinin şüphe ile değerlendirilmesi gerektiği ifade edilmektedir. Eşitlik 3.39, $\kappa = 0$ durumu için Eşitlik 3.10 ve 3.11 şeklinde de yazılabilir. Tek fark, 3.11b ve 3.11d'deki B ve D ifadelerindedir. Eşitlik 3.19 için n ifadesi B ve D 'den bağımsız olduğundan, hem Eşitlik 3.8 hem de Eşitlik 3.39 için geçerlidir (Swanepoel, 1983).

Film Kalınlığı d 'nin ve kırılma indisi n 'nin hesaplanması: Deneysel olarak elde edilen geçirgenlik spektrumunda λ_1 ve λ_2 dalga boylarında iki komşu maksimumlardaki veya komşu minimumlardaki kırılma indisleri n_1 ve n_2 ise alttaşı üzerindeki filmin kalınlığı d ,

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2(\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1)} \quad (3.41)$$

eşitliği ile verilir. Eşitlik 3.41, n 'deki hatalara karşı çok hassastır ve çok doğru değildir. Eşitlik 3.41'den hesaplanan d değerlerinde bir miktar dağılım vardır, ancak küçük dalga boylarındaki değerler bu dağılımdan sapma gösterirler. Genel bir kural olarak, spektrumun küçük dalga boyuna bakan kısmındaki ucundaki ilk iki değer kullanılmamalıdır. Sadece bir T_M ve T_m değerleri belirlenmemeli birden fazla veri seti kullanarak hesaplanan d değerlerinin ortalaması alınarak hata payı azaltılmalıdır.

3.3. Optik Parametrelerin Sonuçlarının Değerlendirilmesi

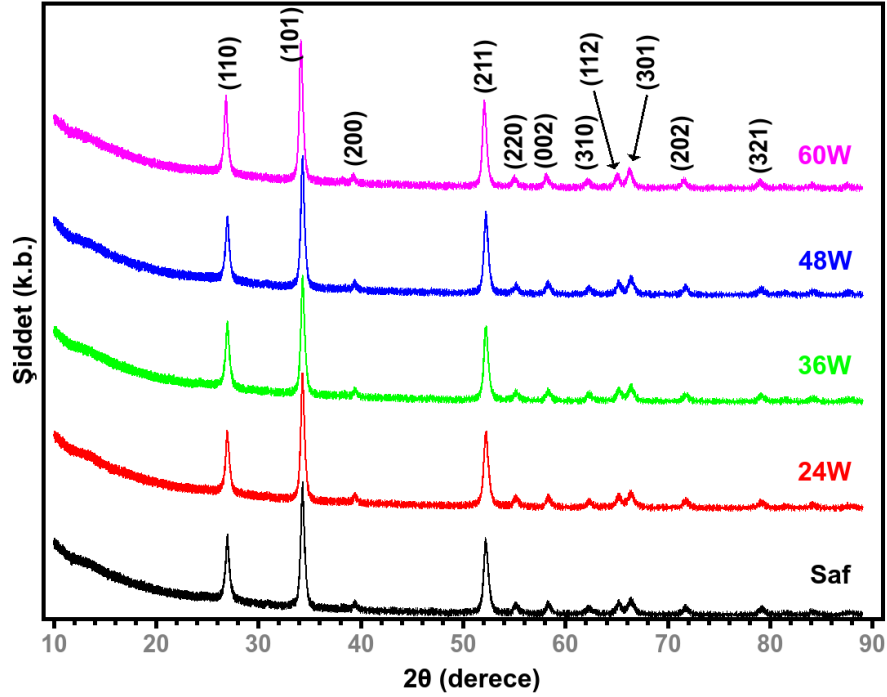
Deneysel olarak ölçülen geçirgenlik spektrumundan hareketle hesaplanan verilerin doğrulaması ise BİTAM bünyesinde bulunan FILMETRICS Thin Film Kalınlık Ölçüm Sisteminden elde edilen sonuçlarla karşılaştırılacaktır.

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

Nb katkılı SnO_2 ince filmlerin değerlendirilmesi üç aşamada gerçekleştirilmiştir. İlk aşamada oluşturulan filmlerin yapısal ve morfolojik özellikleri değerlendirilerek filmin formasyonu ve içeriği hakkında bilgi edinilmiştir. İkinci aşamada optik spektrumlardan hareketle elde edilen deneysel veriler Swanepoel metodu ile yorumlanmış ve filmlerin optik sabitleri tespit edilmiştir. Üçüncü ve son aşamada ise hesaplanan optik parametrelerin tutarlılığı deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

4.1. Nb Katkılı SnO_2 İnce Filmlerin Yapısal Özellikleri

Nb katkılı SnO_2 ince filmlerin yapısal özellikleri ilk olarak X-ışını kırınımı ile incelenmiştir. Bu yöntem filmin amorf veya kristal olup olmaması hakkında bilgi verirken kristal yapının da hangi özellikte olduğunu belirlemek için kullanılır. $\text{CuK}\alpha$ monokromatik X-ışını kullanarak $10^\circ - 90^\circ$ arasında alınan ölçümlere ilişkin spektrum Şekil 4.1’de gösterilmektedir.

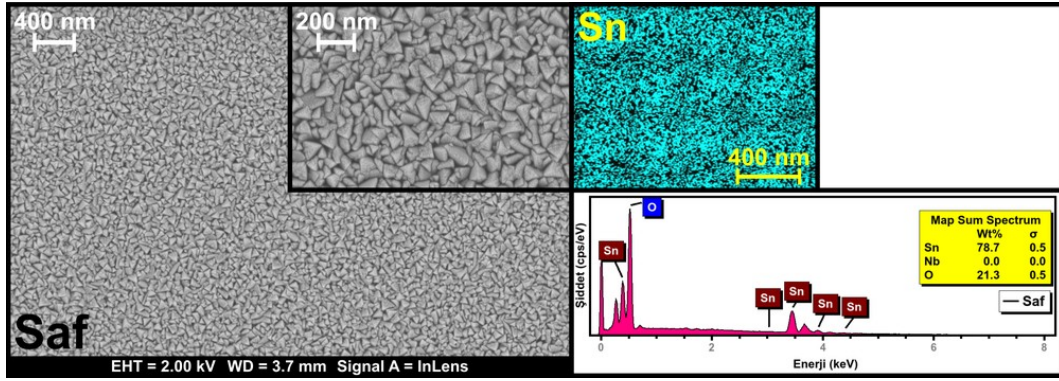


Şekil 4.1. Nb katkılı SnO_2 ince filmlerin XRD spektrumları.

Şekil 4.1 incelendiğinde meydana XRD piklerinin pozisyonlarının ve şiddetlerinin örtüştüğü oluşturulan yapıların neredeyse birebir aynı oldukları söylenebilir. Kristalografik düzlem indislerinden hareketle yapının tetragonal SnO_2

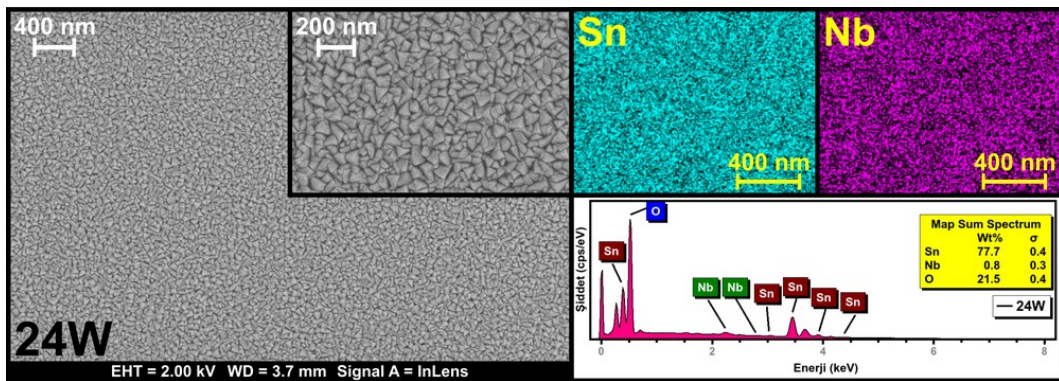
kristal yapısında (JCPDS-ICDD, 41-1445) olduğu tespit edilmiştir. Standartların aksine $\sim 27^\circ$ 'de bulunan (110) pikinin şiddetinin $\sim 35^\circ$ 'de bulunan (101) pikinin şiddetinden az olması filmin büyütme koşullarının yönelimi değiştirdiği şeklinde yorumlanmıştır. Bununla birlikte bütün filmler için XRD desenlerinin aynı olması film içinde niyobyumun oksijenle birleşerek niyobyum-oksit yapısını oluşturmadığı veya oluşturduysa bile bu yapıların SnO_2 yapısı yanında ihmal edilebilecek kadar az olduğu sonucuna varılabilir.

Büyütülen filmlerin alan-etkili taramalı elektron mikroskopundaki görüntüleri, enerji dağılımlı X-ışınları spektroskopisi ile alınan spektrum ve haritalamaları içeren görüntüler Şekil 4.2 – 4.6 arasında sunulmuştur.



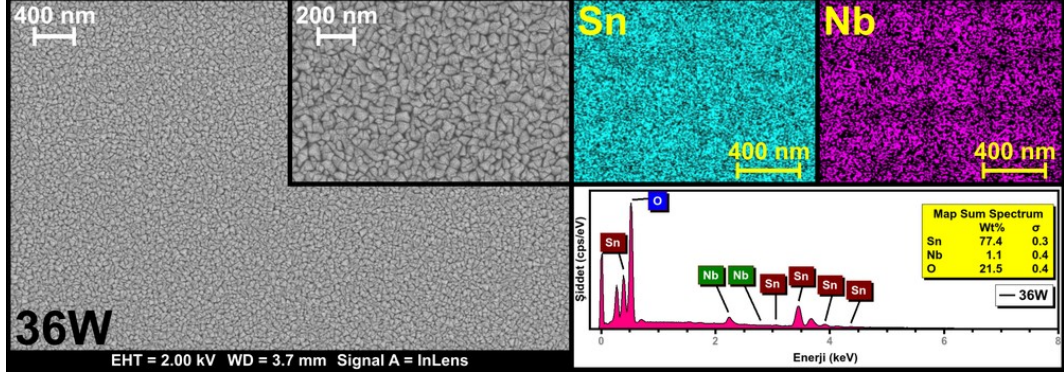
Şekil 4.2. Nb katkısının yapılmadığı saf örneğin FESEM görüntüleri ve EDX sonuçları.

Şekil 4.2 incelendiğinde film yüzeyinde boyutları ~ 20 - 100 nm arasında değişen nano yapıların olduğu tespit edilmiştir. EDX spektrumu incelendiğinde niyobyuma ait herhangi bir pik olmadığı ve EDX haritalamadan da kalayın görüntülenen bölgede homojen dağılım gösterdiği belirlenmiştir.



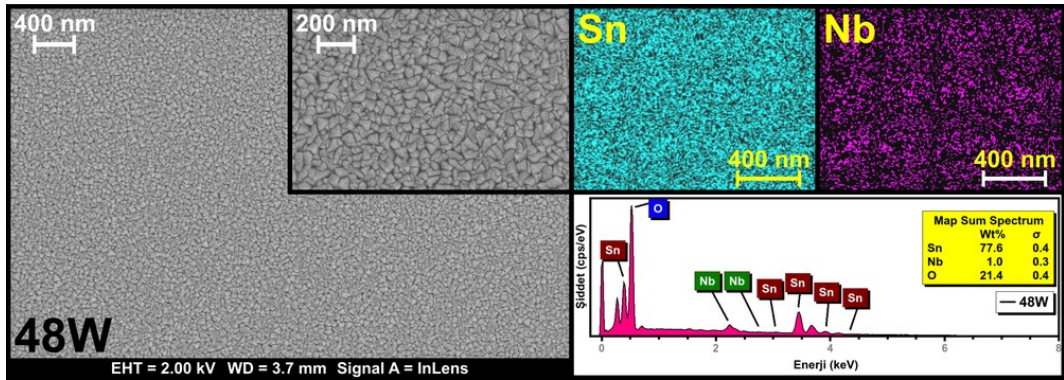
Şekil 4.3. 24W örneğinin FESEM görüntüleri ve EDX sonuçları.

Şekil 4.3 incelendiğinde film yüzeyindeki nano yapıların boyutlarının küçüldüğü tespit edilmiştir. EDX spektrumu incelendiğinde niyobyuma ait zayıf bir pik olduğu film içinde ağırlıkça %77.7 Sn ve %0.8 Nb olduğu, EDX haritalamadan da kalayın ve niyobyumun görüntülenen bölgede homojen dağılım gösterdiği belirlenmiştir.



Şekil 4.4. 36W örneğinin FESEM görüntüleri ve EDX sonuçları.

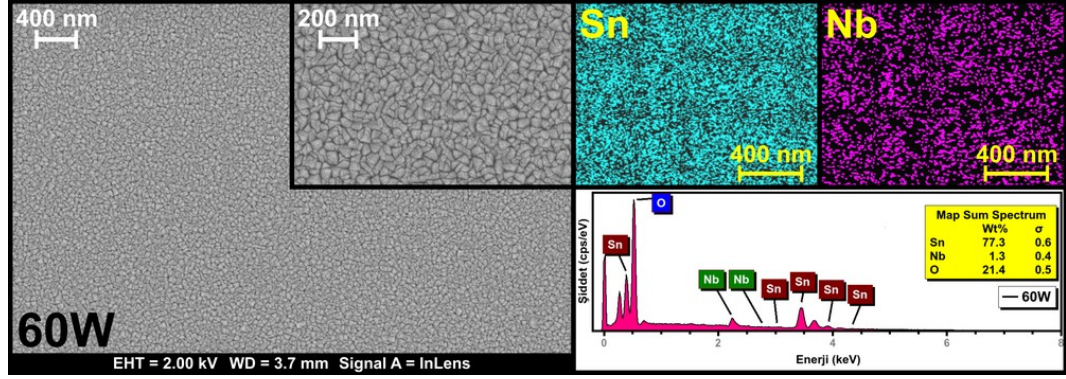
Şekil 4.4 incelendiğinde film yüzeyindeki nano yapıların boyutlarının 24W örneğinin yüzeyindeki nano yapıların boyutlarından farklılık göstermediği tespit edilmiştir. EDX spektrumu incelendiğinde niyobyuma ait zayıf bir pikin bir miktar arttığı olduğu film içinde ağırlıkça %77.4 Sn ve %1.1 Nb olduğu, EDX haritalamadan da kalayın ve niyobyumun görüntülenen bölgede homojen dağılım gösterdiği belirlenmiştir.



Şekil 4.5. 48W örneğinin FESEM görüntüleri ve EDX sonuçları.

Şekil 4.5 incelendiğinde film yüzeyindeki nano yapıların boyutlarının diğer Nb katkılı örneklerle yaklaşık aynı olduğu, boyutlarında manidar bir değişikliğin olmadığı tespit edilmiştir. EDX spektrumu incelendiğinde niyobyuma ait zayıf bir pikin

şiddetinde de anlamlı bir değişikliğin olmadığı film içinde ağırlıkça %77.6 Sn ve %1.0 Nb olduğu, EDX haritalamadan da kalayın ve niyobyumun görüntülenen bölgede homojen dağılım gösterdiği belirlenmiştir. Niyobyumun yapı içerisinde ağırlıkça daha da artması beklenirken 36W örneğine göre biraz azalması bu miktarların sadece görüntülenen bölgeden alınmasından kaynaklandığı tüm örnek için olmadığı şeklinde yorumlanmıştır.



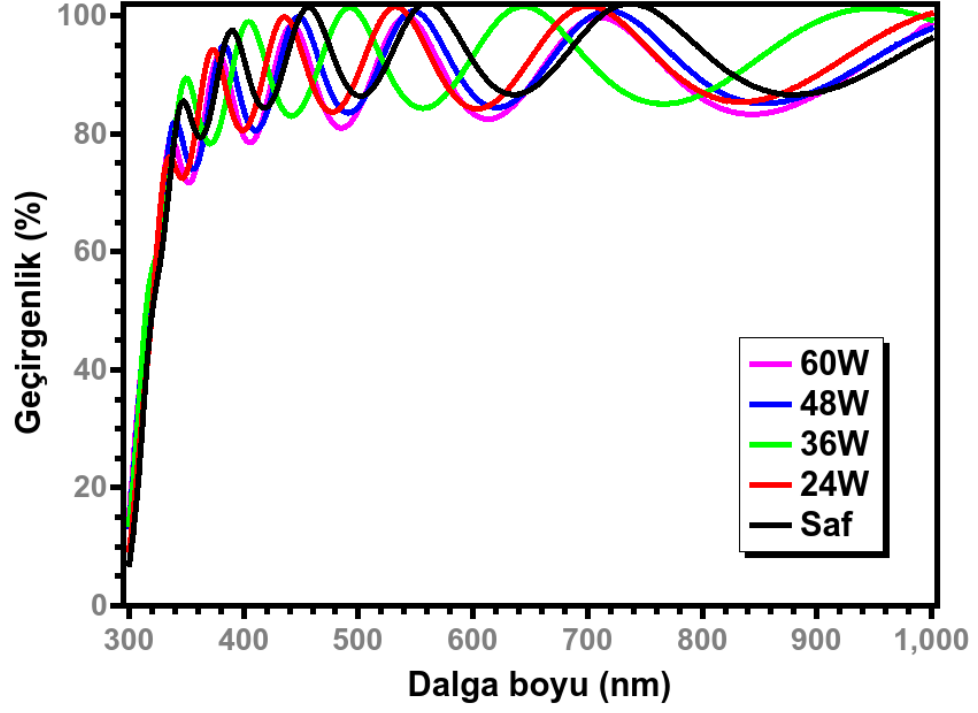
Şekil 4.6. 60W örneğinin FESEM görüntüleri ve EDX sonuçları.

Şekil 4.6 incelendiğinde film yüzeyindeki nano yapıların boyutlarında değişimin olmadığı tespit edilmiştir. EDX spektrumu incelendiğinde niyobyuma ait zayıf bir pikin şiddetinde gözle görülen bir değişiklik saptanmamıştır. Film içinde ağırlıkça %77.3 Sn ve %1.3 Nb olduğu, EDX haritalamadan da kalayın ve niyobyumun görüntülenen bölgede homojen dağılım gösterdiği belirlenmiştir.

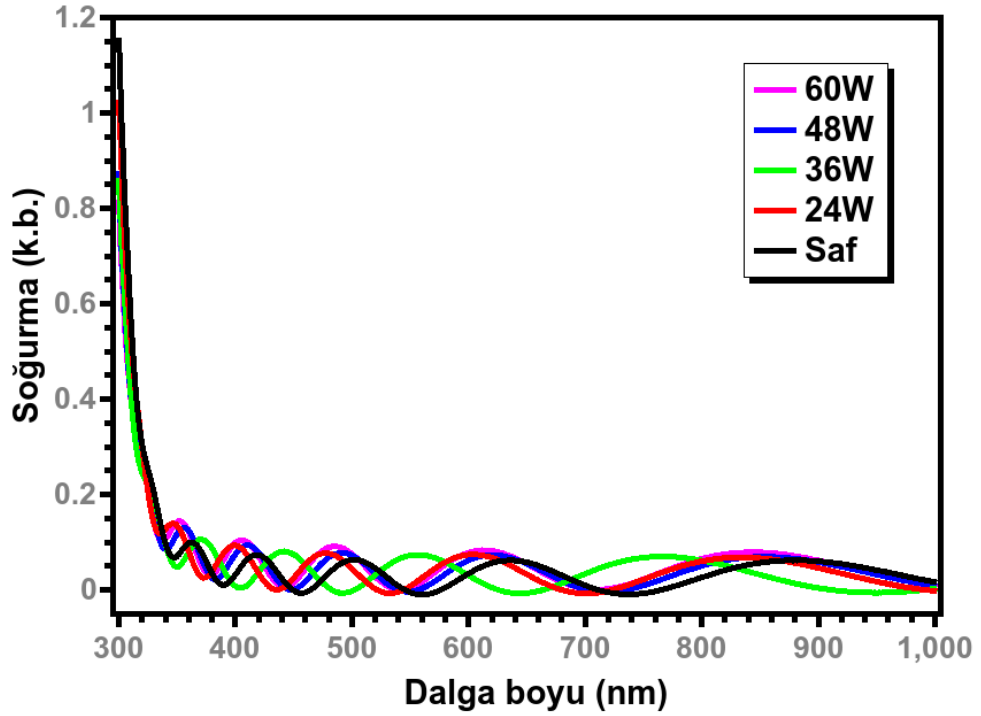
Bu sonuçlar XRD sonuçları ile de uyumaktadır. Nb yapı içerisine çok az miktarda girebilmiştir. Yapı içerisindeki bu az miktar Nb, lokalize niyobyum-oksit yapılar meydana getirirse de bu yapıların XRD desenlerinde pik meydana getirebilecek kadar büyük olmadığı söylenebilir. Nb katkısı ile film yüzeyindeki nano yapıların boyutlarında bir miktar azalma olduğu görülmektedir. Ancak, bu nano yapıların boyutlarının Nb katkı miktarıyla da değişmediği tespit edilmiştir.

4.2. Nb Katkılı SnO₂ İnce Filmlerin Optik Parametrelerinin Belirlenmesi

Nb katkılı SnO₂ ince filmlerin optik özellikleri Swanepoel metodu ile belirlenirken ilk olarak cam üzerinde büyütülmüş filmlerin 300 – 1000 nm arasındaki geçirgenlik ve soğurma spektrumları deneysel olarak elde edilmiştir. Şekil 4.7 ve 4.8’de filmlerin spektrumları gösterilmiştir.



Şekil 4.7. Saf ve Nb katkılı SnO_2 ince filmlerin soğurma spektrumları.



Şekil 4.8. Saf ve Nb katkılı SnO_2 ince filmlerin soğurma spektrumları.

Filmlerin geçirgenlik spektrumları incelendiğinde (Şekil 4.7) 400 – 750 nm aralığı olan görünür bölgede %85'in üzerinde bir geçirgenliği olduğu yani filmlerin

saydam olduğu tespit edilmiştir. UV bölgeye yaklaştıkça geçirgenlik azalmakta ve soğurma artmaya başlamaktadır.

Matematiksel Swanepoel metodu ile hesaplama için gerçekleştirilen adımlar aşağıdaki gibidir.

- Elde edilen geçirgenlik spektrumları her filmin optik parametresini belirlemek için ayrı ayrı incelenmiştir.
 - Spektrumun baş ve son kısmında matematiksel sapma meydana getirebilecek kısımları elimine etmek için spektrum aralığı daraltılmıştır. Seçilen aralık 320 – 900 nm aralığı olmuştur.
 - Her bir girişim saçağı için T_M ve T_m değerleri dalga boyu cinsinden belirlenmiştir.
 - T_M değerlerinden geçen eğri fit edilmiş ve denklemi oluşturulmuştur. Aynı şekilde T_m değerlerinden geçen eğri fit edilmiş ve denklemi oluşturulmuştur. Bu iki denklem geçirgenlik spektrumunda T_M ve T_m değerlerinden geçecek zarf eğrilerinin denklemi olarak kullanılmıştır.
 - Eşitlik 3.34'ten hareketle kırılma indisi n 'in dalga boyuna karşılık değeri hesaplanır. Eşitlik 3.34'te yer alan H değeri orta ve zayıf soğurma bölgesi için $H = 2s \left(\frac{T_M - T_m}{T_M T_m} \right) + \left(\frac{s^2 + 1}{2} \right)$ eşitliği ile,
saydam bölge ise $H = \left(\frac{2s}{T_m} \right) - \frac{s^2 + 1}{2}$ eşitliği ile hesaplanır.
 - s değeri temiz bir alttaştan $s = \frac{1}{T} + \left(\frac{1}{T^2} - 1 \right)^{1/2}$ eşitliği ile hesaplanır ve dalga boyundan bağımsız bir sabittir. Hesaplamalarda s değeri 1.51 olarak alınmıştır (Jin ve ark., 2017).
 - Film kalınlığı d değeri ise Eşitlik 3.41'den hesaplanmıştır.
 - Bu hesaplamalar bir MS Excel tablosu kullanılarak yaptırılmıştır.
- Her bir malzeme için hesaplanan değerler ve hesaplamalar aşağıda sunulmuştur.

4.2.1. “Saf” Örneğinin Optik Parametreleri

Geçirgenlik spektrumundan elde edilen T_M ve T_m değerleri Çizelge 4.1’de sunulmuştur.

Çizelge 4.1. Saf örneğin T_M ve T_m değerleri ve bunlara karşı gelen dalga boyları.

Dalga boyu (nm)	T_M değeri	Dalga boyu (nm)	T_m değeri
320.0	0.47047	320.0	0.47047
347.5	0.83041	361.5	0.76917
389.5	0.94999	418.5	0.81849
456.5	0.98945	502.0	0.83894
560.5	0.99735	635.5	0.84130
737.5	0.99587	883.5	0.84080
883.5	0.99650	900.0	0.84100
900.0	0.99700		

T_M değerlerinden geçecek eğri için denklem uydurma işlemi (fitting) gerçekleştirildiğinde aşağıdaki polinom elde edilmiştir.

$$f(x) = 0.0000100952 x^7 - 0.000379347 x^6 + 0.00599179 x^5 - 0.0520216 x^4 + 0.273056 x^3 - 0.892804 x^2 + 1.74416 x - 0.60754$$

$$R^2 = 1$$

T_m değerlerinden geçecek eğri için denklem uydurma işlemi gerçekleştirildiğinde aşağıdaki polinom elde edilmiştir.

$$f(x) = -0.000319861 x^6 + 0.00850192 x^5 - 0.0914869 x^4 + 0.510948 x^3 - 1.5721 x^2 + 2.56726 x - 0.95233$$

Bu denklemler ile geçirgenlik spektrumunun orta ve zayıf soğurma bölgesi için kırıcılık indisi n ’in dalga boyuna karşılık değerleri hesaplatılmıştır. Daha sonra, T_M ve T_m için değerlerine karşılık gelen n değerleri tespit edilmiştir.

Ardışık T_M ’ler ve T_m ’lerin olduğu dalga boylarındaki n değerleri Çizelge 4.2’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.2. Saf örneği için ardışık T_M ve T_m değerlerinin bulunduğu dalga boyları ve bu dalga boylarına karşılık gelen n değerleri.

T_M değerleri için				T_m değerleri için			
λ_1	n_1	λ_2	n_2	λ_1	n_1	λ_2	n_2
389.5	1.965401	456.5	1.966745	361.5	1.922132	418.5	1.965068
456.5	1.966745	560.5	1.947746	418.5	1.965068	502.0	1.952697
560.5	1.947746	737.5	1.952703	502.0	1.952697	635.5	1.949594

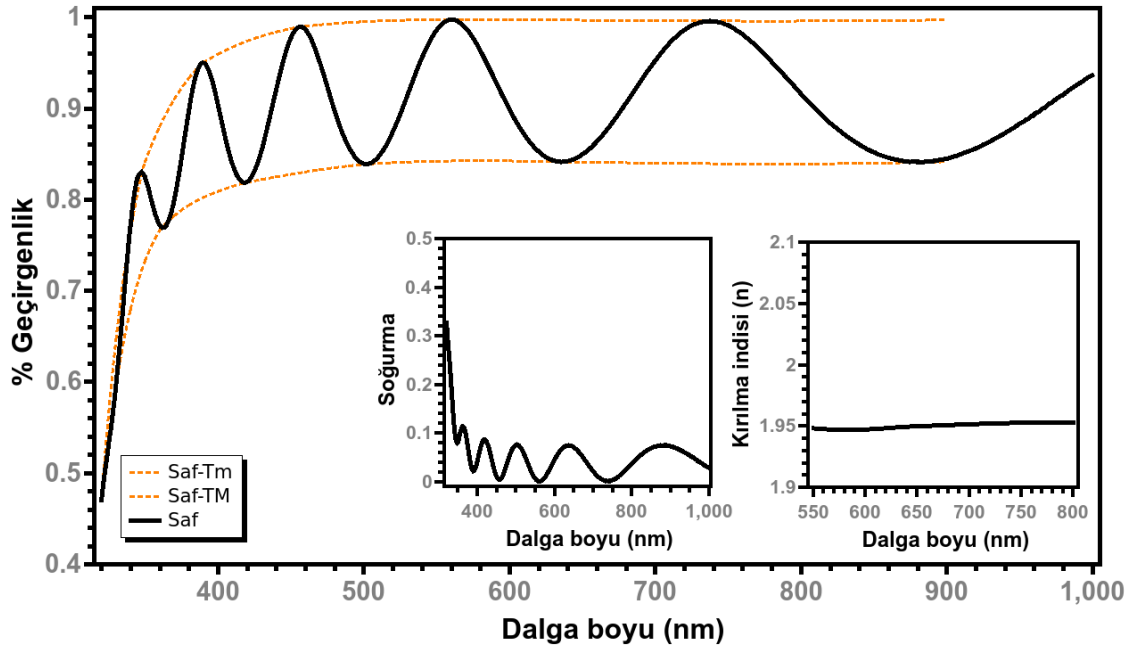
Bu değerler kullanılarak Eşitlik 3.41 ile hesaplanan film kalınlık değerleri Çizelge 4.3'te sunulmuştur.

Çizelge 4.3. Saf örneği için hesaplanan film kalınlık değerleri ve ortalama değer.

T_M 'den hesaplanan kalınlık değerleri (nm)	677.831025	608.318296
	600.025712	
	604.388783	
T_m 'den hesaplanan kalınlık değerleri (nm)	804.379415	
	620.603636	
	608.255054	

Ortalama değer hesabında T_m 'den hesaplanan ilk değer diğerlerine göre büyük farklılık gösterdiği için dikkate alınmamıştır.

Hesaplamalar sonucu elde edilen grafikler Şekil 4.9'da gösterilmektedir.



Şekil 4.9. Saf örneğine ilişkin geçirgenlik, soğurma ve Swanepoel metodu ile hesaplanan kırılma indisine ilişkin grafikler.

4.2.2. “24W” Örneğinin Optik Parametreleri

Geçirgenlik spektrumundan elde edilen T_M ve T_m değerleri Çizelge 4.4’te sunulmuştur.

Çizelge 4.4. 24W örneğinin T_M ve T_m değerleri ve bunlara karşı gelen dalga boyları.

Dalga boyu (nm)	T_M değeri	Dalga boyu (nm)	T_m değeri
320.0	0.48172	320.0	0.48172
335.5	0.74067	346.5	0.70540
373.0	0.92273	398.5	0.78585
435.5	0.97805	477.5	0.81678
532.5	0.99537	604.0	0.82235
699.5	0.99648	830.5	0.83406
900.0	0.99877	900.0	0.83577

T_M değerlerinden geçecek eğri için denklem uydurma işlemi gerçekleştirildiğinde aşağıdaki polinom elde edilmiştir.

$$f(x) = 0.000372347 x^6 - 0.00953213 x^5 + 0.0966278 x^4 - 0.48532 x^3 + 1.20359 x^2 - 1.13197 x + 0.80795$$

$$R^2 = 1$$

T_m değerlerinden geçecek eğri için denklem uydurma işlemi gerçekleştirildiğinde aşağıdaki polinom elde edilmiştir.

$$f(x) = -0.000183153 x^6 + 0.00448696 x^5 - 0.0445609 x^4 + 0.233679 x^3 - 0.708361 x^2 + 1.25387 x - 0.25721$$

$$R^2 = 1$$

Bu denklemler ile geçirgenlik spektrumunun orta ve zayıf soğurma bölgesi için kırıcılık indisi n ’nin dalga boyuna karşılık değerleri hesaplatılmıştır. Daha sonra, T_M ve T_m için değerlerine karşılık gelen n değerleri tespit edilmiştir.

Ardışık T_M ’ler ve T_m ’lerin olduğu dalga boylarındaki n değerleri Çizelge 4.5’te gösterilmektedir.

Çizelge 4.5. 24W örneği için ardışık T_M ve T_m değerlerinin bulunduğu dalga boyları ve bu dalga boylarına karşılık gelen n değerleri.

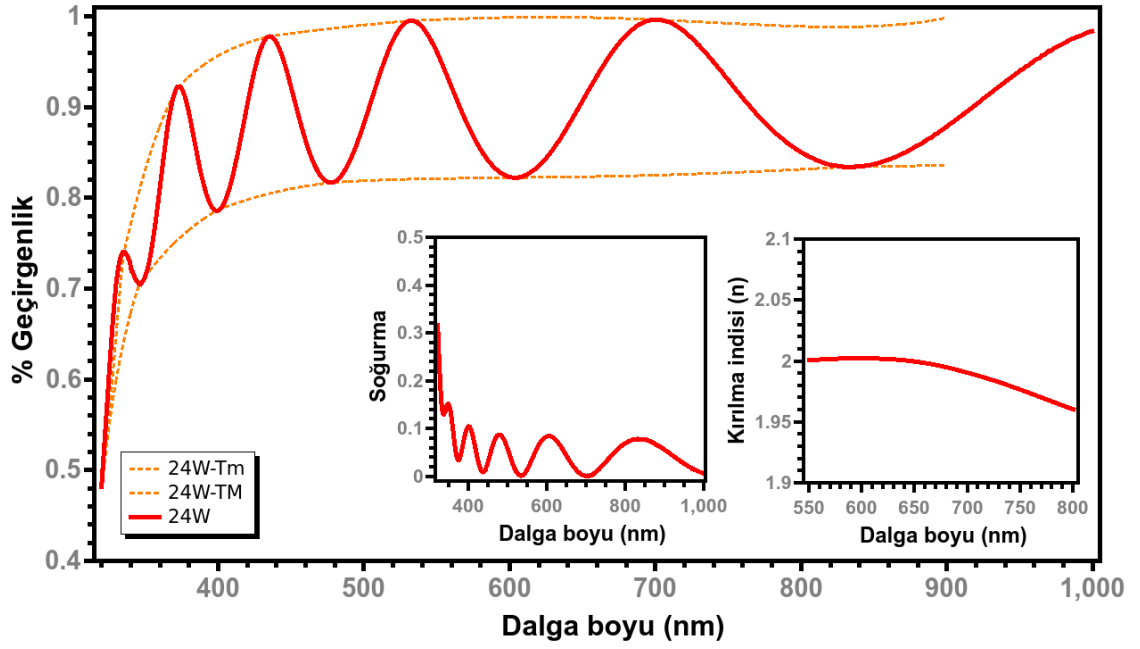
T_M değerleri için				T_m değerleri için			
λ_1	n_1	λ_2	n_2	λ_1	n_1	λ_2	n_2
373.0	2.046946	435.5	2.010915	398.5	2.021280	477.5	1.995222
435.5	2.010915	532.5	2.000237	477.5	1.995222	604.0	2.002333
532.5	2.000237	699.5	1.990741	604.0	2.002333	830.5	1.958972

Bu deęerler kullanılarak Eşitlik 3.41 ile hesaplanan film kalınlık deęerleri Çizelge 4.6’da sunulmuştur.

Çizelge 4.6. 24W örneęi için hesaplanan film kalınlık deęerleri ve ortalama deęer.

T_M ’den hesaplanan kalınlık deęerleri (nm)	574.511400	560.959308
	580.603720	
	549.230810	
T_m ’den hesaplanan kalınlık deęerleri (nm)	559.443401	
	579.137533	
	522.828986	

Hesaplamalar sonucu elde edilen grafikler Şekil 4.10’da gösterilmektedir.



Şekil 4.10. 24W örneęine ilişkin geęirgenlik, soęurma ve Swanepoel metodu ile hesaplanan kırılma indisine ilişkin grafikler.

4.2.3. “36W” örneğinin optik parametreleri

Geçirgenlik spektrumundan elde edilen T_M ve T_m değerleri Çizelge 4.7’de sunulmuştur.

Çizelge 4.7. 36W örneğinin T_M ve T_m değerleri ve bunlara karşı gelen dalga boyları.

Dalga boyu (nm)	T_M değeri	Dalga boyu (nm)	T_m değeri
320.0	0.54810	320.0	0.54810
349.0	0.87362	371.0	0.76352
404.5	0.96984	442.5	0.81026
492.0	0.99413	556.0	0.82335
644.5	0.99598	768.5	0.83052
947.0	0.99299	900.0	0.83414
950.0	0.99399	950.0	0.83434

T_M değerlerinden geçecek eğri için denklem uydurma işlemi (fitting) gerçekleştirildiğinde aşağıdaki polinom elde edilmiştir.

$$f(x) = -0.0000734306 x^6 + 0.00217529 x^5 - 0.0268441 x^4 + 0.178976 x^3 - 0.691077 x^2 + 1.48577 x - 0.40083$$

$$R^2 = 1$$

T_m değerlerinden geçecek eğri için denklem uydurma işlemi gerçekleştirildiğinde aşağıdaki polinom elde edilmiştir.

$$f(x) = -0.0000816944 x^6 + 0.00239842 x^5 - 0.0290099 x^4 + 0.1853 x^3 - 0.662158 x^2 + 1.27074 x - 0.21909$$

$$R^2 = 1$$

Bu denklemler ile geçirgenlik spektrumunun orta ve zayıf soğurma bölgesi için kırıcılık indisi n ’in dalga boyuna karşılık değerleri hesaplatılmıştır. Daha sonra, T_M ve T_m değerlerine karşılık gelen n değerleri tespit edilmiştir.

Ardışık T_M ’ler ve T_m ’lerin olduğu dalga boylarındaki n değerleri Çizelge 4.8’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.8. 36W örneği için ardışık T_M ve T_m değerlerinin bulunduğu dalga boyları ve bu dalga boylarına karşılık gelen n değerleri.

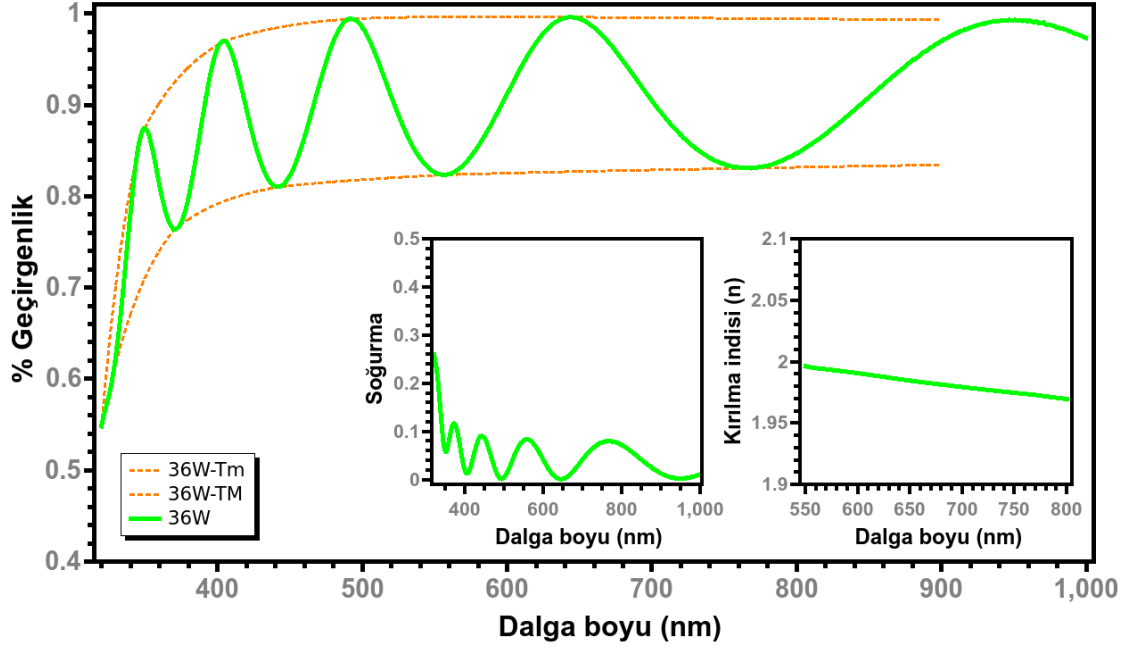
T_M değerleri için				T_m değerleri için			
λ_1	n_1	λ_2	n_2	λ_1	n_1	λ_2	n_2
404.5	2.023953	492.0	2.007402	442.5	2.009302	556.0	1.995391
492.0	2.007402	644.5	1.985401	556.0	1.995391	768.5	1.973276

Bu değerler kullanılarak Eşitlik 3.41 ile hesaplanan film kalınlık değerleri Çizelge 4.9’da sunulmuştur.

Çizelge 4.9. 36W örneği için hesaplanan film kalınlık değerleri ve ortalama değer.

T_M 'den hesaplanan kalınlık değerleri (nm)	541.42 500.22	514.129523
T_m 'den hesaplanan kalınlık değerleri (nm)	525.23 489.65	

Hesaplamalar sonucu elde edilen grafikler Şekil 4.11'de gösterilmektedir.



Şekil 4.11. 36W örneğine ilişkin geçirgenlik, soğurma ve Swanepoel metodu ile hesaplanan kırılma indisine ilişkin grafikler.

4.2.4. “48W” örneğinin optik parametreleri

Geçirgenlik spektrumundan elde edilen T_M ve T_m değerleri Çizelge 4.10’da sunulmuştur.

Çizelge 4.10. 48W örneğinin T_M ve T_m değerleri ve bunlara karşı gelen dalga boyları.

Dalga boyu (nm)	T_M değeri	Dalga boyu (nm)	T_m değeri
320.0	0.51340	320.0	0.51340
340.5	0.80100	355.5	0.72061
382.5	0.92943	410.0	0.78566
447.5	0.97857	491.0	0.81569
548.5	0.98829	621.0	0.82454
718.0	0.98827	853.5	0.83133
900.0	0.98910	900.0	0.83470

T_M değerlerinden geçecek eğri için denklem uydurma işlemi (fitting) gerçekleştirildiğinde aşağıdaki polinom elde edilmiştir.

$$f(x) = -0.0000537861 x^6 + 0.00137805 x^5 - 0.0148079 x^4 + 0.0906452 x^3 - 0.361093 x^2 + 0.919153 x - 0.121821$$

$$R^2 = 1$$

T_m değerlerinden geçecek eğri için denklem uydurma işlemi gerçekleştirildiğinde aşağıdaki polinom elde edilmiştir.

$$f(x) = -0.000172694 x^6 + 0.00444808 x^5 - 0.0464315 x^4 + 0.25349 x^3 - 0.779576 x^2 + 1.34097 x - 0.25933$$

$$R^2 = 1$$

Bu denklemler ile geçirgenlik spektrumunun orta ve zayıf soğurma bölgesi için kırıcılık indisi n 'nin dalga boyuna karşılık değerleri hesaplatılmıştır. Daha sonra, T_M ve T_m değerlerine karşılık gelen n değerleri tespit edilmiştir.

Ardışık T_M 'ler ve T_m 'lerin olduğu dalga boylarındaki n değerleri Çizelge 4.11'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.11. 48W örneği için ardışık T_M ve T_m değerlerinin bulunduğu dalga boyları ve bu dalga boylarına karşılık gelen n değerleri.

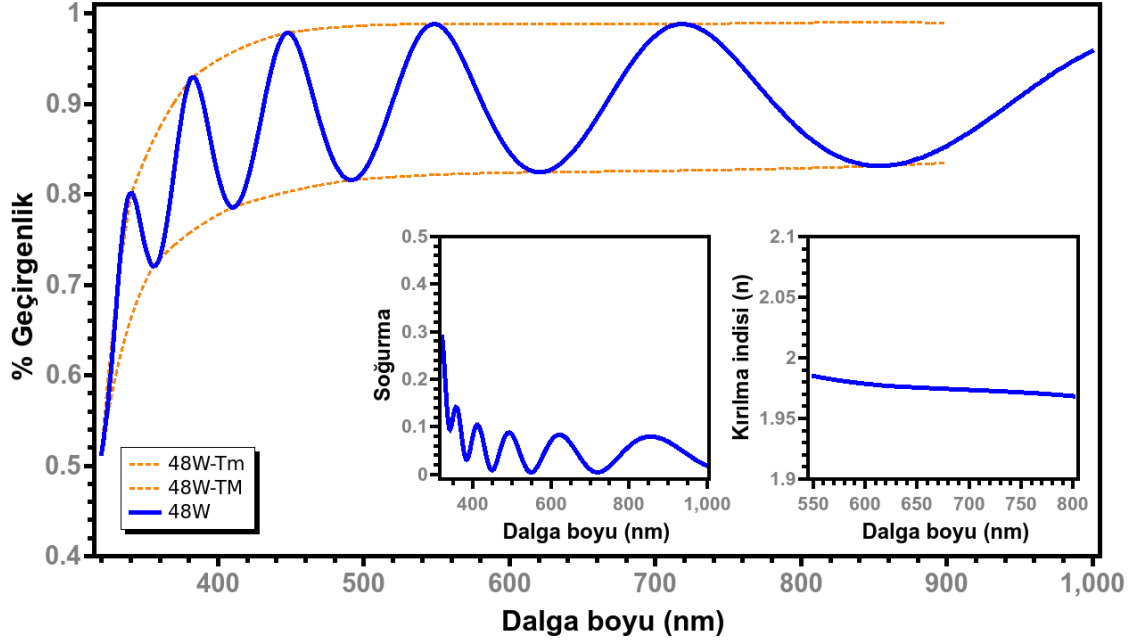
T_M değerleri için				T_m değerleri için			
λ_1	n_1	λ_2	n_2	λ_1	n_1	λ_2	n_2
382.5	2.046254	447.5	2.018234	410.0	2.025324	491.0	1.996277
447.5	2.018234	548.5	1.985563	491.0	1.996277	621.0	1.977149
548.5	1.985563	718.0	1.973189	621.0	1.977149	853.5	1.962934

Bu değerler kullanılarak Eşitlik 3.41 ile hesaplanan film kalınlık değerleri Çizelge 4.12'de sunulmuştur.

Çizelge 4.12. 48W örneği için hesaplanan film kalınlık değerleri ve ortalama değer.

T_M 'den hesaplanan kalınlık değerleri (nm)	595.476463	572.564904
	561.777841	
	573.517622	
T_m 'den hesaplanan kalınlık değerleri (nm)	572.031326	
	566.943730	
	565.642448	

Hesaplamalar sonucu elde edilen grafikler Şekil 4.12'de gösterilmektedir.



Şekil 4.12. 48W örneğine ilişkin geçirgenlik, soğurma ve Swanepoel metodu ile hesaplanan kırılma indisine ilişkin grafikler.

4.2.5. “60W” örneğinin optik parametreleri

Geçirgenlik spektrumundan elde edilen T_M ve T_m değerleri Çizelge 4.13’te sunulmuştur.

Çizelge 4.13. 60W örneğinin T_M ve T_m değerleri ve bunlara karşı gelen dalga boyları.

Dalga boyu (nm)	T_M değeri	Dalga boyu (nm)	T_m değeri
320.0	0.50495	320.0	0.50495
337.5	0.77018	352.0	0.69718
379.0	0.91152	405.5	0.76517
442.5	0.96384	485.0	0.78981
542.0	0.97864	613.0	0.80492
710.0	0.97750	842.0	0.81311
900.0	0.97740	900.0	0.81530

T_M değerlerinden geçecek eğri için denklem uydurma işlemi (fitting) gerçekleştirildiğinde aşağıdaki polinom elde edilmiştir.

$$f(x) = 0.0000998194 x^6 - 0.00248413 x^5 + 0.0239801 x^4 - 0.107458 x^3 + 0.176825 x^2 + 0.197977 x + 0.21601$$

$$R^2 = 1$$

T_m değerlerinden geçecek eğri için denklem uydurma işlemi gerçekleştirildiğinde aşağıdaki polinom elde edilmiştir.

$$f(x) = 0.0000189722 x^6 - 0.00026625 x^5 - 0.000623611 x^4 + 0.0303837 x^3 - 0.21058 x^2 + 0.627697 x + 0.05832$$

$$R^2 = 1$$

Bu denklemler ile geçirgenlik spektrumunun orta ve zayıf soğurma bölgesi için kırıcılık indisi n 'nin dalga boyuna karşılık değerleri hesaplatılmıştır. Daha sonra, T_M ve T_m değerlerine karşılık gelen n değerleri tespit edilmiştir.

Ardışık T_M 'ler ve T_m 'lerin olduğu dalga boylarındaki n değerleri Çizelge 4.14'te gösterilmektedir.

Çizelge 4.14. 60W örneği için ardışık T_M ve T_m değerlerinin bulunduğu dalga boyları ve bu dalga boylarına karşılık gelen n değerleri.

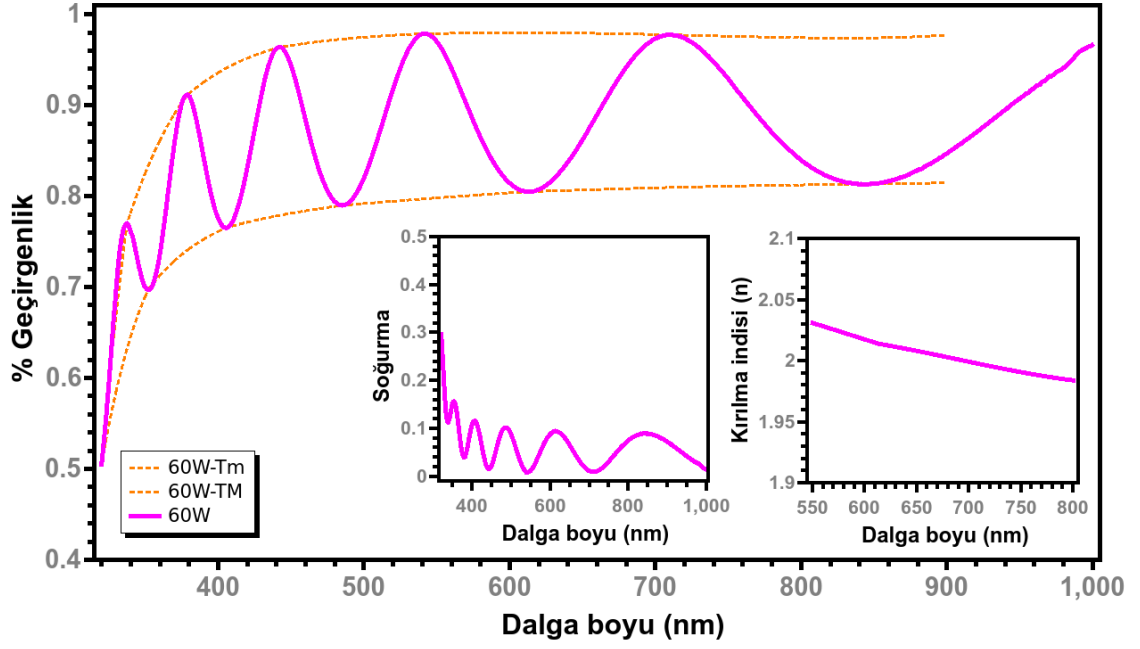
T_M değerleri için				T_m değerleri için			
λ_1	n_1	λ_2	n_2	λ_1	n_1	λ_2	n_2
379.0	2.067397	442.5	2.056123	405.5	2.052294	485.0	2.042443
442.5	2.056123	542.0	2.033195	485.0	2.042443	613.0	2.014140
542.0	2.033195	710.0	1.997524	613.0	2.014140	842.0	1.981443

Bu değerler kullanılarak Eşitlik 3.41 ile hesaplanan film kalınlık değerleri Çizelge 4.15'te sunulmuştur.

Çizelge 4.15. 60W örneği için hesaplanan film kalınlık değerleri ve ortalama değer.

T_M 'den hesaplanan kalınlık değerleri (nm)	618.61	542.010945
	558.46	
	533.12	
T_m 'den hesaplanan kalınlık değerleri (nm)	588.29	
	540.24	
	536.22	

Hesaplamalar sonucu elde edilen grafikler Şekil 4.13'te gösterilmektedir.

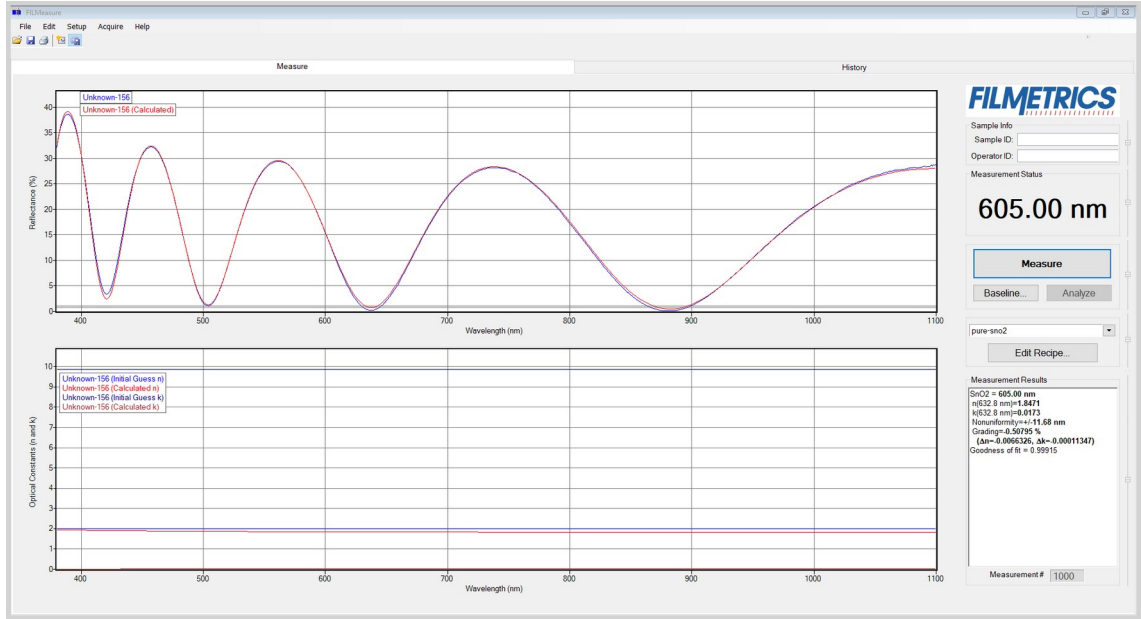


Şekil 4.13. 60W örneğine ilişkin geçirgenlik, soğurma ve Swanepoel metodu ile hesaplanan kırılma indisine ilişkin grafikler.

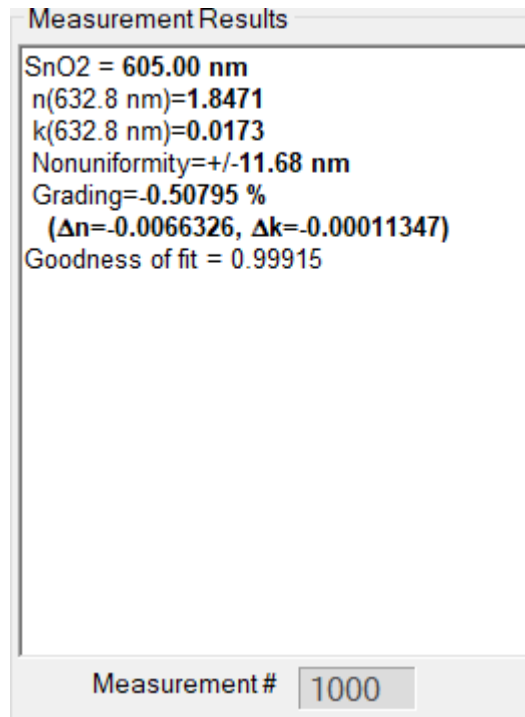
Sonuçlar genel olarak değerlendirildiğinde malzemelerin kırılma indislerinin yaklaşık 2 olduğu, kalınlıklarının da 500 nm’den daha büyük olduğu tespit edilmiştir.

4.3. Nb Katkılı SnO₂ İnce Filmlerin Optik Parametrelerinin Deneysel Sonuçlarla Karşılaştırılması

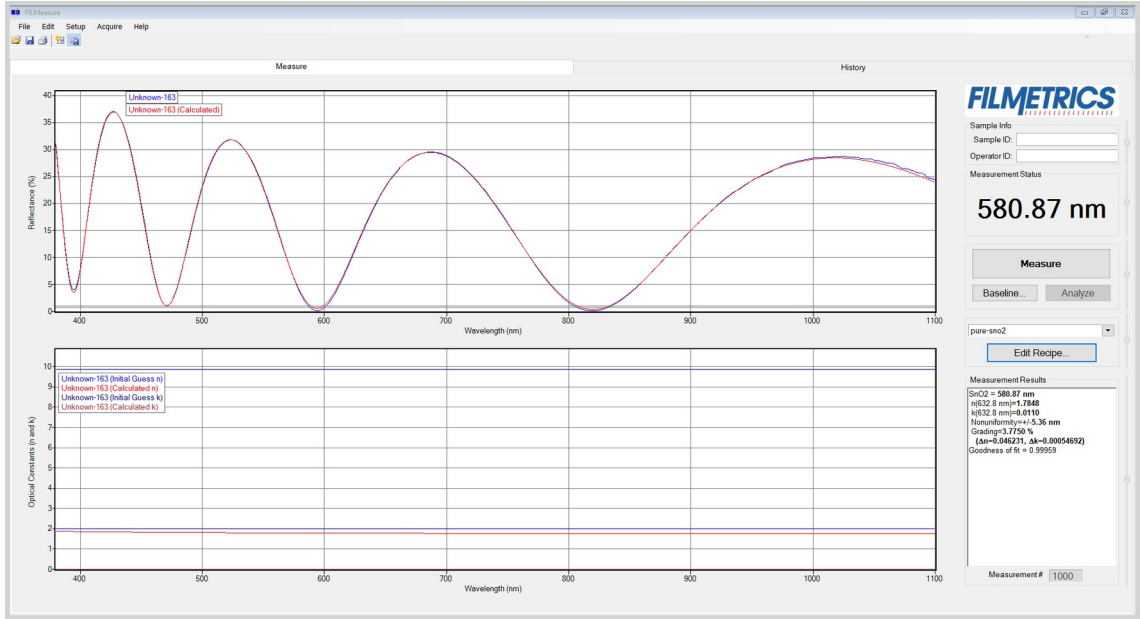
Nb katkılı SnO₂ ince filmlerin Swanepoel metodu ile hesaplanan kırılma indisi ve kalınlık değerleri FILMETRICS Thin Film Kalınlık Ölçüm Sisteminden elde edilen değerlerle karşılaştırılmıştır. Bu cihazda alttaştan yansıyan ışınları analiz ederek kırılma indisi ve film kalınlık değerlerini ölçmektedir. Bu cihazdan alınan sonuçlar Şekil 4.14 – 18’de gösterilmektedir. Yansıma spektrumundan elde edilen değerler ile matematiksel olarak ortaya konulan değerler arasındaki uyum GOF (Goodness of Fit) değeri ile ifade edilir ve en büyük değeri 1 olabilir. Bu değere yaklaştıkça teorik ve deneysel eğrilerin uyumu artar.



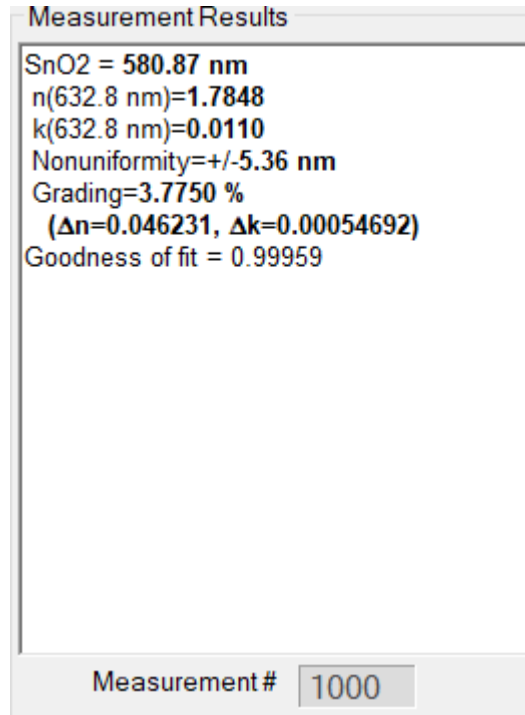
Şekil 4.14. Saf örneğinin ince film optik ölçümü sonucu elde edilen yansım spektrumu ve yansım spektrumuna uydurulan eğri.



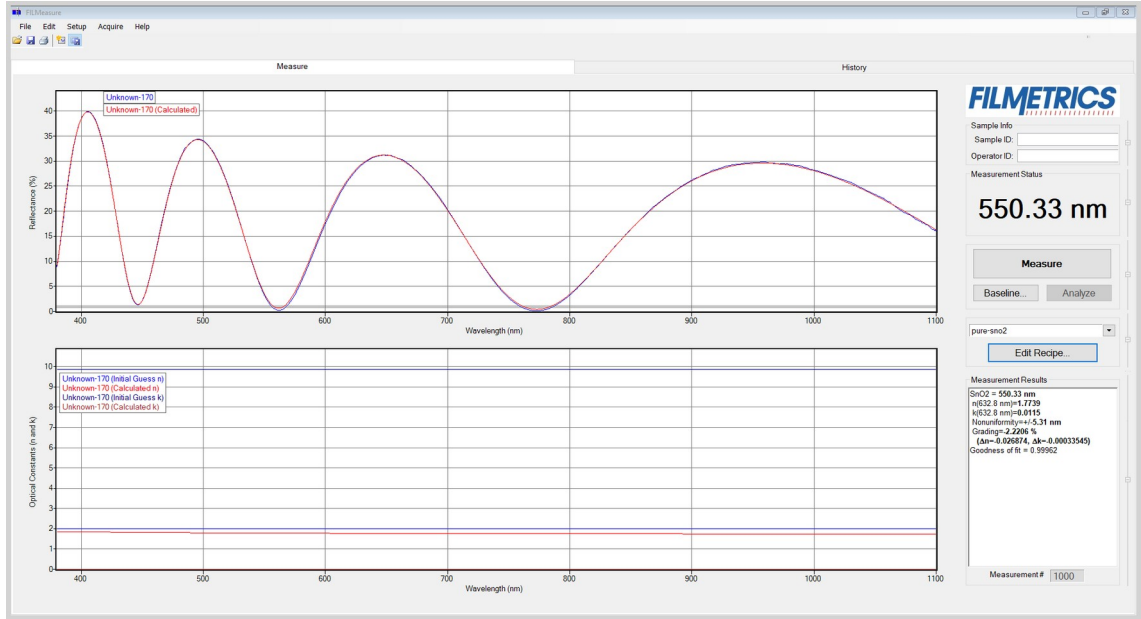
Şekil 4.15. Saf örneğinin ince film optik ölçümü sonucu elde edilen optik parametreleri.



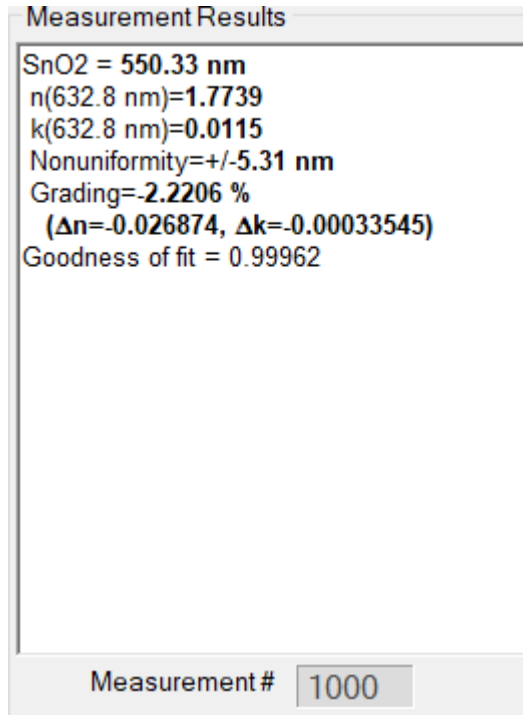
Şekil 4.16. 24W örneğinin ince film optik ölçümü sonucu elde edilen yansım spektrumu ve yansım spektrumuna uydurulan eğri.



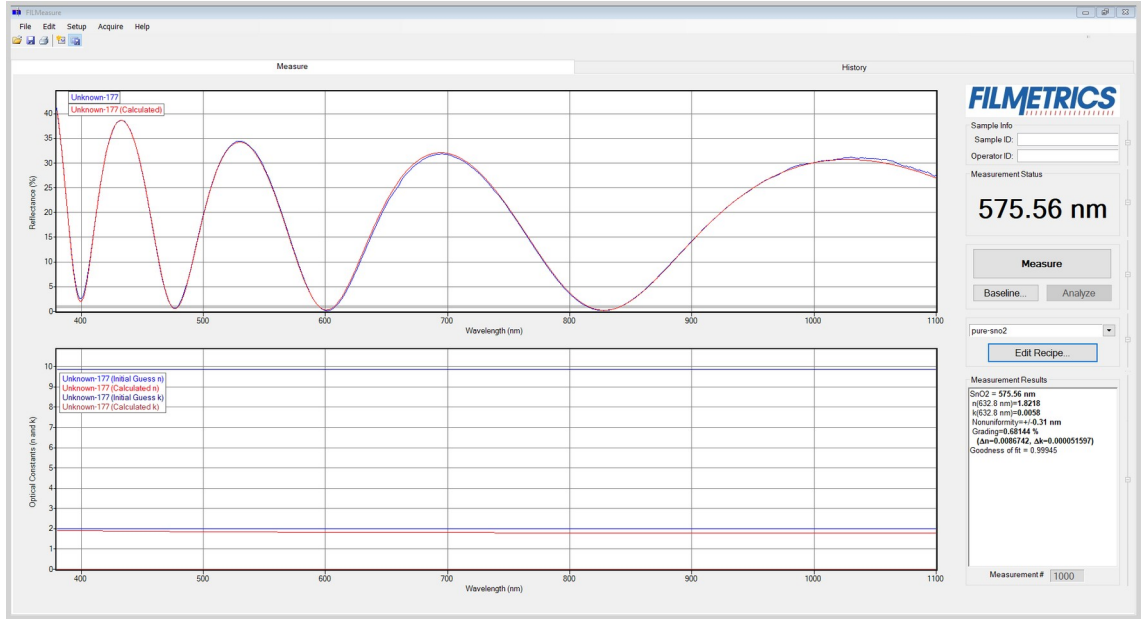
Şekil 4.17. 24W örneğinin ince film optik ölçümü sonucu elde edilen optik parametreleri.



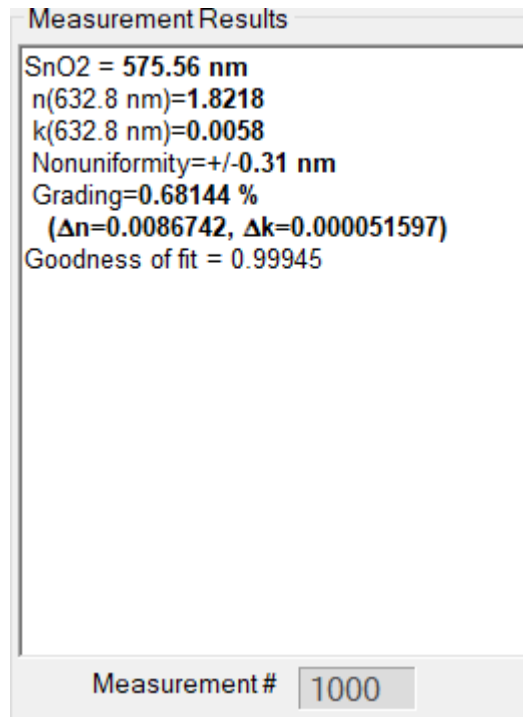
Şekil 4.18. 36W örneğinin ince film optik ölçümü sonucu elde edilen yansım spektrumu ve yansım spektrumuna uydurulan eğri.



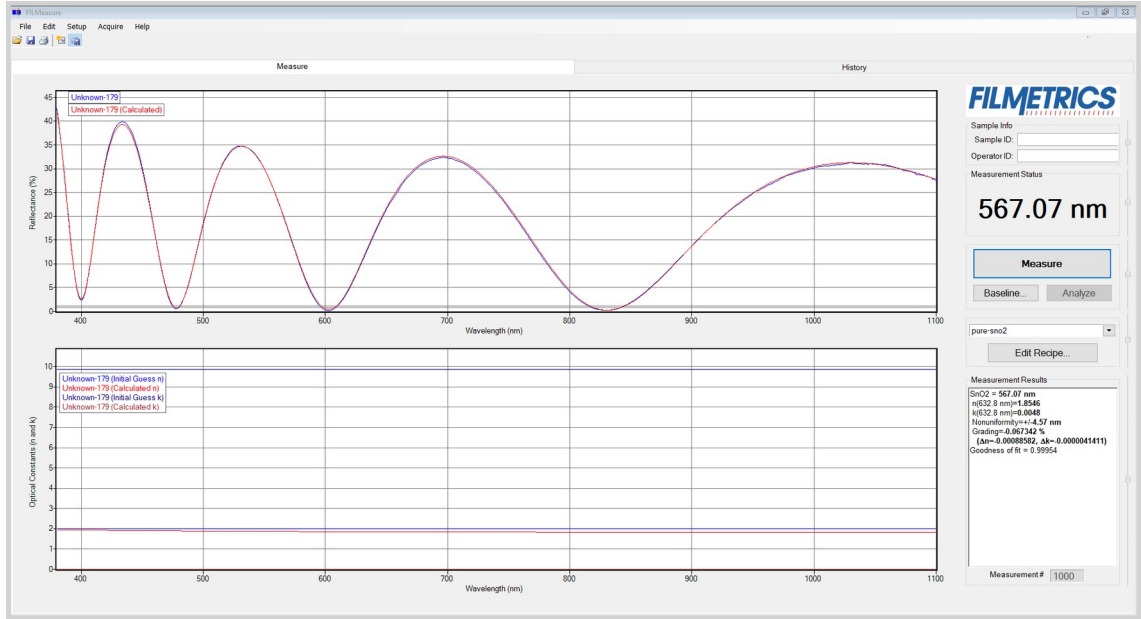
Şekil 4.19. 36W örneğinin ince film optik ölçümü sonucu elde edilen optik parametreleri.



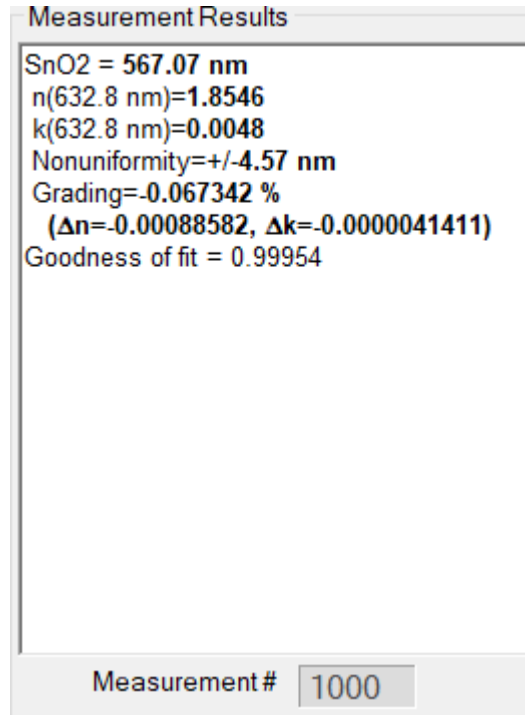
Şekil 4.20. 48W örneğinin ince film optik ölçümü sonucu elde edilen yansım spektrumu ve yansım spektrumuna uydurulan eğri.



Şekil 4.21. 48W örneğinin ince film optik ölçümü sonucu elde edilen optik parametreleri.



Şekil 4.22. 60W örneğinin ince film optik ölçümü sonucu elde edilen yansım spektrumu ve yansım spektrumuna uydurulan eğri.



Şekil 4.23. 60W örneğinin ince film optik ölçümü sonucu elde edilen optik parametreleri.

Teorik ve deneysel verilerden hareketle bulunan veriler Çizelge 4.16’da gösterilmektedir.

Çizelge 4.16. Nb katkılı SnO₂ filmlerin deneysel ve teorik optik parametrelerinin karşılaştırılması

Teorik			Deneysel	
Malzeme	n(632.8 nm)	d (nm)	n(632.8 nm)	d (nm)
Saf	1.949385	608.31829	1.8471	605.00
24W	2.001438	560.9593	1.7848	580.87
36W	1.986911	514.1295	1.7739	550.33
48W	1.976610	572.5649	1.8218	575.56
60W	2.011087	542.0109	1.8546	567.07

Çizelge 4.16’dan hareketle elde edilen sonuçlarda teorik olarak hesaplanan n değerlerinin biraz yüksek olduğu, film kalınlıklarının ise yer yer 30 nm’ye yakın farklı olduğu gözlemlenmiştir.

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

5.1. Sonuçlar

Başta opto-elektronik olmak üzere pek çok alanda önemli bir yere sahip olan kalay-oksit malzemesine yine bileşikleri ilginç elektriksel ve optik özellikler sergileyen niyobyum elementi katkılanarak optik parametreleri hesaplanılmaya çalışılmıştır. Reaktif manyetik alan sıçratma sistemi birlikte buharlaştırma yapılarak elde edilen filmler cam üzerinde büyütülmüştür. Elde edilen filmlerin yapısal özellikleri incelendiğinde niyobyumun yapıya çok az girebildiği hem EDX hem de XRD sonuçlarından hareketle tespit edilmiştir. Meydana getirilen filmlerin optik parametrelerini hesaplamak için matematiksel Swanepoel metodu uygulanmıştır. Bu metod ile filmlerden elde edilen geçirgenlik spektrumlarının zarf eğrileri çizilmiş ve hesaplamalar yapılmıştır. Bu hesaplamalar yansıma spektroskopisini kullanan kalınlık ölçüm cihazından elde edilen deneysel sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. Sonuç olarak kırılma indisinin Swanepoel metodu ile biraz yüksek hesaplandığı kalınlık ölçümünün ise birbiri ile tam örtüşmediği ancak yakın değerlerde olduğu tespit edilmiştir. Bu sonuçlar yapılan yaklaşımın filmin özellikleri hakkında bilgi verme konusunda başarılı olduğunu göstermektedir.

5.2. Öneriler

İnce film endüstrisinde film kalınlığının tespiti oldukça önemlidir. Eğer ki film optik bileşenlerde kullanılacaksa filmin optik parametrelerinin bilinmesi de önemlidir. Bu bağlamda Swanepoel metodu kullanışlı sonuçlar üretmektedir. Ayrıca, deneysel ölçüm sistemlerinin hassasiyetleri kullanılan yazılım ile de sınırlı olduğu için deneysel ölçüm sistemlerinden elde edilen sonuçların güvenilirliği günümüzde hala tartışma konusudur. Bununla birlikte film kalınlığı incelidikçe girişim saçakları arasındaki mesafenin artması ince filmlerde Swanepoel metodunun uygulanabilirliğini ciddi ölçüde kısıtlamaktadır. Ancak, kalın filmlerde güvenilir bir yöntem olarak sunulabilir.

6. KAYNAKLAR

- Adachi, S. (1988). Optical properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alloys. *Phys. Rev. B*, 38(17), 12345–12352.
- Afromowitz, M. A. (1974). Refractive index of $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. *Solid State Communications*, 15(1), 59–63.
- Alenezi, M. R., Alzanki, T. H., Almeshal, A. M., Alshammari, A. S., Beliat, M. J., Henley, S. J., & Silva, S. R. P. (2014). Hierarchically designed ZnO nanostructure based high performance gas sensors. *RSC Adv.*, 4(90), 49521–49528.
- Amjad, M., Khan, M. I., Alwadai, N., Irfan, M., Ikram-ul-Haq, Albalawi, H., Almuqrin, A. H., Almoneef, M. M., & Iqbal, M. (2022). Photovoltaic Properties of ZnO Films Co-Doped with Mn and La to Enhance Solar Cell Efficiency. *Nanomaterials*, 12(7).
- Aribia, A., Sastre, J., Chen, X., Gilshtein, E., Futscher, M. H., Tiwari, A. N., & Romanyuk, Y. E. (2021). In Situ Lithiated {ALD} Niobium Oxide for Improved Long Term Cycling of Layered Oxide Cathodes: A Thin-Film Model Study. *Journal of The Electrochemical Society*, 168(4), 40513.
- Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (n.d.). D.,(1976): Solid state physics. *Saunders College, Philadelphia*.
- Babar, S., Mane, A. U., Yanguas-Gil, A., Mohimi, E., Haasch, R. T., & Elam, J. W. (2016). W: Al_2O_3 nanocomposite thin films with tunable optical properties prepared by atomic layer deposition. *The Journal of Physical Chemistry C*, 120(27), 14681–14689.
- Bah, K., Czapla, A., & Pisarkiewicz, T. (1993). Simple method for optical parameter determination of inhomogeneous thin films. *Thin Solid Films*, 232(1), 18–20.
- Bakkali, H., Blanco, E., Dominguez, M., & Garitaonandia, J. S. (2017). Fabrication and optical properties of nanostructured plasmonic $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Au}-\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ metamaterials. *Nanotechnology*, 28(33), 335704.
- Baraton, M.-I. (2012). Nano- TiO_2 for dye-sensitized solar cells. *Recent Patents on Nanotechnology*, 6(1), 10–15.
- Ben Haj Othmen, W., Hamdi, A., Addad, A., Sieber, B., Elhouichet, H., Szunerits, S., & Boukherroub, R. (2018). Fe-doped SnO_2 decorated reduced graphene oxide nanocomposite with enhanced visible light photocatalytic activity. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 367, 145–155.

- Bendahmane, B., Tomić, M., Toudjen, N. E. H., Gràcia, I., Vallejos, S., & Mansour, F. (2020). Influence of Mg Doping Levels on the Sensing Properties of SnO₂ Films. *Sensors*, 20(7).
- Blanquart, T., Niinistö, J., Heikkilä, M., Sajavaara, T., Kukli, K., Puukilainen, E., Xu, C., Hunka, W., Ritala, M., & Leskelä, M. (2012). Evaluation and Comparison of Novel Precursors for Atomic Layer Deposition of Nb₂O₅ Thin Films. *Chemistry of Materials*, 24(6), 975–980.
- Bloomer, I., & Mirsky, R. (2002). Broadband spectrophotometry. *Photonics Spectra*, 86.
- Born, M., & Wolf, E. (1959). *Principles of Optics*. Pergamon Press INC, New York, NY.
- Born, Max, Wolf, E., Bhatia, A. B., Clemmow, P. C., Gabor, D., Stokes, A. R., Taylor, A. M., Wayman, P. A., & Wilcock, W. L. (1999). Basic properties of the electromagnetic field. In *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light* (7th ed., pp. 1–74). Cambridge University Press.
- Bouaine, A., Brihi, N., Schmerber, G., Ulhaq-Bouillet, C., Colis, S., & Dinia, A. (2007). Structural, Optical, and Magnetic Properties of Co-doped SnO₂ Powders Synthesized by the Coprecipitation Technique. *The Journal of Physical Chemistry C*, 111(7), 2924–2928.
- Bringans, R. D. (1977). The determination of the optical constants of thin films from measurements of normal incidence reflectance and transmittance. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 10(13), 1855.
- Campi, D., & Papuzza, C. (1985). Refractive index dispersion in group IV and binary III-V semiconductors: Comparison of calculated and experimental values. *Journal of Applied Physics*, 57(4), 1305–1310.
- Carminati, R., & Schotland, J. C. (2021). Scattering of Waves. In *Principles of Scattering and Transport of Light* (pp. 63–64). Cambridge University Press.
- Chowdhury, A., Kang, D.-W., Isshiki, M., Oyama, T., Odaka, H., Sichanugrist, P., & Konagai, M. (2015). Effect of textured glass substrates coated with LPCVD-deposited SnO₂:F on amorphous silicon solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 140, 126–133.
- De Caro, L., & Ferrara, M. C. (1999). Simple method for the determination of optical parameters of inhomogeneous thin films. *Thin Solid Films*, 342(1–2), 153–159.
- de L. Kronig, R. (1926). On the Theory of Dispersion of X-Rays. *J. Opt. Soc. Am.*, 12(6), 547–557.

- del Pozo, J. M., & Díaz, L. (1992). Method for the determination of optical constants of thin films: dependence on experimental uncertainties. *Appl. Opt.*, 31(22), 4474–4481.
- Denton, R. E., Campbell, R. D., & Tomlin, S. G. (1972). The determination of the optical constants of thin films from measurements of reflectance and transmittance at normal incidence. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 5(4), 852.
- Drozdowska, K., Welearegay, T., Österlund, L., & Smulko, J. (2022). Combined chemoresistive and in situ FTIR spectroscopy study of nanoporous NiO films for light-activated nitrogen dioxide and acetone gas sensing. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 353, 131125.
- Dwivedi, N., Kumar, S., & Malik, H. K. (2011). Nanostructured titanium/diamond-like carbon multilayer films: deposition, characterization, and applications. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 3(11), 4268–4278.
- Edwards, P. P., Porch, A., Jones, M. O., Morgan, D. V., & Perks, R. M. (2004). Basic materials physics of transparent conducting oxides. *Dalton Trans.*, 19, 2995–3002.
- Efimov, A. M. (1995). *Optical Constants of Inorganic Glasses*. CRC Press.
- Ejeromedoghene, O., Ma, X., Oderinde, O., Yao, F., Adewuyi, S., & Fu, G. (2021). Quaternary type IV deep eutectic solvent-based tungsten oxide/niobium oxide photochromic and reverse fading composite complex. *New J. Chem.*, 45(38), 18008–18018.
- Elger, A.-K., & Hess, C. (2019). Elucidating the Mechanism of Working SnO₂ Gas Sensors Using Combined Operando UV/Vis, Raman, and IR Spectroscopy. *Angewandte Chemie International Edition*, 58(42), 15057–15061.
- Fakhri, M. A., Khalid, F. G., & Salim, E. T. (2021). Influence of annealing temperatures on Nb₂O₅ nanostructures prepared using Pulsed Laser Deposition method. *Journal of Physics: Conference Series*, 1795(1), 12063.
- Fakhri, M. A., Salim, E. T., Wahid, M. H. A., Hashim, U., & Salim, Z. T. (2018). Optical investigations and optical constant of nano lithium niobate deposited by spray pyrolysis technique with injection of Li₂CO₃ and Nb₂O₅ as raw materials. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 29(11), 9200–9208.
- Fang, Z., Yang, L., Jin, Y., Liu, K., Feng, H., Deng, B., Zheng, L., Cui, C., Tian, C., Xie, L., Xu, X., & Wei, Z. (2022). Sputtered SnO₂ as an Interlayer for Efficient Semitransparent Perovskite Solar Cells. *Chinese Physics B*.
- Fernandes, S. L., Affonço, L. J., Junior, R. A. R., AU - da Silva, J. H. D., Longo, E., & Graeff, C. F. de O. (2019). Niobium Oxide Films Deposited by Reactive Sputtering: Effect of Oxygen Flow Rate. *JoVE*, 151, e59929.

- Flammer, J., Mozaffarieh, M., & Bebie, H. (2013). *The Interaction Between Light and Matter BT - Basic Sciences in Ophthalmology: Physics and Chemistry* (J. Flammer, M. Mozaffarieh, & H. Bebie (eds.); pp. 21–39). Springer Berlin Heidelberg.
- Forouhi, A. R., & Bloomer, I. (1986). Optical dispersion relations for amorphous semiconductors and amorphous dielectrics. *Physical Review B*, 34(10), 7018.
- Forouhi, A. R., & Bloomer, I. (1988). Optical properties of crystalline semiconductors and dielectrics. *Physical Review B*, 38(3), 1865.
- Fox, A. M., & Fox, D. P. A. M. (2001). *Optical Properties of Solids*. Oxford University Press.
- Gangwar, A. K., Godiwal, R., Srivastava, S., Pal, P., Gupta, G., & Singh, P. (2022). Preparation of nanocrystalline Pd/SnO₂ thin films deposited on alumina substrate by reactive magnetron sputtering for efficient CO gas sensing. *Materials Research Bulletin*, 148, 111692.
- Gladstone, J. H., & Dale, T. P. (1863). XIV. Researches on the refraction, dispersion, and sensitiveness of liquids. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 153, 317–343.
- Goldsmith, S., Çetinörgü, E., & Boxman, R. L. (2009). Modeling the optical properties of tin oxide thin films. *Thin Solid Films*, 517(17), 5146–5150.
- González-Leal, J.-M., Prieto-Alcón, R., Angel, J.-A., Minkov, D. A., & Márquez, E. (2002). Influence of substrate absorption on the optical and geometrical characterization of thin dielectric films. *Appl. Opt.*, 41(34), 7300–7308.
- Granqvist, C. G. (1992). Electrochromism and smart window design. *Solid State Ionics*, 53–56, 479–489.
- Guo, W., Fu, L., Zhang, Y., Zhang, K., Liang, L. Y., Liu, Z. M., Cao, H. T., & Pan, X. Q. (2010). Microstructure, optical, and electrical properties of p-type SnO thin films. *Applied Physics Letters*, 96(4), 42113.
- Guo, Y., Tao, J., Jiang, J., Zhang, J., Yang, J., Chen, S., & Chu, J. (2018). Low temperature solution deposited niobium oxide films as efficient electron transport layer for planar perovskite solar cell. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 188, 66–72.
- Hall, J. F., & Ferguson, W. F. C. (1955). Optical Properties of Cadmium Sulfide and Zinc Sulfide from 0.6 Micron to 14 Microns. *J. Opt. Soc. Am.*, 45(9), 714–718.
- Halvani Anaraki, E., Kermanpur, A., Mayer, M. T., Steier, L., Ahmed, T., Turren-Cruz, S.-H., Seo, J., Luo, J., Zakeeruddin, S. M., Tress, W. R., Edvinsson, T., Grätzel, M., Hagfeldt, A., & Correa-Baena, J.-P. (2018). Low-Temperature Nb-Doped

- SnO₂ Electron-Selective Contact Yields over 20% Efficiency in Planar Perovskite Solar Cells. *ACS Energy Letters*, 3(4), 773–778.
- Hazelwood, R. A. (1970). Derivation of optical constants from transmission measurements alone—applied to MoSe₂. *Thin Solid Films*, 6(5), 329–341.
- Heavens, O. S. (1960). Optical properties of thin films. *Reports on Progress in Physics*, 23(1), 1.
- Hecht, E. (2002). *Optics*. Addison-Wesley.
- Hecht, H. G. (1976). The interpretation of diffuse reflectance spectra. *Journal of Research of the National Bureau of Standards. Section A, Physics and Chemistry*, 80(4), 567.
- Hervé, P. J. L., & Vandamme, L. K. J. (1995). Empirical temperature dependence of the refractive index of semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 77(10), 5476–5477.
- Hjortsberg, A. (1981). Determination of optical constants of absorbing materials using transmission and reflection of thin films on partially metallized substrates: analysis of the new (T, R_m) technique. *Applied Optics*, 20(7), 1254–1263.
- Hwang, S. Y., Kim, T. J., Byun, J. S., Barange, N. S., Diware, M. S., Kim, Y. D., Aspnes, D. E., Yoon, J. J., & Song, J. D. (2013). Analytic representation of the dielectric functions of InAs_xSb_{1-x} alloys in the parametric model. *Thin Solid Films*, 547, 276–279.
- Irene, E. A. (1993). Applications of spectroscopic ellipsometry to microelectronics. *Thin Solid Films*, 233(1–2), 96–111.
- Jacob, K. T., Shekhar, C., Vinay, M., & Waseda, Y. (2010). Thermodynamic Properties of Niobium Oxides. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 55(11), 4854–4863.
- Jain, P. K., Huang, X., El-Sayed, I. H., & El-Sayed, M. A. (2008). Noble metals on the nanoscale: optical and photothermal properties and some applications in imaging, sensing, biology, and medicine. *Accounts of Chemical Research*, 41(12), 1578–1586.
- Jenkins, F. A., & White, H. E. (2018). *Fundamentals of optics*. Tata McGraw-Hill Education.
- Jin, Y., Song, B., Lin, C., Zhang, P., Dai, S., Xu, T., & Nie, Q. (2017). Extension of the Swanepoel method for obtaining the refractive index of chalcogenide thin films accurately at an arbitrary wavenumber. *Opt. Express*, 25(25), 31273–31280.
- Kasap, S. O. (2013). *Optoelectronics & Photonics: Principles & Practices*. Pearson Education Limited, UK.

- Kim, S., Chang, H.-K., Kim, K. B., Kim, H.-J., Lee, H.-N., Park, T. J., & Park, Y. M. (2021). Highly Porous SnO₂/TiO₂ Heterojunction Thin-Film Photocatalyst Using Gas-Flow Thermal Evaporation and Atomic Layer Deposition. *Catalysts*, 11(10).
- Kong, Y., Li, Y., Cui, X., Su, L., Ma, D., Lai, T., Yao, L., Xiao, X., & Wang, Y. (2021). SnO₂ nanostructured materials used as gas sensors for the detection of hazardous and flammable gases: A review. *Nano Materials Science*.
- Kovalenko, S. A. (1999). Optical properties of thin metal films. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*.
- Kramers, H. A. (1927). La diffusion de la lumiere par les atomes. *Atti Cong. Intern. Fisica (Transactions of Volta Centenary Congress) Como*, 2, 545–557.
- Krishnapriya, R., Praneetha, S., & Vadivel Murugan, A. (2015). Energy-efficient, microwave-assisted hydro/solvothermal synthesis of hierarchical flowers and rice grain-like ZnO nanocrystals as photoanodes for high performance dye-sensitized solar cells. *CrystEngComm*, 17(43), 8353–8367.
- Kumar, M., Sandeep, C. S. S., Kumar, G., Mishra, Y. K., Philip, R., & Reddy, G. B. (2014). Plasmonic and nonlinear optical absorption properties of Ag: ZrO₂ nanocomposite thin films. *Plasmonics*, 9(1), 129–136.
- Kuppan, M., Harinath Babu, S., Kaleemulla, S., Madhusudhanarao, N., Krishnamoorthi, C., Venugopalrao, G., Omkaram, I., Sreekantha Reddy, D., & Venkata Subba Reddy, K. (2017). Structural and Magnetic Properties of Cr Doped SnO₂ Nanopowders Prepared by Solid State Reaction. *Mechanics, Materials Science & Engineering Journal*, 9.
- Kuppan, M., Kaleemulla, S., Rao, N. M., Sai Krishna, N., Begam, M. R., & Shobana, M. (2014). Structural and Magnetic Properties of Ni Doped SnO₂. *Advances in Condensed Matter Physics*, 2014, 284237.
- Kuznetsov, S. A. (2019). Electrodeposition of Niobium Coatings on Long Conductors from a Copper Alloy. *Journal of The Electrochemical Society*, 166(13), D694--D699.
- Laaziz, Y., & Bennouna, A. (1996). On some important care to take when making spectrophotometric measurements on semiconductor thin films. *Thin Solid Films*, 277(1–2), 155–161.
- Lee, C.-C., Tien, C.-L., & Hsu, J.-C. (2002). Internal stress and optical properties of Nb₂O₅ thin films deposited by ion-beam sputtering. *Appl. Opt.*, 41(10), 2043–2047.
- Lee, M. (2019). *Optics for Materials Scientists*. Apple Academic Press.
- Levy, D., & Castellón, E. (2019). *Transparent Conductive Materials: Materials, Synthesis, Characterization, Applications*. Wiley.

- Li, M., Zhu, L., Zhang, X., Wang, C., Gao, D., Han, J., Chen, C., Song, H., Xu, S., & Chen, C. (2022). Highly efficient and stable perovskite solar cells based on E-beam evaporated SnO₂ and rational interface defects passivation. *Nano Select*, 3(5), 956–964.
- Li, N., Fan, Y., Shi, Y., Xiang, Q., Wang, X., & Xu, J. (2019). A low temperature formaldehyde gas sensor based on hierarchical SnO/SnO₂ nano-flowers assembled from ultrathin nanosheets: Synthesis, sensing performance and mechanism. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 294, 106–115.
- Li, R., Nie, S., Miao, C., Xin, Y., Mou, H., Xu, G., & Xiao, W. (2022). Heterostructural Sn/SnO₂ microcube powders coated by a nitrogen-doped carbon layer as good-performance anode materials for lithium ion batteries. *Journal of Colloid and Interface Science*, 606, 1042–1054.
- Liao, J., Ni, W., Wang, C., & Ma, J. (2020). Layer-structured niobium oxides and their analogues for advanced hybrid capacitors. *Chemical Engineering Journal*, 391, 123489.
- Liu, B., Tian, L., Zheng, X., & Xing, Z. (2022). MnO₂ Films deposited on CuO nanomaterials as electrode materials for supercapacitors. *Journal of Alloys and Compounds*, 911, 165003.
- Lu, Y.-J., Shan, C.-X., Jiang, M.-M., Li, B.-H., Liu, K.-W., Li, R.-G., & Shen, D.-Z. (2014). Enhanced emission from ZnO-based double heterostructure light-emitting devices using a distributed Bragg reflector. *RSC Adv.*, 4(32), 16578–16582.
- Ma, T., Nikiel, M., Thomas, A. G., Missous, M., & Lewis, D. J. (2021). A novel and potentially scalable CVD-based route towards SnO₂:Mo thin films as transparent conducting oxides. *Journal of Materials Science*, 56(28), 15921–15936.
- Maheswari, S., Karunakaran, M., Hariprasad, K., Kasirajan, K., Poul Raj, I. L., Chandrasekar, L. B., Alshahrani, T., Shkir, M., & AlFaify, S. (2021). Noticeable enhancement in NH₃ sensing performance of nebulizer spray pyrolysis deposited SnO₂ thin films: An effect of Tb doping. *Superlattices and Microstructures*, 154, 106868.
- Makhlouf, A. S. H., & Tiginyanu, I. (2011). *Nanocoatings and Ultra-Thin Films: Technologies and Applications*. Elsevier Science.
- Mandia, D. J., Zhou, W., Ward, M. J., Joreess, H., Sims, J. J., Giorgi, J. B., Albert, J., & Barry, S. T. (2015). The effect of ALD-grown Al₂O₃ on the refractive index sensitivity of CVD gold-coated optical fiber sensors. *Nanotechnology*, 26(43), 434002.
- Manifacier, J. C., Gasiot, J., & Fillard, J. P. (1976). A simple method for the determination of the optical constants n, k and the thickness of a weakly absorbing thin film. *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, 9(11), 1002.

- Masteghin, M. G., Bertinotti, R. C., & Orlandi, M. O. (2018). Coalescence growth mechanism of inserted tin dioxide belts in polycrystalline SnO₂-based ceramics. *Materials Characterization*, 142, 289–294.
- Medvedeva, J. E., & Freeman, A. J. (2005). Combining high conductivity with complete optical transparency: A band structure approach. *Europhysics Letters* (*EPL*), 69(4), 583–587.
- Meng, F., Liao, Z., Xing, C., Yuan, Z., Zhang, R., Zhu, H., & Li, J. (2022). Preparation of SnO₂/SiO₂ nanocomposites by sol-gel method for enhancing the gas sensing performance to triethylamine. *Journal of Alloys and Compounds*, 893, 162189.
- Minkov, D., & Swanepoel, R. (1993). Computerization of the optical characterization of a thin dielectric film. *Optical Engineering*, 32(12), 3333–3337.
- Morrissey, B. W., & Powell, C. J. (1973). Interpolation of refractive index data. *Applied Optics*, 12(7), 1588–1591.
- Mou, H., Xin, Y., Miao, C., Nie, S., Chen, S., & Xiao, W. (2021). Amorphous SnO₂ nanoparticles embedded into a three-dimensional porous carbon matrix as high-performance anodes for lithium-ion batteries. *Electrochimica Acta*, 397, 139286.
- Nagaraju, Y. S., Ganesha, H., Veeresha, S., Vandana, M., Ashokkumar, S. P., Vijeth, H., & Devendrappa, H. (2021). Single crystalline hierarchical SnO₂ microsphere and fluoride-mediated hollow structures for photocatalytic activity. *Materials Today: Proceedings*, 45, 3833–3836.
- Nguyen, N. V., Nguyen, N., Hattrick-Simpers, J. R., Kirillov, O. A., & Green, M. L. (2021). Optical spectra and interfacial band offsets of pulse-laser-deposited metal-oxides: SnO₂, TiO₂, and ZnO. *Applied Physics Letters*, 118(13), 131602.
- Nico, C., Monteiro, T., & Graça, M. P. F. (2016). Niobium oxides and niobates physical properties: Review and prospects. *Progress in Materials Science*, 80, 1–37.
- Nilsson, P.-O. (1968). Determination of Optical Constants from Intensity Measurements at Normal Incidence. *Appl. Opt.*, 7(3), 435–442.
- Nowak, M. (1995). Determination of optical constants and average thickness of inhomogeneous-rough thin films using spectral dependence of optical transmittance. *Thin Solid Films*, 254(1–2), 200–210.
- Ohtani, B., Iwai, K., Nishimoto, S., & Inui, T. (1994). Electrochromism of Niobium Oxide Thin Films Prepared by the Sol-Gel Process. *Journal of The Electrochemical Society*, 141(9), 2439–2442.
- Ong, G. K., Saez Cabezas, C. A., Dominguez, M. N., Skjærvø, S. L., Heo, S., & Milliron, D. J. (2020). Electrochromic Niobium Oxide Nanorods. *Chemistry of Materials*, 32(1), 468–475.

- Ou, J. Z., Rani, R. A., Ham, M.-H., Field, M. R., Zhang, Y., Zheng, H., Reece, P., Zhuikov, S., Sriram, S., Bhaskaran, M., Kaner, R. B., & Kalantar-zadeh, K. (2012). Elevated Temperature Anodized Nb₂O₅: A Photoanode Material with Exceptionally Large Photoconversion Efficiencies. *ACS Nano*, 6(5), 4045–4053.
- Özer, N., Rubin, M. D., & Lampert, C. M. (1996). Optical and electrochemical characteristics of niobium oxide films prepared by sol-gel process and magnetron sputtering A comparison. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 40(4), 285–296.
- Palik, E. D. (1998). *Handbook of Optical Constants of Solids* (Issue 3. c.). Elsevier Science.
- Palmer, K. F., Williams, M. Z., & Budde, B. A. (1998). Multiply subtractive Kramers--Kronig analysis of optical data. *Appl. Opt.*, 37(13), 2660–2673.
- Park, S.-M., Ikegami, T., & Ebihara, K. (2006). Effects of substrate temperature on the properties of Ga-doped ZnO by pulsed laser deposition. *Thin Solid Films*, 513(1), 90–94.
- Paulick, T. C. (1986). Inversion of normal-incidence (R,T) measurements to obtain $n + ik$ for thin films. *Appl. Opt.*, 25(4), 562–564.
- Perkampus, H. H., Grinter, H. C., & Threlfall, T. L. (1992). *UV-VIS Spectroscopy and Its Applications*. Springer-Verlag.
- Pillai, S., Catchpole, K. R., Trupke, T., Zhang, G., Zhao, J., & Green, M. A. (2006). Enhanced emission from Si-based light-emitting diodes using surface plasmons. *Applied Physics Letters*, 88(16), 161102.
- Poelman, D., & Smet, P. F. (2003). Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements: a critical review. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 36(15), 1850.
- Poelman, D., & Vennik, J. (1988). The temperature dependence of the optical properties of thin CdTe films. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 21(6), 1004.
- Prosovskii, Y. O., Denisov, D. G., Prosovskii, O. F., Metleva, A. P., & Golubeva, N. A. (2021). Structural changes in niobium oxide during electron beam evaporation. In B. Bodermann & K. Frenner (Eds.), *Modeling Aspects in Optical Metrology VIII* (Vol. 11783, pp. 76–85). SPIE.
- Rao, M. C., & Shekhawat, M. S. (2013). A brief survey on basic properties of thin films for device application. *International Journal of Modern Physics: Conference Series*, 22, 576–582.
- Reddaway, S. F., & Wright, D. A. (1965). The optical properties of tin oxide crystals. *British Journal of Applied Physics*, 16(2), 195–198.

- Roessler, D. M. (1966). Kramers-Kronig analysis of reflectance data: III. Approximations, with reference to sodium iodide. *British Journal of Applied Physics*, 17(10), 1313.
- Sanger, A., Kumar, A., Chauhan, S., Gautam, Y. K., & Chandra, R. (2015). Fast and reversible hydrogen sensing properties of Pd/Mg thin film modified by hydrophobic porous silicon substrate. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 213, 252–260.
- Seo, Y. J., Kim, G. W., Sung, C. H., Anwar, M. S., Lee, C. G., & Koo, B. H. (2011). Characterization of transparent and conductive electrodes of Nb-doped SnO₂ thin film by pulsed laser deposition. *Current Applied Physics*, 11(3, Supplement), S310–S313.
- Sharma, A. A., Bain, J. A., & Weldon, J. A. (2015). Phase coupling and control of oxide-based oscillators for neuromorphic computing. *IEEE J. Explor. Solid-State Comput. Devices Circuits*, 1, 58–66.
- Shen, P., Zhang, B., Wang, Y., Liu, X., Yu, C., Xu, T., Mofarah, S. S., Yu, Y., Liu, Y., Sun, H., & Arandiyana, H. (2021). Nanoscale niobium oxides anode for electrochemical lithium and sodium storage: a review of recent improvements. *Journal of Nanostructure in Chemistry*, 11(1), 33–68.
- Simmons, J. H., & Potter, K. S. (1999). *Optical Materials*. Elsevier Science.
- Singh, J., Capper, P., Willoughby, A., & Kasap, S. O. (2020). *Optical Properties of Materials and Their Applications*. Wiley.
- Singh, Jaspal, Sahu, K., Pandey, A., Kumar, M., Ghosh, T., Satpati, B., Som, T., Varma, S., Avasthi, D. K., & Mohapatra, S. (2017). Atom beam sputtered Ag-TiO₂ plasmonic nanocomposite thin films for photocatalytic applications. *Applied Surface Science*, 411, 347–354.
- Sisonyuk, A. G. (1996). A posteriori error of the transmission interference method of thin film refractive index calculation. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 29(4), 1068.
- Smith, D. Y., Inokuti, M., & Karstens, W. (2001). A generalized Cauchy dispersion formula and the refractivity of elemental semiconductors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13(17), 3883–3893.
- Stichauer, L., & Gavaille, G. (1993). Effect of experimental errors on the determination of optical constants of thin films. *Physica Status Solidi (A)*, 135(1), K41–K44.
- Strong, J. (1938). *Procedures in experimental physics*.
- Subbiah, A. S., Mathews, N., Mhaisalkar, S., & Sarkar, S. K. (2018). Novel Plasma-Assisted Low-Temperature-Processed SnO₂ Thin Films for Efficient Flexible Perovskite Photovoltaics. *ACS Energy Letters*, 3(7), 1482–1491.

- Suresh, S. (2013). Semiconductor nanomaterials, methods and applications: a review. *Nanoscience and Nanotechnology*, 3(3), 62–74.
- Swanepoel, R. (1983). Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, 16(12), 1214.
- Szczyrbowski, J. (1978). No Title. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 11(4), 583–593.
- Tanabe, K. (2003). Catalytic application of niobium compounds. *Catalysis Today*, 78(1), 65–77.
- Tatian, B. (1984). Fitting refractive-index data with the Sellmeier dispersion formula. *Appl. Opt.*, 23(24), 4477–4485.
- Turgut, G., Keskenler, E. F., Aydin, S., Yilmaz, M., Dogan, S., & Düzgün, B. (2013). An investigation of the Nb doping effect on structural, morphological, electrical and optical properties of spray deposited F doped SnO₂ films. *Physica Scripta*, 87(3), 35602.
- Ücker, C. L., Gularte, L. T., Fernandes, C. D., Goetzke, V., Moreira, E. C., Raubach, C. W., Moreira, M. L., & Cava, S. S. (2019). Investigation of the properties of niobium pentoxide for use in dye-sensitized solar cells. *Journal of the American Ceramic Society*, 102(4), 1884–1892.
- Uddin, A., & Yi, H. (2022). Progress and Challenges of SnO₂ Electron Transport Layer for Perovskite Solar Cells: A Critical Review. *Solar RRL*, 6(6), 2100983.
- Valeur, B., & Berberan-Santos, M. N. (2011). A Brief History of Fluorescence and Phosphorescence before the Emergence of Quantum Theory. *Journal of Chemical Education*, 88(6), 731–738.
- Venkataraj, S., Drese, R., Liesch, C., Kappertz, O., Jayavel, R., & Wuttig, M. (2002). Temperature stability of sputtered niobium–oxide films. *Journal of Applied Physics*, 91(8), 4863–4871.
- Venkatesh, D., Pavalamalar, S., & Anbalagan, K. (2019). Selective Photodegradation on Dual Dye System by Recoverable Nano SnO₂ Photocatalyst. *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*, 29(3), 939–953.
- Viet, A. Le, Reddy, M. V, Jose, R., Chowdari, B. V. R., & Ramakrishna, S. (2010). Nanostructured Nb₂O₅ Polymorphs by Electrospinning for Rechargeable Lithium Batteries. *The Journal of Physical Chemistry C*, 114(1), 664–671.
- Wakaki, M. (2018). *Optical Materials and Applications*. CRC Press LLC.
- Wang, J., Lau, W. M., & Li, Q. (2005). Effects of particle size and spacing on the optical properties of gold nanocrystals in alumina. *Journal of Applied Physics*, 97(11), 114303.

- Ward, L. (1982). The accuracy of photometric methods for determining the optical constants of thin absorbing films. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 15(8), 1361.
- Wemple, S. H. (1973). Refractive-Index Behavior of Amorphous Semiconductors and Glasses. *Phys. Rev. B*, 7(8), 3767–3777.
- Wood, R. M., & of Materials (Great Britain), I. (1993). *Optical Materials*. Institute of Materials.
- Wu, J., Zhao, R., Xiang, H., Yang, C., Zhong, W., Zhang, C., Zhang, Q., Li, X., & Yang, N. (2021). Exposing highly active (100) facet on a SnS₂/SnO₂ electrocatalyst to boost efficient hydrogen evolution. *Applied Catalysis B: Environmental*, 292, 120200.
- Xiao, X., Dong, G., Xu, C., He, H., Qi, H., Fan, Z., & Shao, J. (2008). Structure and optical properties of Nb₂O₅ sculptured thin films by glancing angle deposition. *Applied Surface Science*, 255(5, Part 1), 2192–2195.
- Xiong, L., Guo, Y., Wen, J., Liu, H., Yang, G., Qin, P., & Fang, G. (2018). Review on the Application of SnO₂ in Perovskite Solar Cells. *Advanced Functional Materials*, 28(35), 1802757.
- Xu, Y., Zheng, L., Yang, C., Liu, X., & Zhang, J. (2020). Highly sensitive and selective electronic sensor based on Co catalyzed SnO₂ nanospheres for acetone detection. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 304, 127237.
- Yadav, A. A., Masumdar, E. U., Moholkar, A. V, Neumann-Spallart, M., Rajpure, K. Y., & Bhosale, C. H. (2009). Electrical, structural and optical properties of SnO₂:F thin films: Effect of the substrate temperature. *Journal of Alloys and Compounds*, 488(1), 350–355.
- Yadav, P. V. K., Ajitha, B., Ahmed, C. M. A., Reddy, Y. A. K., & Minnam Reddy, V. R. (2022). Superior UV photodetector performance of TiO₂ films using Nb doping. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 160, 110350.
- Yang, B., Zuo, X., Chen, P., Zhou, L., Yang, X., Zhang, H., Li, G., Wu, M., Ma, Y., Jin, S., & Chen, X. (2015). Nanocomposite of Tin Sulfide Nanoparticles with Reduced Graphene Oxide in High-Efficiency Dye-Sensitized Solar Cells. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 7(1), 137–143.
- Ying, X., Feldman, A., & Farabaugh, E. N. (1990). Fitting of transmission data for determining the optical constants and thicknesses of optical films. *Journal of Applied Physics*, 67(4), 2056–2059.
- Zhang, J. Z. (2009). *Optical Properties and Spectroscopy of Nanomaterials*. World Scientific.

- Zhang, K., Forouhi, A. R., & Bloomer, I. (1999). Accurate and rapid determination of thickness, n and k spectra, and resistivity of indium--tin--oxide films. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 17(4), 1843–1847.
- Zhang, Y., Ding, F., Deng, C., Zhen, S., Li, X., Xue, Y., Yan, Y.-M., & Sun, K. (2015). Crystal plane-dependent electrocatalytic activity of Co_3O_4 toward oxygen evolution reaction. *Catalysis Communications*, 67, 78–82.
- Zhou, X., Li, Z., Wang, Y., Sheng, X., & Zhang, Z. (2008). Photoluminescence of amorphous niobium oxide films synthesized by solid-state reaction. *Thin Solid Films*, 516(12), 4213–4216.
- Zubairy, M. S. (2016). *A Very Brief History of Light BT - Optics in Our Time* (M. D. Al-Amri, M. El-Gomati, & M. S. Zubairy (eds.); pp. 3–24). Springer International Publishing.