

**T.C.
BİNGÖL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**FOTOKROMİK ORGANİK LİGANDLAR KULLANILARAK ELDE EDİLEN
FOTODİYOTLARIN FABRİKASYONU VE ELEKTRİKSEL
KARAKTERİZASYONU**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
EVİN YİĞİT**

FİZİK ANA BİLİM DALI

**TEZ DANIŞMANI
Doç. Dr. İkrām ORAK**

BİNGÖL-2022

ÖNSÖZ

Bu tez çalışmasında, fotokromik organik ligandların ara yüzeyde kullanılması ile aygıtların farklı fiziksel değişkenlere bağlı elektriksel ve optiksel karakterizasyonu incelenmesi çalışmaları Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) (Proje No: 120F092) tarafından desteklenmiştir.

Bilimin ve bilimsel bilginin öneminin arttığı şu günlerde, bilime katkıda bulunmama ön ayak olan, bu tez çalışmasının hazırlanmasında maddi ve manevi tüm desteklerini, bilgi ve birikimlerini, deneysel tecrübelerini benden esirgemeyen, sabırla öğreten ve tez çalışmamın en iyi şekilde noksansız olması için çalışan çok değerli tez danışmanım Doç. Dr. İkrâm ORAK'a teşekkürü borç bilir, saygı ve şükranlarımı sunarım.

Bu tez çalışmasında laboratuvar çalışmaları esnasında, numunelerin hazırlanmasında ve ölçümlerin alınmasında yardımlarını ve kıymetli bilgilerini benden esirgemeyen Öğretim Görevlisi Sayın Dr. Ömer SEVGİLİ'ye ve yine bu çalışmada emeği geçen, Doç. Dr. Sinan BAYINDIR'a, Doç. Dr. Osman Dayan'a ve Doç. Dr. Feride AKMAN'a çok teşekkür ederim.

Bu çalışmanın uygulamasının yapıldığı Bingöl Üniversitesi Merkezi Laboratuvar Uygulama ve Araştırma Merkezi personellerine gösterdikleri ilgi ve alakadan dolayı teşekkür ederim.

Son olarak, bana her zaman destek veren ve aldığım her kararda daima yanımda olan çok kıymetli annem, babam, kardeşlerim (Mesut YİĞİT, Ferat YİĞİT, M Deyap GÜRKAN) ve arkadaşlarıma sonsuz teşekkür ederim.

Evin YİĞİT

Bingöl 2022

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	v
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	vi
TABLolar LİSTESİ.....	viii
ÖZET.....	x
ABSTRACT.....	xi
1. GİRİŞ.....	1
2. KAYNAK ÖZETLERİ.....	4
2.1. Yarıiletkenler.....	8
2.2 N-Tipi Yarıiletkenler	10
2.3 P-Tipi Yarıiletkenler	11
2.4. P-N Eklemi	12
2.5. Termiyonik Emisyon Teorisi	13
2.6. Schottky Kontak	14
2.6.1. Cheung Fonksiyonları Yardımı ile Schottky Kontak Parametrelerinin Belirlenmesi.....	15
2.6.2. Norde Fonksiyonları Yardımı ile Schottky Kontak Parametrelerinin Belirlenmesi.....	16
2.7. Fotodiyot ve Güneş Pili Uygulamaları.....	17
2.7.1. Fotodiyot ve Güneş Pili Uygulamalarının Karakteristiği.....	19
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	21
3.1. Organik Moleküllerin Eldesi.....	21
3.2. Organik Moleküller.....	24
3.3. p-Si Kristalinin Temizlenmesi	25
3.4. Termal Buharlaştırma Yöntemi ile Omik Kontak Oluşumu	26

3.5. Termal Buharlaştırma Yöntemi ile p-Si Üzerine Arayüzey Malzeme Büyütülmesi.....	27
3.6. Doğrultucu Schottky Kontak	27
3.7. Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) ile yüzey morfolojisi	28
3.8. Farklı Fiziksel Uyarılara Bağlı Diyot Karakteristikleri	29
3.8.1. Işık Şiddetine Bağlı Ölçümler	29
3.8.2. Sıcaklığa Bağlı Ölçümler	30
3.8.3. Frekansa Bağlı Ölçümler.....	30
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	31
4.1. Organik Moleküllerin Sentezi	31
4.1.1. Ph-PDI-Ph (1A)'nın sentezi	31
4.1.2. Pry-PDI-Pry (1B)'nin sentezi	31
4.1.3. Pry-PDI-Ph (1C)'nin sentezi.....	32
4.2. Optimize Edilmiş Molekül Yapısı	32
4.2.1. Ph-PDI-Ph' in optimize edilmiş molekül yapısı	33
4.2.2. Pyr-PDI-Ph'in optimize edilmiş molekül yapısı	33
4.3. Moleküllerin HOMO-LUMO Orbital Şemaları ve Bazı Kimyasal Parametreleri.....	34
4.3.1. Ph-PDI-Ph'in HOMO-LUMO Orbital Şemaları ve Bazı Kimyasal Parametreleri.....	35
4.3.2. Pyr-PDI-Ph'in HOMO-LUMO Orbital Şemaları ve Bazı Kimyasal Parametreleri.....	36
4.4. Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) Yüzey Analizi	38
4.4.1. Ph-PDI-Ph'in MEP Yüzey Analizi	38
4.4.2. Pyr-PDI-Ph' nin MEP Yüzey Analizi	39
4.5. UV-Vis Spektrumları	39
4.5.1. Ph-PDI-Ph'in UV-Vis Spektrumu.....	40
4.5.2 Pyr-PDI-Ph'in UV-Vis Spektrumu	41
4.6. UV Görünür Bölge Absorbsiyon Spektrumları	41
4.7. Atomik Kuvvet Mikroskobu Görüntüleri	42
4.8. Farklı Arayüzey Ligandlarına Bağlı Diyot Karakteristik Parametrelerinin Hesaplanması.....	44

4.8.1. D1 Diyot Yapısının Elektriksel Karakterizasyonu	44
4.8.2. D2 Diyot Yapısının Elektriksel Karakterizasyonu	55
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	63
KAYNAKLAR.....	67
ÖZGEÇMİŞ.....	74

SİMGELER VE KISALTMALAR

A	: Diyotun kontak alanı
A^*	: Richardson sabiti
e^-	: Elektron yükü
h^+	: Boşluk
eV	: Elektron volt
Φ_s	: Yarıiletkenin iş fonksiyonu (eV)
Φ_m	: Metalin iş fonksiyonu (eV)
Φ_b	: Engel yüksekliği (eV)
k	: Boltzman sabiti
I	: Akım (A)
J	: Akım yoğunluğu (A/cm ²)
J_0	: Ters beslem akım yoğunluğu (A/cm ²)
μ	: Mobilite (cm ² / V.s)
E_c	: İletim bandı minimum enerji seviyesi (eV)
E_v	: Valans bandı maksimum enerji seviyesi (eV)
E_F	: Fermi enerjisi (eV)
E_g	: Yasak enerji aralığı (eV)
E_s	: Yarıiletkenin dolu bandının vakum seviyesi altındaki derinliği
ϵ_0	: Boşluğun dielektrik sabiti
χ_s	: Yarıiletkenin elektron ilgisi
T	: Mutlak sıcaklık (K)
$g_c(E)$	: İletkenlik bandındaki hal yoğunluğu
I_0	: Ters doyma akımı (A)
m	: Serbest elektronun kütlesi
m_n^*	: Elektronun etkin kütlesi
n	: İdealite faktörü

K	: Kelvin
P	:Güç (Watt)
FF	:Doldurma faktörü (%)
V _d	:Difüzyon potansiyeli
HOMO	:En yüksek enerjili dolu moleküler orbital
LUMO	:En düşük enerjili boş moleküler orbital
MOY	:Metal/Organik/yarıiletken
MS/MY	:Metal/yarıiletken
TE	:Termiyonik emisyon
MEP	:Moleküler elektrostatik potansiyel
DMSO	: Dimetil sülfoksit
TD-DFT	:Zamana Bağlı Yoğunluk Fonksiyonel Teorisiyle (TD-DFT)
OPV	:Organik Fotovoltaikler
OLED	:Organik Işık yayan diyot
OFET	:Organik Alan Etkili Transistör
I-V	: Akım-voltaj
Ph-PDI-Ph	:2,9-diphenylanthra[2,1,9-def:6,5,10-d'e'f']diisoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone
Pyr-PDI-Ph	:2-phenyl-9-(pyridin-4-yl)anthra[2,1,9-def:6,5,10-d'e'f']isoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1.	İletken, yarıiletken ve yalıtkan malzemelerin $T=0$ K de enerji band aralıkları(E_g)(Streetman&Banerjee,2006).....	9
Şekil 2.2.	Katkılı N tipi yarıiletken	11
Şekil 2.3.	Katkılı P tipi yarıiletken	11
Şekil 2.4.	P-N eklemının (a) tüketim bölgesi (b) şematik gösterimi	12
Şekil 2.5.	Tüketim bölgesi	13
Şekil 2.6.	MY eklemine ait enerji–band diyagramı	14
Şekil 2.7.	Fotodiyotta elektron, boşluk çifti hareketi	18
Şekil 2.8.	Diyot ve güneş piline ait (a) yarı-logaritmik I-V grafiği, (b) Lineer I-V grafiği grafiği	19
Şekil 3.1.	PDI türevinin sentezi	22
Şekil 3.2.	Aminlerin reaktivitesi	23
Şekil 3.3.	PDI (2) ve sentezlenen PDI türevlerinin (C, Ph-PDI-Ph (1A), Pry-PDI-Pry (1B) ve Pry-PDI-Ph (1C)) FT-IR (ATR) (A) ve UV-vis (B) spektrumları.....	24
Şekil 3.4.	(a) Ultrasonik Temizleyici, Wiseclean, (b) Termal Buharlaştırma ve İnce Film Kaplama Sistemi, NANOVAK NVTS-400.....	25
Şekil 3.5.	(a) Termal buharlaştırma sistemi (b) Nokta kontak (c) Yarıiletken tabanlı aygıtın şematik görüntüsü (d) Fabrikasyonu tamamlanan numune örnekleri	27
Şekil 3.6.	(a) Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) (b) temsili gösterimi.....	28
Şekil 3.7.	(a) Akım-Gerilim Solar Simülatörü / Probe Station ,(b) Kryostat cihazı-turbo vakum pompası, Keithley 2400, Güç kaynağı ve sıcaklık kontrol ünitesi ,(c) Empedans Analiz Cihazı 4192A Model YHP Marka LF 5 Hz - 13 MHz.....	29

Şekil 4.1.	Ph-PDI-Ph' in moleküler geometrik yapısı.....	33
Şekil 4.2.	Pyr-PDI-Ph'in moleküler geometrik yapısı.....	33
Şekil 4.3.	(Ph-PDI-Ph) için DFT metoduyla hesaplanmış HOMO-LUMO şeması.....	36
Şekil 4.4.	(Pyr-PDI-Ph) için DFT metoduyla hesaplanmış HOMO-LUMO şeması.....	37
Şekil 4.5.	(Ph-PDI-Ph)' in MEP yüzey haritası.....	39
Şekil 4.6.	(Pyr-PDI-Ph)' nin MEP yüzey haritası.....	39
Şekil 4.7.	Organik malzemelerin Absorbans- Uyarılma enerjisi spektrumu.....	40
Şekil 4.8.	Ph-PDI-Ph, Pyr-PDI-Ph, organik tabakanın a) UV-görünür bölge spektrumu ve b) yasak enerji bant aralığı.....	41
Şekil 4.9.	D1 AFM yüzey morfolojisi a) 40x40 μm^2 yüzey görüntüsü b) 40x40 μm^2 3D yüzey görüntüsü ve yüzey pürüzlülüğü değerleri.....	43
Şekil 4.10.	D2 AFM yüzey morfolojisi a) 40x40 μm^2 yüzey görüntüsü b) 40x40 μm^2 3D yüzey görüntüsü ve yüzey pürüzlülüğü değerleri.....	43
Şekil 4.11.	D1 schottky diyot yapısının karanlık ve 30-100 mW/cm ² ışık şiddeti altında lnI-V grafiği, (b) Fotoakım- Zaman Grafiği ve (c) logI-logP grafiği.....	45
Şekil 4.12.	D1 için I-V grafiğinden doğrultma oranı.....	46
Şekil 4.13.	D1 diyot yapısının 100-320 K sıcaklık altında ve karanlıkta (a) lnI-V grafiği, (b) Norde fonksiyonu F(V)-V grafiği, (c) Cheung Fonksiyonu dV/dln(I)-V eğrileri ve (d) Cheung Fonksiyonu H (I)-I (A) eğrileri.....	48
Şekil 4.14.	D1 Schottky diyot yapısının (-2,+3) volt ve (5-5000) kHz frekans aralığında elde edilen (a) ve (b) düşük-yüksek C-V grafikleri, (c) ve (d) düşük-yüksek G/w-V grafikleri.....	52
Şekil 4.15.	D1 Schottky diyot yapısının (-2,+3) volt ve (5-5000) kHz frekans aralığında elde edilen (a) ve (b) düşük- yüksek frekans Ri-V grafiği, (c) C-2-V grafiği, (d) 5 kHz'de NSS-V grafiği.....	53
Şekil 4.16.	D1 Schottky diyot yapısının (a) Rs-ln(f) grafiği, (b) TE, Norde Fonksiyonu ve Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre Bariyer Yüksekliği- sıcaklık karşılaştırılması, (c) Ohm Kanunu, Norde Fonksiyonu ve	

	Cheung'in 1. Fonksiyonu, Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre Seri direnç-sıcaklık karşılaştırılması.....	55
Şekil 4.17.	D2 schottky diyot yapısının karanlık ve 30-100 mW/cm ² ışık şiddeti altında lnI-V grafiği, (b) Fotoakım- Zaman Grafiği ve (c)logI-logP....	56
Şekil 4.18.	D2 diyot yapısının 100-320 K sıcaklık altında ve karanlıkta (a) lnI-V grafiği, (b) Norde fonksiyonu F(V)-V grafiği, (c) Cheung Fonksiyonu dV/dln(I)-V eğrileri ve (d) Cheung Fonksiyonu H (I)-I (A) eğrileri.....	57
Şekil 4.19.	D2 Schottky diyot yapısının (-3,+3) volt ve (5-5000) kHz frekans aralığında elde edilen (a) ve (b) düşük-yüksek C-V grafikleri, (c) ve (d) düşük-yüksek G/w-V grafikleri.....	59
Şekil 4.20.	D2 Schottky diyot yapısının (-3,+3) volt ve (5-5000) kHz frekans aralığında elde edilen (a) ve (b) düşük- yüksek frekans Ri-V grafiği, (c) C-2-V grafiği, (d) 5 kHz'de NSS-V grafiği.....	60
Şekil 4.21.	D2 Schottky diyot yapısının (a) Rs-ln(f) grafiği, (b) TE, Norde Fonksiyonu ve Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre Bariyer Yüksekliği-Sıcaklık karşılaştırılması, (c) Ohm Kanunu, Norde Fonksiyonu ve Cheung'in 1. Fonksiyonu, Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre Seri direnç-Sıcaklık karşılaştırılması.....	62

TABLÖLER LİSTESİ

Tablo 4.1.	(Ph-PDI-Ph) 'ın gaz ve sıvı (DMSO) fazında DFT ve TD-DFT* metoduyla hesaplanmış bazı kimyasal parametreleri	36
Tablo 4.2.	(Pyr-PDI-Ph) 'nin gaz ve sıvı (DMSO) fazında DFT ve TD-DFT* metoduyla hesaplanmış bazı kimyasal parametreleri	37
Tablo 4.3.	(Ph-PDI-Ph) ' ın TD-DFT methoduyla hesaplanmış absorpsiyon verileri	40
Tablo 4.4.	(Pyr-PDI-Ph)'nın TD-DFT methoduyla hesaplanmış absorpsiyon verileri.....	41
Tablo 4.5.	D1 Diyot yapısının oda sıcaklığında (300 K) hesaplanan engel yüksekliği ve idealite faktörü, seri direnç, şönt direnç ve doğrultma oranı değerleri	47
Tablo 4.6.	D1 Diyotu için değişen sıcaklık değerlerinde, doygunluk I_0 , idealite n , bariyer yüksekliği Φ_b ve seri direnç R_s değerlerinin incelenmesi	49
Tablo 4.7.	D1 diyotu için çeşitli frekanslar ile hesaplanan V_D , N_D , E_F , W_D , $\Phi_{B(C-V)}$ ve R_s değerleri	54
Tablo 4.8.	D2 Diyot yapısının oda sıcaklığında (300 K) hesaplanan engel yüksekliği ve idealite faktörü, seri direnç, şönt direnç ve doğrultma oranı değerleri	56
Tablo 4.9.	D2 Diyot yapısı için değişen sıcaklık değerlerinde, doygunluk I_0 , idealite n , bariyer yüksekliği Φ_b ve seri direnç R_s değerlerinin incelenmesi	58
Tablo 4.10.	D2 Diyot yapısı için çeşitli frekanslar ile hesaplanan V_D , N_D , E_F , W_D , $\Phi_{B(C-V)}$ ve R_s değerleri	61

FOTOKROMİK ORGANİK LİGANDLAR KULLANILARAK ELDE EDİLEN FOTODİYOTLARIN FABRİKASYONU VE ELEKTRİKSEL KARAKTERİZASYONU

ÖZET

Bu çalışmada temel organik moleküler baz alınarak iki farklı organik fotokromik malzeme kullanılarak yarıiletken tabanlı fotodiyotların fabrikasyonu ve karakterizasyonu yapılmıştır. Bu iki aygıt D1 ve D2 olarak adlandırılmıştır. Arayüzey organik malzemelerin optik özellikleri 400-600 nm dalga boyu aralığında alınan UV-ölçümleri ile analiz edilerek bu malzemelerin bant aralığı 2,25 eV, 2,26 eV olarak hesaplandı. Termal buharlaştırma yöntemi ile p-Si parlak yüzeyine organik kompleksler ince film şeklinde kaplandı. Fabrikasyonu tamamlanan malzemelerin yüzey morfolojisini incelemek için AFM cihazı kullanıldı. Yüzey pürüzlülükleri sırasıyla 0,98 nm, 0,25 nm olarak elde edildi. Elde edilen aygıtların fotovoltaiik performansını anlayabilmek için karanlık ve güneş simülatörü ile 30-100 mW/cm² arasında farklı ışık şiddetleri altında elde edilen akım-gerilim (I-V) karakteristiğinden engel yüksekliği, idealite faktörü, seri direnç, şönt direnç ve doğrultma oranı parametreleri hesaplandı. Organik arayüzeye sahip fotodiyotların, ışık şiddetinin artması ile ters beslem bölgesinde akımın arttığı gözlemlendi. Karanlık ortamda alınan ölçümlerin Termiyonik emisyon (TE) teorisi ile D1, D2 organik arayüzeyli aygıtların engel yüksekliği sırasıyla 0,73 eV, 0,73 eV ve idealite faktörleri 1,86 ve 1,88 olarak hesaplandı. Sadece bir fiziksel parametrenin değişimi ile değil aynı zamanda farklı bir fiziksel uyarıcı olan sıcaklıkla ilgili diyot karakteristiği de incelenmiştir. 100-320 K aralığında 20K'lık sıcaklık adımları ile, aygıt karakteristiğinde meydana gelen değişimler incelenmiştir. Yapılan ölçümlerde yarı logaritmik I-V eğrileri Ohm kanunu, TE, Norde ve Cheung fonksiyonları yardımıyla (I_0) sızıntı akımı, (n) idealite faktörü, (Φ_b) bariyer yüksekliği ve (R_s) seri direnç diyot parametreleri hesaplandı. Frekansa bağlı diyot parametrelerini incelemek üzere 5-5000 kHz aralığında kapasite, iletkenlik, seri direnç diyot parametreleri incelendi.

Anahtar Kelimeler: Fotokromik organik ligand, termal buharlaştırma, idealite faktörü, engel yüksekliği, fotodiyot, yüzey morfolojisi.

FACTORY AND ELECTRICAL CHARACTERIZATION OF PHOTODIODES USING PHOTOCHROMIC ORGANIC LIGANDS

ABSTRACT

In this study, fabrication and characterization of semiconductor-based photodiodes were performed using two different organic photochromic materials based on basic organic molecules. These two devices are named D1, D2. The optical properties of the interfacial organic materials were analyzed by UV-measurements and the band gap was calculated as 2.25 eV, 2.26 eV. Organic complexes were coated in the form of thin films on the p-Si surface with a thermal evaporation device. AFM device was used to examine the surface morphology of the fabricated materials. In order to understand the photovoltaic performance, the barrier height, ideality factor, series resistance, shunt resistance and rectification ratio parameters were calculated under different light intensities between 30-100 mW/cm² under the dark and solar simulator. It was observed that the current in the reverse bias region increased with the increase of light intensity of photodiodes with organic interfaces. The barrier height of the D1, D2 organic interface photodiodes was calculated as 0.73 eV, 0.73 eV, and the ideality factors were calculated as 1.86 and 1.88, respectively, with the thermionic emission (TE) theory of the measurements taken in the dark condition. The diode characteristic of not only the change of a physical parameter, but also a different physical stimulus, temperature, has been investigated. The change in the device was investigated with 20K temperature steps in the range of 100-320 K. In the measurements made, (I_0) leakage current, (n) ideality factor, (Φ_b) barrier height and (R_s) series resistance diode parameters were calculated with the help of semi-logarithmic I-V curves, Ohm's law, TE, Norde and Cheung functions. In order to examine the frequency dependent diode parameters, the diode parameters of capacitance, conductivity and series resistance in the range of 5-5000 kHz were examined.

Keyword: Photochromic organic ligand, thermal evaporation, ideality factor, barrier height, photodiode, surface morphology.

1. GİRİŞ

Son zamanlarda artan enerji ihtiyacını karşılamak için güçlü bir alternatif olan güneş pili, güneş enerjisini doğrudan elektrik enerjisine dönüştüren ve fotovoltaik (PV) prensip ile çalışan sistemlerdir. Güneş hücresi, güneşten gelen ışınları doğrudan elektrik enerjisine dönüştüren ve son zamanlarda artan enerji ihtiyacını karşılayan fotovoltaik (PV) sistemlerdir. Tükenmek üzere ve oldukça çevreci olmayan fosil yakıtların önemli bir yeri olmasına rağmen kendini yenileyebilen bu enerji, daha ucuz ve temiz bir enerji kaynağı olarak önem kazanmaktadır. Güneş enerjisi, diğer enerji kaynaklarına göre kaynağın kesintisiz kullanılabilir olması, maliyetinin az olması ve çevreye zarar vermemesi sebebiyle avantaj sağlamaktadır. Güneş enerjisi üzerine yapılan yoğun çalışmalar sonucunda endüstride çeşitli güneş hücreleri bulunmaktadır. Ancak maliyeti ve çevreye toksit madde bırakması ile çıkan sorunlar yüzünden farklı malzeme arayışına gidilmiştir. Son zamanlarda özellikle güneş hücrelerinde organik malzemeler kullanılmaya ve literatüre kazandırılma çalışmaları yapılmaktadır. Amaç düşük direnç ve yüksek optik geçirgenlik gibi elektriksel ve optik özelliklerinin iyileştirilmesidir.

Yarıiletken devre elemanları olup akımı tek yönde ileten diyotlar, N tipi ve P tipi maddelerin birleşmesiyle PN ekleminden oluşur. Akımın bir yönde kolayca akmasını sağlarken, ters beslem bölgesinde önemli bir şekilde engeller. Metal-yarıiletken (MS) eklemler, çeşitli elektronik ve optoelektronik teknolojisinde oldukça sık kullanılmaktadırlar. Metal-yarıiletken diyotun elektriksel karakteristikleri, diyotun ara yüzey özellikleriyle kontrol edildiği iyi bilinmektedir (Aydın, 2007). Diyotun elektronik özellikleri, engel yüksekliği ve idealite faktörü gibi parametreler ile ara yüzey özellikleri ile karakterize edilir. Metal/yarıiletken arasındaki ara yüzey durumları, Schottky engel yüksekliğinin ve diğer parametrelerin belirlenmesinde önemli bir rol oynar sonuç itibari ile bunlar malzemenin performansını ve kararlılığını etkilemektedir (Sze, 1981).

Yapılan çalışmaların sonucunda; metal/yarıiletken arasında oluşan yüzey ve ara yüzeylerin, yüzeyin hazırlama şartlarına bağlı olduğunu ve bu yüzeylerin diyotların fiziksel özelliklerini değiştirdiği açıkça ortaya koymakla beraber, bilinmeyen kirliliklerle kaplı olan yüzeyler üzerine yerleştirilen kontaklar ara yüzey durumlarına sebep olduğu ve bu durumların diyotların performansını, kararlılığını, verimini, mekanik ve elektriksel özelliklerini etkilediği bilinmektedir (Bolotnikov, 2002).

Diyot, hassas bir şekilde hazırlanmadığı takdirde, metal ve yarıiletken arasında bir oksit tabakası oluşmakta ve bu tabakanın varlığı diyotu olumsuz yönde etkilemektedir. Diyot performansının bilinmesi için bu yüzey ve ara yüzey durumlarının bilinmesi gerekmektedir. Bundan dolayı son zamanlarda elektronik devre elemanlarında kullanılan organik bileşikler oldukça rağbet görmektedir.

Organik yarıiletkenler, üretiminin kolay olması, düşük maliyette olması, uygulamaya özgün üretilebilmesi ve yararlı elektronik özelliklerinin olması sebebiyle yapılan çalışmalarda büyük ilgi görmektedir. (Brütting, 2006). Organik yarıiletkenlerin ince film teknolojisi uygulamalarında yeri çok geniştir. Son yıllarda, organik yarıiletkenler ve türevleri ile yeni Schottky diyotlar hazırlanıp, karakterizasyonları yapılmaktadır (Stallinga, 2002)(Lee, 2017).

Organik yarıiletkenler, örneğin organik alan etkili transistörler OFET'ler, organik ışık yayan gelecek nesil ultra ince, geniş alanlı ve esnek aygıtlarda potansiyel uygulamaları nedeniyle son yirmi yılda önemli bir gelişme kaydetti. Düşük maliyetli ve düşük enerjili işlemlerle üretilebilen ve böylece geleneksel silikon teknolojilerinden farklı yeni özellikler sunan organik ışık yayan diyotlar (OLED) ve organik fotovoltailer (OPV) gibi aygıtlar bu tür cihazları çalıştıran temel bileşendir (Klauk, 2006). Organik yarı iletkenlerin OFET'lere uygulanması ilk olarak 1980'lerde yarı iletken malzeme olarak poli(tiyofen) kullanıldığında rapor edilmiştir (Koezuka, 1986). Ancak, alan etkili mobilite ve çevresel stabilite dâhil olmak üzere bu prototipik OFET'lerin özellikleri vasattı ve bu nedenle pratik kullanım mümkün değildi (Katz, 1997).

Fotodiyotlar genellikle güneş ışığı gibi bir dış kaynağın enerjisi ile taşıyıcıların jenerasyonu şeklinde elektrik gücü oluşturmak için kullanılan bir PN eklemidir. Diğer bir deyişle ışığa duyarlı yarıiletken diyotlardır (Donati, 2001). Anot ve katot olan iki elektriksel kontağı bulunur. Doğru beslemede normal diyot özellikleri gösterirler. Ters besleme altında üzerine düşen ışıkla orantılı olacak şekilde ters akımları değişir. Üzerine düşen ışık şiddeti arttığında eklem yüzeyindeki direnç azalır ve fotodiyot üzerinden geçen akım artar, ışık şiddeti azaldığında eklem yüzeyindeki direnç artar ve fotodiyot üzerinden geçen akım azalır. Fotodiyotlar, bu prensibe dayanarak yapılırlar. Fotodiyotlar, ışık şiddetini elektriksel işarete çevirmede en etkili olanıdır ve bu çevrim işlemi fotodiyodun karakteristiğine bağlıdır (Singh, 2003). Fotodiyotlar ışığa karşı hassas olmaları sebebiyle bilgisayarlar, elektronik devreler, fotoğraf makineleri, uzaktan kumandalar, alarm sistemleri vb. kontrol devrelerinde kullanılmaktadır (Dalla, 2011)(Crowell, 1966).

Bu tez çalışmasındaki amacımız; az maliyetli, yüksek verimli yeni kuşak fotovoltaiik aygıtların elde edilmesinde kullanılmak üzere yeniliklere açık organik tabanlı ya da organik ara yüzeyli malzemelerin geliştirilmesi ve yeni fotovoltaiik aygıtlar üretilmesi hedeflenmektedir. Elektron verici ve alıcı grupların bir arada bulunduğu organik moleküllerin sentezi ve uygulamalarından oldukça başarılı sonuçlar elde edilirken aynı zamanda serbest enerji, mesafe bağımlılığı gibi elektron transferi oranını düzenleyen temel kanunları yani ihtiyaçları en aza indirmesi önemli hedeflerindendir. Bu çalışmanın öncelikli hedefi, yapısında verici-alıcı grupları bulunduran organik moleküller olarak sentezlenen arayüzey malzemelerinin fotodiyot uygulamalarında farklı uyaranlara bağlı olarak elektriksel karakteristiklerini araştırmaktır. Bu sayede, yeni nesil optik aygıtların üretilmesinde kullanılmak üzere kendine has malzemelerin geliştirilmesi ve Perilendiimid (PDI) gibi gruplar içeren film tabakaları fotovoltaiik aygıtların fabrikasyonu ile literatüre katkı sağlanmasıdır. Sonuçta, bu çalışmada amaç, yeni organik moleküllerin sentezini gerçekleştirip elektronik ve foto çevrim malzeme biliminde kullanılan nanoteknolojik aygıtların elde edilmesidir. Bu malzemeleri yeni kuşak fotovoltaiik aygıtların üretilmesinde kullanılmak üzere kendine has malzemelerin geliştirilmesi PDI gruplar içeren Ph-PDI-Ph, Pyr-PDI-Ph gibi organik moleküllerin film tabakaları fotovoltaiik aygıtların fabrikasyonunda kullanıp elde edilen organik malzemelerin uygulanması sağlanacaktır.

2. KAYNAK ÖZETLERİ

Braun'un 1874 yılında, sülfat kristallerinde elektriksel iletkenlik karakteristiğinin simetrik değil de asimetrik olduğunu keşfetmesi sonucunda, elektriksel ve optiksel olan tüm teknolojik ilerlemenin temelini oluşturan bir akım haline gelmiştir. Bu keşif MY eklemlerinin başlangıcı sayıldığından, Pickard 1906 yılında, silikon kullanarak MY eklemine dayalı detektör patentini alamaya hak kazanmıştır. 1907 yılında ise Pierce, metal bir teli yarıiletkenin yüzeyine nokta kontak oluşturarak fabrikasyonunu yaptığı MY doğrultucu eklemine elektriksel ve optiksel karakterizasyonları araştırılmıştır (Neamen, 2003).

19. yy ortalarına doğru birçok bilim insanı, MY eklemlerin doğrultma özellikleriyle ilgili çalışmalara başlamıştır (Schottky 1931). Schottky ve Mott 1938 yılında birbirlerinden habersiz olarak yürüttükleri çalışmalarda doğrultma mekanizmalarının elektronların potansiyel engeli üzerinden difüzyon ve sürüklenme şeklinde taşınması ile açıklanabileceği bir teori olarak ortaya atmışlardır. Bu teoride, meydana gelen engelin nedeni metal ve yarıiletkenin iş fonksiyonları arasındaki parametre farkından kaynaklanabileceği açıklanmıştır. Dolayısıyla potansiyel engelin büyüklüğünün hesaplanması, metalin iş fonksiyonunun elektron ilgisinin ve yarıiletkenin elektron ilgisinin farkından yararlanılarak bulunabileceği sonucu çıkarılmıştır. Kuantum mekaniğinin MY diyotlardaki ilk uygulanması Wilson'un çalışmaları sonucunda tarafından olmuştur. Bu çalışmalardan kuantum mekaniksel tünellemeyi ve doğrultma için ters polarite söz konusu olduğunun sonuçlarını elde etmiştir (Wilson, 1938).

Daha sonraki çalışmalarda, Schottky engel yüksekliğine etki eden parametrenin, metalin iş fonksiyonundan kaynaklanmadığı buna sebep olan ise metal ile yarıiletken eklemine hazırlanma metotlarına bağlı olduğu sonucu çıkarımında bulunulmuştur. Buna kaynak olarakta Schottky-Mott teorisinin, ideal diyotlar için hazırlanmış bir teori olduğu gösterilmiştir. Sterilize bir ortamda yapılan Metal/Yarıiletken eklemlerde bir ara yüzey

oluşması kaçınılmaz bir deneysel hatadır. Bu ara yüzey durumları elektronik özelliklerinden kaynaklı olarak, diyotun elektriksel karakteristiğini oldukça etkiler. Bu yüzden yeni çalışmalara ihtiyaç duyulmuştur. Bardeen yaptığı çalışmalar sonucu yeni bir modül geliştirerek, bu ihtiyacın karşılanmasında oldukça etkili olmuştur. Bardeen, ‘Metal/Yarıiletken ara yüzeylerde bulunan yerel elektriksel olarak değişime etki edeceği hallerin olması durumlarında, potansiyel engel yüksekliği metalin iş fonksiyonundan bağımsız olacağını ortaya koymuştur (Bardeen, 1947). Rhoderick ve Card’ın yaptığı çalışmalar Bardeen’nin yaptığı çalışmaları desteklemiştir. Çalışmalar sonucunda, Metal/Yarıiletken eklemenin ara yüzey hal yoğunluğunu belirlendikten sonra, ara yüzey hal yoğunluğunun ve arayüzey tabakası gibi ara yüzey durumlarının akım-gerilim karakteristiklerinden faydalanıp, idealite faktörü üzerindeki olumlu ya da olumsuz etkilerini açıklamayı başarmışlardır (Card, 1971).

Mönch ise çalışmalarında, engel yüksekliğinin safsızlığından kaynaklı idealite faktörü ve engel yüksekliği gibi bazı elektriksel özelliklerinin diyottan diyota farklılık gösterebileceğinin sonucuna varmıştır (Mönch, 1987).

Sonra Cheung ve Cheung diyotları ideal ve ideal olmayan diyotlar olarak ikiye ayırmıştır. Bu diyotlar için doğru beslem akım-gerilim karakteristiklerin faydalanılarak, Schottky diyotlarda idealite faktörü, engel yüksekliği ve seri direnç gibi elektriksel parametrelerin hesaplanması için farklı yollarla elde edilebilecek hesaplama metodu ortaya konmuştur. Daha sonra seri direncin hesaplanmasından faydalanarak paralel direnç hesaplanmaları yapılmıştır (Cheung , 1986).

Çalışmalar ne kadar titizlik ile olsa da Metal/Yarıiletken diyotlarda kirlilik ya da oksit tabakasının oluşması kaçınılmazdır. Bu arayüzey tabakası diyotun elektriksel parametrelerine oldukça etkisi fazladır. Metal/Yarıiletken diyotunu Metal/Yalıtkan/Yarıiletken diyotuna dönüştürmüş olacaktır. Bu ara yüzey tabakanın elektriksel parametreleri, diyotun elektriksel karakteristiğine çok önemli etkilerde bulunduğu öngörülmüştür. Ara yüzeylerin, bu diyotlara elektriksel etkilerini ilk araştıranlar, Cowley ve Sze olmuştur. Yapılan araştırmalarda ara yüzeyin kalınlık derecesi ve diğer diyot parametrelerine nasıl etki ettiğini, doğru beslem bölgesinde akım-gerilim karakteristiğinden faydalanarak çalışmalar yapılmıştır (Sze, 1981) (Cowley, 1965).

Benzer şekilde, Tseng ve Wu, Ara yüzey durumlarının Schottky eklem diyotlara etkisini incelemiştir. Yapılan çalışmalarda ara yüzey tabakasında meydana gelen durumların Schottky eklemlerinin akım-gerilim ve kapasitans-gerilim parametreleri üzerindeki etkilerini inceleyip bu ölçümlerden farklı fiziksel parametreleri ihtiva eden durumları hesaplamışlardır. Dahası Rhoderick, Horvarth ve Card'da ara yüzey durumlarının diyotun elektriksel karakteristiği üzerine etkisini araştırmışlardır. Bu çalışmaların sonucunda 'ara yüzey durum dağılımı ve ara yüzey tabaka kalınlığının' tüm belsem bölgesinde akım-gerilim verilerinden faydalanılarak bulunacağını ispat etmişlerdir (Crowell, 1966).

Schottky diyotları, mekanik temizlemeden sonra 3 dakika boyunca kuvvetli bir şekilde kazınmış olup bir n-tipi Si yüzeyinde Al'in buharlaştırılmasıyla üretildi. Al/n-Si diyotlarının daha iyi çalışan bir tanesinin ölçümleri oda sıcaklığında gerçekleştirilmiştir. İdeallik faktörü (n) için tüm arayüz durumlarının önce metalle, sonra yarıiletkenle dengede olduğu varsayılarak iki ifade bulundu. Diyot, idealite faktörü 1.46 ile ideal olmayan akım-gerilim davranışı gösterdi. Arayüz durumlarının yoğunluk dağılımı, ileri önyargı I-V özelliklerinden elde edildi. Ters beslem bölgesinde C^2-V grafiklerindeki doğrusal olmama veya eğrilik, arayüz durumlarının varlığından kaynaklanan "fazla kapasitans" C_0 olarak adlandırılan bir miktardı. Fazla kapasitansın artan frekansla azaldığı gözlemlendi. Bu davranış, arayüzey durumlarının görünür yoğunluğunun artan frekansla azalması gerçeğine bağlandı (Türüt, 1992).

Chattopadyay ve Daw MIS (Metal-Yalıtkan-Yarıiletken) yapılarının, akım-gerilim ve kapasitans-gerilim ölçümlerini, diyotların engel yüksekliğinin ara yüzeyde oluşan oksit tabakası kalınlığına bağlı olduğunu açıklamıştır. Ek olarak ara yüzeyde oluşan oksit ya da kirlilik tabakasının farklı değişken kalınlık tabakaları temel alınarak engel yüksekliğinin değişkenliğinin hangi yönde olduğu incelenmiştir (Chattopadhyay, 1995).

Silikon yüzeylerde doğal oksit filminin varlığı, cihaz imalat işleminin kalitesinin kontrol kabiliyetini, yarı iletken cihazların performansını ve güvenilirliğini düşürmektedir. Bu düşünceden kaynaklı olarak, n-tipi silikon yüzeyinde doğal oksit filmi oluşturmak için metal buharlaşmasından önce temiz oda havasına maruz bırakılan kimyasal olarak temizlenmiş n-Si yüzeyini kullanarak Au/n-Si/AuSb Schottky diyotları üretilmiştir. Bu çalışmada ki amaç, temiz oda havasına maruz kalan numunenin idealite faktörü, engel

yüksekliği, doğrultma oranı, seri direnç ve arayüz durum yoğunluğu değerlerini referans numunesi ile karşılaştırılarak ve fabrikasyonu yapılan aygıtların performans ve güvenilirliğinin oksit tabakasından dolayı bozulup bozulmadığını görmektir (Kiliçoğlu, 2005).

Au/n-tipi GaAs Schottky bariyer diyotunun oda sıcaklığında akım-gerilim ve kapasitans-gerilim özelliklerinden elde edilen elektronik ve arayüz durum yoğunluk dağılım özellikleri araştırılması yapıldı. İdealite faktörü (n), seri direnç (R_s) ve bariyer yüksekliği (Φ_B) gibi parametreler Cheung's yöntemi kullanılarak akım-gerilim ve kapasitans-gerilim ölçümlerinden elde edildi. Diyot, birlikten daha büyük bir idealite faktörü ile ideal olmayan akım-gerilim davranışı gösterdi. Sonuçta metal ve yarı iletken arasında ince bir ara yüzey tabakasının varlığını göstermektedir (Karataş, 2006).

Al/Turuncu G/n-Si/AuSb yapısının akım-gerilim, kapasitans-gerilim ve kapasitans-frekans özellikleri oda sıcaklığında incelenmiştir. Engel yüksekliği (BH) ve seri direnç dahil parametreleri hesaplamak için geleneksel ileri akım-gerilim yöntemi kullanıldı. Norde fonksiyonundan elde edilen bariyer yüksekliği ve seri direnç, Cheung fonksiyonundan elde edilenlerle karşılaştırılmış ve her iki yöntemden elde edilen seri dirençler arasında iyi bir uyum olduğu görülmüştür. $C-V$ özellikleri 10 gerçekleştirilmiştir kHz ve 500 kHz frekansları ve $C-f$ karakteristikler 0,0V, +0,4V ve -0,4V gerçekleştirilmiştir (Aydoğan, 2008).

Au/Orcein/p-Si/Al aygıt fabrikasyonu yapıldı. Fabrikasyonu yapılan aygıtın akım-gerilim ölçümleri diyot özellikleri gösterdi. Aygıtın akım-gerilim, kapasitans-gerilim ve kapasitans-frekans özellikleri oda sıcaklığında incelendi. Aygıtın idealite faktörü, bariyer yüksekliği, seri direnç gibi bazı bağlantı parametreleri akım-gerilim ve kapasitans-gerilim karakteristiklerinden belirlenmiştir. 2,48 idealite faktörü ve 0,70 eV bariyer yüksekliği akım-gerilim kullanılarak hesaplandı. Orcein tabakasının, Au ve p-Si arasındaki fiziksel bariyeri oluşturduğu için yapının efektif bariyer yüksekliğini arttırdığı görüldü (Turut, 2010).

ZnO ince filmini farklı ara yüzey kaplama ve biriktirme yöntemlerini kullanarak p-tipi-Si üzerine filmleri büyütürük, sabit ve değişmeyen diyot analiz I-V, C-V koşullarda yaptığı

gözlem ve ölçümlerde arayüzey film kaplama yöntemlerinden kaynaklı olarak diyot parametrelerindeki değişimler belirtildi (Orak, 2016).

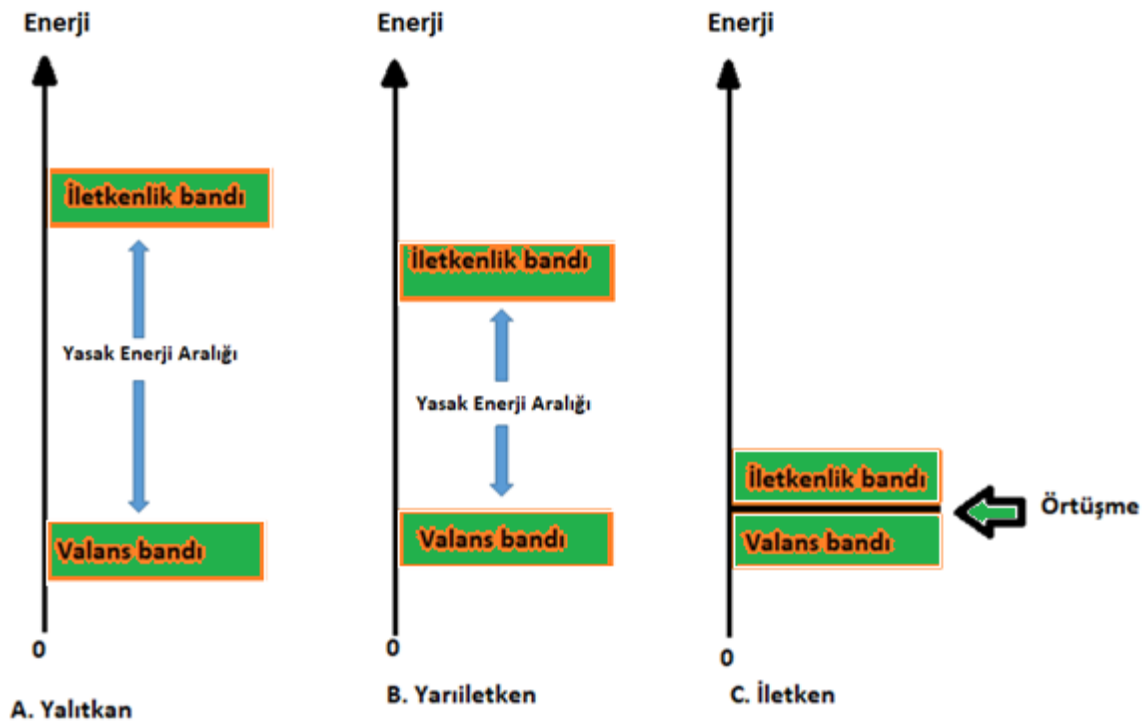
Tris (2,2'-bipiridin) Rutenyum (II)-kompleks ince filmin p-tipi kristal silikon (Si) üzerine spin kaplama (Al/Ru(II)/p-Si) ile biriktirilmesi yöntemi ile kaplanıldı. İlk olarak, organik ince filmin optik özellikleri, optik absorpsiyon spektrumundan belirlendi ve bant aralığının 2,74 eV olduğu bulundu. Daha sonra Al/Ru(II)/p-Si fotodiyotun idealite faktörü n , bariyer yüksekliği Φ_b^{I-V} , difüzyon potansiyeli, bariyer yüksekliği Φ_b^{C-V} gibi elektriksel parametreleri ve taşıyıcı konsantrasyonu N_{bir} , oda sıcaklığında akım-gerilim ve kapasitans-gerilim ölçümü ile hesaplandı. Bu sonuçlar, fabrikasyonu yapılan Al/Ru(II)/p-Si'nin fotovoltaiik ve fotodedektör alanlarında ışığa karşı tepki gösterdiğinden fotodiyot olarak kullanılabileceğini ortaya koymaktadır (Yıldırım, 2017).

Kompleks yapıların diyot üzerinde karakterizasyonlarını anlayabilmek amacıyla Ru(II) ve Alq3 kompleks-organik molekülleri döndürerek kaplama/spin coating ve termal buharlaştırma teknikleri kullanılarak yarıiletken malzeme olan p-tipi-Si alttaş üzerine shottky diyot fabrikasyonu yapıldı. Kompleks moleküllerin diyot akım iletimine etkisi incelenirken bir adet referans olarak arayüzeysiz Al/p-Si/Al üç adet arayüzey madde miktarları değişen Al/Ru(II)+Alq3/p-Si/Al shottky diyot fabrikasyonu gerçekleştirildi. Arayüzey solisyonlarının optik özellikleri analiz edilerek bant aralığı 2,23 eV, 2,31 eV, 2,33 eV olarak hesaplanıldı (Şahinkaya, 2020).

2.1. Yarıiletkenler

Günlük yaşamımızın her alanında yarıiletkenler ile karşılaşmaktayız. Akıllı cihazların günlük hayatta yer alması, uzaktan kontrol edilebilir sistemlerin geliştirilmesi ve insanların tüm işlerini oturdukları yerden yapmaları yarıiletkenlere olan ihtiyacı giderek artırmıştır. Teknolojik bağımlılığın giderek arttığı dünyada yarıiletkenlere duyulan ihtiyacın gün geçtikçe daha da artması beklenmektedir. Sadece inorganik tabanlı malzemeler değil aynı zamanda organik tabanlı malzemelerden de bu tür özelliklere sahip yarıiletken malzeme üretilmesi giderek yaygınlaşmaktadır. Farklı fiziksel uyaranlar altında bu malzemelerin ve yapıların incelenmesi ayrı bir araştırma konusu olmuştur.

Katı malzemeleri iletkenliklerine göre üç grupta sınıflandırabiliriz. Bunlar; iletkenler yalıtkanlar, iletkenler ve yarıiletkenlerdir. Bu üç grubun oluşmasındaki etken enerji-band diyagramları arasında temel farklılıklardan kaynaklanmaktadır. Valans bandı tamamen elektronlar ile dolu ve iletim bandı tamamen boş olan katılara “yalıtkan” adı verilmektedir. Yasak enerji aralığının en geniş olduğu malzemeler yalıtkanlardır. Yasak enerji aralığının geniş olması elektronların hareketini kısıtladığı için iletim oda sıcaklığında gerçekleşmez. Oda sıcaklığında yasak enerji aralığı durumlarına göre iletim durumlarını yarıiletkenler ve iletkenler takip eder. Yarıiletkenlerde sıcaklık artışı meydana geldikçe valans bandındaki elektronlar iletim bandına ısı olarak uyarılmış olacaktır. Sonuçta ise, iletim bandındaki elektronlar ile valans bandındaki elektronlar tarafından geride kalan yüklü boşlukların iletkenliğe katkısı olmaz. İletkenlerde valans bandı ve iletim bandı birbiri ile çakışık oldukları için elektronlar bu yapılar içerisinde rahat hareket ederler.



Şekil 2.1. İletken, yarıiletken ve yalıtkan malzemelerin $T=0$ K de enerji band aralıkları (E_g)(Streetman & Banerjee, 2006)

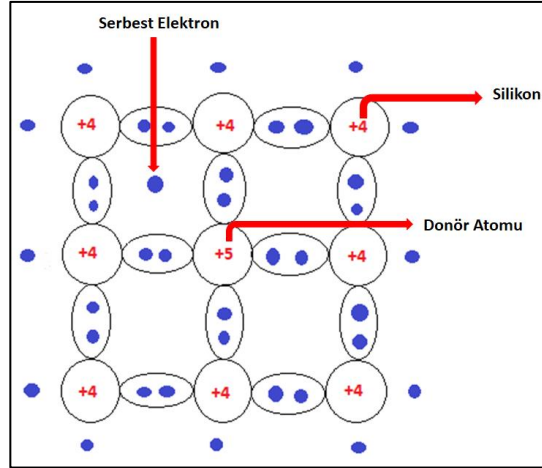
Kısaca özetlemek gerekirse yasak enerji aralıkları 0,05 eV'tan daha küçük olan organik, inorganik malzemeler metal, yasak enerji aralıkları 3 eV'tan büyük olanlar yalıtkandırlar. Yasak enerji aralığı 0,07 eV ile 3,0 eV aralığında değişen malzemeler ise yarıiletkenler olarak adlandırılmaktadırlar.

Serbest elektron sayısı ve bu elektronların mobilitesi o malzemenin iletkenliği hakkında önemli bilgiler vermektedir. İletken malzemelerde serbest elektronların sayısı oldukça fazladır ve sıcaklıktan etkilenmez. Sıcaklık artıkça malzemenin direnci artmakta ve mobilite azalmaktadır. Yarıiletkenler de atomlar arasındaki bağ daha kuvvetlidir. Bunun sebebi ise, Valans yörüngelerindeki dolu olduğundan kaynaklanmaktadır. Yarıiletkeni iletken hale getirmek için ise bu bağları bozabilecek bir enerji uygulamak gerekmektedir.

Yarıiletken bir malzemedan bir elektron bir fotonun soğrulması ile koparsa yarıiletken iletkenlik kazanmış olur. Fotonun enerjisi yasak enerji aralığından büyük ise elektronlar valans bandından iletim bandına çıkabilir, aksi durumda elektronun hareketi valans bandı ile sınırlıdır. Yalıtkanlarda valans elektronları arasında güçlü bağların varlığı, buradaki elektron hareketliliğini sınırlayarak, elektriksel iletim mekanizmasını olumsuz etkilemektedir.

2.2. N-Tipi Yarıiletkenler

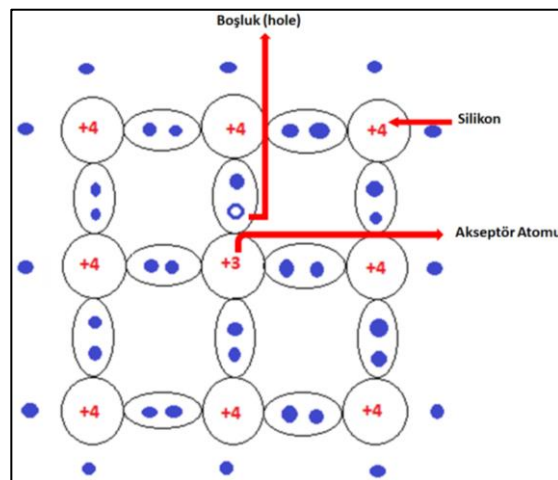
4A grup atomlarından olan Silikon atomu kristal yapıda olup son orbitalinde dört elektronu bulunduran ve dört kovalent bağ yapma özelliğine sahip bir yarıiletkendir. Kendisinden sonra ki grup yani 5A grubundaki herhangi bir atom ile kovalent bağ kurduğunda 5A grubundan gelen bir elektron fazlalığı oluşmaktadır. Oluşan bu yapıda kristal içine verilen bu elektron kaynaklı olarak bu tür atomlara verici atomlar denir. Kristalde son durumda negatif yük fazlalığı olup akım iletimi bu yükler üzerinden gerçekleşecektir. Bu olaya katkılanma ve oluşan bu tür yapılara da n-tipi yarıiletken denir.



Şekil 2.2 Katkılı N tipi yarıiletken

2.3. P-Tipi Yarıiletkenler

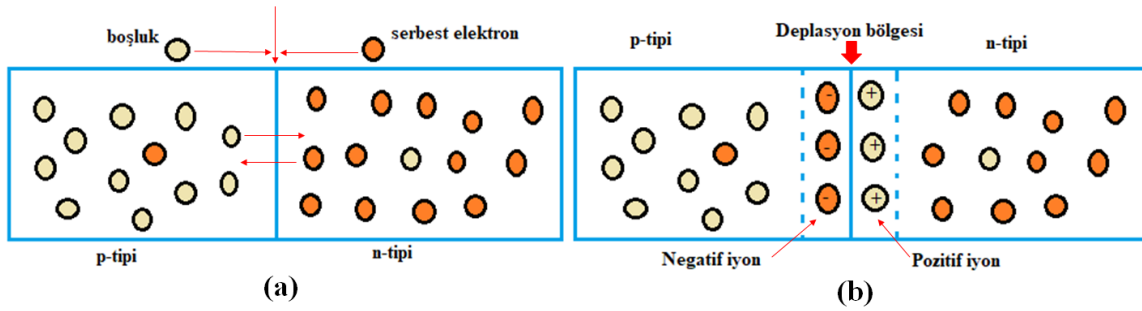
4A grup atomlarından olan Silikon atomu kristal yapıda olup son orbitalinde dört elektronu bulunduran ve dört kovalent bağ yapma özelliğine sahip bir yarıiletkenidir. Kendisinden önceki ki grup yani 3A grubundaki herhangi bir atom ile kovalent bağ kurduğunda 3A grubundan gelen bir elektron eksikliği oluşmaktadır. Oluşan bu yapıda elektron eksikliğinden kaynaklı olarak oluşan bu bağ eksikliğine boşluk (hole) adı verilmektedir. Bu tür atomlara alıcı atomlar denir. Kristalde son durumda boşluk yani pozitif yük fazlalığı olup akım iletimi bu boşluklar üzerinden gerçekleşecektir. Bu olaya katılanma ve oluşan bu tür yapılara da p-tipi yarıiletken denir.



Şekil 2.3. Katkılı P tipi yarıiletken

2.4. P-N Eklemi

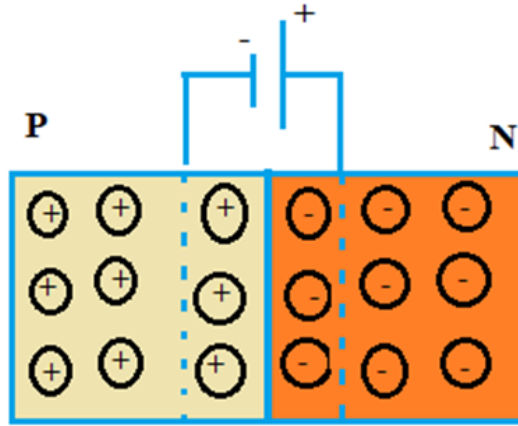
Yarıiletkenlerden faydalanma biçimi bunları farklı biçimde katkılayarak N-tipi veya P-tipi oluşturduktan sonra bu iki yapıyı bir araya getirerek kontak oluşturulması ile gerçekleştirilir. P-N yarıiletkenlerin birleştirilmesinden sonra, P tarafındaki boşlukların ve N tarafındaki elektronların yani yük yoğunluklarının farklı olmasından kaynaklı (E_f seviyesi farklı) olarak yük dağılımı denge durumuna gelineye dek (fermi seviyesi eşitleninceye kadar) bir yük alış-verişi olur.



Şekil 2.4. p-n ekleminin (a) tüketim bölgesi (b) şematik gösterimi

Bu N tarafındaki elektronların P tarafına geçerek oradaki boşluklarla birleşmesi ile olmaktadır. N tarafından ayrılıp P tarafına geçen elektronlar (boşluklar) arkalarında pozitif (negatif) ve hareketsiz iyonlar bırakır. Hareket halindeki yüklerden kurtulan bu bölgeye tüketim bölgesi denir. Bir elektrik alan altında elektronların ve iyonların hareketinden sonra bir denge durumu söz konusudur.

P ve N tipi yarıiletken birleşimi aynı yapı içerisinde oluşturulacağından P ve N tipi arasında bir arakesit (Şekil 3.4 (b)) yüzey yani alan oluşacaktır. Bu alan, fazla yük geçişlerinin eklemi aşmasına bir engel oluşturur ve tüketim bölgesinde iç potansiyel veya temas kaynaklı bir gerilim oluşturur. Temas geriliminin değeri bazı parametrelere bağlı olup yarıiletken bölgelerinin katkılanma yoğunluklarına, sıcaklığa ve yarıiletkenin cinsine göre değişen bir parametredir. P-N ekleminin iki tarafında farklı taşıyıcı yoğunluklarının bulunmasından dolayı denge durumuna gelineye kadar yük geçişi olacaktır.

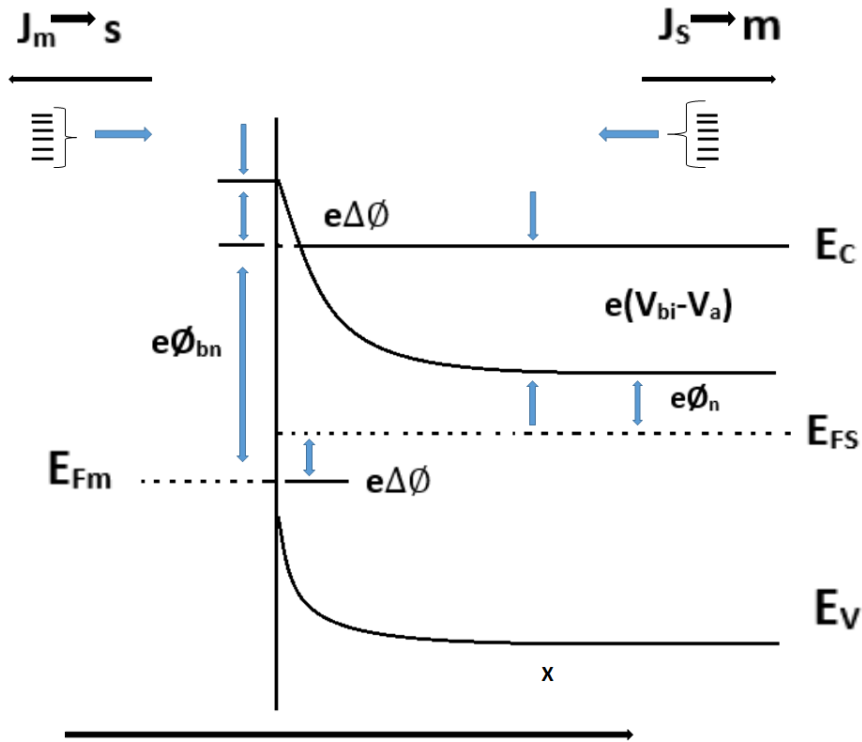


Şekil 2.5. Tüketim bölgesi

P ve N tipi yarıiletkenlerin birleştirilmesinden sonra, elektron ve boşluklar yoğunluk olarak yüksek bölgeden, yoğunluk bakımından düşük bölgeye doğru difüzyon akışı gerçekleştirirler. Azınlık taşıyıcılar alan etkisi ile karşı bölgeye geçerken çoğunluk taşıyıcılar difüzyonla karşı bölgeye geçmektedir. P-N eklemine bir dış uyaran ile gerilim uygulanmadığı sürece dengede durumundadır ve akan akım sıfırdır.

2.5. Termiyonik Emisyon Teorisi

Termiyonik emisyon teorisi sıcak bir yüzeyden elektron koparılması olayı ile ilişkilidir. Eğer yüzey katot olarak kullanılıyorsa ve tüm koparılan elektronlar dikkate alınırsa bu katodun doyma emisyonunu verdiği bilinmektedir. Bu akım yoğunluğuna doyma akım yoğunluğu J_s denir. J_s ifadesi Richardson eşitliği olarak bilinen katot iş fonksiyonu Φ_B ve katot sıcaklığı T cinsinden ifade edilir. Termiyonik emisyon teorisi, termal denge durumunda, bu olaydan etkilenmemesi için doğrultucu kontağa ait olan potansiyel engelinin kT enerji değerinden çok yüksek olabileceği varsayımına dayanarak tüketim bölgesindeki taşıyıcı çarpışmalarının da fazla olabileceği varsayılarak oluşturulmuştur (Aydoğan, 2004).



Şekil 2.6. MY eklemine ait enerji–band diyagramı

Metal Schottky dioduna bir doğru beslem gerilimi uygulandığı zaman engel yüksekliğinde bir azalma olacak ve yarıiletken den metale engeli geçen elektronların akım yoğunluğu artacağından I akım ifadesi,

$$I = I_0 \left[\exp \left(\frac{eV}{kT} \right) - 1 \right] \quad (2.1)$$

olacaktır.

2.6. Schottky Kontak

Belirli fiziksel şartlar oluşturulduktan sonra metal ile yarıiletken arasında oluşan kontağa Schottky kontak denilir. PN eklemının özellikleri ve kontağın doğrultucu özellikleri oldukça benzerdir. Oluşturulan kontağın ideal olması için yüzey de oluşturulan malzemenin pürüzlülüğü ve temiz olması gerekmektedir (Sze, 1981). Kontak haline getirilen malzemeler arasında Fermi enerji seviyeleri eşitleninceye kadar aralarında bir yük alış-verişi olur (Yamamoto et al., 1968). Bu her iki malzemenin yasak enerji aralığı ile

ilişkilidir. MY kontaklar bu malzemelerin iş fonksiyonuna göre omik ve doğrultucu kontak olmak üzere ikiye ayrılır.

Bir MY kontağının iş fonksiyonu (Φ_m) önemli bir parametre olup kristalde metalin yüzeyinden kinetik enerjisi sıfır olacak şekilde bir elektronu koparmak için gerekli olan enerji veya bir elektronu enerji bandındaki Fermi enerji seviyesinden (E_F) vakum seviyesine çıkarmak için elektrona verilmesi gerekli olan enerji olarak tanımlanır. Bu tanım yarıiletkenin iş fonksiyonu olan Φ_s için de geçerlidir. Yarıiletkenlerde bir diğer parametre ise elektron çekme eğilimi olarak tanımlanan χ_s parametresidir ve iletkenlik bandının en alt kısmı ile vakum seviyesi arasındaki enerji farkı veya iletkenlik bandının genişliği olarak tanımlanır.

Bir MY kontağın niteliklerini idealite faktörü, engel yüksekliği gibi karakteristik özellikler belirlemektedir.

2.6.1. Cheung Fonksiyonları Yardımı ile Schottky Kontak Parametrelerinin Belirlenmesi

Diyot parametrelerinin belirlenmesinde kullanılan bir yöntemde Cheung (1986) tarafından ortaya konan Cheung yöntemidir. Diyoda uygulanan gerilimin artan değerlerinde $I-V$ eğrisinde lineerlikten sapmaya neden olan R_s seri direncin varlığı gözlenecektir. Cheung yöntemleri bu seri direncin bulunmasına olanak sağlamaktadır (Cheung, 1986).

Denklem,

$$I = I_0 \left[\exp\left(\frac{eV - IR_s}{kT}\right) - 1 \right] \quad (2.2)$$

olacaktır. Denkleminde 1 değeri $V \gg 3kT/e$ için ihmal edileceğinden ve ortaya çıkan denklemin doğal logaritması alındığında,

$$\ln(I) = \ln(I_0) + \frac{eV}{nkT} - \frac{eIR_s}{nkT} \quad (2.3)$$

Oluşan bu denklemde potansiyel ifadesi yalnız bırakılıp V 'nin $\ln(I)$ göre türevi alınırsa,

$$\frac{dV}{d\ln(I)} = \frac{nkT}{e} + IR_s \quad (2.4)$$

Şeklinde elde edilen denklem birinci Cheung fonksiyonudur. Bu denklemden de $dV/d\ln(I)$ - I grafiği belli bir kısımda bir doğru verir. R_s değeri bu doğrunun eğiminden elde edilir ve $dV/d\ln(I)$ ekseninde $I = 0$ için dikey eksen kesme noktasından n idealite faktörü hesaplanılabilmektedir. Cheung'ın ikinci fonksiyonu için ise I_0 'ın yerine yazılması ile oluşan denklem,

$$\ln(I) = \ln(AA^*T^2) - \frac{e\Phi_b}{kT} + \frac{eV}{nkT} - \frac{eIR_s}{nkT} \quad (2.5)$$

Denklemini oluşacaktır. Bu denklemde V yalnız bırakılırsa,

$$H(I) = V - \frac{nkT}{e} \ln\left(\frac{1}{AA^*T^2}\right) \quad (2.6)$$

$$H(I) = n\Phi_B + IR_s \quad (2.7)$$

Böylelikle Cheung fonksiyonları elde edilmiş olacaktır. $H(I)$ - I grafiğinden lineer bir çizgi elde edileceği bir gerçektir. Elde edilen bu lineer çizginin eğim değeri R_s seri direncini vermektedir. Eğim çizgisinin $H(I)$ eksenindeki kesme noktası $I = 0$ için $n\Phi_b$ değeridir. Birinci fonksiyonda bulunan idealite faktörü diğer fonksiyonda $n\Phi_B$ 'de yerine konulması ile engel yükseklği ifadesi elde edilmiş olacaktır.

2.6.2. Norde Fonksiyonları Yardımı ile Schottky Kontak Parametrelerinin Belirlenmesi

Schottky diyot eklemının elektriksel parametrelerinin belirlenmesi için uygulanan diğer bir hesaplama fonksiyonu Norde (H. Norde, 1979) fonksiyonudur. Norde fonksiyonu, metal ile yarıiletken arasındaki eklemının ideal olduğunu varsaydığı için ideal olmayan ($n>1$) durumlarda eklem parametrelerini bulmak için kullanılacak uygun bir fonksiyon değildir. Norde tarafından $n=1$ durumundaki diyotların karakteristiği için seri direnç ve engel yükseklğini tanımlayan $F(V)$ fonksiyonu daha uygun bir fonksiyondur. Bu yöntem sadece

sıcaklık altında alınan akım-gerilim eğrisinden elde edilen R_s ve Φ_B parametrelerini vermektedir (Kacuş, 2014).

$$F(V) = \frac{V_0}{\gamma} - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{I(V)}{A A^* T^2}\right) \quad (2.8)$$

Bu denklemdeki γ , n değerinden büyük ilk tamsayı değeri olarak kabul edilir. $I(V)$ akım-gerilim ölçümlerinden elde edilen değerdir. Engel yüksekliği, $F(V)$ - V grafiğinin en düşük noktası tespit edildikten sonra gerekli hesaplamalar yapılır. Engel yüksekliği;

$$\Phi_B = F(v) + \frac{V_0}{\gamma} - \frac{kT}{q} \quad (2.9)$$

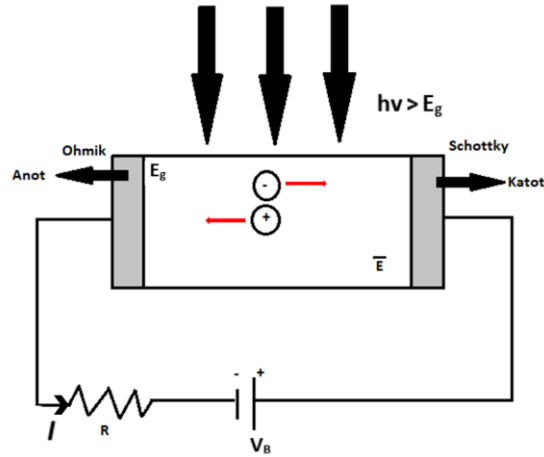
ile verilir. Buradaki $F(V_0)$, $F(V)$ değerinin en düşük noktası olup ve V_0 değeri bu düşük noktadaki gerilimin değeridir (Turmuş, 2014)

2.7. Fotodiyot ve Güneş Pili Uygulamaları

Fotodiyotlar üzerlerine düşen ışığı elektrik enerjisine çeviren aygıtlardır. Bu işlevi P-N eklem diyotlar ile yapılabilir. P-N ekleminde diyot doğru beslem bölgesine göre yönlendirildiğinde N- tipi yarıiletkenlerdeki serbest elektronlar difüzyon geçişi ile P bölgesine geçer. Elektronların valans bandına geçmeleri enerji kayıplarına sebep olmaktadır. Bu enerjinin bir miktarı ışık enerjisine (fotonlara) dönüşür. Fotodiyotlar ters beslem altında çalışacak şekilde hazırlanırlar. Fotodiyotun P tarafına dış yükün negatif ucu, N tarafına dış yükün pozitif ucu gelecek şekilde bağlanır. Fotodiyotlar ışığa oldukça duyarlıdır ve üzerine yeterli miktarda ışık aldığında çalışmaya başlar. Fotovoltaik sistemler fotodiyotların bir çeşididir.

P-N veya N-P eklemleri herhangi bir diyotta ters beslem altında daima sızıntı akımı oluşur. Bu akımı artırmak için diyotun durumuna göre taşıyıcı sayısını değiştirmek gerekir. Taşıyıcı sayısındaki değişim yoğunlukla alakalı olmayıp enerjinin değişimi ile alakalı bir durumdur. Taşıyıcı tipine bağlı olarak oluşturulan harekette süreklilik yoktur ve bu azınlık taşıyıcılar eklem bölgelerini geçmeden tekrar kararlı hale gelebilirler. Bu nedenle akımı

oluşturmada aygıt içerisinde sürekli bu tarz durumlar söz konusudur. Bu sorunu çözmenin en kısa yolu, azınlık taşıyıcıların eklem bölgesinde birleşmemesi için dışardan enerji verilmesidir. Fotodiyot aygıtlarda bu mantıkla güneş ışığındaki fotonları kullanarak çalışırlar.

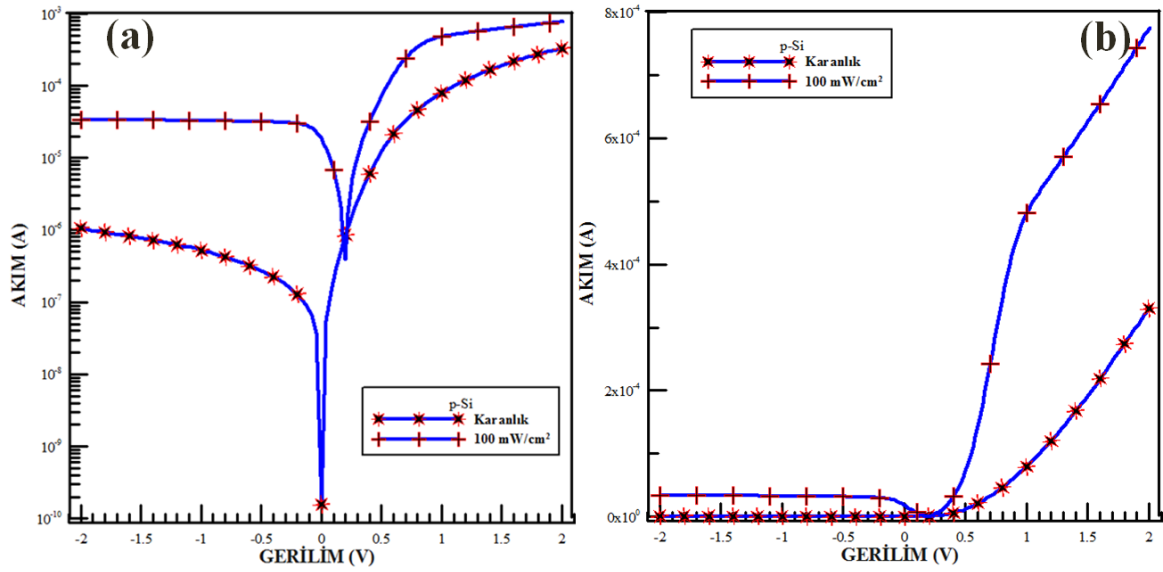


Şekil 2.7. Fotodiyotta elektron, boşluk çifti hareketi

Fotodiyota dışardan bir enerji verildiğinde valans elektronlarının enerjisi artar. Bu uygulanan enerji malzemenin yasak enerji aralığından büyük ise elektronlar iletim bandına geçerler. Böylece bu elektron valans bandında bir boşluk bırakır. Uygulanan enerji devam ederse bu oluşan boşluk hemen başka bir elektronla dolar, boşluğun yerine geçen elektron alanında tekrar bir boşluk oluşturur. Enerjisi artan her bir elektron iletim bandına geçerek, ardında birçok boşluk bırakarak bir elektrik alan ve dolayısıyla bir potansiyel oluşturulmuş olur. Fotodiyot prensipte bir akım kaynağıdır ve yeterli miktarda ışık aldığında çalışmaya başlar. Temel olarak, fotodiyotun çalışması diyot eklemi içinde foto taşıyıcıların yer değiştirmesine dayanır. Doğrultucu ekleme ışık verildiği an, yeterli enerjisi olan fotonlar soğrulur. Burada meydana gelen fazlalık elektronlar ve boşluklar difüzyon eklem bölgesi ile ayrılır ve diyodun farklı bölgelerinde toplanırlar. Fabrikasyonu yapılan bu diyot bir dış yüke bağlanırsa soğutulan fotonların ve meydana gelen taşıyıcıların sayısı ile orantılı olacak şekilde bir akım oluşur. Yani fotodiyotlar, üzerlerine düşen ışık miktarı arttıkça ters akımların artması prensibine dayanarak yapılmışlardır. Fotodiyotlar, ışık şiddetini elektriksel işarete en etkili şekilde çevirmektedirler. Çevirme işleminin etkinliği fotodiyodun akım-voltaj karakteristiğine bağlıdır.

2.7.1. Fotodiyot ve Güneş Pili Uygulamalarının Karakteristiği

Bir fotodiyotun akım-gerilim (I-V) karakteristiği diyot eklemesindeki akım taşıma işlemleri ile belirlenir. Metal-yarıiletken eklemleri ve P-N eklemlerine bağlı olarak fotodiyotlarda farklı akım taşıma mekanizmaları meydana gelebilir (Bıyıklı, 2004).



Şekil 2.8. Diyot ve güneş piline ait (a) yarı-logaritmik I-V grafiği, (b) Lineer I-V grafiği grafiği

Fotodiyotların akım-voltaj karakteristikleri şekil olarak normal bir diyot gibidir. Karanlık ortamda fotodiyottan akan akım, termal yoldan azınlık taşıyıcılarıyla oluşan akımdır. Bu akıma karanlık akım olarak adlandırılır. Şekil 2.8’de görüldüğü gibi Metal/Yarıiletken eklem, karanlıkta normal diyot özelliği gösterirken ışık altında fotodiyot özelliğini göstermektedir. Işık altında fotodiyotun voltajı pozitif bölgede kesmesi onun fotovoltajik özellik gösterdiği anlamına gelmektedir. Yukarıda ki şekilde 100 mW/cm² ışık altında voltaj eksenini pozitif bölgede ve 0-0,5 V arasında kestiğini ve bu değer bize açık devre gerilimini (V_{oc}) değerini verdiği açıkça göstermektedir.

Aydınlatma altındaki diyotun akım-voltaj karakteristiğinde, eğrinin voltaj eksenini kestiği değere açık-devre voltajı V_{oc} denir ve akımın sıfır olduğu durumda belirlenir.

$$V_{oc} = \left(\frac{nkT}{q} \right) \ln \left[\left(\frac{I_{sc}}{I_s} \right) + 1 \right] \quad (2.10)$$

Şeklinde ifade edilir.

Bir fotodiyodun seri direnci, kontakların ve altlığın hacminin direncidir. Fotodiyotun doğrusallığını belirlenmesinde kullanılır.

$$R_s = \frac{V(+\infty)}{I(+\infty)} \quad (2.11)$$

Şönt direnç, fotodiyota besleme voltajı uygulanmadığı durumlardaki gürültü akımını tanımlamak için kullanılan bir spesifik terimdir. Diğer bir deyişle şönt direnci, başlangıcı $V=0$ 'da olan fotodiyodun akım-voltaj eğrisinin eğimidir.

$$R_{sh} = \frac{V(-\infty)}{R(-\infty)} \quad (2.12)$$

Ohm yasası; elektrik akımı şiddeti, gerilim ve direnç arasındaki ilişkileri tanımlar. Bir iletkenin iki ucu arasındaki potansiyel farkının, iletkenen geçen akım şiddetinin oranına eşittir.

$$“Direnç = \frac{Potansiyel\ fark}{Akım\ şiddeti} = \frac{V}{A} \quad (2.13)$$

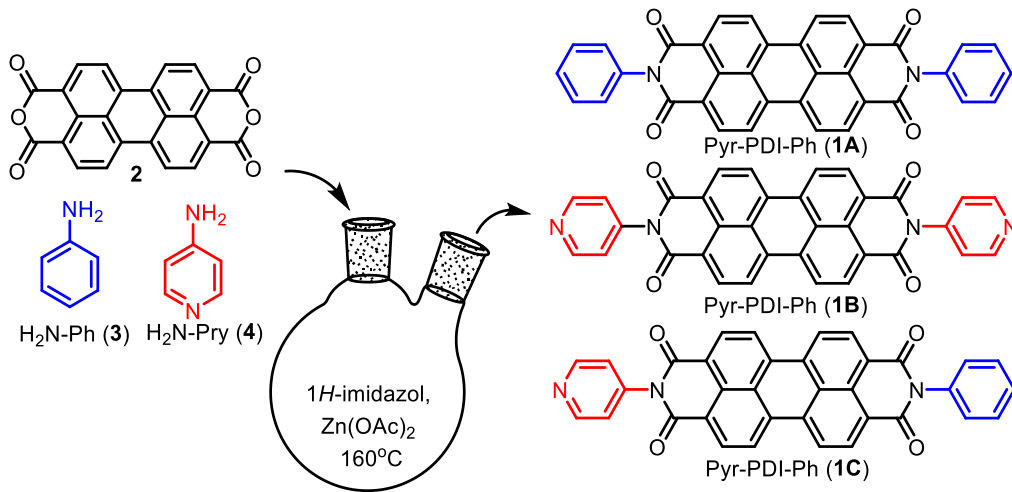
3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Organik Moleküllerin Eldesi

Malzeme üretimi üzerine çalışmalar yapan araştırma gruplarının üzerine sıkça çalıştıkları önemli kromofor grupları ihtiva eden organik molekül sınıfları arasında ilk sıralarda 3,4:9,10-perilentrakarboksilikdianhidrit (**2**,PDI) grupları ihtiva eden moleküller gelmektedir. PDI grubu ihtiva eden moleküller özellikle fotokimya özelinde çalışmalarda kullanılmak üzere malzeme üretmek için oldukça kullanışlı bir kromofor gruptur. Bu yapıların değişik gruplarla simetrik veya asimetrik türevlerinin sentezi hem organik kimya çeşitliliğini artırmakta hem de bu olağan üstü yapının fotofiziksel olarak yararlılığının artırılmasına olanak sağlamaktadır. Bu bağlamda bu tez çalışmasının bu kısmında öncelikli olarak yeni simetrik ve asimetrik PDI türevlerinin sentezi gerçekleştirilmiştir (Şekil 4.1). Çalışma kapsamında farklı doğaya sahip aromatik amin türevlerinin PDI ile reaksiyonları incelenmiştir. Simetrik PDI türevleri Ph-PDI-Ph (**1A**) ve Pry-PDI-Pry (**1B**), literatür verileri ışığında ilgili amin türevinin 2 ekivalent miktarına karşılık PDI türevinin 1 ekivalent miktarının 1*H*-imidazol içerisinde Zn(OAc)₂ katalizörlüğünde gün aşırı kaynatılmaları sonucunda elde edilmişlerdir (Kolhe, 2010)(Pagano, 2017). Hedef simetrik PDI türevlerinin sentezi başarılı bir şekilde gerçekleştirilmiştir. Diğer bir hedef ürün asimetrik PDI türevi Pry-PDI-Ph (**1C**)'nin sentezi için de yine benzer yaklaşımla; amin türevleri Ph-NH₂ (**3**), Pry-NH₂ (**4**) ve PDI (**2**)'nin birer ekivalent miktarı 1*H*-imidazol içerisinde Zn(OAc)₂ katalizörlüğünde gün aşırı kaynatıldı. Reaksiyon sonucunda hedef asimetrik PDI türevi Pry-PDI-Ph (**1C**) oldukça düşük bir verimle yan ürün olarak elde edilirken, simetrik PDI türevleri **1A** ve **1B** ise ana ürünler olarak elde edildi (Şekil 4.1).

Sentezi hedeflenen asimetrik PDI türevlerinin sentezinde elde edilen bulgular bu molekülün asimetrik türevlerinin elde edilmesi ile alakalı sentetik organik kimya için önemli sayılabilecek çıktılar vermiştir. Şöyle ki, PDI iskeletinin reaksiyon eğilimi reaktivitesi daha yüksek olan amin türevleri ile öncelikli olarak reaksiyona girme

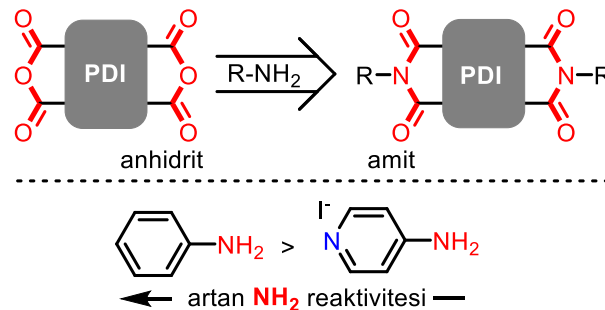
yönündedir. Bu çalışma kapsamında, PDI kromofor gruplarının aren ve heteroaren grupları içeren aromatik aminlerle türevlendirilmesi sonucu simetrik ve asimetrik PDI türevlerinin elde edilmesi hedeflenmiştir.



Şekil 3.1. PDI türevinin sentezi

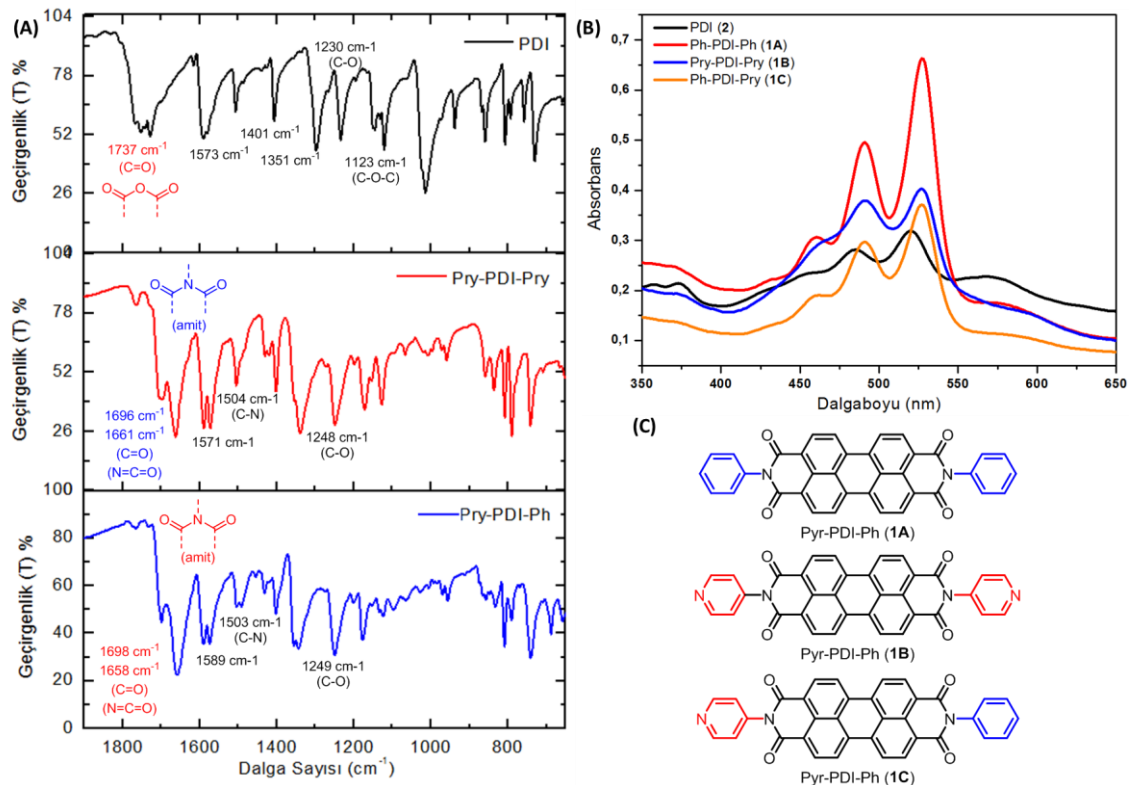
Bu sentez temelde anhidrit grubu içeren PDI moleküllerinin aminlerle reaksiyonu sonucunda bir mol su çıkışıyla amit bileşiklerinin elde edilmesi esasına dayanmaktadır. Dolayısıyla amin türevlerinin reaktivitesi oluşacak ürünlerin verimini doğrudan etkilemektedir. Aromatik aminlerin reaktiviteleri alifatik aminlere göre konjugasyon nedeniyle oldukça düşüktür. Aromatik aminlerin ise aromatik halkaya süstitüe durumdaki elektron çekici veya sağlayıcı grupların varlığına göre değişiklik göstermektedir. Bütün bu bilgiler ışığında kullanılan aren ve heteroaren aminlerin reaktiviteleri şekil 3.2’de gösterildiği gibidir. Bu bağlamda, genel doğası itibariyle her ne kadar fotokimyasal çalışmalar üzerinden etkili malzemeler üretilmesinin hedeflendiği bir tez çalışması olsa da genel muhtevası bakımından bu tezin çalışmasının önceliği sentez mekanizmaları ve hedeflenen malzemelerin verim farklılıkları üzerine analitik yorumlar yaparak kıyaslamalı olarak daha büyük ve geniş katımlı çalışmalara mekanistik açıdan projeksiyon tutmaktır. Sentezlenen simetrik ve asimetrik PDI türevlerinin karakterisasyonu ¹H-NMR, FT-IR ve UV-vis spektroskopisi kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Bu aşamada, hedef simetrik PDI türevleri Ph-PDI-Ph (1A) ve Pry-PDI-Pry (1B) için alınan FT-IR, UV-vis ve ¹H-NMR spektrumları literatürle uyumludur (Bknz. Bulgular ve Tartışma). Diğer bir hedef molekül olan asimetrik PDI türevi Pry-PDI-Ph (1C)’nin ¹H-NMR spektrumundan molekülün

yapısıyla alakalı olarak madde miktarının azlığı ve ciddi çözünürlük problemleri nedeniyle sağlıklı veriler elde edilememiştir.



Şekil 3.2. Aminlerin reaktivitesi

Bu bağlamda, asimetrik PDI türevi Pry-PDI-Ph (**1C**)'nin karakterizasyon çalışmaları diğer PDI türevleri **1A** ve **1B** ile çıkış molekülü PDI molekülünün kıyaslamalı FT-IR ve UV-vis spektrumlarına dayatılarak gerçekleştirilmiştir. Buna göre, çıkış molekülü PDI (**2**)'nin yapısında bulunan karakteristik piklerin varlığı sentezlenen simetrik ve asimetrik PDI türevleri Pry-PDI-Pry (**1B**) ve Pry-PDI-Ph (**1C**)'nin FT-IR spektrumunda da göze çarpmaktadır (Şekil 4.3C). Bunların yanı sıra PDI (**2**)'nin ilgili aminlerle reaksiyona girerek hedef amit türevlerini oluşturduğunun en belirgin göstergesi PDI (**2**)'nin yapısında bulunan ve 1737 cm^{-1} 'de ki anhidrit grubuna ait karakteristiktik C=O piklerinin hedef ürünlere ait FT-IR spektrumunda bulunmamasıdır. Bunun yerine hedef PDI türevleri Pry-PDI-Pry (**1B**) ve Pry-PDI-Ph (**1C**)'nin FT-IR spektrumunda, sırasıyla $1696/1661\text{ cm}^{-1}$ ve $1698/1658\text{ cm}^{-1}$ 'de ki karakteristik amit C=O ve N=C=O piklerinin varlığı elde edilen **1B** ve **1C**'in birer amit türevi olduğunu göstermektedir. Yine hedef PDI türevleri Pry-PDI-Pry (**1B**) ve Pry-PDI-Ph (**1C**)'nin FT-IR spektrumunda sırasıyla 1504 cm^{-1} ve 1503 cm^{-1} 'de gelen C-N bağlarına ait etkileşim piklerinin varlığı da spesifik olarak hedef amit türevlerinin oluştuğunu ima etmektedir. Bütün bu veriler hedeflenen ürünlerin elde edildiğinin somut birer göstergesidir (Şekil 4.3A). Özellikle PDI iskeletinin yapısında bulunan amit halkalarına ait (Band I) etkileşim piklerinin $491/528\text{ nm}$ civarında geldiği görülmektedir (Şekil 3.3B). Bütün bu spektroskopik veriler hedef simetrik PDI türevleri **1A** ve **1B**'nin yanı sıra asimetrik PDI türevi **1C**'nin de elde edildiğini göstermektedir.



Şekil 3.3. PDI (2) ve sentezlenen PDI türevlerinin (C, Ph-PDI-Ph (1A), Pyr-PDI-Pyr (1B) ve Pyr-PDI-Ph (1C)) FT-IR (ATR) (A) ve UV-vis (B) spektrumları

3.2. Organik Moleküller

Bu çalışmada kullanılan moleküllerin bütün kuantum mekaniksel hesaplamaları Gaussian 09W (Frisch, 2010) ve GausView 0.5 (Dennington, 2010) paket programlarının Windows versiyonu kullanılarak uzak masaüstü bağlantısıyla Bingöl Üniversitesine ait sunucu üzerinde, yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) kullanılarak yapılmıştır. GausView 0.5 programıyla çizilen moleküller, DFT metodu ile B3LYP hibrit fonksiyoneliyle (Becke'nin üç parametrelili hibrit fonksiyoneli (B3) (AD, 1988) ile Lee-Yang-Parr fonksiyonlarının (LYP) (Lee C, Yang W, 1988) kombinasyonu birlikte etkili çekirdek potansiyeli (ECP) kullanılarak H,O,C,N atomları için 6-31G (d,p) temel seti, ağır atom olan Ru atomu için LANL2DZ (Los Alamos National Laboratory 2 Double-Zeta) (Hay et al Wadt, 1985) temel seti kullanılarak gaz ve sıvı (DMSO) fazda hesaplanmıştır. İlk olarak moleküllerin DFT metoduyla geometrik optimizasyonu gerçekleştirilmiş ve elde edilen kararlı moleküler geometrilerden yola çıkılarak sınır moleküler orbital analizi (FMO) ve bu orbital enerjilerine bağlı bazı kimyasal parametreler belirlenmiştir. Elektronik özellikleri anlamak

için, sıvı fazda (DMSO) soğurma dalga boyları, osilatör kuvvetleri, HOMO–LUMO enerji seviyeleri ve enerji band aralıkları iletkin benzeri polarize edilebilir süreklilik modeli (CPCM) ile yapılan Zamana Bağlı Yoğunluk Fonksiyonel Teorisiyle (TD-DFT) (Runge, 1984) belirtilen metot ve temel setler kullanılarak belirlenmiştir. Ayrıca, moleküllerin elektrofilik ve nükleofilik olarak reaktif olduğu bölgeleri ve molekül yüzeyindeki elektron yoğunluğunu belirlemek için moleküler elektrostatik potansiyel (MEP) yüzey analizleri yapılmıştır.

3.3. p-Si Kristalinin Temizlenmesi

Bu çalışmada kullandığımız silisyum kristaline, fiziksel ve kimyasal kirliliklerin temizlenmesi ve var olan oksit tabakasının minimize edilmesi amacıyla kimyasal temizlik işlemleri uygulanmıştır. Şekil 3.4a’da ki ürün ve cihazlar ile numune kimyasal olarak temizlenmiştir.



Şekil 3.4. (a) Ultrasonik Temizleyici, WiseClean, (b) Termal Buharlaştırma ve İnce Film Kaplama Sistemi, NANOVAK NVTS-400

Numune temizlik prosesi aşağıda verilmiştir;

- a) Ultrasonik karıştırıcı içerisinde aseton ile on dakika yıkanmıştır.
- b) Deiyonize su ile beş dakika durulanmıştır.
- c) Ultrasonik karıştırıcı içerisinde İzoproponal alkol ile on dakika yıkanmıştır.
- d) Deiyonize su ile beş dakika durulanmıştır.
- e) 30 sn HF(1:20) de bekletilmiştir
- f) Deiyonize su ile on dakika durulanmıştır
- g) Son olarak azot gazı (N₂) ile kurutulmuştur.

3.4. Termal Buharlaştırma Yöntemi ile Omik Kontak Oluşumu

Silisyum kristalinin kimyasal temizleme işlemi yapıldıktan sonra kristalin mat yüzeyine Alüminyum metali gerekli temizlik işlemlerinden geçirildikten sonra omik kontak için hazır hale getirilmiştir. Omik kontak doğrultucu olmayan bir kontak türüdür. Ohm yasasına ($V=I.R$) uyar ve kontak direnci mümkün olduğu kadar küçük olmalıdır. Temizlenen Silisyumlar aseton ile yıkanan ve temizlenen alttaşın üzerine konularak kontak için hazır hale getirilmiştir. Yine temizlenen Al metali buharlaştırılmak için termal buharlaştırma potasına yerleştirilip şekil 3.4 (b)'de görüldüğü gibi vakuma alınıp 10^{-6} torr seviyesine gelmesi beklenilmiştir.

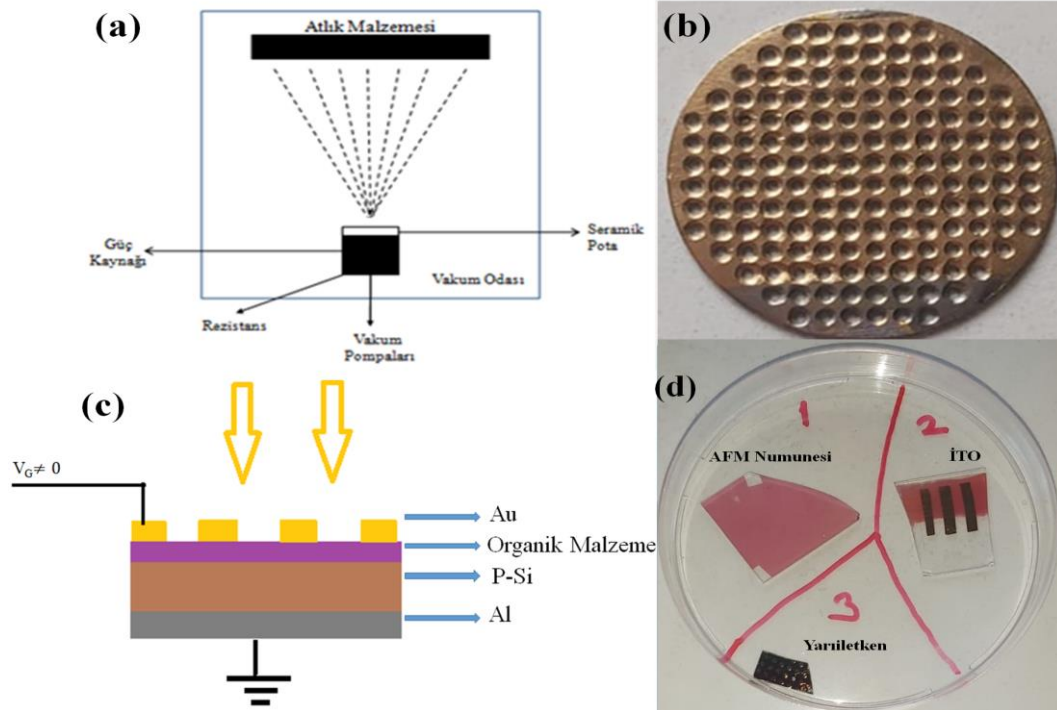
Şekil 3.4'ün (b) görselindeki termal buharlaştırma cihazının vakum altına alınmasından sonra basıncın 6.10^{-6} Torr'a termal buharlaştırma işlemi başlatılarak, metal alüminyumun bulunduğu potaya kademeli bir şekilde artış şeklinde DC uygulanarak 27 volt (V) değerlerinde termal buharlaştırma gerçekleştirilmiş olup yine kademeli bir şekilde doğru akım azaltılıp işlem tamamlanmıştır. Yapılan buharlaştırma sonucunda aygıtta omik kontak değerleri iyi olduğu için termal tavlama yapılmamıştır.

3.5. Termal Buharlaştırma Yöntemi ile p-Si Üzerine Arayüzey Malzeme Büyütülmesi

Hazırlanan organik moleküller kloroform çözücüsünde çözünmediğinden silisyum kristalinin parlak yüzeyine termal kaplama yöntemi (şekil 3.4. (b)) ile arayüzey malzemesi olarak kaplanmıştır. Üç farklı pota yerleştirilen organik malzemelere sırasıyla kademeli olarak artacak bir şekilde DC verilerek 35 V'ta kaplama yapılmıştır. Ardından kademeli olarak verilen akım azaltılıp cihazın tekrar vakuma yani 6.10^{-6} Torr'a gelmesi beklenilmiş ve bu işlem diğer organik malzemeler için uygulanmıştır. Potlardaki organik malzeme partikülleri diğer malzemelerin arayüzey malzemesi olarak kaplamaması için botlar alüminyum folyo ile kaplanıp olası deneysel hatalar önlenmiştir.

3.6. Doğrultucu Schottky Kontak

Parlak yüzeyleri organik malzemeler ile kaplanmış Silisyumların yüzeyi üzerine 1 mm yarıçaplı metal maske yerleştirilmiştir. Hazırlanan maske altaşın yüzeyine yapıştırıldıktan sonra altaş potaya yerleştirilmiştir.



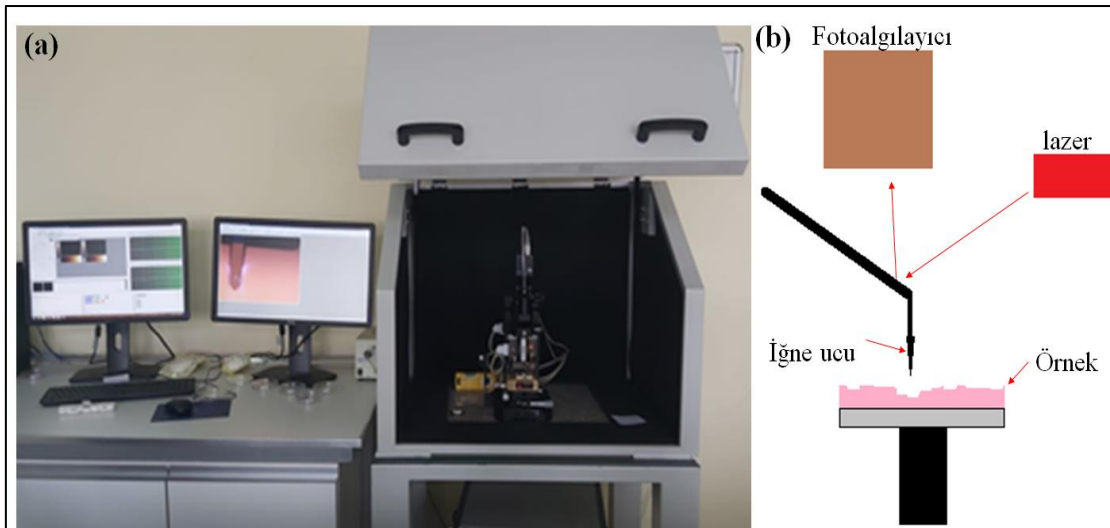
Şekil 3.5. (a) Termal buharlaştırma sistemi (b) Nokta kontak (c) Yarıiletken tabanlı aygıtın şematik görüntüsü (d) Fabrikasyonu tamamlanan numune örnekleri

Kontak için gerekli temizlik işlemlerinden geçirilen Au (Altın) metali pota yerleştirilmiştir. Vakuma alınan termal buharlaştırma cihazının 6.10^{-6} Torr'a gelmesi beklenilmiştir. Ardından istenilen değere gelen termal buharlaştırma cihazı ile kademeli artırılan doğru akımla 30 V'ta kaplama yapılmıştır.

Termal buharlaştırma cihazı ile Altın metali kaplanarak doğrultucu kontak oluşturulmuştur. Doğrultucu kontağın oluşturulmasıyla sırasıyla D1, D2 olarak isimlendirilen Au/Ph-PDI-Ph/p-Si/Al ve Au/Pyr-PDI-Ph/p-Si/Al aygıt yapıları elde edilmiştir.

3.7. Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) ile yüzey morfolojisi

Üzerine büyütülen herhangi bir malzemenin yüzey pürüzlülüğünü ölçmek için 1986 yılında IBM laboratuvarındaki AFM cihazı geliştirilmeye başlanmıştır. Esasında bir ince tip ve lazer optimizasyonuna dayanan ve piezoelektrik yöntemler kullanılarak geliştirilen bir ölçüm sistemidir. Son zamanlarda özellikle nanoteknolojinin gelişmesi ile oldukça sık kullanılan bir karakterizasyon cihazı olmuştur. Herhangi bir yüzeye kaplanan malzemenin yüzey morfolojisi AFM cihazı ile taranabilir. Böylelikle hem iki boyutta hem de üç boyutta yüzey taraması yapılmasına uygun bir cihazdır (Aydoğan, 2011).



Şekil 3.6. (a) Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) (b) temsili gösterimi

Şekil (a)'da bir AFM cihazı gösterilmiştir. Şekil (b)'de çalışma prensibinin temsili şekli gösterilmiştir. İğne yüzeye yaklaştırıldığında, yüzey ve bu iğne arasında çekim kuvveti oluşur. Bu çekim kuvveti iğnenin yüzeye doğru kaymasına ve iğne yüzeye daha da yaklaştırıldığında, yüzeye temas etmiş gibi bir itme kuvveti meydana gelmekte olup iğnenin yüzeyden dışarı doğru kaymasına sebebiyet vermektedir. AFM aygıtının ucunda kullanılan iğne, bakılmak istenen yüzeylere göre farklılık gösterebilir. İğne ucu ile yüzey arasında oluşan bu çekim kuvveti; numunenin kendine özgü yapısına, prop ucuna ve yüzey ile arasındaki uzaklığa bağlıdır. Sonuçta nano boyutta kaplanan numunenin yüzey morfolojisi, faz farklılıkları, partikül boyutu, elektriksel ve manyetik alan yönü gibi farklı fiziksel özelliklerin incelenmesine yardımcı olmaktadır.

3.8. Farklı Fiziksel Uyarılara Bağlı Diyot Karakteristikleri

3.8.1 Işık Şiddetine Bağlı Ölçümler

Bu çalışmada hazırlamış olduğumuz aygıtların elektriksel karakterizasyonunu incelemek için farklı aydınlatma şiddetleri altında akım-voltaj ölçümleri yapılmıştır. Ölçümler için oda sıcaklığında Keithley 2400 güç kaynağı kullanılmıştır. Silisyum altlık üzerine yapılan Schottky diyotlara -2 V ile +2 V arasında voltaj uygulanarak akım ölçümü yapılmıştır.



Şekil 3.7. (a) Akım-Gerilim Solar Simülatorü / Probe Station, (b) Kryostat cihazı-turbo vakum pompası, Keithley 2400, Güç kaynağı ve sıcaklık kontrol ünitesi, (c) Empedans Analiz Cihazı 4192A Model YHP Marka LF 5 Hz - 13 MHz

Fabrikasyonu yapılan diyotların karanlıkta ve farklı ışık şiddeti altındaki akım-gerilim (I-V) karakteristiğini belirlemede yapay güneş ışığı ve güç kaynağı (Şekil 3.7a) kullanılmıştır. Bu güç kaynağıyla alınan ölçümler Labview programıyla kontrol edilmiştir.

3.8.2. Sıcaklığa Bağlı Ölçümler

Optiksel veya optiksel olmayan malzemelerin elektriksel ya da elektriksel olmayan malzemelerin karakterizasyonlarını yüksek ve düşük sıcaklık değerlerinde analiz edilmesinde helyum ile çalışan kapalı devre kryostat cihazı (Şekil 3.7b) kullanılmaktadır. Çalışmamızda Keithley 2400 marka/model güç kaynağıyla -2 ile +2 voltaj aralığı ve karanlık ortamda Schottky diyotun değişen sıcaklık etkilerine karşı akım-gerilim verileri alınarak diyot verimliliği analiz edilmiştir.

3.8.3. Frekansa Bağlı Ölçümler

Belirli bir voltaj ve değişen frekans değerlerinde Schottky diyotun empedans, kapasitans ve kondüktans (Şekil 4.7c) değerleri hesaplanarak Schottky diyotun verimliliği hesaplanmıştır.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1. Organik Moleküllerin Sentezi

4.1.1. Ph-PDI-Ph (1A)'nın sentezi

100 mg (0.25 mmol) 3,4:9,10-perilentetrakarboksilikdianhidrit (**2**, PDI), 1H-imidazol (5 g) ve $\text{Zn}(\text{OAc})_2$ (10 gr) karışımı 100°C'de karıştırıldı. Daha sonra çözeltiye 47 mg (0.50 mmol) anilin (**3**) eklendikten sonra reaksiyon karışımı 160°C'de gün aşırı karıştırılarak geri akıtıldı. Reaksiyon karışımı daha sonra oda sıcaklığına soğutuldu ve 2N hidroklorik asit (HCl) ile asitleştirildi. Çökelti daha sonra süzülerek bol su ile yıkandı ve gece boyunca 100 °C'de vakum altında kurutuldu. Etanol içerisindeki kristallendirme işlemi neticesinde 98 mg (%71) simetrik PDI ürünü Ph-PDI-Ph (**1A**) elde edildi.

Ph-PDI-Ph (**1A**)'ya ait spektral veriler; ^1H NMR ($\text{DMSO-d}_6/\text{CF}_3\text{COOH}$ (%2)): δ 8.92 (m, =CH, 8H), 7.59 (m, =CH, 6H), 7.32 (m, =CH, 4H). Veriler literatür ile uyumludur (Kolhe, 2010).

4.1.2. Pry-PDI-Pry (1B)'nin sentezi

100 mg (0.25 mmol) 3,4:9,10-perilentetrakarboksilikdianhidrit (**2**, PDI), 1H-imidazol (5 g) ve $\text{Zn}(\text{OAc})_2$ (10 gr) karışımı 100°C'de karıştırıldı. Daha sonra çözeltiye 48 mg (0.50 mmol) piridin-4-amin (**4**) eklendikten sonra reaksiyon karışımı 160°C'de gün aşırı karıştırılarak geri akıtıldı. Reaksiyon karışımı daha sonra oda sıcaklığına soğutuldu ve 2N hidroklorik asit (HCl) ile asitleştirildi. Çökelti daha sonra süzülerek bol su ile yıkandı ve gece boyunca 100 °C'de vakum altında kurutuldu. Etanol içerisindeki kristallendirme işlemi neticesinde 86 mg (%62) simetrik PDI ürünü Pry-PDI-Pry (**1B**) elde edildi.

Pry-PDI-Pry (**1B**)’ye ait spektral veriler; ^1H NMR (DMSO- d_6 /CF $_3$ COOH (%2)): δ 9.19-9.18 (m, =CH, 4H, AB sisteminin A kısmı), 8.95-8.94 (m, =CH, 8H), 8.28-8.26 (m, 4H, AB sisteminin B kısmı). IR (ATR, cm^{-1}): 3076, 1696 (C=O), 1661 (amit N-C=O), 1571, 1504 (C-N), 1401, 1248 (C-O), 1127. Veriler literatür ile uyumludur (Pagano, 2017).

4.1.3. Pry-PDI-Ph (**1C**)’nin sentezi

100 mg (0.25 mmol) 3,4:9,10-perilentetrakarboksilikdianhidrit (**2**, PDI), 1H-imidazol (5 g) ve Zn(OAc) $_2$ (10 gr) karışımı 100°C’de karıştırıldı. Daha sonra çözeltiliye 24 mg (0.25 mmol) anilin (**3**) ve 24 mg (0.25 mmol) piridin-4-amin (**4**) eklendikten sonra reaksiyon karışımı 160°C’de gün aşırı karıştırılarak geri akıtıldı. Daha sonra, oda sıcaklığına soğutuldu, 2N hidroklorik asit (HCl) ile asitleştirildi ve süzüldü. Çökelti yeterli su ile yıkandıktan sonra susuz etanol içinde kristallendirildi. Etanol içerisindeki kristallendirme işlemi neticesinde 58 mg (%42) simetrik PDI ürünü Ph-PDI-Ph (**1A**) ve 26 mg (%18) Pry-PDI-Pry (**1B**) elde edilirken, 12 mg (%9) asimetrik PDI ürünü Pry-PDI-Ph (**1C**)’nin oluştuğu belirlendi.

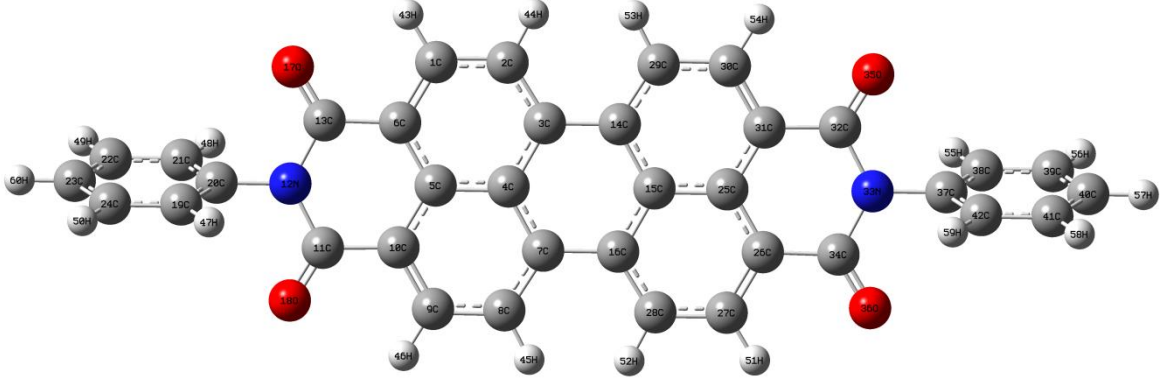
Pry-PDI-Ph (**1C**)’ye ait spektral veriler; IR (ATR, cm^{-1}): 3375, 3065, 1698 (amit, C=O), 1658 (amit N-C=O), 1589, 1571, 1503 (C-N), 1431, 1354, 1342, 1249 (C-O); UV-Vis (nm): 491 ve 528 (PDI Band I).

4.2. Optimize Edilmiş Molekül Yapısı

Bu çalışmada hedeflenen hesaplamaların yapılabilmesi için ilk olarak organik ve organometalik moleküllerin en kararlı yapılarının bulunması yani optimize edilmiş molekül yapılarının belirlenmesi gerekmektedir. Bu amaçla organik ve organometalik moleküller B3LYP hibrit fonksiyoneliyle birlikte etkili çekirdek potansiyeli (ECP) kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplanan organik ve organometalik moleküllerin optimize edilmiş molekül yapıları sırasıyla verilmiştir.

4.2.1. Ph-PDI-Ph’ ın optimize edilmiş molekül yapısı

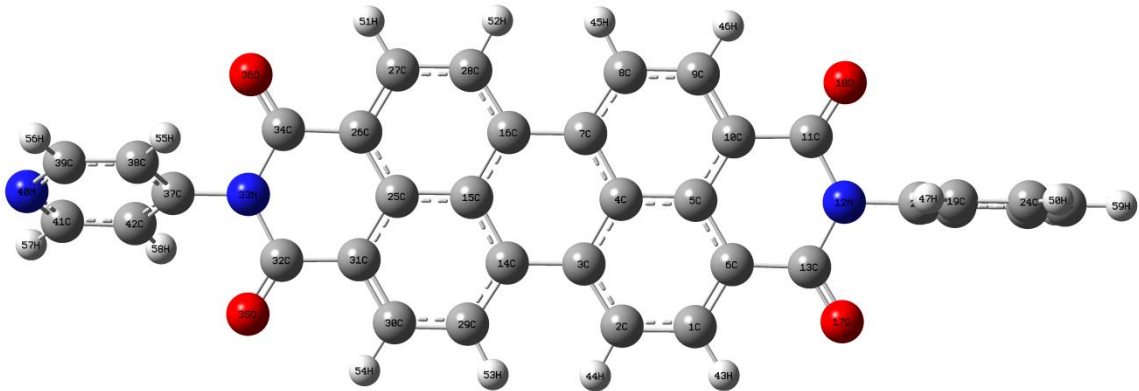
2,9-diphenylanthra[2,1,9-def:6,5,10-d'e'f']diisoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone (Ph-PDI-Ph) molekülünün optimize edilmiş moleküler geometrik yapısı şekil 4.1'de verilmiştir.



Şekil 4.1. Ph-PDI-Ph' ın moleküler geometrik yapısı

4.2.2. Pyr-PDI-Ph'ın optimize edilmiş molekül yapısı

2-phenyl-9-(pyridin-4-yl)anthra[2,1,9-def:6,5,10-d'e'f']isoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone (Pyr-PDI-Ph) molekülünün optimize edilmiş moleküler geometrik yapısı şekil 4.2'de verilmiştir.



Şekil 4.2. Pyr-PDI-Ph'ın moleküler geometrik yapısı

4.3. Moleküllerin HOMO-LUMO Orbital Şemaları ve Bazı Kimyasal Parametreleri

Sınır moleküler orbitalleri (FMO) olarak bilinen en yüksek enerjili dolu moleküler orbital (HOMO) ve en düşük enerjili boş moleküler orbital (LUMO), kimyasal reaksiyonlar, molekül stabilitesi, kimyasal reaktivite, optik ve elektriksel yetenek gibi birçok özelliğin belirlenmesi için oldukça önemlidir (Fleming, 1976)(Matyjaszewski, 2006). Ayrıca HOMO ve LUMO analizi molekül içindeki yük transferi hakkında da bize bilgi verir. HOMO ve LUMO enerjileri yardımıyla, iyonlaşma potansiyeli (IP), elektron affinitesi (EA), elektronegatiflik (χ), kimyasal potansiyel (μ), kimyasal sertlik (η), kimyasal yumuşaklık (ζ), global elektrofilisite indeksi (ω) ve maksimum yük transfer indeksi ($\Delta N_{\max}$) gibi bazı kimyasal özellikler tanımlanabilir (Parr, 1978)(Padmanabhan, 2007):

$$IP = -E_{HOMO} \quad (4.1)$$

$$EA = -E_{LUMO} \quad (4.2)$$

$$\chi = -1/2 (E_{LUMO} + E_{HOMO}) \quad (4.3)$$

$$\mu = 1/2 (E_{LUMO} + E_{HOMO}) \quad (4.4)$$

$$\eta = 1/2 (E_{LUMO} - E_{HOMO}) \quad (4.5)$$

$$\zeta = \frac{1}{\eta} \quad (4.6)$$

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta} \quad (4.7)$$

$$\Delta N_{\max} = -\frac{\mu}{\eta} \quad (4.8)$$

Bir molekülün kimyasal reaktivitesi HOMO ve LUMO orbitalleri arasındaki enerji band aralığına bakılarak belirlenebilir. Bu enerji ne kadar küçükse, o molekül o kadar düşük kinetik stabiliteye, daha çok polarize olma yeteneğine ve yüksek kimyasal reaktiviteye sahiptir (Fleming, 1976). Bir molekülün kimyasal sertliği ve yumuşaklığı kalitatif göstergelerdir ve elektron bulutunun bir elektrik alanda ne kadar bozulduğunu gösterir (Berkowitz, M., Parr, 1988) ve küçük HOMO–LUMO enerji band aralığı kimyasal olarak yumuşak bir molekülü gösterirken, büyük enerji band aralığı kimyasal olarak sert bir molekülü gösterir ve küçük sertlik değeri moleküldeki elektron veren grubun gücünün bir göstergesidir (Harbola, 1991). Sertlik kelimesinin kimyasal olmayan anlamı deformasyona

veya değişime dirençken, yumuşaklık ise bunun tam tersidir (Parr, 1983). Kimyasal potansiyel, daha yüksek kimyasal potansiyele sahip bir sistemden daha düşük kimyasal potansiyele yük aktarımı ile ilgilidir. Bir elektronun kaçış eğilimini sunar ve kimyasal sertliğe karşı davranışla bilinir (Toro-Labbé, 1999). Moleküllerin güçlü ve zayıf elektrofilik özelliklerini anlamak için global elektrofilitelerine bakmak gerekir. Bir moleküldeki donör ve akseptör gruplar arasındaki elektron akışı nedeniyle, molekülün toplam enerjisindeki düşüşün bir göstergesidir. Domingo ve arkadaşlarının 2008 yılında yaptığı bir çalışmaya göre (Domingo, 2008);

$\omega < 0.8$ eV ise; zayıf derecede elektrofil,

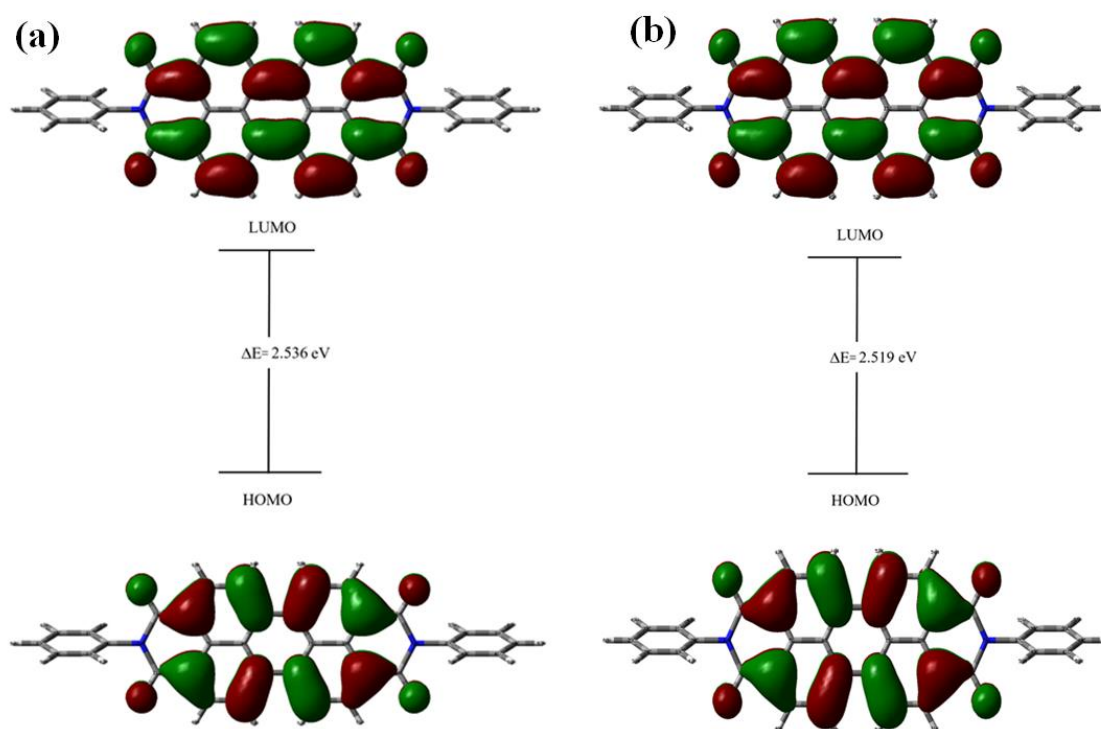
$0.8 < \omega < 1.5$ eV ise; orta derecede elektrofil,

$\omega > 1.5$ eV ise; yüksek derecede elektrofil,

Maksimum yük transfer indeksi ise; çevreden maksimum kabul edilen yükü (elektrofili) gösterir (Padmanabhan, 2007). Organik ve organometalik moleküllerin sınır orbital analizleri, iyonlaşma enerjisi, elektron affinitesi, elektronegatiflik, kimyasal potansiyel, kimyasal sertlik, kimyasal yumuşaklık, global elektrofilitesi ve maksimum yük transfer indeksi gibi bazı kimyasal parametreleri teorik olarak hesaplanıp şekil ve tablolarda sırasıyla verilmiştir.

4.3.1. Ph-PDI-Ph'in HOMO-LUMO Orbital Şemaları ve Bazı Kimyasal Parametreleri

2,9-diphenylanthra[2,1,9-def:6,5,10-d'e'f']diisoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone (Ph-PDI-Ph) molekülünün gaz ve sıvı (DMSO) fazda belirlenmiş molekül orbital (MO's) şemaları sırasıyla Şekil 4.3'ün (a) ve (b)'den, hesaplanan bazı kimyasal parametreleri Tablo 4.1'de verilmiştir.



Şekil 4.3. (Ph-PDI-Ph) için DFT metoduyla hesaplanmış HOMO-LUMO şeması

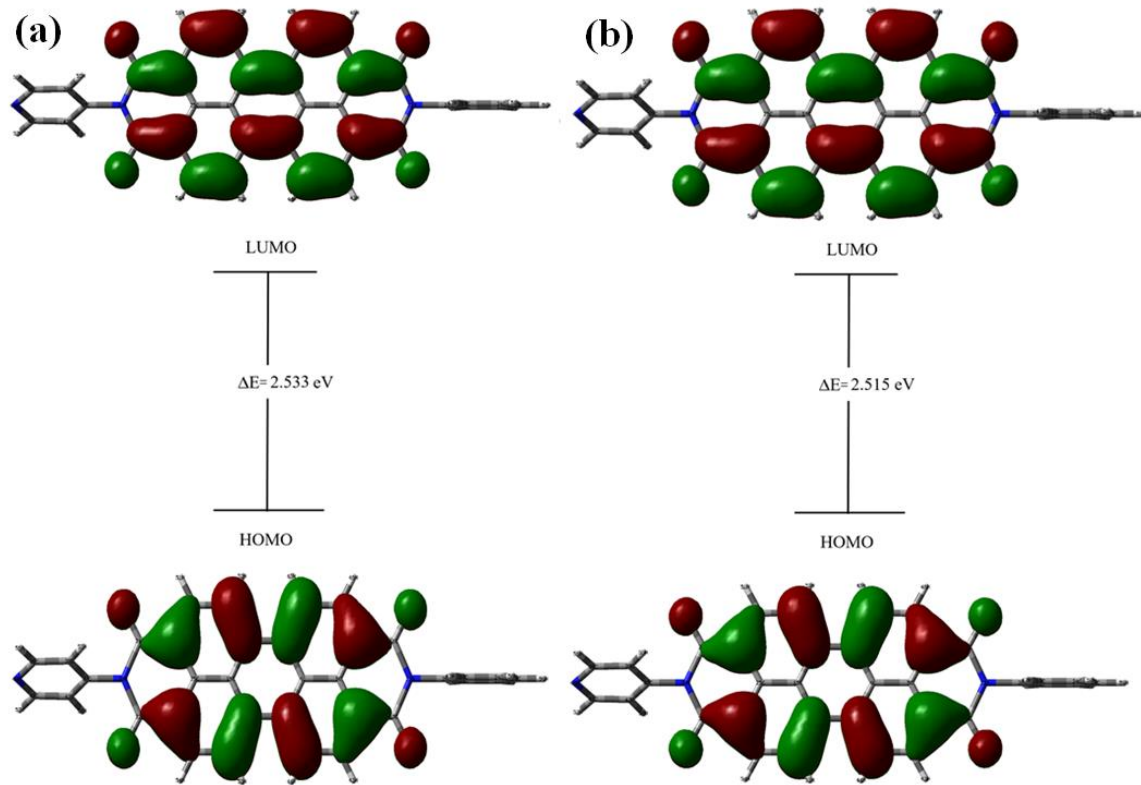
Tablo 4.1. (Ph-PDI-Ph) 'ın gaz ve sıvı (DMSO) fazında DFT ve TD-DFT* metoduyla hesaplanmış bazı kimyasal parametreleri

Parametreler (eV)	Numuneler	
	1	1*
E_{HOMO}	-5,9838	-5,8728
E_{LUMO}	-3,4474	-3,3535
ΔE	2,5364	2,5192
IP	5,9838	5,8728
EA	3,4474	3,3535
χ	4,7156	4,6131
μ	-4,7156	-4,6131
η	1,2682	1,2596
ζ	0,7885	0,7939
ω	8,7672	8,4475
ΔN_{max}	3,7184	3,6623

E_{HOMO} : HOMO orbitalinin enerjisi; E_{LUMO} : LUMO orbitalinin enerjisi; ΔE : Orbitaler arası enerji boşluğu; IP: İyonlaşma potansiyeli; EA: Elektron affinitesi; χ : Elektronegatiflik; μ : Kimyasal potansiyel; η : Kimyasal sertlik; ζ : Kimyasal yumuşaklık; ω : global elektrofilisite indeksi; ΔN_{max} : Maksimum yük transfer indeksi

4.3.2. Pyr-PDI-Ph' nin HOMO-LUMO Orbital Şemaları ve Bazı Kimyasal Parametreleri

2-phenyl-9-(pyridin-4-yl)anthra[2,1,9-def:6,5,10-d'e'f']isoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone (Pyr-PDI-Ph) molekülünün gaz ve sıvı (DMSO) fazda belirlenmiş molekül orbital (MO's) şemaları sırasıyla Şekil 4.4'ün (a) ve (b)'den, hesaplanan bazı kimyasal parametreleri Tablo 4.2'de verilmiştir.



Şekil 4.4. (Pyr-PDI-Ph) için DFT metoduyla hesaplanmış HOMO-LUMO şeması

Tablo 4.2. (Pyr-PDI-Ph) 'nin gaz ve sıvı (DMSO) fazında DFT ve TD-DFT* metoduyla hesaplanmış bazı kimyasal parametreleri

Parametreler (eV)	Numuneler 2	2*
E_{HOMO}	-6,1008	-5,9005
E_{LUMO}	-3,5677	-3,3851
ΔE	2,5331	2,5154
IP	6,1008	5,9005
EA	3,5677	3,3851
χ	4,8342	4,6428
μ	-4,8342	-4,6428
η	1,2666	1,2577
ζ	0,7895	0,7951
ω	9,2258	8,5694

$\Delta N_{\max}$	3,8168	3,6915
-------------------	--------	--------

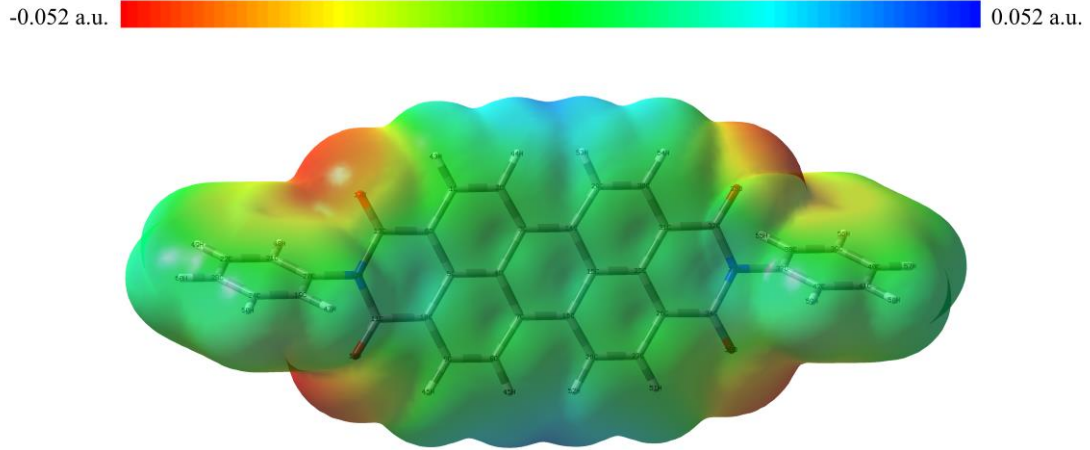
E_{HOMO} :HOMO orbitalinin enerjisi; E_{LUMO} :LUMO orbitalinin enerjisi; ΔE : Orbitaler arası enerji boşluğu; IP: İyonlaşma potansiyeli; EA: Elektron affinitesi; χ : Elektronegatiflik; μ : Kimyasal potansiyel; η : Kimyasal sertlik; ζ : Kimyasal yumuşaklık; ω : global elektrofilisite indeksi; $\Delta N_{\max}$:Maksimum yük transfer indeksi

4.4. Moleküler Elektrostatik Potansiyel (MEP) Yüzey Analizi

Moleküler elektrostatik potansiyel (MEP) yüzey analizi, moleküllerin elektronca fakir yani nükleofilik saldırı bölgeleri ile elektronca zengin yani elektrofilik saldırı bölgelerini, elektrofilik ve nükleofilik olarak reaktif olduğu bölgeleri, hidrojen bağı etkileşimlerini ve molekül yüzeyindeki elektronun yoğun olduğu bölgeleri belirlemek için kullanılan önemli bir yöntemdir (Scrocco, 1978)(Murray, 1996). Ayrıca moleküler şekli ve boyutu, pozitif, negatif ve nötr elektrostatik potansiyel bölgelerini gösterir (Murray, 1996). Kısacası MEP, bir sistemin reaktivitesini anlamak için ve renk değişimlerine göre bilgi veren görsel bir yöntem sağlar. MEP yüzey haritasında, kırmızı bölgeler yani negatif elektrostatik potansiyele sahip bölgeler elektronların yoğun olduğu bölgeyi gösterirken, mavi bölgeler yani pozitif elektrostatik potansiyele sahip olan bölgeler ise; elektronca fakir bölgeleri gösterir. MEP haritası üzerindeki farklı renkler elektrostatik potansiyelin farklı değerlerinden kaynaklanır. Elektrostatik potansiyel kırmızı < turuncu < sarı < yeşil < mavi sırasında artar. Yani MEP yüzey haritası elektronca zengin bölgeden (kırmızı) başlayarak elektronca fakir bölgeye (mavi) doğru farklı renklerle gösterilir.

4.4.1. Ph-PDI-Ph'ın MEP Yüzey Analizi

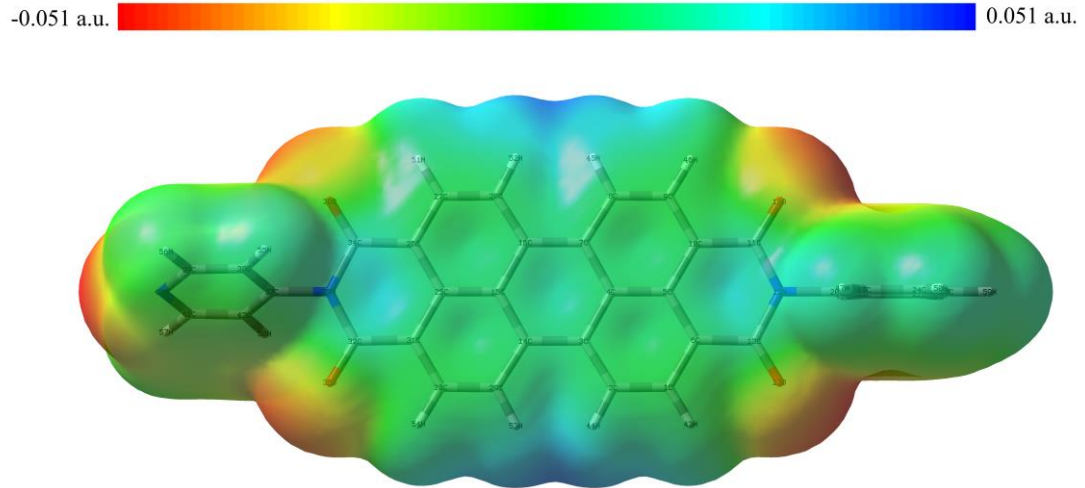
2,9-diphenylanthra[2,1,9-def:6,5,10-d'e'f']diisoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone (Ph-PDI-Ph) molekülünün MEP yüzey haritası Şekil 4.5'de verilmiştir.



Şekil 4.5. (Ph-PDI-Ph)' in MEP yüzey haritası

4.4.2. Pyr-PDI-Ph' nin MEP Yüzey Analizi

2-phenyl-9-(pyridin-4-yl)anthra[2,1,9-def:6,5,10-d'e'f']isoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone (Pyr-PDI-Ph) molekülünün MEP yüzey haritası Şekil 4.6' de verilmiştir.

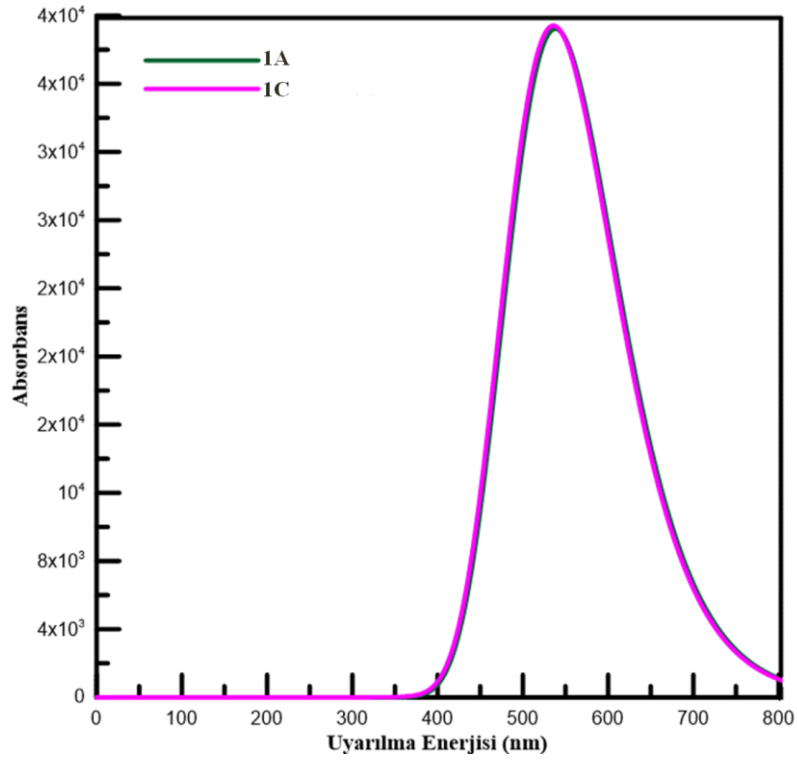


Şekil 4.6. (Pyr-PDI-Ph)' nin MEP yüzey haritası

4.5. UV-Vis Spektrumları

TD-DFT metodu moleküllerin UV-Vis spektrumunu belirlemek için oldukça yaygın kullanılan bir metottur (Gelfand, 2019)(Alam, 2019). Moleküllerin UV-Vis absorpsiyon spektrumlarını elektriksel olarak ve soğurma dalga boyları, uyarılma enerjileri, osilatör

kuvvetleri ve HOMO–LUMO orbitallerine geiş olasılıkları gibi bazı absorpsiyon parametreleri iletken benzeri polarize edilebilir sreklielik modeli (CPCM) seilerek, DMSO zcs kullanılarak TD-DFT metodu kullanılarak belirlenmiřtir.



řekil 4.7. Organik malzemelerin Absorbans- Uyarılma enerjisi spektrumu

4.5.1. Ph-PDI-Ph'ın UV-Vis Spektrumu

2,9-diphenylanthra[2,1,9-def:6,5,10-d'e'f']diisoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone (Ph-PDI-Ph) moleklnn DMSO zcsndeki UV-Vis Spektrumu řekil 5.9'de, TD-DFT metoduyla hesaplanan bazı absorpsiyon verileri Tablo 4.3.' de verilmiřtir.

Tablo 4.3. (Ph-PDI-Ph) ' ın TD-DFT methoduyla hesaplanmıř absorpsiyon verileri

	E_{ex} (eV)	λ (nm)	f (eV)	Geiř olasılıęı (%)
$S_0 \rightarrow S_1$	2,3063	537,58	0,9731	H $\rightarrow$ L (80%)
$S_0 \rightarrow S_2$	3,0940	400,73	0,0000	H-T $\rightarrow$ L (2%) H-1 $\rightarrow$ L (94%)
$S_0 \rightarrow S_3$	3,1130	398,28	0,0012	H-8 $\rightarrow$ L (4%) H-2 $\rightarrow$ L (93%)

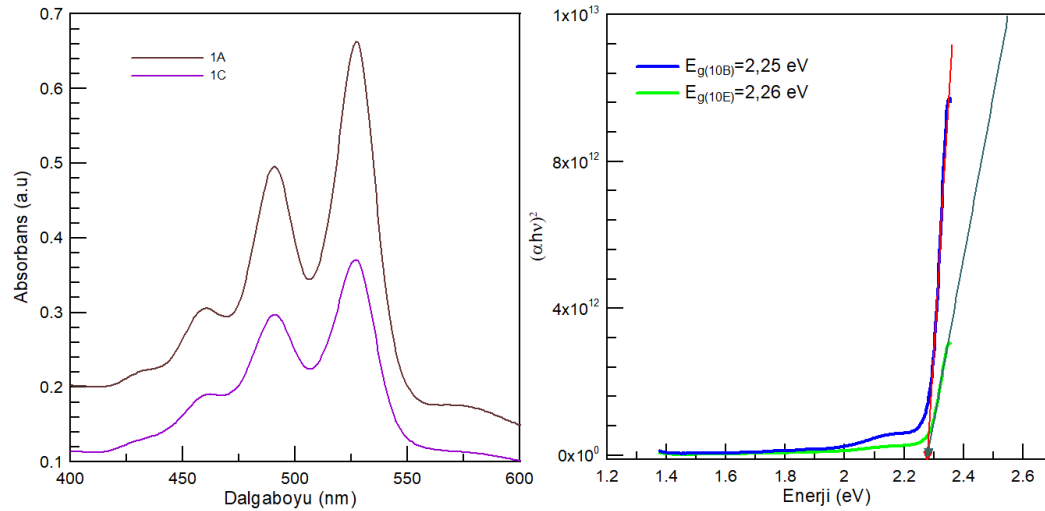
4.5.2. Pyr-PDI-Ph'ın UV-Vis Spektrumu

2-phenyl-9-(pyridin-4-yl)anthra[2,1,9-def:6,5,10-d'e'f']isoquinoline-1,3,8,10(2H,9H)-tetraone (Pyr-PDI-Ph) molekülünün DMSO çözücüsündeki UV-Vis spektrumu Şekil 5.9' de, TD-DFT metoduyla hesaplanan bazı absorpsiyon verileri Tablo 4.4' de verilmiştir.

Tablo 4.4. Pyr-PDI-Ph'nın TD-DFT methoduyla hesaplanmış absorpsiyon verileri

	E_{ex} (eV)	λ (nm)	f (eV)	Geçiş olasılığı (%)
$S0 \rightarrow S1$	2,3034	538,27	0,9686	H $\rightarrow$ L (100%)
$S0 \rightarrow S2$	3,1925	388,36	0,0000	H-8 $\rightarrow$ L (9%) H-1 $\rightarrow$ L (87%)
$S0 \rightarrow S3$	3,3231	373,10	0,0000	H-2 $\rightarrow$ L (98%)
E_{ex} : Uyarılma enerjisi; λ : dalga boyu; f: osilatör kuvveti				

4.6. UV Görünür Bölge Absorbsiyon Spektrumları



Şekil 4.8. Ph-PDI-Ph, Pyr-PDI-Ph, organik tabakanın a) UV-görünür bölge spektrumu ve b) yasak enerji bant aralığı

Ph-PDI-Ph, Pyr-PDI-Ph, organik tabakanın bant aralığı değerinin elde etmek için, öncelikle absorpsiyon katsayısı belirlenir. Absorpsiyon katsayısı

$$\alpha = \frac{\ln(1-T)}{d} \quad (4.9)$$

denklemleriyle bulunur (Turgut, 2013). Burada T yüzdece optik geçirgenlik değerini, d ise film kalınlığını belirtir.

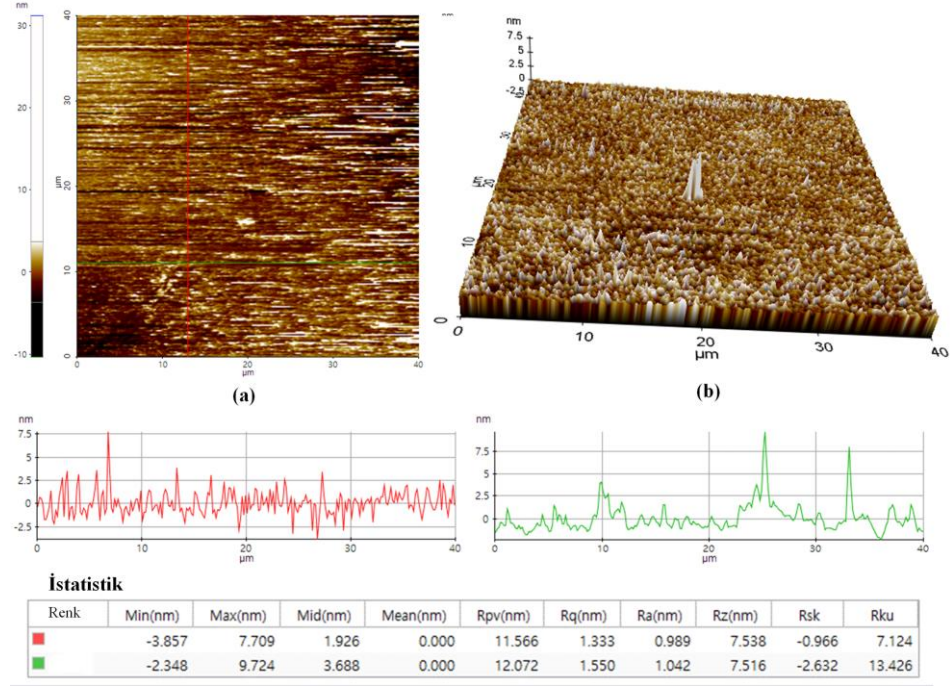
$$\alpha h\nu = K(h\nu - E_g)^2 \quad (4.10)$$

Denklemleriyle bulunur. Burada $h\nu$ foton enerjisi, K malzeme sabitidir. E_g yasak enerji aralığıdır. Hazırlanan solüsyonların absorbans pik değerleri incelendiğinde Şekil 5.8a'da Ph-PDI-Ph, Pyr-PDI-Ph, sırasıyla 520 nm, 525 nm aralığında pik değerleri olarak değerlendirilmiştir. Yine bu solüsyonların ölçümlerinden elde edilen bant aralığı $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$ grafiğinin eğim değeri incelenerek sırasıyla 2,25 eV, 2.26 eV olarak bulunmuştur. Bu değer Şekil 5.8b'de ki grafiğin lineer kısmına uygun fit yapıldı. Bu fitin x eksenini kestiği nokta bize yasak enerji aralığını verir. Elde edilen bu değerlere göre sentezlenen organik malzemelerin yarıiletken özellik gösterdiği söylenebilir. Aynı zamanda bu tarz malzemeler ile yasak enerji aralıkları dikkate alındığında fotovoltaik uygulamalarda kullanılabileceğini göstermiştir.

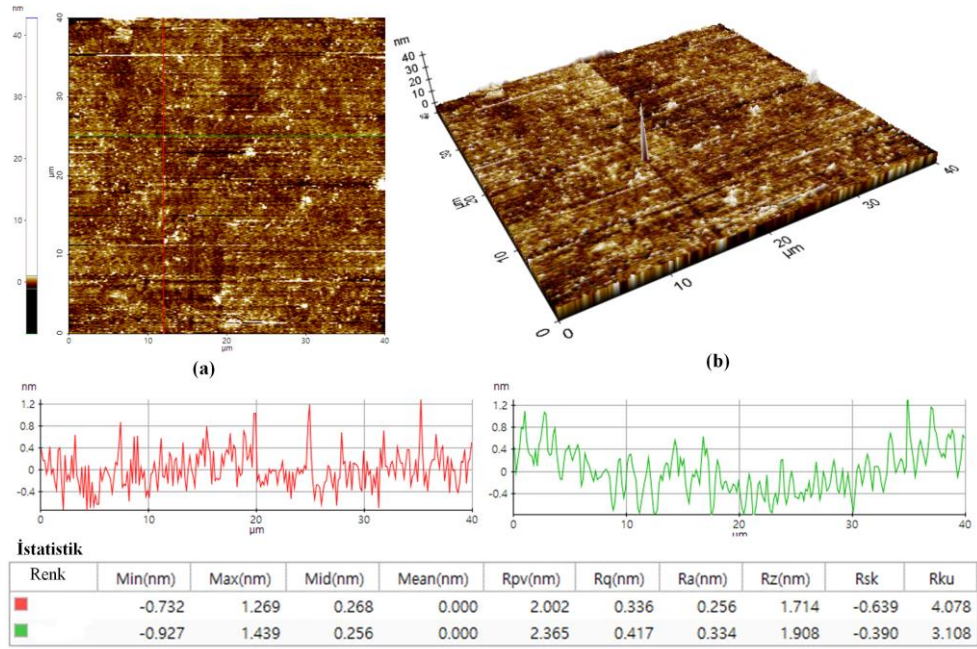
4.7. Atomik Kuvvet Mikroskopu Görüntüleri

Ara yüzeyde kullanılan organik malzemelerin lamel üzerine termal buharlaştırma cihazı ile kaplanarak yüzey morfolojisinin AFM cihazında $40 \times 40 \mu m^2$ ve $40 \times 40 \mu m^2$ alan üzerine yapılan analizin Şekil 4.9 ve 4.10'da görüldüğü üzere iki ve üç boyutlu görüntüleridir.

Elde edilen malzemenin yüzey morfolojisi ve yüzeye kaplanma şekilleri hakkında yüzeysel bilgi sahibi olmak için AFM görüntüleri alınmıştır. Bu numune içinde yüzey pürüzlülüğü değeri dikey olarak yaklaşık 0.98 nm, yatay olarak ise yaklaşık 1.04 nm olarak tespit edilmiştir.



Şekil 4.9. D1 AFM yüzey morfolojisi a) $40 \times 40 \mu m^2$ yüzey görüntüsü b) $40 \times 40 \mu m^2$ 3D yüzey görüntüsü ve yüzey pürüzlülüğü değerleri



Şekil 4.10. D2 AFM yüzey morfolojisi a) $40 \times 40 \mu m^2$ yüzey görüntüsü b) $40 \times 40 \mu m^2$ 3D yüzey görüntüsü ve yüzey pürüzlülüğü değerleri

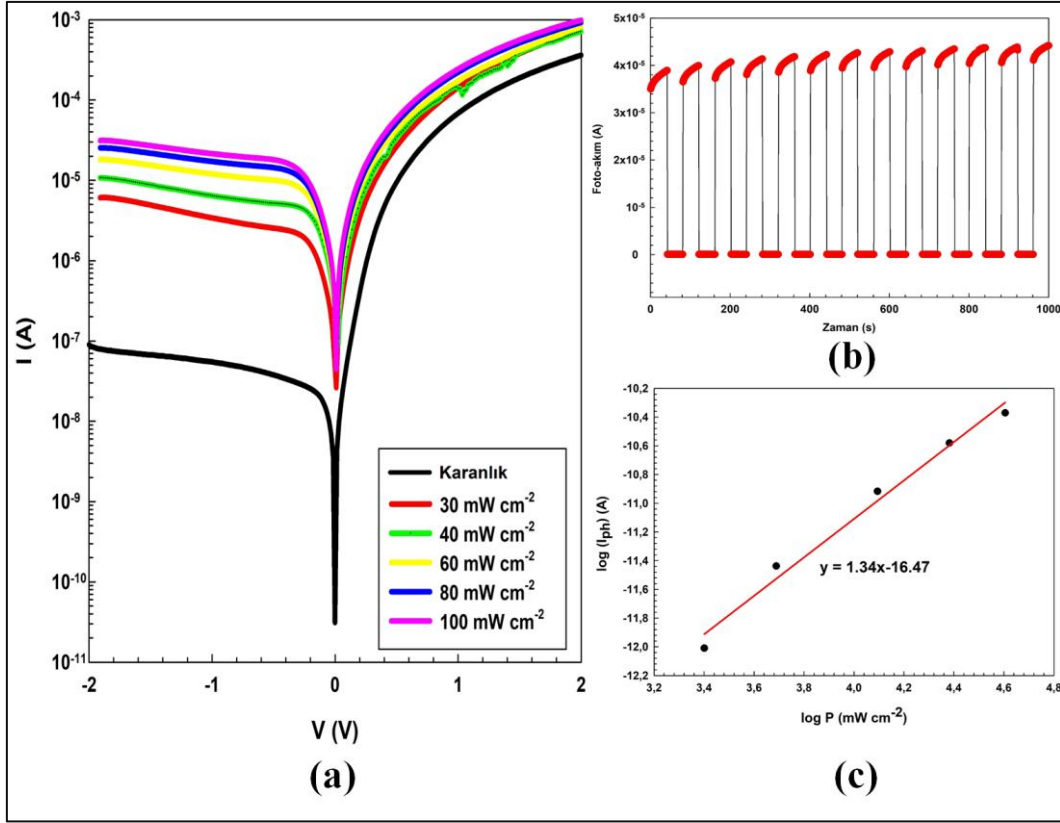
Termal kaplama ile yapılan kaplamalarda yüzey pürüzlülüğü çalışmaları AFM görüntüleri ile incelenmiştir. İki boyutta ve üç boyutta AFM görüntüleri Şekil 4.10'da verilmiştir. Bu verilen görüntülere göre taranan alanda ve numune yüzeyindeki farklı noktalardan AFM görüntülerinin birbirine benzer sonuçlar verdiği görülmüştür. Bu malzeme için yüzey pürüzlülüğü değeri dikey olarak yaklaşık 0.25 nm, yatay olarak yaklaşık 0.33 nm bulunmuştur. Bu termal yöntem ile büyütülen malzemenin homojen bir şekilde kaplandığı anlamına gelmektedir.

4.8. Farklı Arayüzey Ligandlarına Bağlı Diyot Karakteristik Parametrelerinin Hesaplanması

4.8.1 D1 Diyot Yapısının Elektriksel Karakterizasyonu

Bu çalışmada hazırlamış olduğumuz aygıtların (doğrultucu) elektriksel karakterizasyonunu incelemek için ilkin oda sıcaklığında ve farklı aydınlatma şiddetleri altında akım-voltaj ölçümleri yapılmıştır. Silisyum altlık üzerine yapılan Schottky diyotlara -2 V ile +2 V arasında voltaj uygulanarak akım ölçümü yapılmıştır. Yapılan ölçümler sonucunda diyotun ana parametreleri olan idealite faktörü, engel yüksekliği, seri direnç, şönt direnç, doğrultma oranı ve doyma akımı değerleri denklem (4.12), denklem (4.13), denklem (4.14), denklem (2.11), denklem (2.12) ve denklem (4.15) kullanılarak hesaplanmıştır.

Ayrıca ters gerilim voltajlarını değiştirmek için ışık açık ve kapalı (Ion/off) durumları için I-V özellikleri incelenmiştir. Bu ölçümlere geçici fotoakım ölçümleri denir ve cihazın fotostabilitesini ve yük taşıma mekanizmasını açıklamaya yardımcı olur (Wageh, 2017). Fotoakım- voltaj grafiği Şekil (b)'de gösterilmiştir. Bu değerler, -2 V'tan 0'a değişen öngerilim gerilimleriyle neredeyse değişmez. Işık, arayüzdeki şarj taşıyıcılarının hemen artmasına neden olduğu için cihaz ışık anahtarlama hızla tepki verir (Close, 2009). Bu sonuç, cihazın iyi bir fotostabiliteye ve hızlı foto-duyarlılığa sahip olduğu anlamına gelir.



Şekil 4.11. D1 schottky diyot yapısının karanlık ve 30-100 mW/cm^2 ışık şiddeti altında $\ln I$ - V grafiği, (b) Fotoakım- Zaman Grafiği ve (c) $\log I$ - $\log P$ grafiği

Tabloda 4.5’de aydınlatma şiddetinin artması ile idealite faktörü artarken, engel yüksekliğinin ise azaldığı görülmektedir. İdeal diyotların idealite faktörü değeri 1’dir. İdealite faktörü değerinin 1’den büyük bulunması diyotun ideallikten saptığının en büyük göstergesidir. İdeallikten sapmaya arayüz durumları (Orak, 2015), bariyer homojenliği (Orainy, 2014), seri direnç (Karataş, 2010), arayüzdeki taşıyıcının dağılımı gibi etmenler (Altındal, 2014), tünelleme işlemi (Lee, 2010) ve görüntü-kuvvet etkileri (Maity, 2015) sebep olur.

Termoionik emisyonla göre $eV \gg kT$ olduğundan, akım ifadesi aşağıdaki gibi yazılır.

$$I = I_0 \exp\left(-\frac{q(V - IR_S)}{nkT}\right) \quad (4.11)$$

İdealite faktörünü bulmak için, eşitliğin her iki tarafının logaritması alınır ve sonrasında V ’ye göre türevi alınarak aşağıdaki eşitlik elde edilir.

$$n = \frac{e}{kT} \frac{dV}{d \ln(I)} \quad (4.12)$$

yarı logaritmik I-V grafiğinin pozitif bölgesinde yer alan lineer kısmına lineer bir fit yapıldığında, bu doğrunun eğiminden $dV/d(\ln I)$ bulunur. Bu doğrunun $V=0$ 'da düşey eksenini kestiği nokta I_0 doyma akım yoğunluğunu verir ve aşağıdaki şekilde yazılır.

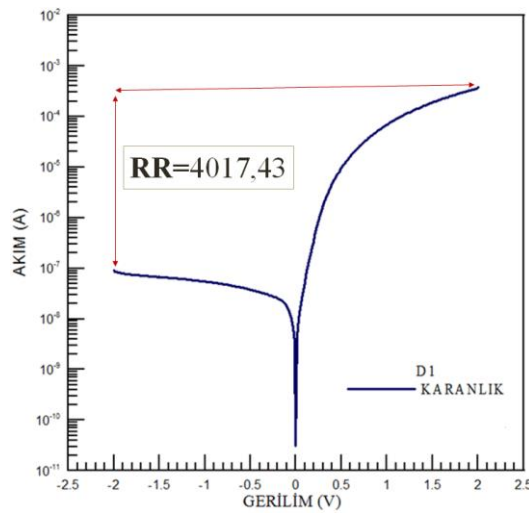
$$I_0 = AA^* T^2 \exp\left(\frac{-e\phi_b}{kT}\right) \quad (4.13)$$

Bu eşitlikten aşağıdaki engel yüksekliği bulunur.

$$e\phi_B = kT \ln\left(\frac{AA^* T^2}{I_0}\right) \quad (4.14)$$

Burada, A diyotun etkin alanını ($7,85 \times 10^{-3} \text{ cm}^2$), A^* Richardson sabitini (p-Si için $32 \text{ A/K}^2 \text{ cm}^2$), k Boltzman sabitini ($8,625 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$), T Kelvin cinsinden sıcaklığı simgeler.

Metal yarıiletken kontaklarda doğrultma oranı yük taşıyıcılarının bir yöne diğer yönden daha kolay iletiildiği durumları ifade etmek için kullanılmaktadır. Doğru ve ters beslem akımlarının oranına doğrultma oranı denilmektedir. İdeal diyotlar için bu oran $10^8 - 10^{10}$ civarındadır.



Şekil 4.12. D1 için I-V grafiğinden doğrultma oranı

Doğrulma oranı (RR),

$$RR = \frac{I_F}{I_V} \quad (4.15)$$

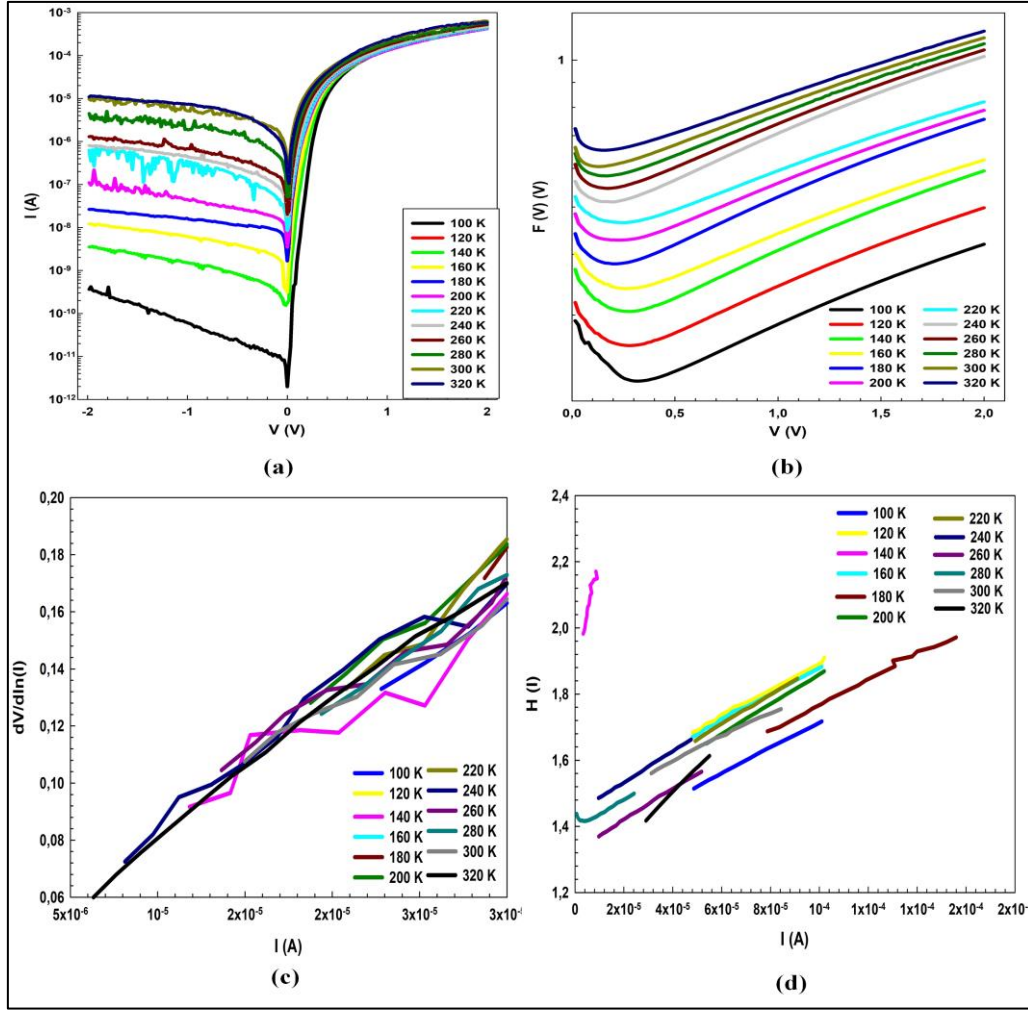
Şeklinde ifade edilir. Burada I_F doğru beslem akımı, I_V ters beslem akımıdır.

Tablo 4.5. D1 Diyot yapısının oda sıcaklığında (300 K) hesaplanan engel yüksekliği ve idealite faktörü, seri direnç, şönt direnç ve doğrultma oranı değerleri

P (mW.cm⁻²)	n	I₀ (A)	Φ_{B0} (eV)	R_s (Ω)	R_{sh} (Ω)	RR
Karanlık	1,86	5,70x10 ⁻⁹	0,73	5524,86	22195750,09	4017,43
30	1,96	1,76x10 ⁻⁸	0,70	5934,71	5363834,24	903,80
40	3,83	9,77x10 ⁻⁷	0,60	2587,32	328615,40	127,00
60	4,11	1,59x10 ⁻⁶	0,59	2457,01	185520,15	75,50
80	4,45	2,49x10 ⁻⁶	0,58	2197,80	110224,65	50,15
100	4,87	3,46x10 ⁻⁶	0,57	1972,38	78759,82	39,93

İkinci olarak organik arayüzeyli diyotlar sıcaklığa duyarlılık noktasında test edilmiştir. Şekil 4.13’de D1 diyot yapısının karanlık ortamda numune sıcaklığına bağlı olarak 100-320 K aralığında 20 K’lik adımlarla yarı logaritmik akım-gerilim grafiği çizilmiştir.

Tablo 4.6’de fabrikasyonu yapılan organik arayüzey malzemeli diyot yapısının idealite faktörleri, seri dirençleri ve engel yükseklikleri, elde edilen I-V grafiklerinin eğimleri kullanılarak Ohm kanunu, Termoyonik emisyon teorisi, Norde ve Cheung fonksiyonlarına göre 100-320 K aralığında değişen numune sıcaklığına göre hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlara göre sıcaklık arttıkça engel yüksekliğinin arttığı, idealite faktörünün ise azaldığı tespit edilmiştir. İdealite faktörü azalan numune sıcaklığı ile artmasına karşı engel yüksekliği değerlerinin küçüldüğü tespit edilmiştir. Bu durum seri direnç, yüzey pürüzlülüğüne ve yanal inhomojenliğine atfedilmiştir (Yıldırım, 2009). Yanal inhomojenliğinin nedeni olarak oksit tabakanın inhomojen, arayüzey yüklerinin varlığı ve arayüzey oksit tabaka kalınlığına atfedilmiştir (Song, 1986).



Şekil 4.13. D1 diyot yapısının 100-320 K sıcaklık altında ve karanlıkta (a) $\ln I$ -V grafiği, (b) Norde fonksiyonu $F(V)$ -V grafiği, (c) Cheung Fonksiyonu $dV/d\ln(I)$ -V eğrileri ve (d) Cheung Fonksiyonu $H(I)$ -I (A) eğrileri

Norde fonksiyonundan R_s seri direnç değeri, Φ_B bariyer yüksekliği elde edilir. Norde hesaplamalarında doğru beslem altındaki eğrinin sadece lineer kısmı dikkate alınmıştır, bu bölgede akım üstel olarak değişim göstermektedir. Hesaplamalarda seri direnç ve engel yüksekliği bulunurken geleneksel TE metodu ile bulunan idealite çarpanı değeri kullanılmıştır (Karataş, 2004).

Diyot parametrelerinin anlaşılmasında bir diğer yöntem ise Cheung fonksiyonlarıdır. Diyotun doğru beslem altında artan lineer fit doğrusunda artan gerilim ile oluşan değişim bölgesine yapılan yeni bir fit denklemi ile diyot karakteristiklerinden idealite faktörü n , bariyer yüksekliği Φ_B ve seri direnç R_s değerleri hesaplanmaktadır.

Tablo 4.6. D1 Diyotu için değişen sıcaklık değerlerinde, doygunluk I_0 , idealite n , bariyer yüksekliği Φ_b ve seri direnç R_s değerlerinin incelenmesi

T (K)	TE			Ohm Kanunu	Norde Fonksiyonu		Cheung-Cheung Fonksiyonu			
							dV/dln(I)		H(I)	
	n	I_0 (A)	Φ_{B0} (eV)	R_s (Ω)	Φ_{B0} (eV)	R_s (Ω)	n	R_s (Ω)	Φ_{B0} (eV)	R_s (Ω)
100	6,20	$6,27 \times 10^{-9}$	0,23	4228,32	0,25	1566,33	5,81	3536,6	0,22	3857,6
120	5,30	$1,47 \times 10^{-8}$	0,27	4504,50	0,29	1536,48	5,78	3715,4	0,25	4000,5
140	4,61	$1,73 \times 10^{-8}$	0,31	4504,50	0,34	1283,93	4,82	3729,3	0,30	3964,2
160	4,10	$2,08 \times 10^{-8}$	0,36	4474,27	0,38	2363,84	3,81	4289,6	0,36	3653,3
180	3,64	$6,27 \times 10^{-8}$	0,39	4683,84	0,41	1501,75	3,73	4271,3	0,37	4507
200	3,36	$5,75 \times 10^{-8}$	0,44	4750,59	0,46	3102,03	3,35	4298,1	0,43	4451
220	3,13	$7,55 \times 10^{-8}$	0,49	4545,45	0,49	4783,18	2,84	4137,8	0,49	5481,5
240	2,97	$1,36 \times 10^{-7}$	0,52	4175,36	0,58	127,60	2,65	3839,4	0,50	4553,7
260	2,77	$2,11 \times 10^{-7}$	0,56	3831,41	0,61	1006,96	2,63	3682,1	0,53	3778,9
280	2,59	$3,50 \times 10^{-7}$	0,59	3478,26	0,60	1776,99	2,56	3544	0,56	3609,2
300	2,48	$5,91 \times 10^{-7}$	0,63	3169,57	0,62	1965,30	2,41	3375,2	0,58	3767,2
320	2,38	$4,42 \times 10^{-7}$	0,68	3395,58	0,67	2236,39	2,07	3314	0,63	4173,5

D1 Schottky diyotun hem C-V hem de G/ ω -V grafikleri 5 kHz-5000 kHz frekans aralığı ve -3V ile 3V aralığındaki ölçümleri Şekil 4.14'de gösterilmiştir.

C-V sonuçlarından difüzyon gerilimi (V_d), alıcı yoğunlaşması (N_a), tüketim tabakası genişliği (W_D), Fermi enerjisi (E_F), seri direnç (R_s) ve engel yüksekliği (Φ_{b0}) parametreleri bulundu.

Nicollian-Brews metoduna (Nicollian, E.H., Brews, 1982) göre Seri direnç (R_s),

$$R_s = \frac{G_m}{G_m^2 + (\omega C_m)^2} \quad (4.16)$$

Bu denklemde, C_m ölçülen Kapasitans, G_m ölçülen kondüktans ve herhangi bir ön gerilim için $\omega (=2\pi/T)$ açısal frekanstır.

Tükenme bölgesi, C^2-V grafiğinin doğrusal bir davranışa sahip olmasından birçok diyot parametresi bu denklemden hesaplanabilir.

$$C^{-2} = \frac{2(V_R + V_0)}{q \epsilon_0 N_A A^2} \quad (4.17)$$

Bu denklemde V_R ters öngerilim voltajı, N_A akseptör atomların uyarıcı konsantrasyonu V_0 olabilecek ön gerilimde sıfır voltajı kesme, q elektronik yükü ve ϵ_0 boşluğun dielektrik sabiti olarak tanımlanır.

Bu denklemde de görüldüğü üzere şekil, C^2-V grafikleri her frekans için uygulanan öngerilim voltajı aralığı geniş düz bir çizgi sergiler. Böylece, N_A değeri C^2-V 'nin doğrusal kısmının eğiminden elde edilmiştir.

Doğru ve ters beslemde metal-organik-yarıiletken (MOY) Schottky diyotun deneysel olarak difüzyon potansiyeli (V_D), alıcı atomları sayısı (N_A), fermi enerji seviyesi (E_F), tüketim bölgesi genişliği (W_D) ve frekansa bağlı engel yüksekliği ($\Phi_{B(C-V)}$) gibi elektriksel parametrelerini C^2-V 'nin terslenim bölgesi eğimi ve aşağıdaki eşitlikler kullanılarak hesaplanabilir (Rhoderick,1988)(Sharma, 1984)(Sze, 1981a)(Card, 1971).

$$V_D = V_D - \frac{kT}{q} \quad (4.18)$$

Burada V_0 ise ters beslemdeki lineer C^2-V grafiğinin eğiminin yatay eksenini kestiği noktadır.

$$N_C = 4.82 \times 10^{15} T^{3/2} \left(\frac{m_e^*}{m_0} \right)^{3/2} \quad (4.19)$$

$$N_A = \frac{2}{q \epsilon_0 A^2} \left[- \frac{1}{d(C^{-2})/dV} \right] = \frac{2}{q \epsilon_s A^2 \tan(\theta)} \quad (4.20)$$

$$E_F = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_c}{N_A}\right) \quad (4.21)$$

$$W_D = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qN_A}} |V_i - V| \quad (4.22)$$

$$\Phi_{B(C-V)} = V_0 + E_F \quad (4.23)$$

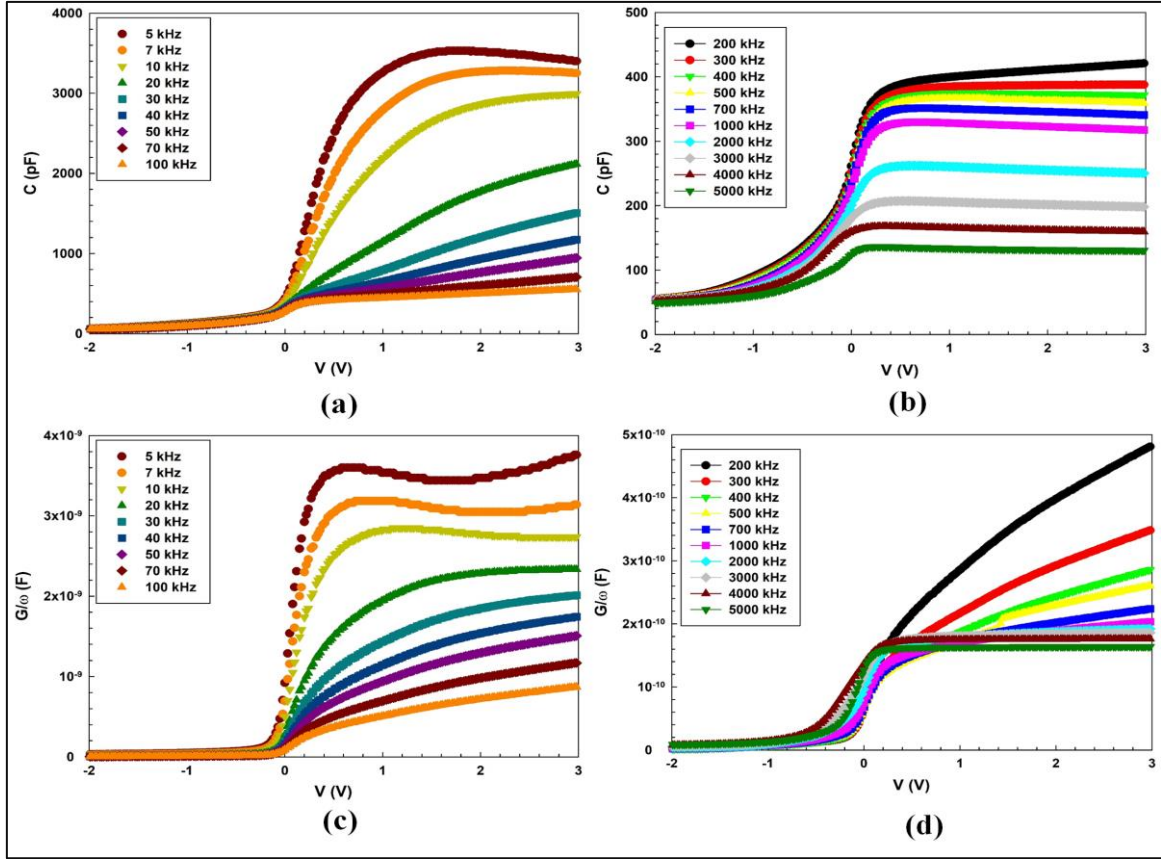
Burada $\left(\frac{m_e^*}{m_0}\right) = 0,55$, N_c iletkenlik bandındaki etkin durum yoğunluğu, ε_0 ise uzayın geçirgenliğidir ve değeri $8,85 \times 10^{-14}$ F/cm'dir.

Voltaja bağlı arayüzey durumları (N_{ss}),

$$N_{ss} = \frac{1}{qA} \left[\left(\frac{1}{C_{LF}} - \frac{1}{C_i} \right)^{-1} - \left(\frac{1}{C_{HF}} - \frac{1}{C_i} \right)^{-1} \right] \quad (4.24)$$

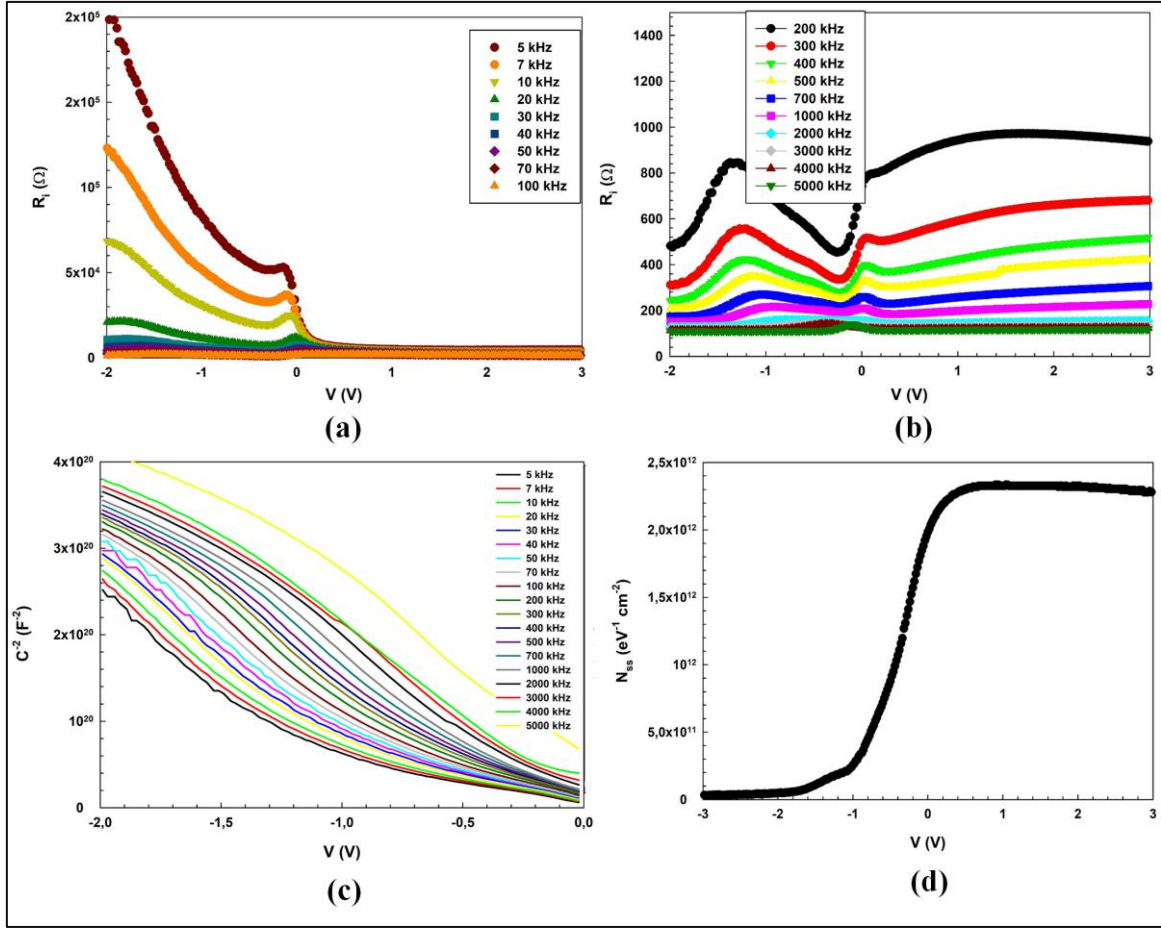
Bu denklemde düşük-yüksek frekans (C_{LF} - C_{HF})'dır. C_i kapasitans ara katmanı ve q elektronik yüküdür.

C-V ile diyot parametrelerinin incelenmesi diyot kontak aralığında varlığı bilinen uzay yükü bölgesinin öngerilimlenmiş terslenim bölgesinin genişliği ile ilişkilidir. Gerilimi takip eden düşük frekans değerlerinde yüksek pik verilen bölgeyi tükenim bölgesi olarak adlandırmak mümkündür. Bu tükenim bölgesindeki pik durumlarını yasak enerji aralığında mevcut arayüzey durumlarının yani arayüzey tabakasının varlığı teyit edilmiş olur (Şahinkaya, 2020)



Şekil 4.14. D1 Schottky diyot yapısının (-2,+3) volt ve (5-5000) kHz frekans aralığında elde edilen (a) ve (b) düşük-yüksek C-V grafikleri, (c) ve (d) düşük-yüksek G/ω-V grafikleri

Şekillerden de görüldüğü gibi C-V ve G/ω-V terslenim (-3V/-1V), tüketim (-1V/1V) ve yığılma (1V/3V) olmak üzere tıpkı MOY yapılar gibi üç bölgeye sahiptir. Özellikle yüksek frekanslarda olmak üzere terslenim ve yığılma bölgelerinde C-V ve G/ω-V sabit bir değer almaktadır. Bununla birlikte tüketim ve yığılma bölgelerinde gerilimle birlikte artmaktadır. Çünkü Silisyum'un ön yüzeyinde çoğunlukta olan elektronlar metal yüzeyin ön kısmına geçerler ve böylece bir dengesizlik meydana gelir. Bundan dolayı C değeri, denge durumuna kadar elektronların azalmasıyla birlikte azalır. Yani C ve G/ω değerleri N_{ss} etkilerinde olduğu gibi frekans ve gerilimle büyük ölçüde etkilenebilmektedir. Yeterince küçük negatif gerilim de terslenim bölgesi ise C ve G/ω değerlerinde kayda değer önemli bir değişim olmayıp bu bölgede gerilimin C ve G/ω değerlerine etkisi hemen hemen hiç yoktur. Ayrıca C-V eğrisinde seri direncin büyüklüğü ve etkisinden dolayı yığılma bölgesinde aşağı doğru bükülme meydana gelmektedir.



Şekil 4.15. D1 Schottky diyot yapısının (-2,+3) volt ve (5-5000) kHz frekans aralığında elde edilen (a) ve (b) düşük- yüksek frekans R_i - V grafiği, (c) C_2 - V grafiği, (d) 5 kHz'de N_{ss} - V grafiği

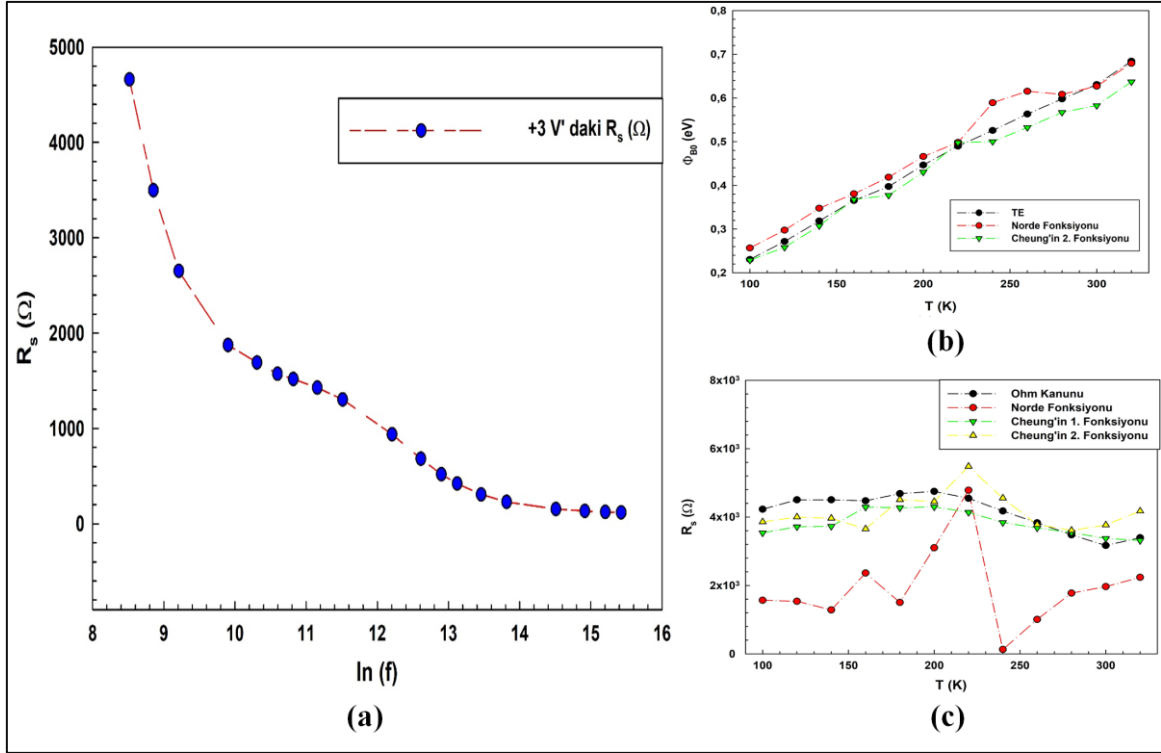
R_s değeri özellikle yığılma bölgesinde C - V grafiğinde etkilidir ve bu bölgede bükülmeye sebep olur. Düşük frekanslarda, N_{ss} dış AC sinyali takip edebilir ve bundan dolayı C ve G/ω değerlerinde artmalar oluşur ve göre bu durum azınlık taşıyıcılardan kaynaklanmaktadır (Werner, 1991). R_i değerinin gerilime bağlılığı değeri Nicollian–Brews metodu kullanılarak ta hesaplanabilir (Nicollian, 1982).

Bir yarıiletken kontağın gerçek R_s değeri yeterince yüksek pozitif gerilimde elde edilen değerdir. Yarıiletken aygıtın seri direnci yüksek pozitif gerilimlerde gerçek değerine ve ters gerilimlerde ise sonsuza doğru gitmektedir. Budan dolayı ileri yığılma bölgesinde yüksek frekanslar ($f \geq 1$ MHz) için R_i değeri yapının R_s değerine karşılık gelmektedir.

C^{-2} -V eğrisi kullanılarak çeşitli frekanslar için hesaplanan V_D , N_A , E_F , W_D , $\Phi_{B(C-V)}$ ve R_s değerleri tablo 4.7’de verilmiştir. Frekans arttıkça ters beslem C^{-2} -V eğimlerinin artma meydana geldiğinden dolayı W_D ve E_F değerleri artan frekans ile artarken, N_A değeri artan frekans ile azalmaktadır. Düşük frekanslardaki $\Phi_{B(C-V)}$ değeri bu frekanslardaki AC sinyali takip edebilen N_{ss} ile belirlenir. Ama yüksek frekanslarda bu (Ismael Raafat, 2019) arayüzey durumları AC sinyali takip edemezler ve bundan dolayı ölçüm kapasitansının katkısı göz ardı edilebilir (Sharma, 1984)(Cheung, 1986).

Tablo 4.7. D1 diyotu için çeşitli frekanslar ile hesaplanan V_D , N_D , E_F , W_D , $\Phi_{B(C-V)}$ ve R_s değerleri

Frekans (kHz)	V_D (eV)	N_A (cm^{-3})	E_F (eV)	W_D (cm)	Φ_{B0} (eV)	R_s (Ω)
5	0,06	4,70E+15	0,22	1,6E-05	0,28	4193,04
7	0,08	5,03E+15	0,21	1,8E-05	0,30	3789,45
10	0,08	5,07E+15	0,21	1,83E-05	0,30	3295,07
20	0,09	5,21E+15	0,21	1,93E-05	0,31	2648,75
30	0,11	5,31E+15	0,21	2,1E-05	0,33	2474,15
40	0,13	5,36E+15	0,21	2,28E-05	0,35	2177,38
50	0,16	5,36E+15	0,2	2,44E-05	0,37	2118,02
70	0,18	5,41E+15	0,21	2,6E-05	0,40	2097,42
100	0,22	5,41E+15	0,21	2,87E-05	0,44	2084,31
200	0,26	5,41E+15	0,21	3,12E-05	0,48	1970,17
300	0,31	5,41E+15	0,21	3,4E-05	0,53	2058,81
400	0,34	5,31E+15	0,21	3,6E-05	0,56	2018,42
500	0,36	5,31E+15	0,21	3,68E-05	0,57	2005,87
700	0,43	5,26E+15	0,21	4,05E-05	0,65	2005,38
1000	0,56	5,16E+15	0,21	4,65E-05	0,78	1571,57
2000	0,61	4,55E+15	0,22	5,21E-05	0,84	1492,61
3000	0,81	4,28E+15	0,22	6,17E-05	1,04	1448,71
4000	0,87	3,79E+15	0,22	6,79E-05	1,10	1374,55
5000	0,95	3,63E+15	0,22	7,24E-05	1,18	1522,69

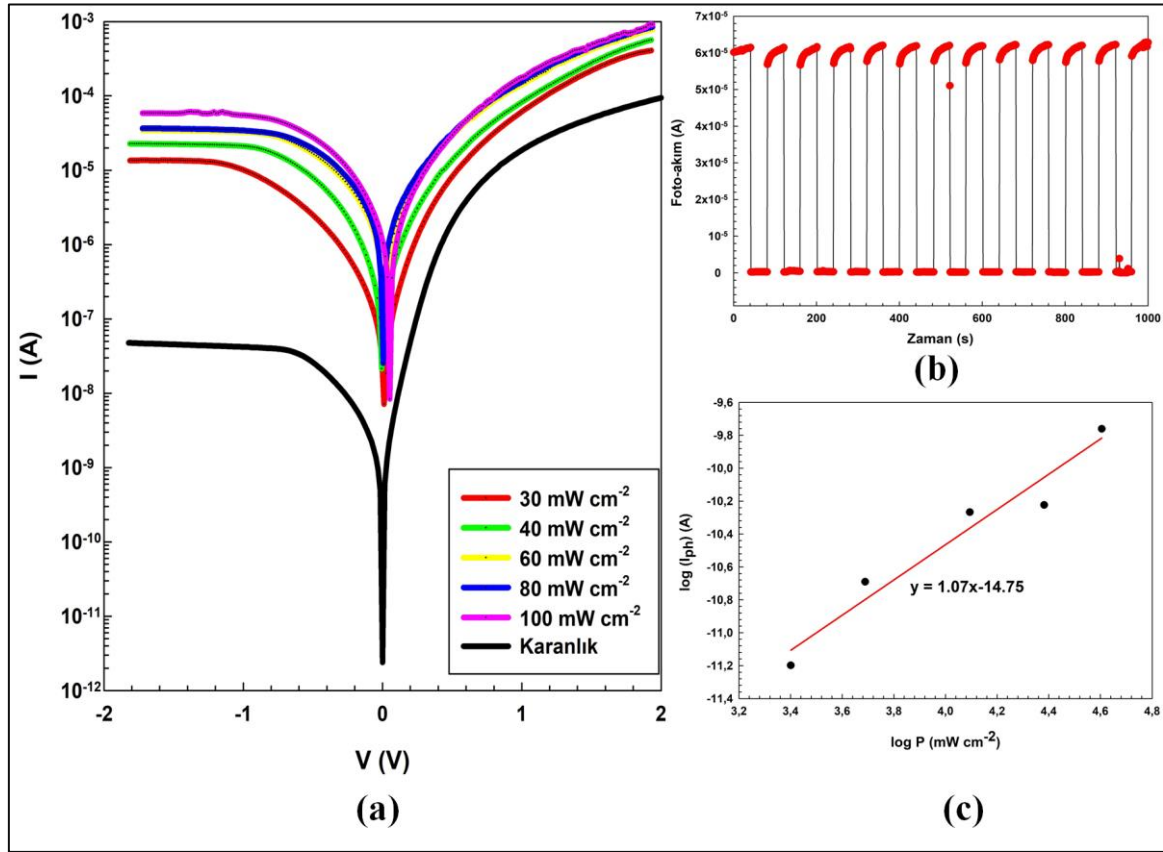


Şekil 4.16. D1 Schottky diyot yapısının (a) R_s - $\ln(f)$ grafiği, (b) TE, Norde Fonksiyonu ve Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre Bariyer Yüksekliği-sıcaklık karşılaştırılması, (c) Ohm Kanunu, Norde Fonksiyonu ve Cheung'in 1. Fonksiyonu, Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre Seri direnç-sıcaklık karşılaştırılması

Şekil (b)'de TE, Norde Fonksiyonu ve Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre bariyer Yüksekliğinin sıcaklığa göre değişimi karşılaştırılması mevcuttur. Bu karşılaşmaya göre hesaplanan değerler birbirleri ile uyumludur yani tam olarak aynı veriler elde edilmese de hemen hemen birbirine yakın veriler elde edilmiştir. Şekil (c)'de Ohm Kanunu, Norde Fonksiyonu ve Cheung'in 1. Fonksiyonu, Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre Seri direnç-sıcaklık karşılaştırılması mevcuttur. Şekle göre Norde fonksiyonun verileri diğer fonksiyonların verilerinden oldukça farklı veriler olarak elde edilmiştir.

4.8.2. D2 Diyot Yapısının Elektriksel Karakterizasyonu

Şekil 4.17'nin (a)'daki grafiği incelendiğinde ışık şiddeti arttıkça ters beslem bölgesinde akım değerinin arttığını görmekteyiz. Tablo 4.8'deki diyot parametreleri diyotun ışığa karşı duyarlılığı değişen ışık şiddetlerine göre incelenmiştir.

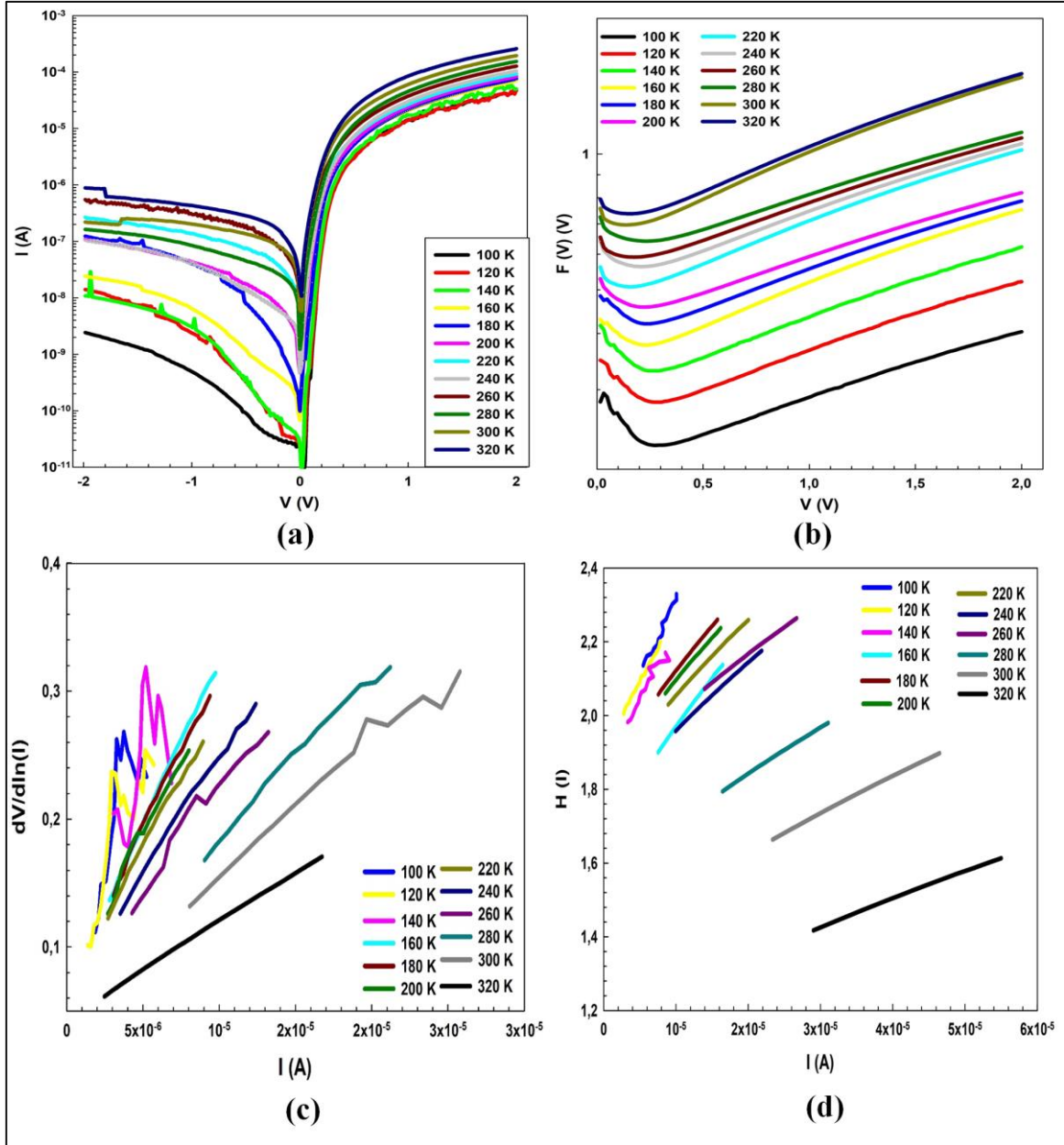


Şekil 4.17. D2 schottky diyot yapısının karanlık ve 30-100 mW/cm^2 ışık şiddeti altında $\ln I$ - V grafiği, (b) Fotoakım- Zaman Grafiği ve (c) $\log I$ - $\log P$

Tablo 4.8. D2 Diyot yapısının oda sıcaklığında (300 K) hesaplanan engel yüksekliği ve idealite faktörü, seri direnç, şönt direnç ve doğrultma oranı değerleri

P (mW.cm^{-2})	n	I_0 (A)	Φ_{B0} (eV)	R_s (Ω)	R_{sh} (Ω)	RR
Karanlık	1,88	$7,71 \times 10^{-10}$	0,78	21187,31	40132630	1894,18
30	3,55	$2,04 \times 10^{-7}$	0,64	4545,45	146024	32,12
40	4,57	$7,37 \times 10^{-7}$	0,61	3053,43	87877,21	28,77
60	6,12	$4,60 \times 10^{-6}$	0,56	2028,39	57565,14	28,37
80	6,86	$5,76 \times 10^{-6}$	0,56	1841,62	55094,23	29,91
100	6,87	$4,86 \times 10^{-6}$	0,56	1629,99	34688,97	21,28

Tabloda 4.8’de aydınlatma şiddetinin artması ile idealite faktörü artarken, engel yüksekliğinin ise azaldığı görülmektedir. Bu durum Schottky kontağının ideallikten sapmasının göstergesidir.



Şekil 4.18. D2 diyot yapısının 100-320 K sıcaklık altında ve karanlıkta (a) $\ln I$ -V grafiği, (b) Norde fonksiyonu $F(V)$ -V grafiği, (c) Cheung Fonksiyonu $dV/d\ln(I)$ -V eğrileri ve (d) Cheung Fonksiyonu $H(I)$ -I (A) eğrileri

Şekil 4.18'de 100 K'den 320 K'ye değişen sıcaklıklarına bağlı olarak Tablo 4.9'da hesaplanan Φ_B ve R_s değerleri verilmektedir. Φ_B değerlerinin artmasına rağmen, sıcaklığın artmasıyla R_s değerlerinin azaldığı görülmektedir. Gözlenen bu azalma, sıcaklığın artmasıyla artan taşıyıcılara atfedilebilir (A. Turut, 2012)(Kwietniewski, 2008).

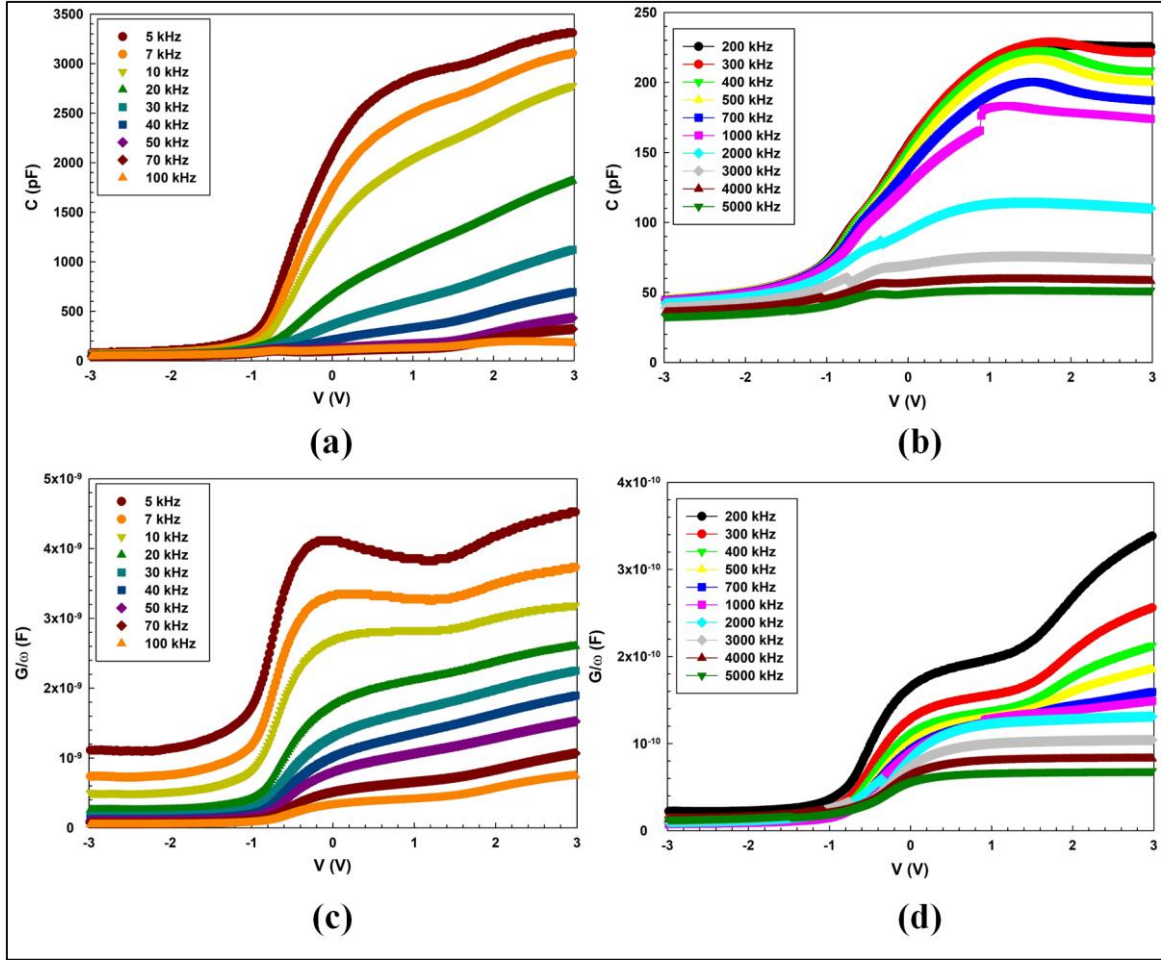
Φ_B değerleri artan sıcaklıkla artmış, R_s değerleri azalmıştır. Bu azalma, artan sıcaklıkla birlikte cihazda artan taşıyıcılara bağlanabilir (Battal, 2015). Norde yöntemi, TE teorisi ve

Cheung yöntemine göre elde edilen Φ_B ve R_s değerleri arasında farklılıklar mevcuttur. Bu farklılıklar, Cheung'un yönteminin doğrusal olmayan bölgeye (yüksek voltaj) uygulanmasına rağmen, Norde yönteminin I–V grafiklerinde tüm ileri sapmaları gerçekleştirmesine atfedilebilir (Yıldırım, 2013).

Tablo 4.9. D2 Diyot yapısı için değişen sıcaklık değerlerinde, doygunluk I_0 , idealite n , bariyer yüksekliği Φ_b ve seri direnç R_s değerlerinin incelenmesi

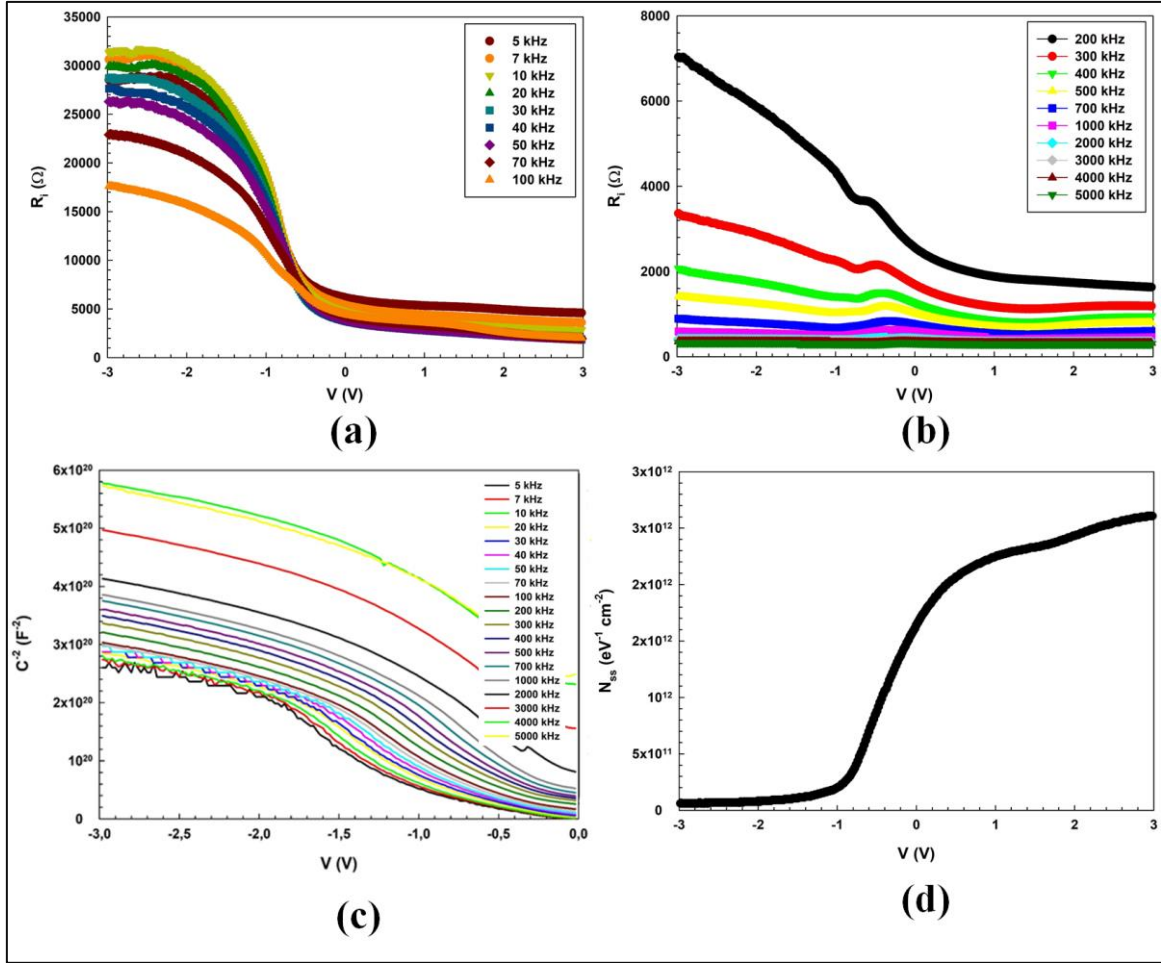
T (K)	TE			Ohm Kanunu	Norde Fonksiyonu		Cheung-Cheung Fonksiyonu				
	n	I ₀ (A)	Φ _{B0} (eV)		R _s (Ω)	Φ _{B0} (eV)	R _s (Ω)	dV/dln(I)		H(I)	
								n	R _s (Ω)	Φ _{B0} (eV)	R _s (Ω)
100	7,01	4,37x10 ⁻⁹	0,23	42349,7	0,25	15446,8	8,78	37439	0,21	41213	
120	5,59	2,79x10 ⁻⁹	0,28	41491,9	0,31	9566,58	7,08	34266	0,26	36592	
140	4,56	2,96x10 ⁻⁹	0,34	39965,3	0,36	15527,6	5,98	36013	0,31	34695	
160	3,96	5,84x10 ⁻⁹	0,38	28056,7	0,42	762,391	4,71	26077	0,36	26567	
180	3,47	5,05x10 ⁻⁹	0,43	26214,2	0,46	11862,1	4,66	24221	0,40	24676	
200	3,09	8,16x10 ⁻⁹	0,48	23865,2	0,49	20071,2	4,21	23149	0,44	22937	
220	2,76	1,77x10 ⁻⁸	0,51	21493	0,54	9236,77	3,82	20998	0,48	20749	
240	2,45	8,16x10 ⁻⁹	0,58	19230,8	0,61	17376,2	3,29	18101	0,53	18277	
260	2,24	1,83x10 ⁻⁸	0,61	15748	0,62	20207,3	3,00	15835	0,62	15028	
280	2,04	1,29x10 ⁻⁸	0,67	12987	0,69	14510	2,50	12547	0,63	12676	
300	1,84	2,30x10 ⁻⁸	0,71	10256,4	0,74	5466,25	2,11	10295	0,67	10133	
320	1,71	2,66x10 ⁻⁸	0,76	7722,01	0,79	6867,03	1,59	7617,3	0,75	7540,7	

H(I)–I eğrisinden elde edilen seri direnç değerinin dV/d(lnI)–I grafiğinden elde edilen değerle yakın bir uyum içinde olduğu açıkça görülebilir. Bu durum Cheung'un yaklaşımının tutarlılığını göstermektedir. I–V karakteristiklerinin doğrusal olmaması nedeniyle, Cheung fonksiyonlarından elde edilen idealite faktörünün değerleri, ileri sapma I–V değerlerinden daha yüksek olabilir. İdealite faktörlerinin değerleri arasındaki fark, birincisinin sadece arayüzey özelliklerinin etkisi altında olmasına, ikincisinin ise hem arayüzey özelliklerinin hem de seri direncin etkisi altında olmasına bağlanabilir (Aydın, 2007).



Şekil 4.19. D2 Schottky diyot yapısının (-3,+3) volt ve (5-5000) kHz frekans aralığında elde edilen (a) ve (b) düşük-yüksek C-V grafikleri, (c) ve (d) düşük-yüksek G/ω-V grafikleri

Schottky kontakların akım iletim mekanizmalarının yanı sıra elde edilen diyotun frekansa karşı verdiği tepkiyi belirlemek amacıyla organik arayüzey katmanlı Schottky diyotların frekansa bağlı parametreleri incelendi. C-V ve G/ω-V karakteristikleri oda sıcaklığında 5-5000 kHz frekans aralığında incelenerek sırasıyla Şekil 4.19’de görüldüğü üzere C-V eğrileri terslenim, yığılma ve tükenim tabakasından oluşan üç bölgeye sahip olduğu gözlemlenmiştir. Şekillerden de anlaşılacağı gibi C-V ve G/ω-V terslenim (-3V/-1V), tüketim (-1V/1V) ve yığılma (1V/3V) olmak üzere tıpkı MOY yapılar gibi üç bölgeye sahiptir. Özellikle yüksek frekanslarda olmak üzere terslenim ve yığılma bölgelerinde C-V ve G/ω-V sabit bir değer almaktadır.



Şekil 4.20. D2 Schottky diyot yapısının (-3,+3) volt ve (5-5000) kHz frekans aralığında elde edilen (a) ve (b) düşük- yüksek frekans R_i -V grafiği, (c) C^{-2} -V grafiği, (d) 5 kHz'de N_{ss} -V grafiği

Genelde C-V ölçümlerinden elde edilen engel yüksekliği I-V ölçümlerinden elde edilenden büyüktür. Yani her iki ölçümden elde edilen engel yükseklikleri birbirinden farklıdır. Bu fark imaj kuvvetin etkisi, kenar sızıntı akımları, metal ile yarıiletken arasına doğal veya deneysel yollarla oluşturulmuş herhangi bir yalıtkan tabaka, engel yüksekliği homojensizliği, safsızlık seviyesi ve ölçüm sistemlerinin tekniğinden dolayı kaynaklanmaktadır (Werner, 1991)(Tung, 2001). Ayrıca, katkılama seviyesi arttıkça I-V ölçümlerinden elde edilen engel yüksekliği azalırken, C-V ölçümlerinden elde edilen engel yüksekliği sabit kalır (Tung, 2001).

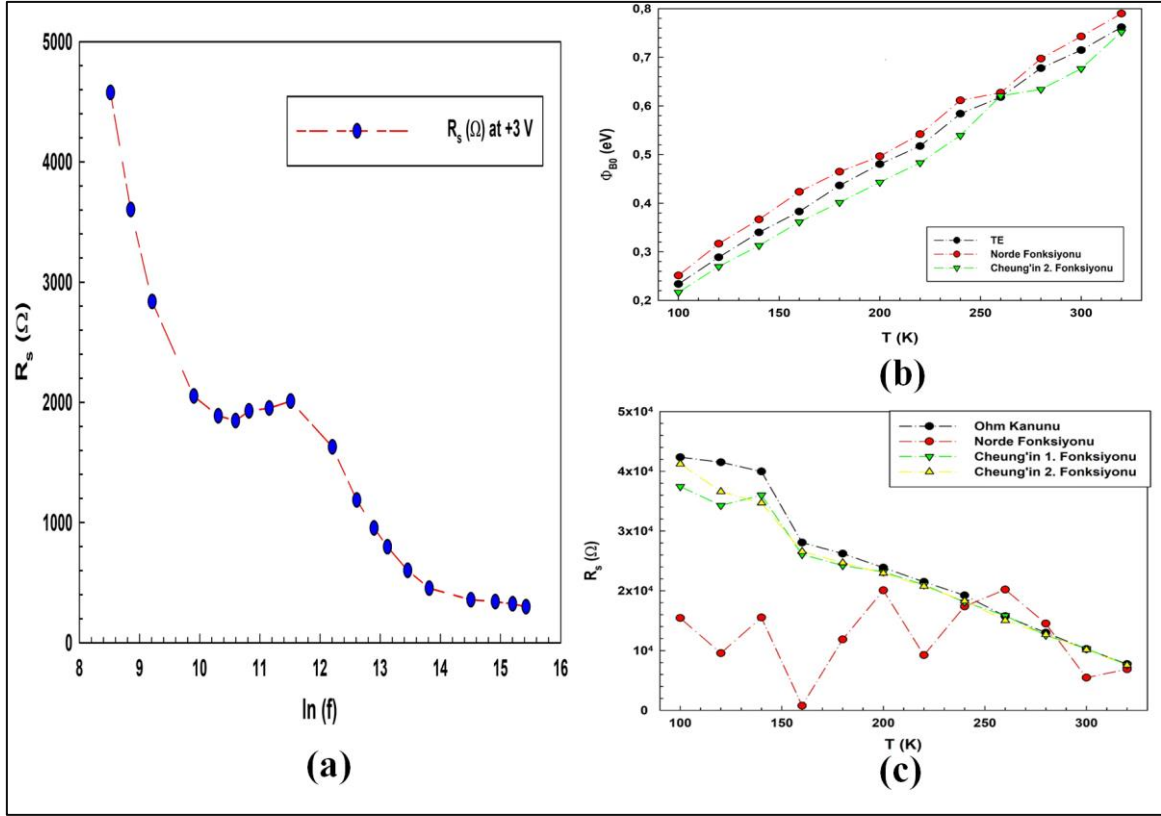
İdeal bir elektronik kontak için N_{ss} değerinin yaklaşık olarak $10^{12} eV^{-1} cm^{-2}$ değerinde olması beklenir. Ancak yarıiletkenin yasak enerji aralığında yarıiletken ve arayüzey tabakası arasında oluşan arayüzey durumları, metal ile yarıiletken arasında homojen

olmayan bariyer, kontağın R_s değeri, alıcı ve verici atomların konsantrasyonunun homojensizliği gibi sebepler kontağın ideallikten sapmasına neden olur. Bu yüzden arayüzey durumları kontağın kapasitans ve iletkenlik değerlerini oldukça etkilemektedir (Sevgili, 2020).

Tablo 4.10. D2 Diyot yapısı için çeşitli frekanslar ile hesaplanan V_D , N_A , E_F , W_D , Φ_{B0} (C-V) ve R_s değerleri

Frekans (kHz)	V_D (eV)	N_A (cm^{-3})	E_F (eV)	W_D (cm)	Φ_{B0} (eV)	R_s (Ω) +3 V'daki
5	0,12	2,57E+15	0,23	3,16E-05	0,36	4660,04
7	0,13	2,40E+15	0,23	3,35E-05	0,37	3496,47
10	0,14	2,23E+15	0,24	3,53E-05	0,38	2651,62
20	0,14	2,02E+15	0,24	3,80E-05	0,38	1873,21
30	0,15	1,92E+15	0,24	3,97E-05	0,39	1690,88
40	0,14	1,79E+15	0,24	4,02E-05	0,39	1571,77
50	0,13	1,68E+15	0,24	4,04E-05	0,38	1517,11
70	0,13	1,56E+15	0,24	4,09E-05	0,38	1426,48
100	0,12	1,45E+15	0,25	4,14E-05	0,37	1303,09
200	0,11	1,30E+15	0,25	4,28E-05	0,37	937,47
300	0,11	1,19E+15	0,25	4,36E-05	0,37	680,40
400	0,11	1,13E+15	0,25	4,42E-05	0,36	517,71
500	0,09	1,04E+15	0,26	4,35E-05	0,35	421,68
700	0,08	9,43E+14	0,26	4,26E-05	0,34	306,41
1000	0,07	8,49E+14	0,26	4,09E-05	0,33	227,98
2000	0,09	7,62E+14	0,26	4,83E-05	0,35	153,56
3000	0,08	6,81E+14	0,27	4,96E-05	0,35	133,63
4000	0,11	6,81E+14	0,27	5,82E-05	0,38	124,04
5000	0,28	2,32E+15	0,23	4,94E-05	0,52	118,94

Organik arayüzey tabakasına sahip frekansa bağlı kapasitans ve iletkenlik özellikleri sırasıyla Şekil 4.19 ve Şekil 4.20'de gösterilmektedir. Şekillerden de görüldüğü gibi hem pozitif hem de negatif öngerilim gerilimlerinde artan gerilim ile kapasitans değerleri artar, buna rağmen pozitif gerilim bölgesinde artan gerilim ile iletkenlik değerleri artar, ancak negatif gerilim bölgesinde sabit olma eğilimindedir. Bunlara ek olarak artan frekansla kapasitans değerleri azalırken, iletkenlik değerleri artmaktadır. Bu değişikliklerin nedeni, yüksek voltaj bölgelerindeki seri direnç ve arayüz durumunun etkisine bağlanabilir (Karabulut, 2018)(Turut , 2015).



Şekil 4.21. D2 Schottky diyot yapısının (a) R_s - $\ln(f)$ grafiği, (b) TE, Norde Fonksiyonu ve Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre Bariyer Yüksekliği-Sıcaklık karşılaştırılması, (c) Ohm Kanunu, Norde Fonksiyonu ve Cheung'in 1. Fonksiyonu, Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre Seri direnç-sıcaklık karşılaştırılması

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, yarıiletken malzeme olarak hol (boşluk) bakımından zenginleştirilmesi için P/Boron katkılı p-tipi Si, 100 yönelimine sahip, 525 ± 25 μm kalınlıkla, 1-10 Ω cm öz dirençli Si kristali kullanılarak bu malzeme üzerine arayüzeyli olarak 2 adet fotodiyot yapılarak bu aygıtların akım iletim mekanizmaları incelendi.

Bu çalışmaya konu olan organik ve organometalik moleküllerin DFT hesaplamaları Gaussian 09 paket programı kullanılarak yapılmıştır. İlk olarak organik ve organometalik moleküllerin geometrik optimizasyonları yapılarak en kararlı yapıları belirlenmiştir. Ph-PDI-Ph ve Pyr-PDI-Ph molekülleri B3LYP hibrit fonksiyoneliyle 6-31G (d,p) temel seti kullanılarak optimize edilmiştir. Moleküllerin optimize edilmiş molekül yapıları Şekil 3.1.1, 3.1.2’de verilmiştir. Moleküllerin optimize edilmiş molekül yapıları bulunduğundan sonra, moleküllerin en yüksek enerjili dolu moleküler orbital olarak tanımlanan HOMO ve en düşük enerjili boş moleküler orbital olarak tanımlanan LUMO orbitallerinin enerji değerleri (E_{HOMO} ve E_{LUMO}), enerji band aralıkları (ΔE), iyonlaşma potansiyeli (IP), elektron affinitesi (EA), elektronegatiflik (χ), kimyasal potansiyel (μ), kimyasal sertlik (η), kimyasal yumuşaklık (ζ), global elektrofilisite indeksi (ω) ve maksimum yük transfer indeksi (ΔN_{max}) gibi bazı önemli kimyasal parametreleri hem gaz fazında hem de sıvı fazda (DMSO) hesaplanmıştır. Organik ve organometalik moleküllerin HOMO-LUMO enerji diyagramları ve hesaplanan kimyasal parametreleri sırasıyla; şekil 5.4 ve 5.5, tablo 5.1, şekil 5.6 ve 5.7, tablo 5.2’de verilmiştir. Ph-PDI-Ph, Pyr-PDI-Ph’nin HOMO-LUMO diyagramlarına bakıldığında zaman, bütün LUMO’lar ve HOMO’lar molekülün merkezine dağılmıştır. Bütün moleküllerdeki fenil gruplarının HOMO ve LUMO gibi öncü orbitallere katkısının olmadığı görülmüştür. Organik moleküllerin gaz ve sıvı (DMSO) fazda enerji band aralıklarına bakıldığında zaman sırasıyla, Ph-PDI-Ph’de HOMO-LUMO arasındaki enerji farkı 2.536 ve 2.519 eV, Pyr-PDI-Ph’da 2.533 ve 2.515 eV’dur. Bir molekülün

HOMO ve LUMO orbitalleri arasındaki enerji band aralığının küçük olması o molekülün kimyasal reaksiyonlarda daha reaktif, daha çok polarize olabilen ve daha düşük kinetik stabiliteye sahip olduğu anlamına gelir. Bu durumda 2,533 ve 2,515 eV'luk enerji aralığı ile Pyr-PDI-Ph, Ph-PDI-Ph'a kıyasla kimyasal reaksiyonlarda daha reaktiftir denilebilir. Moleküllerin kimyasal potansiyelinin negatif olduğu görülmektedir. Buda hem organik hem de organometalik moleküllerin kararlı olduğu anlamına gelir. Ayrıca HOMO ve LUMO orbitalleri arasındaki enerji band aralığı küçüldükçe o molekülün kimyasal sertlik değeri azalır, kimyasal yumuşaklık değeri artar ve molekülün aktivitesi artar. Organik ve organometalik moleküllerin kimyasal parametre tablolarına bakıldığı zaman, bütün moleküllerde hem gaz hem de sıvı fazda DMSO enerji band aralığının kimyasal sertlik ve yumuşaklık arasındaki bu ilişkisi açıkça görülmektedir. Gaz ve sıvı fazda 1.268 ve 1.259 eV'luk en yüksek sertlik değerleriyle Ph-PDI-Ph değişime uğraması zor olan, iyi stabiliteye sahip, çoğu uyarılma durumlarında yüksek uyarılma enerjisi isteyen moleküldür denilebilir (Harbola, 1991)(Parr, 1983). Ayrıca organik ve organometalik moleküllerin elektrofilik ve nükleofilik olarak reaktif olduğu bölgeleri belirlemek için MEP yüzey analizleri yapılmıştır. Moleküllerin MEP yüzey analizleri Şekil 5.10, 5.11'de verilmiştir. Molekül Ph-PDI-Ph, Pyr-PDI-Ph'de, merkez halkalara bağlı hidrojen ve azot atomlarının çevresi pozitif potansiyele sahipken oksijen atomlarının çevresinin negatif potansiyele sahip olduğu görülmektedir. Komplekste ise; merkez halkasına bağlı içteki hidrojenler pozitif potansiyele sahipken rutenyum, klor ve oksijen atomları çevresinin negatif potansiyele sahip olduğu yani elektronca zengin bir bölge olduğu ve moleküllerin en reaktif bölgesinin burası olduğu görülmektedir.

Arayüzey tabakası olarak sentezlenen 1A, 1B ve 1C moleküllerinden, D1 ve D2 aygıtları yapılmıştır. Bu aygıtların elektriksel ölçümleri incelenmiştir. Farklı fiziksel ortamlarda D3 aygıtından verimli ölçümler alınamadığı için 1B ile alakalı UV ve diğer çalışmalar eklenmemiştir. Arayüzey olarak kullanılan Ph-PDI-Ph, Pyr-PDI-Ph organik molekülleri malzeme karakterizasyonunun tam olarak anlaşılabilmesi için DMSO ile oda sıcaklığında buharlaşma gibi etkilerinde göz önünde bulundurularak hazırlanan solisyonların optik özellikleri için UV-vis ölçümleri alındı. Malzemelerin optiksel olarak UV cihazında yapılan analizlerde Ph-PDI-Ph ve Pyr-PDI-Ph organik kompleksler için dalga boyları pik değerleri sırası ile 520 nm, 525 nm tespit edildi. Alınan UV-vis ölçümlerinden

malzemelerin yasak enerji aralığı 2,25 ve 2,26 eV olarak hesaplanmış ve bu hesaplamaların DFT hesaplamaları ile birbirlerine yakın değerlere sahip olduğu görülmüştür. Bu da sentezlenen moleküllerin istenilen kimyasal yapıya sahip olduğunu göstermesi ile birlikte sentezlenen yapıların yarıiletken özelliğe sahip olduğunu ortaya koymaktadır. Sentezlenen malzemelerin yüzey morfolojisi anlamak için AFM cihazı kullanıldı. Termal buharlaştırma ile yapılan aygıtlardaki organik malzemenin yüzey pürüzlülüğünün çok küçük olduğu tespit edilmiştir.

Ph-PDI-Ph, Pyr-PDI-Ph organik bileşikleri kullanılarak D1, D2 diyotlarının fabrikasyonu yapılmıştır. Öncelikle fabrikasyonu yapılan bu diyotların elektriksel karakteristiklerinin incelenmesi için oda sıcaklığında, karanlıkta ve diyotların hepsi sabit bir gerilim aralığında ve aynı koşullarda ışığa-sıcaklığa ve frekansa bağlı akım iletim analizi yapılmıştır. Elde edilen sonuçların yarı logaritmik I-V, I-V-T, C-V ve $1/C^2$ grafiklerinden diyot parametreleri TE, Norde ve Cheung fonksiyonları ve Ohm yasına göre parametreler incelenip hesaplanmıştır. Fabrikasyonu yapılan diyot kontaklarının deneysel I-V (akım-gerilim) karakteristiklerinden sıcaklığa, ışığa ve frekansa bağlı parametreleri hesaplanarak karşılaştırılmıştır.

Oda sıcaklığında ve karanlık ortamda yapılan ölçümler sonuçlarına göre hazırlanan Schottky kontakların bariyer yüksekliği ve idealite değerleri hesaplandı. İdealite faktörleri D1 ve D2 için sırasıyla 1.86, 1.88 hesaplandı. İdeal Schottky kontak değeri olan $n=1$ idealite değerine en yakın kontak 1.86 idealite faktörüne sahip diyot tespit edildi. Fabrikasyonu yapılan organik arayüzey malzemeli diyotların idealite faktörleri ve engel yükseklikleri, elde edilen sıcaklığa, ışığa ve frekansa bağlı elektriksel parametreleri grafiklerden hesaplanmıştır. Yapılan hesaplamalar sonucu fabrikasyonu yapılan tüm diyotlar için $n>1$ olduğundan, ideal olmayan davranış gösterdikleri görülmüştür. İdeallikten sapmaya arayüz durumları (Orak, 2015), bariyer homojenliği (Orainy, 2014), seri direnç (Karataş, 2010), arayüzdeki taşıyıcının dağılımı (Altindal, 2014), tünelleme işlemi (Lee, 2010) ve görüntü-kuvvet etkilerine (Maity, 2015) atfedilebilir.

Karanlıktaki doğrultma oranlarına bakıldığında D1, D2 için sırasıyla 4017,43 ve 1894,18 olarak hesaplandı. Hazırlanan diyotların TE, Norde fonksiyonu ve Cheung'in 2. Fonksiyonuna göre bariyer yüksekliğinin sıcaklığa göre değişimi karşılaştırılmasına göre hesaplanan değerler birbirleri ile uyumludur. Kontakların Ohm kanunu, Norde fonksiyonu ve Cheung'in 1. fonksiyonu, Cheung'in 2. fonksiyonuna göre seri direnç-sıcaklık karşılaştırılmasına göre Norde fonksiyonun verileri diğer fonksiyonların verilerinden oldukça farklı veriler olarak elde edilmiştir.

Diyotların C-V ve G/w-V ölçümlerinde, negatif gerilim aralığında, kapasitans ve iletkenlik değerleri değişen frekanslarda herhangi bir değişiklik göstermez iken, pozitif gerilim aralığında her ikisi de frekanstan güçlü bir şekilde etkilendiği tesbit edildi. Kontak üzerine uygulanan gerilimdeki artış, frekansı takip eden kontak iletkenlik değeri ile daha da artmış, ancak bir süre sonra artan tepkiyi kaybetmiş ve yüksek gerilimlerde neredeyse sabit bir biçimde ilerlemiştir. Kapasitans ve iletkenlikte meydana gelen bu tepkilere karşılık kontak seri direncinin değişim bölgelerinde tepki verdiği tesbit edildi.

Fotodiyotlar üzerlerine düşen ışık şiddetinin artması ile ters beslem bölgesindeki akımlarının artmasına bağlı bir yapıya sahip olduklarından (Bhattacharya P, 1997), fabrikasyonu yapılan organik arayüzey malzemeli kontakların ışık şiddetini elektriksel sinyallere dönüştürdüğünü, bundan kaynaklı olarak fotodiyot özelliğe sahip olduğu söylenir. Işık şiddeti 30-100 mW/cm² aralığında arttırıldığında kontaklarda doğru beslem bölgesindeki akım fazla değişmemesine rağmen, ters beslem bölgesinde akım artışı gözlemlendi.

Sonuçta Ph-PDI-Ph, Pyr-PDI-Ph organik arayüzey malzemesi kullanılarak fabrikasyonu yapılan Au/Ph-PDI-Ph/p-Si/Al, Au/Pyr-PDI-Ph/p-Si/Al schottky diyotların, literatür ile kıyaslandığında schottky kontaklarını ideallikten uzaklaştırmış olmasına rağmen fotodiyot özelliğinin olduğu görüldü. Bu sonuçlardan yola çıkarak organik tabanlı fotovoltaiik aygıt üretiminde Ph-PDI-Ph ve Pyr-PDI-Ph organik moleküllerinin araştırma ve geliştirme çalışmalarında kullanılabileceği sonucuna varılmıştır.

KAYNAKLAR

Alam MJ, Khan AU, Alam M , Ahmad S (2019) Spectroscopic (FTIR, FT-Raman, ¹H NMR and UV–Vis) and DFT/TD-DFT studies on cholesteno [4, 6-b, c]-2', 5'-dihydro-1', 5'-benzothiazepine. Journal of Molecular Structure, 1178: 570–582

Al Orainy RH (2014) Electrical characterization of a Schottky diode based on organic semiconductor film. J. Optoelectron. Adv. Mater, 16: 793–797

Altindal T, Tunç H, Yücedag IT (2014) Electrical and photovoltaic properties of Au/(Ni, Zn)-doped PVA/n-Si structures in dark and under 250 W illumination level. Mater. Sci. Semicond. Process, 28: 48–53

Aydin ME, Yakuphanoglu F, Eom JH, Hwang DH (2007) Electrical characterization of Al/MEH-PPV/p-Si Schottky diode by current-voltage and capacitance-voltage methods. Physica B: Condensed Matter, 387(1-2): 239-344

Aydoğan Ş, İncekara Ü, Deniz AR, Turut A (2010) Extraction of electronic parameters of Schottky diode based on an organic Orcein. Microelectronic Engineering, 87(12): 2525–2530

Aydoğan Ş (2004) Polimer inorganik Yarıiletken Kontakların Karakteristik Parametrelerinin Sıcaklığa Bağlı I-V, C-V, C-f, Ölçümlerinden Tayin Edilmesi. Doktora tezi, Atatürk Üniversitesi Fen bilimleri Enstitüsü, s.117

Aydoğan Ş (2011) Katıhal Fiziği

Bardeen J (1947) Surface states and rectification at a metal semi-conductor contact. Physical Review Letters, 71(10): 717–727

Battal A, Tatar D, Koçyiğit A, Düzgün B (2015) Substrat sıcaklığının bazı özelliklere etkisi, sprey piroliz kullanılarak iki kat katkılı kalay oksit ince filmler. Materials Focus, 4:445–456

Becke AD (1988) Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. Phys Rev A, 38(6):3098

Berkowitz M, Parr RG (1988) Molecular hardness and softness, local hardness and softness, hardness and softness kernels, and relations among these quantities. The Journal of Chemical Physics, 88(4) :2554–2557
Bhattacharya P (1997) Semiconductor Optoelectronic Devices. Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, s.345

Bıyıklı N (2004) High-Performance Al_x Ga_{1-x} N-Based UV Photodetectors for Visible/Solar-Blind Applications, Bilkent Üniversitesi, s.179

Bolotnikov AE, Boggs SE, Hubert Chen CM, Cook WR, Harrison FA, Schindler SM (2002) Properties of Pt Schottky type contacts on high-resistivity CdZnTe detectors. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. s.395-407

Brütting W (2006) Introduction to the Physics of Organic Semiconductors. In Physics of Organic Semiconductors

Card HC, Rhoderick EH (1971) Studies of tunnel MOS diodes I. Interface effects in silicon Schottky diodes. Journal of Physics D: Applied Physics 4(10): 1589

Chattopadhyay P, Sanyal S (1995) Capacitance-voltage characteristics of Schottky barrier diode in the presence of deep-level impurities and series resistance. Applied Surface Science 89(2):250-209

Cheung SK, Cheung NW (1986) Extraction of Schottky diode parameters from forward current-voltage characteristics. Applied Physics Letters, 49(2): 85–87

Cheung SK, Cheung NW (1986) Extraction of Schottky diode parameters from forward current-voltage characteristics. Applied Physics Letters, 49(2): 85–87

Close B, Tatar AE, Bulgurcuoglu P, Gokdemir P, Aydogan D, Yilmazer O, Özdemir K K (2009) Electrical and photovoltaic properties of Cr/Si Schottky diodes. Int. J. Hydrogen Energy, 34:5208–5212

Cowley AM, Sze SM (1965) Surface states and barrier height of metal-semiconductor systems. Journal of Applied Physics, 36: 3212

Crowell, CR, Sze SM (1966) Current transport in metal-semiconductor barriers. Solid State Electronics, 9 (11-12): 1035-1048

Dalla GF, Pancheri L, Stoppa D, Henderson R, Richardso J (2011) Avalanche Photodiodes in Submicron CMOS Technologies for High-Sensitivity Imaging. In Advances in Photodiodes, s.225-249

Dennington R, Keith T, Millam J, GaussView, Version 5, Semichem Inc, SMK (2010) No Title, 7(1): 41-57

Doğan H, Yıldırım N, Orak İ (2017) Photovoltaic and Electrical Properties of Al/Ruthenium (II)-complex / p-Si Photodiode. Cumhuriyet Science Journal, 38(2): 329–329

Domingo LR, Chamorro E, Pérez P (2008) Understanding the reactivity of captodative ethylenes in polar cycloaddition reactions. A Theoretical Study. Journal of Organic Chemistry, 73(12): 4615–4624

Donati, S (2001) Photodetectors: Devices, Circuits, and Applications. Measurement Science and Technology, s.464

Fleming I (1976) Frontier orbital and organic chemical reactions. John Wiley and Sons, New York, 320(5): 879-880

Frisch M J, Trucks G, Schlegel HB, Scuseria G E, Robb MA, Cheeseman JR, Scalmani G, Barone V, Mennucci B, Petersson GA, Nakatsuji H, Caricato M, Li X, Hratchian HP, Izmaylov AF, Bloino J, Zheng G, Sonnenberg J L, Hada M (2010) No Title, 5(1): 6-10

Gelfand N, Freidzon A, Vovna V (2019) Theoretical insights into UV–Vis absorption spectra of difluoroboron β -diketonates with an extended π system: An analysis based on DFT and TD-DFT calculations. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 216:161–172

Güllü Ö, Aydoğan Ş, Türüt. A (2008) Fabrication and electrical characteristics of Schottky diode based on organic material. Microelectronic Engineering, 85(7): 1647–1651

Harbola MK, Chattaraj PK, Parr RG (1991) Aspects of the Softness and Hardness Concepts of Density- Functional Theory. Israel Journal of Chemistry, 31(4): 395–402

Hay PJ, Wadt WR (1985) Ab initio effective core potentials for molecular calculations – potentials for the transition-metal atoms Sc to Hg. J. Chem. Phys, 82: 270–283

Ismael Raafat A, El-Hag Ali, A (2019) A novel Lawsonia inermis (Henna)/(hydroxyethylcellulose/polyvinylpyrrolidone) wound dressing hydrogel: radiation synthesis, characterization and biological evaluation. Polymer Bulletin, 76(8): 4069–4086

Kacuş H (2014) Au/Antrasen/n-Si/Al Schottky Diyodun Temel Karakteristik Parametrelerinin Sıcaklığa Bağlı I-V (Akım-Voltaj) ve C-V (Kapasite-Voltaj) Ölçümlerinden Tayin Edilmesi. YL Tezi. Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, s.89

Karabulut A, Türüt A, Orak İ (2018) Au/Ti/HfO₂/n-GaAs yapılarının elektriksel ve dielektrik özellikleri. J. Mol. Yapı, 1157:513–518

Karataş Ş, Türüt A (2006) The determination of electronic and interface state density distributions of Au/n-type GaAs Schottky barrier diodes. Physica B: Condensed Matter, 381(1–2):199–203

Karataş Ş, Altındal Ş (2004) ideal olmayan Schottky diyotların temel parametrelerinin akım-voltaj karakteristiklerinden hesaplanması. Fen ve Mühendislik Dergisi 7(2): 20–25

Karataş Ş (2010) Effect of series resistance on the electrical characteristics and interface state energy distributions of Sn/p-Si (MS) Schottky diodes. Microelectron. Eng, 87: 1935–1940

Karataş Ş, Yıldırım N, Türüt A (2013) Cr/n-Si Schottky bariyer diyotunun elektriksel özellikleri ve arayüzey durum enerji dağılımları. Superlattices Microstructure, 64: 483–494

Katz H (1997) No Title. J. Mater. Kimya, 7:369

Kiliçoğlu T, Asubay S (2005) The effect of native oxide layer on some electronic parameters of Au/n-Si/Au-Sb Schottky barrier diodes. Physica B: Condensed Matter, 368(1-4): 58-63

Klaauk H (2006) Organic electronics: materials, manufacturing, and applications, s.428

Kolhe NB, Asha SK, Senanayak SP, Narayan KS (2010) n-Type Field Effect Transistors Based on Rigid Rod and Liquid Crystalline Alternating Copoly(benzobisoxazole) Imides Containing Perylene and/or Naphthalene. J. Phys. Chem. B, 114:16694–16704

Kwietniewski N, Sochacki M, Szmidt J, Guziewicz M, Kaminska E, AP (2008) Yüzey Temizleme Etkilerinin Schottky Diyotlarının 4H – SiC Üzerindeki Özellikleri Üzerindeki Etkisi. Uygulamalı Yüzey Bilimi Etkisi, 254: 8106–8110

Lee J, Uhrmann T, Dimopoulos T, Bruckl HJF (2010) TEM study on diffusion process of NiFe Schottky and MgO/NiFe tunneling diodes for spin injection in silicon. IEEE Trans. Magn, 46:2067–2069

Lee C, Yang W, PR (1988) Development of the Colle–Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. Phys Rev B, 37(2): 785

Lee CP, Li CT, Ho KC (2017) Use of organic materials in dye-sensitized solar cells. In Materials Today, 20(5): 267-283

Matyjaszewski K (2006) ACS Symposium Series 944. American Chemical Society, Washington, 128 (47):15111–15113

Mönch W (1987) Role of virtual gap states and defects in metal-semiconductor contacts. Physical Review Letters, s. 224-227

Murray JS, Sen K (1996) No Title. Molecular Electrostatic Potentials: Concepts and Applications. Elsevier, s. 665

Maity NP, Maity R, Thapa RK, SB (2015) Image force effect on tunneling current for ultra thin High-K dielectric material Al₂O₃ based metal oxide semiconductor devices. Nanoelectron. Optoelectron, 10:645–648

Neamen DA (2003) Metal-Semiconductor and Semiconductor Heterojunctions. Semiconductor Physics and Devices: Basic Principles

Nicollian EH, Brews JR (1982) Metal oxide semiconductor (MOS) physics and technology. New York, 257–264

Norde H (1979) A modified forward I-V plot for Schottky diodes with high series resistance. Journal of Applied Physics, s.50

Orak İ, Ejderha K, Türüt A (2015) The electrical characterizations and illumination response of Co/N-type GaP junction device. *Curr. Appl. Phys*, 15: 1054–1061

Orak İ(2016) The performances photodiode and diode of ZnO thin film by atomic layer deposition technique. *Solid State Commun*, 247: 17–22

Padmanabhan J, Parthasarathi R, Subramanian V, Chattaraj P K (2007) Electrophilicity-based charge transfer descriptor. *The Journal of Physical Chemistry A*, 111(7): 1358–1361

Pagano P, Pelagatti P, Bacchi A, Chierotti MR, Bourne SA, Mehlana G (2017) Sorption Properties towards Environmentally Important VOCs of Half-Sandwich Ru(II) Complexes Containing Perylene-Bis-Imide Ligands, Synthesis and Reactivity in Inorganic, Metal-Organic, and Nano-Metal Chemistry, 47(3):427–432

Parr R G, Pearson RG (1983) Absolute hardness: companion parameter to absolute electronegativity. *Journal of the American Chemical Society*, 105(26):7512-7516

Parr RG, Donnelly RA, Levy M, PW (1978) Electronegativity: the density functional viewpoint. *J Chem Phys*, 68(8): 3801–3807

Rhoderick RH, Williams EH (1988). *Metal-Semiconductor Contacts*. London: Oxford University Press, 257–267

Runge E, Gross EK (1984) Density-functional theory for time-dependent systems. *Physical Review Letters*, 52(12): 997

Sevgili Ö (2020) Au/(Ag-ZnO/PVP)/n-Si (MPS) Schottky engel diyotların hazırlanması ve elektrik ile dielektrik özelliklerinin frekans ve voltaja bağlı incelenmesi / The fabrication of Au/(Ag-ZnO/PVP)/n-Si (MPS) Schottky barrier diodes and the investigation their electrical. Doktora Tezi.Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Ana Bilim Dalı, s.127

Scrocco E, JT (1978) *Advances quantum chemistry*. Edited by P. Lowdin. Academic Press New York, cilt:11

Sharma B (1984) *Metal-Semiconductor Schottky Barrier Junctions and Their Applications*. New York: Plenum Press, s.370

Singh J (2003) Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures. In Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures, s.532

Song YP, Van Meirhaeghe RL, Lafle' re WH, CF (1986) On the difference in apparent barrier height as obtained from capacitance–voltage and current–voltage/temperature measurements on Al/p-InP Schottky barriers. Solid-State Electron, 29: 633– 638

Stallinga P, Gomes HL, Murgia M, Müllen K (2002) Interface state mapping in a Schottky barrier of the organic semiconductor terrylene. Organic Electronics, 3(1): 43-51

Streetman BG, Banerjee S (2006) Dry and Wet Thermal Oxide Thickness Grown on Si (100) as a Function of Time and Temperature. In Solid state electronic devices

Sze S (1981a) Physics of semiconductor devices 2nd edition. Microelectronics Journal

Sze S (1981b) Physics of semiconductor devices 2nd edition. Microelectronics Journal, 13(4): 44–44

Şahinkaya, M (2020) Si tabanlı ru(II) kompleks yapısına alq3 organik bileşiğinin elektriksel ve fotovoltajik özelliklerini arttırmadaki etkisi. YL Tezi. Bingöl Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, s.93

Toro-Labbé A (1999) Characterization of chemical reactions from the profiles of energy, chemical potential, and hardness. The Journal of Physical Chemistry A, 103(22): 4398–4403

Tung RT (2001) Recent advances in Schottky barrier concepts. Materials Science and Engineering, 35(1–3): 1–138

Turgut G, Keskenler EF, Aydın S, Sönmez E, Doğan S, Düzgün B, Ertuğrul M (2013) Effect of Nb doping on structural, electrical and optical properties of spray deposited SnO2 thin films. Superlattices Microstructure, 56: 107–116

Turmuş M (2014) N Tipi Silisyum Tabanlı Altlık Üzerine Pyrene (C16H10) Maddesinin Kaplanarak Elde Edilen Yapıların Akım İletim Mekanizmaları. YL Tezi. Bingöl Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, s.67

Turut A (2012) İdeal Co/n-GaAs Schottky'de Norde yöntemiyle bariyer yüksekliği sıcaklık katsayısının belirlenmesi. Türk. J. Fizik, 36: 235–244

Turut T, Karabulut A, Ejderha K, Bulut N (2015) Çok ince Al_2O_3 ara yüzey tabakasına sahip Au/Ti/Al 2×10^3 / n -GaAs yapılarının kapasitans-iletkenlik özellikleri. Anne. Araş. Ekspres, 2: 046301

Türüt A, Sağlam M (1992) Determination of the density of Si-metal interface states and excess capacitance caused by them. Physica B: Physics of Condensed Matter, 179(4): 285-294

Tsumura A, Koezuka H, (1986) No Title. Appl. Fizik Lett, 49: 1210

Wageh S, Farooq WA, Tataroğlu A, Dere A, AG Al-Sehemi AA, Al-Ghamdi, Yakuphanoglu F (2017) A photodiode based on PbS nanocrystallites for FYTRONIX solar panel automatic tracking controller. Phys. B Condens. Matter, 527: 44–51

Werner JH, Güttler HH (1991) Barrier inhomogeneities at Schottky contacts. Journal of Applied Physics, 69(3): 1522–1533

Wilson AH, Fowler RH (1938) The electrical conductivity of the transition metals. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 167: 931

Yamamoto S, Liu ST, van der Ziel A (1968) Noise in p-v-p diodes at room temperature. Solid State Electronics, 11(7): 707-710

Yıldırım N (2009) Saçtırma Yöntemiyle Hazırlanan Ni/n-GaAsschottky engel diyotların karakteristik parametrelerinin tavlama ve numune sıcaklığına bağlı değişimleri. Doktora Tezi, Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, s.106

