T.C.
KASTAMONU ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
MALZEME BİLİMİ VE MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI

MoO_3 TABANLI HETEROEKLEM FOTODEDEKTÖRLERİN ÜRETİMİ, OTOMATİK SEM GÖRÜNTÜ ANALİZİ VE OPTOELEKTRONİK KARAKTERİZASYONU

HASAN MAKARA

DOKTORA TEZİ

DOÇ. DR. OSMAN ÇİÇEK

TEMMUZ - 2026
KASTAMONU

TEZ ONAYI

Hasan MAKARA tarafından hazırlanan "**MoO_3 Tabanlı Heteroeklem Fotodedektörlerin Üretimi, Otomatik SEM Görüntü Analizi ve Optoelektronik Karakterizasyonu**" adlı tez çalışmasının savunma sınavı **10.07.2026** tarihinde yapılmış olup aşağıda verilen jüri tarafından oy birliği ile Kastamonu Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü **Malzeme Bilimi ve Mühendisliği Ana Bilim Dalı Doktora Tezi** olarak kabul edilmiştir.

Danışman	Doç. Dr. Osman ÇİÇEK Kastamonu Üniversitesi	.....
Jüri Üyesi	Prof. Dr. Özgür ÖZTÜRK Kastamonu Üniversitesi	.....
Jüri Üyesi	Doç. Dr. Satiye KORKMAZ Karabük Üniversitesi	.....
Jüri Üyesi	Doç. Dr. Yusuf ONUR (Yosef BADALI) İstanbul Ticaret Üniversitesi	.....
Jüri Üyesi	Dr. Öğr. Üyesi Faruk ERKEN Kastamonu Üniversitesi	.....

Jüri üyeleri tarafından kabul edilmiş olan bu tez Kastamonu Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulunca onanmıştır.

Enstitü Müdürü Prof. Dr. Selahattin KAYMAKCI .....

TAAHHÜTNAME

Bu tezin tasarımı, hazırlanması, yürütülmesi, araştırmalarının yapılması ve bulgularının analizlerinde bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu; ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını, bilimsel etiğe uygun olarak kaynak gösterildiğini bildirir ve taahhüt ederim.

Hasan MAKARA

ÖZET

DOKTORA TEZİ

MoO_3 TABANLI HETEROEKLEM FOTODEDEKTÖRLERİN ÜRETİMİ, OTOMATİK SEM GÖRÜNTÜ ANALİZİ VE OPTOELEKTRONİK KARAKTERİZASYONU

HASAN MAKARA

KASTAMONU ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
MALZEME BİLİMİ VE MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI
DANIŞMAN: DOÇ. DR. OSMAN ÇİÇEK

Bu tez; bant aralıkları 1,12–3,26 eV arasında değişen dört n-tipi alt tabaka (Si, GaAs, InP ve 4H-SiC) üzerinde fiziksel buhar biriktirme (PVD) yöntemiyle hazırlanan *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerini, birbirini tamamlayan üç çalışma ve bu çalışmaların nicel sentezi kapsamında ele almaktadır. Biriktirilen MoO_3 filmleri polikristal ortorombik α-fazında oluşmuş; tüm aygıtlar ortak bir üretim ve karakterizasyon protokolüyle hazırlanarak alt tabakalar arası karşılaştırmaların iç tutarlılığı sağlanmıştır.

İlk çalışmada, ortam havasında 200 °C'de uygulanan ısıl tavlamanın elektriksel ve dielektrik özelliklere etkisinin alt tabakaya göre nitelik değiştirdiği belirlenmiştir. Tavlanmamış hâliyle serinin en iyi doğrultucusu olan *p*-MoO_3/*n*-4H-SiC ekleminde tavlama; bariyer yüksekliğini 1,531 eV'tan 1,203 eV'a, doğrultma oranını ise $2{,}02\times10^5$'ten 2,12'ye düşürerek doğrultucu karakteri ortadan kaldırmıştır. Buna karşılık aynı işlem *p*-MoO_3/*n*-GaAs diyodunda seri direnci yaklaşık %88 azaltıp doğrultma oranını yirmi kat artırarak başarımı iyileştirmiştir. Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-4H-SiC yapısında yürütülen frekansa bağlı dielektrik ölçümler; Debye dışı gevşeme, güçlü arayüz polarizasyonu ve atlama (hopping) baskın AC iletkenliğe işaret etmiştir.

İkinci çalışmada, aygıtların yapısal niceliklerini nesnel ve tekrarlanabilir biçimde ölçmek üzere otomatik bir taramalı elektron mikroskobu (SEM) görüntü işleme çerçevesi geliştirilmiştir. Yarı otomatik gümüş kontak çapı ölçümünü, Otsu eşikleme ve bağlı bileşen analiziyle MoO_3 parçacık yoğunluğunun otomatik tespitini ve sistematik düzeltmelerle kesit kalınlığı analizini birleştiren çerçeve; kontak çapını 1,59–1,82 mm, parçacık yoğunluğunu 23–102 parçacık/μm² ve film kalınlığını 37–72 nm aralığında nicelendirmiştir. Manuel ölçümlere göre bağıl fark %4 (Si-Tavlanmış) ile %93 (InP-Tavlanmış) arasında değişmiş, sekiz aygıtın altısında %20'nin altında kalmıştır.

Üçüncü çalışmada aynı heteroeklemler, kendinden beslemeli (harici besleme olmadan, V_{bias} = 0 V çalışan) görünür–UV fotodiyotlar olarak sınanmıştır. En yüksek görünür ışık duyarlılığı tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtında (1225 W/m²'de %15000 duyarlılık ve 43,52 dB sinyal–gürültü oranı), en yüksek morötesi özgül algılama ise tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtında (395 nm'de $D^* = 2{,}44\times10^9$ Jones) elde edilmiştir.

Üç çalışmanın nicel sentezi, MoO_3 film morfolojisi ile eklem kalitesi arasında doğrudan bir bağıntı ortaya koymuştur: tavlamanın parçacık yoğunluğunda yol açtığı bağıl değişim ile karanlık diyot parametrelerindeki (idealite faktörü, bariyer yüksekliği, seri ve şönt direnç) değişimler arasında, on altı karşılaştırmanın on beşinde işaret uyumu belirlenmiştir. Buna karşılık karanlık eklem kalitesindeki iyileşme fotoyanıt başarımına doğrudan yansımamıştır; *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtında tavlama idealite faktörünü 5,30'dan 2,21'e düşürmesine karşın 395 nm'deki özgül algılamayı yaklaşık 56 kat azaltmıştır. Bu ayrışma, film morfolojisinin öncelikle karanlık yük taşınımını, arayüzün kimyasal bütünlüğünün ise fotoyanıt başarımını belirlediğini göstermektedir.

Bütün olarak bu tez; MoO_3 tabanlı heteroeklem aygıtların güç elektroniği ve optoelektronik uygulamalar için geliştirilmesinde, alt tabaka seçimi ile tavlama stratejisinin birlikte ele alınması gereken ortak bir tasarım ilkesi oluşturduğunu ortaya koymaktadır.

ANAHTAR KELİMELER: *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklem, Isıl Tavlama, Alt Tabakaya Bağlı Modülasyon, Dielektrik Özellikler, Otomatik SEM Görüntü İşleme, Kendinden Beslemeli Fotodiyot, Görünür–UV Algılama.

Temmuz 2026, 132 Sayfa

ABSTRACT

PH.D. THESIS

FABRICATION, AUTOMATED SEM IMAGE ANALYSIS AND OPTOELECTRONIC CHARACTERIZATION OF MoO_3-BASED HETEROJUNCTION PHOTODETECTORS

HASAN MAKARA

KASTAMONU UNIVERSITY INSTITUTE OF SCIENCE
DEPARTMENT OF MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING
SUPERVISOR: ASSOC. PROF. DR. OSMAN ÇİÇEK

This thesis investigates *p*-MoO_3/*n*-semiconductor heterojunctions prepared by physical vapor deposition (PVD) on four *n*-type substrates whose bandgaps span 1.12–3.26 eV (Si, GaAs, InP and 4H-SiC), through three complementary studies and a quantitative synthesis of these studies. The deposited MoO_3 films formed in the polycrystalline orthorhombic α-phase, and all devices were produced under a common fabrication and characterization protocol, ensuring the internal consistency of the substrate-to-substrate comparisons.

In the first study, the effect of thermal annealing at 200 °C in ambient air on the electrical and dielectric properties was found to change in character with the substrate. In the *p*-MoO_3/*n*-4H-SiC junction, the best rectifier of the series in its as-deposited state, annealing lowered the barrier height from 1.531 eV to 1.203 eV and the rectification ratio from 2.02×10^5 to 2.12, thereby eliminating the rectifying character. In contrast, the same treatment improved the *p*-MoO_3/*n*-GaAs diode by reducing the series resistance by about 88% and raising the rectification ratio roughly twentyfold. Frequency-dependent dielectric measurements on the as-deposited *p*-MoO_3/*n*-4H-SiC structure indicated non-Debye relaxation, strong interfacial polarization and hopping-dominated AC conductivity.

In the second study, an automated scanning electron microscopy (SEM) image-processing framework was developed to quantify the structural properties of the devices objectively and reproducibly. Combining semi-automated silver contact diameter measurement, automated MoO_3 particle-density detection based on Otsu thresholding and connected-component analysis, and cross-sectional thickness analysis with systematic corrections, the framework yielded contact diameters of 1.59–1.82 mm, particle densities of 23–102 particles/μm² and film thicknesses of 37–72 nm. The relative difference with respect to manual measurements ranged from 4% (Si-annealed) to 93% (InP-annealed), remaining below 20% for six of the eight devices.

In the third study, the same heterojunctions were tested as self-powered visible–UV photodiodes operating without external bias (V_{bias} = 0 V). The highest visible-light photosensitivity was obtained for the as-deposited *p*-MoO_3/*n*-Si device (15000% at 1225 W/m² with a 43.52 dB signal-to-noise ratio), whereas the highest ultraviolet specific detectivity was achieved by the as-deposited *p*-MoO_3/*n*-InP device (D^* = 2.44×10^9 Jones at 395 nm).

The quantitative synthesis of the three studies revealed a direct link between MoO_3 film morphology and junction quality: sign agreement was obtained in fifteen of sixteen comparisons between the annealing-induced relative change in particle density and the corresponding changes in the dark diode parameters (ideality factor, barrier height, series and shunt resistance). However, improvements in dark junction quality did not translate directly into photoresponse performance; in the *p*-MoO_3/*n*-InP device, annealing lowered the ideality factor from 5.30 to 2.21 yet reduced the specific detectivity at 395 nm by about 56 times. This decoupling shows that film morphology primarily governs dark charge transport, whereas the chemical integrity of the interface determines the photoresponse performance.

Overall, this thesis demonstrates that substrate selection and annealing strategy constitute a joint design principle that must be considered together when developing MoO_3-based heterojunction devices for power-electronic and optoelectronic applications.

KEYWORDS: *p*-MoO_3/*n*-Semiconductor Heterojunction, Thermal Annealing, Substrate-Dependent Modulation, Dielectric Properties, Automated SEM Image Processing, Self-Powered Photodiode, Visible–UV Detection.

July 2026, 132 Pages

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmasının her aşamasında değerli bilgi, deneyim ve yönlendirmeleriyle bana yol gösteren, akademik gelişimime önemli katkılar sağlayan danışmanım Doç. Dr. Osman ÇİÇEK'e en içten teşekkürlerimi sunarım.

Aygıtların üretimi ve deneysel altyapının kurulmasındaki katkıları için Doç. Dr. Fatih ÜNAL'a teşekkür ederim. Çalışmalarım sırasında Kastamonu Üniversitesi Merkezi Araştırma Laboratuvarı (MERLAB) imkanlarından yararlanmamı sağlayan ve desteklerini esirgemeyen Doç. Dr. Fevziye Işıl KESBİÇ, Dr. Şeydanur KAYA ve Serhat KARABIÇAK ile yardımlarını gördüğüm tüm çalışma arkadaşlarıma ayrıca teşekkür ederim.

Eğitim hayatım boyunca maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman esirgemeyen, her daim yanımda olan aileme minnettarım. Bu sürecin her aşamasında gösterdiği sabır ve fedakârlık için eşim Selma'ya gönülden teşekkür ederim.

HASAN MAKARA

Kastamonu, 2026

İÇİNDEKİLER

Sayfa

TEZ ONAYI ... **ii**
TAAHHÜTNAME ... **iii**
ÖZET ... **iv**
ABSTRACT ... **vi**
TEŞEKKÜR ... **viii**
İÇİNDEKİLER ... **ix**
ŞEKİLLER DİZİNİ ... **xi**
TABLOLAR DİZİNİ ... **xiv**
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ ... **xv**
1. GİRİŞ ... **1**
1.1 Genel Çerçeve ve Motivasyon ... 1
1.2 Literatürdeki Boşluk ve Problem Tanımı ... 2
1.3 Tezin Amacı, Kapsamı ve Araştırma Soruları ... 3
1.4 Tezin Bütünleştirici Çerçevesi ... 4
1.5 Tezin Özgün Katkıları ... 5
1.6 Tezin Organizasyonu ... 6
2. GENEL BİLGİLER ... **7**
2.1 Yarıiletkenler: Temel Kavramlar, Taşıyıcılar ve Sınıflandırma ... 7
2.2 Geçiş Metali Oksitleri ve MoO_3: Elektronik Yapı ve Kusur Kimyası ... 11
2.3 Akım İletim Mekanizmaları: Termiyonik Emisyon ve MIS/Schottky Kuramı ... 19
2.4 Dielektrik Gevşeme ve Atlama (*Hopping*) İletkenliği ... 21
2.5 Otomatik SEM Görüntü İşleme ile Metroloji ... 23
2.6 Kendinden Beslemeli Görünür–UV Fotodedektörler ve Başarım Ölçütleri ... 27
3. MATERYAL VE YÖNTEM ... **32**
3.1 Alt Tabakaya Bağlı Termal Modülasyon: *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklemlerin Elektriksel ve Dielektrik Özellikleri ... 32
3.1.1 Ortak Aygıt Üretimi ve Alt Tabaka Hazırlığı ... 32
3.1.2 Yapısal Karakterizasyon ... 33
3.1.3 Karakterizasyon ve Ölçüm Sistemleri ... 35
3.2 Yarıiletken Aygıtlarda Hassas Metroloji için Otomatik SEM Görüntü İşleme ... 36
3.2.1 *p-n* Heteroeklemli Aygıtların Üretim Prosedürleri ... 36
3.2.2 Birleştirilmiş SEM Görüntü İşleme Yaklaşımı ... 37
3.2.2.1 Kontak analizi ... 37
3.2.2.2 MoO_3 parçacık yoğunluğunun nicelendirilmesi ... 39
3.2.2.3 Sistematik düzeltmelerle kesit katman kalınlığı analizinin iş akışı ... 41
3.3 *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroekleme Dayalı Kendinden Beslemeli Görünür-UV Fotodiyot Özellikleri ... 45
4. BULGULAR VE TARTIŞMA ... **49**
4.1 Alt Tabakaya Bağlı Termal Modülasyon: *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklemlerin Elektriksel ve Dielektrik Özellikleri ... 49

4.1.1 Akım–Voltaj (I–V) Karakteristikleri ve Diyot Parametreleri 49
4.1.2 Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC Heteroekleminin Dielektrik Karakteristikleri 55
4.2 Hassas Metroloji için Otomatik SEM Görüntü İşleme 64
4.2.1 *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Aygıtların Niteliksel SEM Karakterizasyonu 64
4.2.2 Kontak Analizi 67
4.2.3 MoO_3 Yüzey Analizi 69
4.2.4 Katman Kalınlığının Nicel Analizi 74
4.3 *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklemlerine Dayalı Kendinden Beslemeli Görünür-UV Fotodiyotlar 78
4.4 Tavlamanın Alt Tabakaya Bağlı Etki Mekanizması ve Enerji-Bant Yorumu 98
4.5 Bütünleştirici Tartışma 100
4.6 Çalışmalar Arası Nicel Sentez: Morfoloji–Eklem Kalitesi İlişkisi ve Fotoyanıt Ayrışması 101
5. SONUÇ VE ÖNERİLER 107
5.1 Alt Tabakaya Bağlı Termal Modülasyon: *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklemlerin Elektriksel ve Dielektrik Özellikleri 108
5.2 Yarıiletken Aygıtlarda Hassas Metroloji için Otomatik SEM Görüntü İşleme 109
5.3 *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklemlerine Dayalı Kendinden Beslemeli Görünür-UV Fotodiyotlar 110
5.4 Çalışmalar Arası Nicel Sentez ve Çapraz Doğrulama 110
5.5 Öneriler ve Gelecek Çalışmalar 111
KAYNAKLAR 114
EKLER 124
EK A. SEM Görüntü İşleme Parametreleri ve Aygıt Etiketleme Şeması 125
EK B. SEM Görüntü İşleme Algoritmaları ve MATLAB Kod Özütleri 127
EK B.1. Ölçek Çubuğu Kalibrasyonu ve Alt-Piksel İyileştirme 127
EK B.2. Gümüş (Ag) Kontak Geometrisi 127
EK B.3. MoO_3 Yüzey Parçacık Segmentasyonu 128
EK B.4. Kesit Katman Kalınlığı ve Sistematik Düzeltme 128
EK B.5. SEM Panellerinin Otomatik Dizilmesi 128
EK C. İstatistiksel Hesaplamaların Bağımsız Doğrulaması İçin Kod Özütleri 129
EK C.1. Java Kod Özütü 129
EK C.2. MATLAB Kod Özütü 130
ÖZGEÇMİŞ 131

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 2.1 (a) İletken, (b) yarıiletken ve (c) yalıtkan malzemelerin şematik enerji-bant yapıları. Yarıiletkende elektron, ısı veya ışık gibi bir dış uyarıyla yasak enerji aralığını aşarak iletim bandına geçebilmektedir 7

Şekil 2.2 Katkılamanın Fermi düzeyi (E_F) konumuna etkisi: (a) *n*-tipi, (b) asal ve (c) *p*-tipi yarıiletkenlerin şematik bant diyagramları. Dolu daireler elektronları, boş daireler oyukları temsil etmektedir 8

Şekil 2.3 Momentum uzayında (*E*–*k*) (a) doğrudan ve (b) dolaylı bant geçişlerinin şematik gösterimi. Doğrudan geçişte yalnızca foton yeterliyken, dolaylı geçişte momentum korunumu için ek olarak bir fonona gereksinim duyulmaktadır 9

Şekil 3.1 p-MoO_3/n-tipi yarıiletken heteroeklem yapılarının adım adım üretim prosedürü 33

Şekil 3.2 *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken heteroeklem yapılarının yapısal ve şematik karakterizasyonu: (a) üretilen *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıt yapısının şematik diyagramı, (b) MoO_3 tabakasının yarıiletken alt tabaka üzerindeki morfolojisini ve kalınlığını gösteren kesit SEM görüntüsü, (c) biriktirilen *p*-MoO_3 ince filmine ait X-ışını kırınım (XRD) deseni ve (d) denge koşullarında heteroeklem için önerilen enerji-bant diyagramı. 34

Şekil 3.3 *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerinin katman yapıları: (A) *n*-Si, (B) *n*-4H-SiC, (C) *n*-InP ve (D) *n*-GaAs alt tabakalı aygıtlar (şematik gösterim) 36

Şekil 3.4 SEM görüntülerinden Ag kontak çapı ölçümü için optimize edilmiş iş akışı 38

Şekil 3.5 MoO_3 parçacık yoğunluğu ölçümü için optimize edilmiş iş akışı 40

Şekil 3.6 Üçlü ölçüm kalibrasyonu ve çift faktörlü sistematik düzeltmelerle kesitsel katman kalınlığı ölçümü için optimize edilmiş iş akışı 42

Şekil 3.7 *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerin üretim süreci akışı: (a) alt tabaka hazırlığı ve Al arka kontak biriktirme, (b) yaklaşık 50 nm α-MoO_3 filminin PVD ile büyütülmesi, (c) Ag üst kontak desenlendirme ($A = 7{,}85\times10^{-2}$ cm²) ve (d) havada 200 °C'de 1 saat süreyle biriktirme sonrası tavlama 45

Şekil 3.8 Üretilen *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemin şematik gösterimi 46

Şekil 3.9 Üretilen *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklem için ölçüm sistemi 47

Şekil 3.10 *n*-Si, *n*-GaAs, *n*-InP ve *n*-4H-SiC üzerindeki α-MoO_3 ince filminin XRD deseni 47

Şekil 3.11 Heteroeklem aygıtlarının SEM görüntüleri; hem tavlanmamış hem de tavlanmış durumlarda p-MoO_3/n-Si, p-MoO_3/n-GaAs, p-MoO_3/n-InP ve p-MoO_3/n-4H-SiC'nin kesit ve üst yüzey morfolojilerini göstermekte olup, yaklaşık 50 nm'lik tek tip bir MoO_3 ara tabakasının oluştuğunu doğrulamaktadır 48

Şekil 4.1 *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken heteroeklem diyotlarının ileri ve geri besleme koşullarındaki yarı-logaritmik I–V karakteristikleri 49

Şekil 4.2 *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken heteroeklem diyotlarının Φ_{B0} ve *n* değerleri 51
Şekil 4.3 *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken heteroeklem diyotlarının uygulanan voltajın fonksiyonu olarak R_s ve R_{sh} grafikleri 52
Şekil 4.4 p-MoO_3/n-tipi yarıiletken heteroeklem diyotlarında seri direncin Cheung yöntemiyle belirlenmesi: (A) dV/dln(I) ve (B) H(I) fonksiyonlarının dört alt tabaka (a: GaAs, b: InP, c: Si, d: SiC) için doğrusal uyarlamaları ile (C) her iki yöntemden elde edilen Rs değerlerinin karşılaştırması. Siyah: tavlanmamış, mavi: tavlanmış 54
Şekil 4.5 Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklem diyotlarının frekansa bağlı C–V, G–V, C^{-2}–V, R_s–V ve arayüz durum yoğunluğu karakteristikleri 56
Şekil 4.6 Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklem diyotu için farklı frekanslarda voltaja bağlı ε' (a), ε'' (b), tan δ (c), M' (d), M'' (e) ve σ_{ac} (f) karakteristikleri 61
Şekil 4.7 Tavlanmış *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtların SEM görüntüleri. Şekil, dört yarıiletken alt tabaka üzerinde karşılaştırmalı morfolojik analizi göstermektedir: GaAs (satır 1), InP (satır 2), Si (satır 3) ve SiC (satır 4) 65
Şekil 4.8 Temel karşılaştırma için tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtların SEM görüntüleri. Şekil, aynı dört yarıiletken alt tabaka üzerinde tavlanmamış aygıt morfolojisini göstermektedir: GaAs (satır 1), InP (satır 2), Si (satır 3) ve SiC (satır 4) 66
Şekil 4.9 Ag kontak çapı karakterizasyonu ve karşılaştırmalı analiz. (a) Ölçek çubuğu kalibrasyonu, (b) Kontak çapı ölçümü (kırmızı çizgi: çap, siyah kesikli daire: kontak sınırı), (c) Dört alt tabakada kontak çapı: sütunlar görüntü analizi (lacivert tavlanmış, açık mavi tavlanmamış), kesikli çizgiler gerçek SEM ölçümü (koyu kırmızı tavlanmış, kırmızı tavlanmamış) 68
Şekil 4.10 MoO_3 parçacık yoğunluğu iş akışı ve karşılaştırmalı analiz. (a) *p*-MoO_3/*n*-InP tavlanmış aygıt örneğinde ölçek kalibrasyonu, (b) ilgi bölgesi (ROI) seçimi (kırmızı kaplama, 2,67 μm^2), (c) 154 parçacığın otomatik olarak tespit edilmesi (kırmızı çarpı işaretleri, yoğunluk: 58 parçacık/μm^2), (d) Tavlanmış (yeşil) ve tavlanmamış (turuncu) koşullar için dört farklı alt tabaka üzerinde parçacık yoğunluğu karşılaştırması 71
Şekil 4.11 Kesitsel tabaka kalınlığı analizi ve algoritma ile gerçek SEM ölçümünün karşılaştırması. (a-c) *p*-MoO_3/*n*-InP tavlanmamış aygıtta üçlü kalibrasyon ve çok noktalı ölçüm örnekleri, (d) Algoritma tabanlı kalınlık ölçümleri (renkli daireler: tek tek veriler, yatay çizgi: ortalama), (e) Gerçek SEM ölçümleri 75
Şekil 4.12 Karanlık koşullar altında ve görünür ışık aydınlatması (1300 W/m^2) altında ölçülen, hem tavlanmamış hem de tavlanmış durumdaki *p*-MoO_3/*n*-Si, *p*-MoO_3/*n*-GaAs, *p*-MoO_3/*n*-InP ve *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtlarının yarı logaritmik I–V karakteristikleri 79
Şekil 4.13 Karanlık ve UV ışığı altında (395 nm) tavlanmamış ve tavlanmış durumlarda aynı dört aygıtın yarı logaritmik I–V karakteristikleri 80
Şekil 4.14 Karanlık, görünür (1300 W/m^2) ve UV (395 nm) ışık altında tavlanmamış ve tavlanmış durumdaki tüm aygıtların elektronik parametreleri (*n*, Φ_{B0}, *RR*, R_s, R_{sh}) 86

Şekil 4.15 *p*-MoO_3/*n*-Si, -GaAs, -InP ve -SiC aygıtlarının kendinden beslemeli fotodedektör parametreleri (*PS*, *R*, *D**, *SNR*); V_{bias} = 0 V'da görünür ışık yoğunluğunun (650–1300 W/m²) bir fonksiyonu olarak; tavlanmamış (kesikli, açık) ile tavlanmış (düz, dolu) durumların karşılaştırması 91
Şekil 4.16 V_{bias} = 0 V'da UV aydınlatması (365 nm ve 395 nm) altında, tavlanmamış ve tavlanmış durumlar için aynı dört aygıtın kendinden beslemeli fotodedektör parametreleri 92
Şekil 4.17 Tek bir entegre şekilde MoO_3 tabanlı fotodedektörlerin performans karşılaştırması: çeşitli konfigürasyonlar için ışık duyarlılığı ve ışık yoğunluğu 98
Şekil 4.18 Morfoloji ile karanlık eklem kalitesi arasındaki çalışmalar arası ilişki. (a) Tavlamanın yol açtığı parçacık yoğunluğu değişimi (Δρ) ile karanlık idealite faktörü değişimi (Δ*n*) arasındaki ilişki; (b) sekiz aygıtın tamamı için parçacık yoğunluğu (ρ) ile idealite faktörü (*n*) arasındaki mutlak ilişki (içi boş işaretler: tavlanmamış, dolu işaretler: tavlanmış; oklar tavlama yönünü gösterir) 105
Şekil 4.19 Karanlık eklem kalitesi ile UV fotoyanıt başarımı arasındaki ayrışma. Yatay eksen tavlamayla karanlık idealite faktöründeki değişimi, düşey eksen UV özgül algılamadaki (*D**) logaritmik oran değişimini gösterir; *n*-InP'de karanlık eklem iyileşirken fotoyanıtın çökmesi 105

TABLOLAR DİZİNİ

Sayfa

Tablo 2.1 Diyot ve fotodiyot uygulamalarında öne çıkan geçiş metali oksitlerinin yarıiletken tipi, yaklaşık bant aralığı ve temel işlevleri 12
Tablo 2.2 Diyot ve fotodiyot uygulamalarında öne çıkan geçiş-sonrası (ana grup) metal oksitlerinin yarıiletken tipi, yaklaşık bant aralığı ve temel işlevleri 13
Tablo 2.3 Geçiş metali oksitleri ile geçiş-sonrası metal oksitlerinin temel özellikleri bakımından karşılaştırılması 14
Tablo 4.1 Temel diyot parametreleri ve doğrultma başarımı (RR: doğrultma oranı) 50
Tablo 4.2 Standart yöntem ve Cheung fonksiyonları ile elde edilen R_s değerlerinin ayrıntılı karşılaştırması..... 53
Tablo 4.3 Farklı frekanslarda tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklem diyotunun hesaplanan elektronik parametreleri 59
Tablo 4.4 Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklem diyotunun C_0, C_{0x} ve ε'_{max} değerleri..... 62
Tablo 4.5 *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtlar için Ag kontak çapı ve alan ölçümleri 69
Tablo 4.6 *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtlar için MoO_3 parçacık yoğunluğu analizi sonuçları 72
Tablo 4.7 Algoritma tabanlı ve gerçek SEM katman kalınlığı ölçümlerinin karşılaştırmalı analizi (değerler, cihaz çözünürlüğü ve ölçüm saçılımı dikkate alınarak en yakın nanometreye yuvarlanmıştır; bağıl farklar yuvarlanmamış ölçümlerden hesaplanmıştır)..... 74
Tablo 4.8 Karanlık, görünür (650–1300 W/m²) ve UV (365 nm, 395 nm) aydınlatma altında tavlanmamış ve tavlanmış durumdaki *p*-MoO_3/*n*-Si, -GaAs, -InP ve -SiC aygıtlarının elektronik parametreleri (n, Φ_{B0}, I_0, R_s, R_{sh}). Her hücre tavlanmamış / tavlanmış değerleri verir..... 84
Tablo 4.9 V_{bias} = 0 V'da görünür (650–1300 W/m²) ve UV (365 nm, 395 nm) aydınlatma altında tavlanmamış ve tavlanmış durumdaki *p*-MoO_3/*n*-Si, -GaAs, -InP ve -SiC aygıtlarının kendinden beslemeli fotodedektör parametreleri (*PS*, *R*, *D**, *SNR*). Her hücre tavlanmamış / tavlanmış değerleri verir 90
Tablo 4.10 MoO_3 tabanlı fotodedektör/fotodiyot performansının literatürle karşılaştırılması 95
Tablo 4.11 Tavlamanın morfolojik etkisi (Δρ) ile karanlık diyot parametrelerindeki ve UV özgül algılamadaki değişimlerin alt tabaka bazında karşılaştırılması. Oranlar, tavlanmış değerin tavlanmamış değere bölümüdür 102
Tablo A 1 SEM görüntü işleme rutinlerinde kullanılan sabit parametreler 125
Tablo A 2 Dosya adı ilk karakterine göre aygıt etiketleme şeması..... 125
Tablo A.3 Kesit katman kalınlığı analizinde uygulanan sistematik düzeltme katsayıları 126

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler

2θ : X-ışını kırınım açısı (°)
A : Kontak alanı (cm^2)
A* : Etkin Richardson sabiti ($A \cdot cm^{-2} \cdot K^{-2}$)
c : Işık hızı ($m \cdot s^{-1}$)
C_0 : Boşluk kapasitansı (F)
C_m : Ölçülen paralel kapasitans (F)
C_{0x} : Arayüz (oksit) tabakası kapasitansı (F)
D* : Özgül algılama / dedektivite (Jones)
E_F : Fermi enerji düzeyi (eV)
E_g : Yasak enerji aralığı (bant aralığı) (eV)
E_m : Maksimum elektrik alanı (V/cm)
f : Frekans (Hz)
G_m : Ölçülen paralel iletkenlik (S)
h : Planck sabiti ($J \cdot s$)
I_0 : Doyum akımı (A)
I_d : Karanlık akım (A)
I_{LH} : Aydınlatma altındaki akım (fotoakım) (A)
k : Boltzmann sabiti ($J \cdot K^{-1}$)
M′, *M″* : Elektrik modülünün reel ve sanal bileşenleri
M* : Karmaşık elektrik modülü
n : İdealite faktörü
N_C : İletim bandının etkin durum yoğunluğu (cm^{-3})
N_D : Donör yoğunluğu (cm^{-3})
N_{ss} : Arayüz durum yoğunluğu ($eV^{-1} \cdot cm^{-2}$)
NEP : Gürültü eşdeğeri güç (W)
p : İstatistiksel anlamlılık olasılığı (p-değeri)
P : Gelen optik güç yoğunluğu ($W \cdot m^{-2}$)
PS : Işık duyarlılığı (fotoakımın karanlık akıma oranı)
q : Elektron yükü (C)
r : Pearson korelasyon katsayısı
R : Duyarlılık / yanıt oranı (A/W)
R_s : Seri direnç (Ω)
R_{sh} : Şönt direnç (Ω)
s : Jonscher güç yasasındaki frekans üssü ($0 < s < 1$)
T : Mutlak sıcaklık (K)
tan δ : Kayıp tanjantı (dielektrik kayıp tanjantı)
V_{bias} : Besleme (bias) voltajı (V)
V_{bi} : İç-yapısal (built-in) potansiyel (V)
V_R : Geri besleme (ters kutuplama) voltajı (V)
W_D : Tükenim bölgesi genişliği (μm)
Y : Karmaşık admitans (S)
α : Cole–Cole gevşeme zamanı dağılım parametresi
α-MoO_3 : Molibden trioksitin ortorombik α-fazı

γ	: Fotoakımın ışık şiddetine bağlılık üssü
Δf	: Gürültü bant genişliği (Hz)
$\Delta\Phi_B$	: Görüntü kuvveti kaynaklı bariyer alçalması (eV)
ε'	: Dielektrik sabitinin reel bileşeni
ε''	: Dielektrik kayıp (sanal bileşen)
ε_0	: Boşluğun elektriksel geçirgenliği ($F \cdot cm^{-1}$)
ε_s	: Yarıiletkenin dielektrik sabiti
λ	: Dalga boyu (nm)
ρ	: MoO_3 parçacık (*particle*) yoğunluğu (parçacık/μm^2)
σ_{ac}	: Alternatif akım (AC) iletkenliği ($S \cdot cm^{-1}$)
σ_{dc}	: Doğru akım (DC) iletkenliği ($S \cdot cm^{-1}$)
τ	: Dielektrik gevşeme zamanı (s)
τ_r, τ_f	: Fotoyanıtın yükselme ve düşme süreleri (s)
Φ_B, Φ_{B0}	: Bariyer yüksekliği (eV)
Φ_m	: MoO_3 tabakasının iş fonksiyonu (eV)
χ	: Elektron ilgisi (eV)
ω	: Açısal frekans ($rad \cdot s^{-1}$)

Kısaltmalar

AC	: Alternatif Akım (Alternating Current)
ALD	: Atomik Katman Biriktirme (Atomic Layer Deposition)
CLAHE	: Kontrast Sınırlı Adaptif Histogram Eşitleme
CNN	: Evrişimli Sinir Ağı (Convolutional Neural Network)
COD	: Kristalografi Açık Veritabanı (Crystallography Open Database)
C–V	: Kapasitans–Voltaj
CV	: Varyasyon Katsayısı (Coefficient of Variation)
DFT	: Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Density Functional Theory)
EDS	: Enerji Dağılımlı X-ışını Spektroskopisi (Energy Dispersive X-ray Spectroscopy)
EQE	: Dış Kuantum Verimi (External Quantum Efficiency)
ETL	: Elektron Taşıma Tabakası (Electron Transport Layer)
FEG-SEM	: Alan Emisyonlu Taramalı Elektron Mikroskobu (Field Emission Gun Scanning Electron Microscopy)
FIB	: Odaklanmış İyon Demeti (Focused Ion Beam)
FTO	: Flor Katkılı Kalay Oksit (Fluorine-doped Tin Oxide)
G–V	: İletkenlik–Voltaj
HEL	: Oyuk Çıkarma Tabakası (Hole Extraction Layer)
HTL	: Oyuk Taşıma Tabakası (Hole Transport Layer)
I–V	: Akım–Voltaj
IoU	: Kesişim/Birleşim Oranı (Intersection over Union)
IR	: Kızılötesi (Infrared)
ITO	: İndiyum Kalay Oksit (Indium Tin Oxide)
LED	: Işık Yayan Diyot (Light Emitting Diode)

MIS	**:** Metal–Yalıtkan–Yarıiletken (Metal–Insulator–Semiconductor)
MoO_3	**:** Molibden Trioksit
NIR	**:** Yakın Kızılötesi (Near-Infrared)
Otsu	**:** Otsu eşikleme yöntemi
PD	**:** Fotodiyot / Fotodedektör
PVD	**:** Fiziksel Buhar Biriktirme (Physical Vapor Deposition)
ROI	**:** İlgi Bölgesi (Region of Interest)
RR	**:** Doğrultma Oranı (Rectification Ratio)
SEM	**:** Taramalı Elektron Mikroskobu (Scanning Electron Microscope)
SIMS	**:** İkincil İyon Kütle Spektrometrisi (Secondary Ion Mass Spectrometry)
SNR	**:** Sinyal–Gürültü Oranı (Signal-to-Noise Ratio)
TCAD	**:** Teknoloji Bilgisayar Destekli Tasarım (Technology Computer-Aided Design)
TE	**:** Termiyonik Emisyon (Thermionic Emission)
TEM	**:** Geçirimli Elektron Mikroskobu (Transmission Electron Microscopy)
TMO	**:** Geçiş Metali Oksiti (Transition Metal Oxide)
UV	**:** Morötesi (Ultraviyole)
ViT	**:** Görüntü Dönüştürücü (Vision Transformer)
XPS	**:** X-ışını Fotoelektron Spektroskopisi (X-ray Photoelectron Spectroscopy)
XRD	**:** X-ışını Kırınımı (X-ray Diffraction)

1. GİRİŞ

1.1 Genel Çerçeve ve Motivasyon

Geçiş metali oksitleri arasında molibden trioksit (MoO_3), sahip olduğu geniş optik bant aralığı (yaklaşık 3 eV) ve istisnai derecede yüksek iş fonksiyonu (yaklaşık 6,8 eV) ile öne çıkan çok işlevli bir malzemedir. Nominal olarak *n*-tipi bir oksit olmasına karşın, vakum düzeyine göre derin konumlu (deep-lying) boş elektronik durumları sayesinde komşu yarıiletken ve organik katmanlardan etkin biçimde oyuk (hole) çekebilmekte; böylece pratikte oyuk-seçici (hole-selective) ve *p*-tipi benzeri bir davranış sergilemektedir (Greiner ve Lu, 2013; Kröger vd., 2009a; Meyer vd., 2012). Bu özellik, MoO_3'ü güneş gözeleri, organik ışık yayan diyotlar, fotodedektörler ve güç elektroniği aygıtlarında arayüz/kontak mühendisliğinin anahtar bileşenlerinden biri hâline getirmiştir (Battaglia vd., 2014a; Bullock vd., 2014).

Buhar fazı biriktirme yöntemleriyle elde edilen MoO_3 filmleri, biriktirme sıcaklığına bağlı olarak amorf, β-fazı veya kararlı α-fazında oluşabilmektedir (Koike vd., 2014). Bu fazların kusur kimyası ve buna bağlı stokiyometrisi (elementlerin atomik oranı) ile yüzey morfolojisi, oluşturdukları heteroeklemlerin elektriksel ve optoelektronik davranışını büyük ölçüde belirlemektedir (Guo ve Robertson, 2014). Bir *p*-MoO_3 tabakasının bir *n*-tipi yarıiletken üzerine biriktirilmesiyle oluşan *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemi, doğrultucu bir kontak ve ışığa duyarlı bir arayüz sunarak hem diyot temelli güç aygıtları hem de fotodedektörler için elverişli bir yapı oluşturur.

Bu yapının başarımını belirleyen ancak çoğu zaman ikincil bir ayrıntı olarak ele alınan kritik bir tasarım değişkeni, alt tabaka (substrate) seçimidir. Si, GaAs, InP ve 4H-SiC gibi bant aralıkları 1,12 eV ile 3,26 eV arasında değişen *n*-tipi yarıiletkenler; bant hizalaması, kafes ve termal uyum, yüzey kimyası ve doğal oksit davranışı bakımından birbirinden belirgin biçimde ayrışır. Dolayısıyla aynı *p*-MoO_3 tabakası farklı alt tabakalar üzerinde tümüyle farklı arayüz fiziği ortaya koyabilir. Bu tez, alt tabakayı merkezî bir tasarım parametresi olarak konumlandırarak, *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerinin davranışını bu eksende bütünleşik biçimde ele almaktadır.

1.2 Literatürdeki Boşluk ve Problem Tanımı

MoO_3 tabanlı heteroeklemler üzerine yapılan çalışmaların büyük bölümü, tek bir alt tabaka üzerinde ve çoğunlukla tek bir özellik kümesine (yalnızca elektriksel ya da yalnızca optik) odaklanmıştır. Bu durum üç temel boşluk doğurmaktadır. Birincisi, aynı *p*-MoO_3 platformunun çok sayıda geniş bant aralıklı alt tabaka üzerinde, ortak bir üretim ve karakterizasyon protokolüyle karşılaştırıldığı sistematik bir çalışma yok denecek kadar azdır; bu nedenle alt tabakaya bağlı eğilimler nicel olarak haritalanamamaktadır.

İkincisi, ısıl tavlamanın etkisi literatürde sıklıkla iyileştirici bir adım olarak genellemekte; oysa tavlamanın, kusurların elektriksel olarak etkisizleştirilmesi (kusur pasivasyonu), oksijen boşluklarına bağlı bileşim değişimi (stokiyometrik yeniden düzenlenme) ve arayüzde tetiklenen kimyasal tepkimeler üzerinden alt tabakaya göre çok farklı, hatta zıt sonuçlar verebileceği yeterince irdelenmemiştir. Üçüncüsü ve yöntemsel açıdan en önemlisi, farklı alt tabakalar üzerindeki aygıtların adil biçimde karşılaştırılabilmesi için gereken nesnel ve tekrarlanabilir bir metroloji (ölçüm bilimi; ölçümün izlenebilirliği ve belirsizliğiyle birlikte raporlanması) altyapısı çoğunlukla bulunmamaktadır: kontak geometrisi ve film kalınlığı gibi nicelikler genellikle operatörün görüntü üzerinde iki nokta seçmesiyle elle ölçülmekte; yüzey morfolojisi ise çoğu zaman hiç nicelendirilmeden sözel olarak betimlenmektedir. Elle ölçümde sınırın nereye yerleştirileceği operatöre bağlı olduğundan, özellikle ışın penetrasyonu ve kenar etkisi nedeniyle arayüzün keskin bir basamak yerine bir parlaklık geçişi olarak göründüğü ince filmlerde bu durum yapı–özellik ilişkilerinin güvenilirliğini zayıflatmaktadır.

Bu boşluklar bir araya geldiğinde ortaya çıkan asıl problem şudur: MoO_3 tabanlı heteroeklem aygıtların elektriksel, dielektrik ve optoelektronik başarımı; alt tabaka ve işlem (tavlama) koşullarıyla nasıl, ne yönde ve hangi yapısal mekanizmalar üzerinden değişmektedir ve bu ilişki, nesnel olarak ölçülebilir yapısal niceliklere nasıl bağlanabilir?

1.3 Tezin Amacı, Kapsamı ve Araştırma Soruları

Bu tezin temel amacı; bant aralıkları 1,12–3,26 eV arasında değişen dört *n*-tipi alt tabaka (Si, GaAs, InP ve 4H-SiC) üzerinde PVD ile üretilen *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerini, alt tabakaya bağlı tasarım ve ısıl tavlama ekseninde; elektriksel ve dielektrik davranıştan nesnel yapısal metrolojiye ve oradan da optoelektronik işleve uzanan bütünleşik bir çerçevede incelemektir. Tez, birbirini tamamlayan üç çalışmayı tek bir araştırma anlatısı altında birleştirir.

Bu amaç doğrultusunda yanıt aranan başlıca araştırma soruları şunlardır:

(i) Ortam havasında (ambient air) uygulanan ısıl tavlama, *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerinin doğrultma, bariyer yüksekliği, seri direnç davranışını alt tabakaya bağlı olarak nasıl değiştirmektedir; dielektrik gevşeme davranışı bu değişimlerle nasıl ilişkilidir?

(ii) Farklı alt tabakalar üzerindeki aygıtların adil karşılaştırılmasını sağlayacak; kontak çapı, parçacık (*particle*) yoğunluğu ve kesit film kalınlığını nesnel, tekrarlanabilir ve yüksek doğrulukla ölçen otomatik bir SEM metroloji çerçevesi nasıl kurulabilir?

(iii) Aynı heteroeklemler, harici güç gerektirmeden (V_{bias} = 0 V) çalışan görünür–UV fotodedektörler olarak hangi başarımı sergiler ve bu başarım alt tabakaya nasıl bağlıdır?

(iv) Elektriksel/dielektrik davranış, yapısal metroloji ve optoelektronik başarım birlikte değerlendirildiğinde, MoO_3 tabanlı aygıtlar için alt tabaka ve tavlama temelli ortak bir tasarım ilkesi tanımlanabilir mi?

Tezin kapsamı bilinçli olarak dar tutulmuştur: alt tabaka olarak yalnızca dört yarıiletken (Si, GaAs, InP ve 4H-SiC) kullanılmış, *p*-MoO_3 tabakası tüm aygıtlarda tek bir yöntemle (fiziksel buhar biriktirme, PVD) büyütülmüş, ısıl işlem ise tek bir koşulla — ortam havasında (ambient air) 200°C'de tavlama — sınırlandırılmıştır. Biriktirme parametrelerinin taranması, farklı tavlama sıcaklık ve ortamlarının karşılaştırılması ve alternatif oksit fazlarının incelenmesi tez dışında bırakılmıştır. Bu sınırlandırma

deneysel tasarımın gereğidir: diğer değişkenler sabit tutulduğunda, aygıtlar arasındaki farklar yalnızca alt tabaka türü ve tavlama durumuna bağlanabilmekte, böylece bu iki etkenin katkısı yalıtılarak incelenebilmektedir.

1.4 Tezin Bütünleştirici Çerçevesi

Tezi oluşturan üç çalışma; ayrı makaleler olarak değil, ortak bir aygıt yapısının (dört alt tabaka üzerindeki aynı *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemi) üç tamamlayıcı kesiti olarak tasarlanmıştır. Bu çalışmalar arasındaki ilişki şu şekilde kurulur:

Birinci çalışma (elektriksel ve dielektrik özellikler) yapı–özellik ilişkisinin elektriksel ayağını oluşturur: akım–voltaj (I–V) ile frekansa bağlı kapasitans–voltaj ve iletkenlik–voltaj (C–V–f, G–V–f) ölçümleri ve bunlardan türetilen dielektrik büyüklükler (ε', ε'', tan δ, M', M'', σ_{ac}) üzerinden, tavlamanın alt tabakaya seçici etkisini ortaya koyar.

İkinci çalışma (otomatik SEM görüntü işleme metrolojisi) tezin metrolojik omurgasıdır: aynı aygıtların kontak çapını, MoO_3 parçacık yoğunluğunu ve kesit film kalınlığını nesnel ve tekrarlanabilir biçimde nicelendirerek, birinci ve üçüncü çalışmalardaki alt tabakalar arası karşılaştırmaların güvenilirliğini sağlar.

Üçüncü çalışma (kendinden beslemeli görünür–UV fotodiyotlar) aynı yapının optoelektronik işlevini ortaya koyar: harici besleme olmaksızın ışığa duyarlı çalışmayı ve bu başarımın alt tabakaya bağlılığını gösterir.

Üç çalışmayı birbirine bağlayan ortak eksen, “alt tabaka + tavlama + yapı → özellik” nedensel zinciridir. Birinci çalışma bu zincirin elektriksel/dielektrik çıktısını, üçüncü çalışma optoelektronik çıktısını ölçerken; ikinci çalışma, zincirin “yapı” halkasını nesnel biçimde ölçülebilir kılarak diğer ikisini birbirine bağlar. Bu kurgu, tezin üç bölümünü tek ve tutarlı bir doktora araştırması hâline getirir.

1.5 Tezin Özgün Katkıları

Bu tezin bilime sağladığı başlıca özgün katkılar aşağıda özetlenmiştir:

a) Aynı *p*-MoO_3 platformunun bant aralıkları 1,12–3,26 eV arasında değişen dört *n*-tipi alt tabaka (Si, GaAs, InP, 4H-SiC) üzerinde, ortak bir üretim ve karakterizasyon protokolüyle; elektriksel, dielektrik, morfolojik ve optoelektronik özellikleri kapsayan çok boyutlu ve sistematik bir karşılaştırması ilk kez bir arada sunulmuştur.

b) Isıl tavlamanın alt tabakaya seçici (substrate-selective) etkisi nicel olarak gösterilmiştir: *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklemi, biriktirilmiş hâlde en yüksek doğrultma oranına sahipken tavlama sonrasında doğrultucu karakterini yitirmiş (bariyer yüksekliği 1,531 eV'tan 1,203 eV'a, doğrultma oranı $2{,}02\times10^5$'ten 2,12'ye düşmüştür); buna karşılık aynı tavlama *p*-MoO_3/*n*-GaAs aygıtının başarımını iyileştirmiştir. Böylece "tüm alt tabakalar için tek tip tavlama" yaklaşımının geçersizliği ortaya konmuştur.

c) Aygıt metrolojisi için özgün bir otomatik SEM görüntü işleme çerçevesi geliştirilmiştir. Otsu eşikleme ve bağlı bileşen analizi ile parçacık yoğunluğunun otomatik tespiti, yarı otomatik kontak çapı ölçümü ve sistematik düzeltmelerle kesit kalınlığı ölçümünü birleştiren bu çerçeve; manuel ölçüme kıyasla nesnel ve tekrarlanabilir nicelemeler sağlamıştır (manuel ölçümle bağıl fark %4 (Si-Tavlanmış) ile %93 (InP-Tavlanmış) arasında; sekiz aygıtın altısında %20'nin altında) (kontak çapı 1,59–1,82 mm; parçacık yoğunluğu 23–102 parçacık/μm²; kalınlık 37–72 nm).

d) Aynı heteroeklemlerin kendinden beslemeli (V_{bias} = 0 V) görünür–UV fotodiyotlar olarak çalıştırılabilirliği gösterilmiş ve başarımın alt tabakaya bağlılığı ortaya konmuştur: tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtı 1225 W/m²'de %15000 ışık duyarlılığı ve 43,52 dB sinyal–gürültü oranı sergilerken, en yüksek UV özgül algılaması 395 nm'de *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtında (D^* = $2{,}44\times10^9$ Jones) elde edilmiştir.

e) Üç bulgu kümesinin sentezlenmesiyle; MoO_3 tabanlı heteroeklem aygıt tasarımında alt tabaka seçiminin ve tavlama stratejisinin, güç elektroniği (doğrultucu/dielektrik) ve optoelektronik (fotodedektör) hedeflerine göre yönlendirilebilen ortak bir tasarım

ilkesi olarak konumlandırılması sağlanmıştır. Bu, tek tek üç çalışmanın ötesinde, tezin bütünleşik özgün katkısını oluşturur.

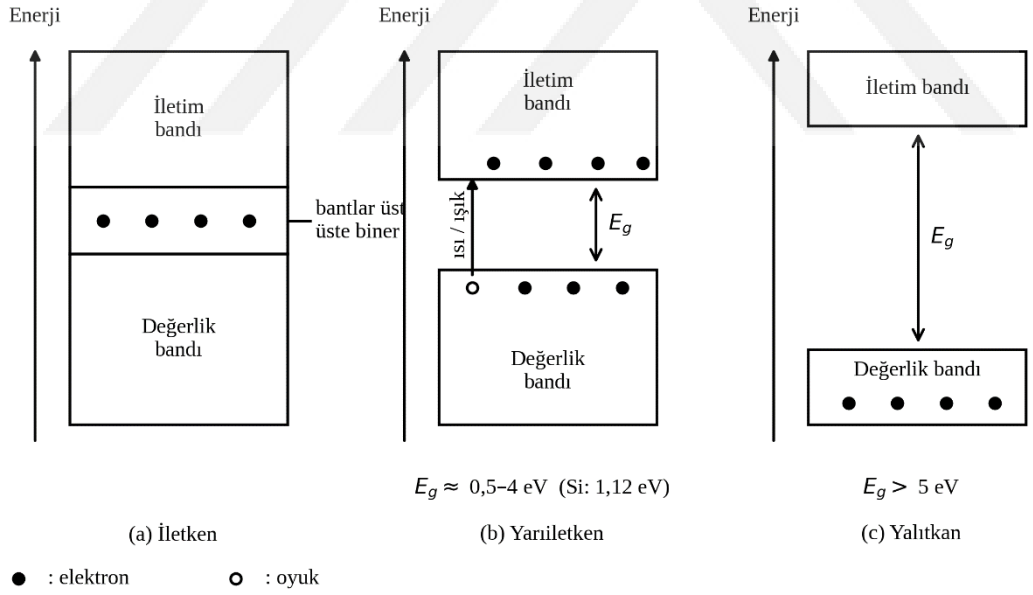
1.6 Tezin Organizasyonu

Tez beş ana bölümden oluşmaktadır. Bu Giriş bölümünün ardından, Bölüm 2 (Genel Bilgiler) tezin kuramsal temelini; MoO_3'ün elektronik yapısı ve kusur kimyası, heteroeklem ve akım iletim kuramı, dielektrik gevşeme süreçleri, SEM tabanlı görüntü işleme yaklaşımları ile fotodedektör başarım ölçütleri çerçevesinde sunar. Bölüm 3 (Materyal ve Yöntem) *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerinin üretim adımlarını, yapısal karakterizasyonu ve üç çalışmaya ait ölçüm/analiz yöntemlerini sunar. Bölüm 4 (Bulgular ve Tartışma) sırasıyla elektriksel ve dielektrik özellikleri, otomatik SEM metrolojisini ve kendinden beslemeli görünür–UV fotodiyot başarımını alt tabakaya bağlı olarak ele alıp tartışır; ardından tavlamanın alt tabakaya bağlı etki mekanizmasını enerji-bant çerçevesinde yorumlar (Bölüm 4.4), üç çalışmanın bulgularını bütünleştirir (Bölüm 4.5) ve morfoloji–eklem kalitesi–fotoyanıt ekseninde nicel bir sentez sunar (Bölüm 4.6). Bölüm 5 (Sonuç ve Öneriler) ise üç çalışmanın bulgularını bütünleşik biçimde sentezleyerek alt tabaka–tavlama temelli tasarım ilkesini ortaya koyar ve gelecek çalışmalara yönelik önerilerde bulunur.

2. GENEL BİLGİLER

2.1 Yarıiletkenler: Temel Kavramlar, Taşıyıcılar ve Sınıflandırma

Yarıiletkenler; elektriksel iletkenlikleri metaller ile yalıtkanlar arasında yer alan ve iletkenlikleri sıcaklık, ışık, uygulanan elektrik alanı veya katkılama yoluyla geniş bir aralıkta denetlenebilen malzemelerdir (Sze ve Ng, 2007). Bu denetlenebilirlik, yarıiletkenleri modern elektronik ve optoelektronik aygıtların temel yapı taşı hâline getirmektedir. Bir katının bu sınıfa girip girmediği, değerlik bandı ile iletim bandı arasında uzanan yasak enerji aralığının (E_g) genişliğiyle belirlenir. Şekil 2.1'de şematik olarak gösterildiği üzere iletkenlerde değerlik ve iletim bantları örtüşmekte, dolayısıyla taşıyıcılar herhangi bir enerji engeliyle karşılaşmadan iletime katılmaktadır. Yalıtkanlarda ise yasak enerji aralığı tipik olarak 5 eV'nin üzerinde olduğundan, oda sıcaklığındaki termal uyarma taşıyıcıları iletim bandına çıkarmakta yetersiz kalmaktadır. Yarıiletkenlerde bant aralığı yaklaşık 0,5–4 eV arasında bulunur; bu değer, taşıyıcıların ısı, ışık veya uygulanan voltaj gibi dış uyarılarla iletim bandına geçebilmesine imkân tanıyacak kadar küçüktür.

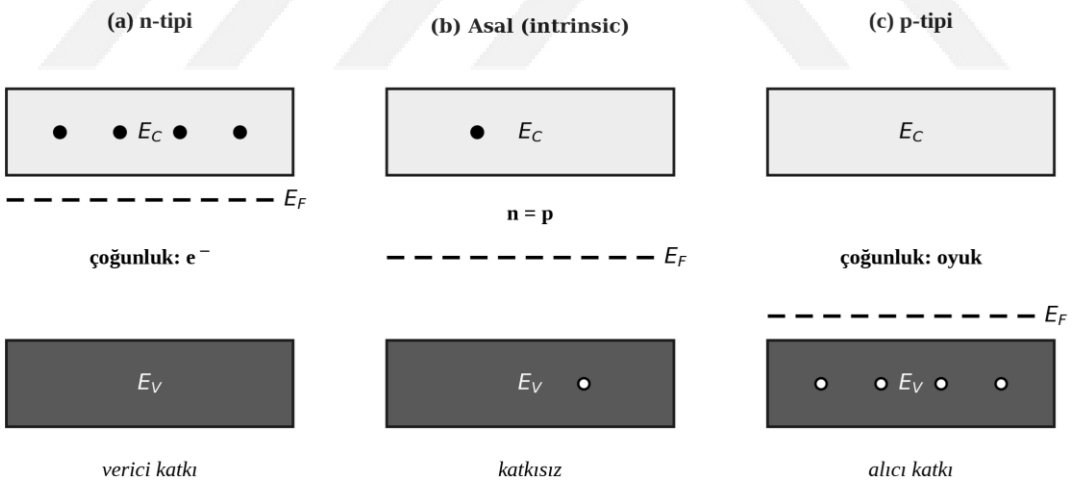


Şekil 2.1 (a) İletken, (b) yarıiletken ve (c) yalıtkan malzemelerin şematik enerji-bant yapıları. Yarıiletkende elektron, ısı veya ışık gibi bir dış uyarıyla yasak enerji aralığını aşarak iletim bandına geçebilmektedir

Bu tezin konusu olan fotodedektörler işlevi de doğrudan bu olguya dayanmaktadır: enerjisi bant aralığından büyük olan fotonlar soğurulduğunda, değerlik bandındaki elektronlar iletim bandına uyarılmakta ve ölçülebilir bir fotoakım oluşmaktadır.

Bir elektron iletim bandına uyarıldığında, değerlik bandında geride bıraktığı boşluk oyuk (*hole*) olarak adlandırılır ve pozitif yüklü bir taşıyıcı gibi davranır. Yarıiletkenlerde akım, elektronlar ve oyuklar olmak üzere iki tür taşıyıcı tarafından birlikte iletilir; bu ikili taşıyıcı yapısı, *p-n* eklemi başta olmak üzere tüm yarıiletken aygıtların çalışma ilkesinin temelini oluşturur (Sze ve Ng, 2007). Termal dengede taşıyıcı yoğunlukları, Fermi düzeyinin (E_F) bant kenarlarına göre konumuyla belirlenir.

Saf ve katkısız durumdaki bir yarıiletken asal *(intrinsic)* olarak nitelendirilir; bu durumda elektron ve oyuk yoğunlukları birbirine eşittir ve Fermi düzeyi yaklaşık olarak bant aralığının ortasında bulunur. Asal iletkenlik yalnızca termal olarak üretilen taşıyıcılardan kaynaklandığından oldukça düşüktür. Aygıt uygulamalarında iletkenliğin denetlenmesi için malzemeye kasıtlı olarak yabancı atomlar eklenir; bu işleme katkılama *(doping)* denir ve elde edilen malzemeye katkılı *(extrinsic)* yarıiletken adı verilir.



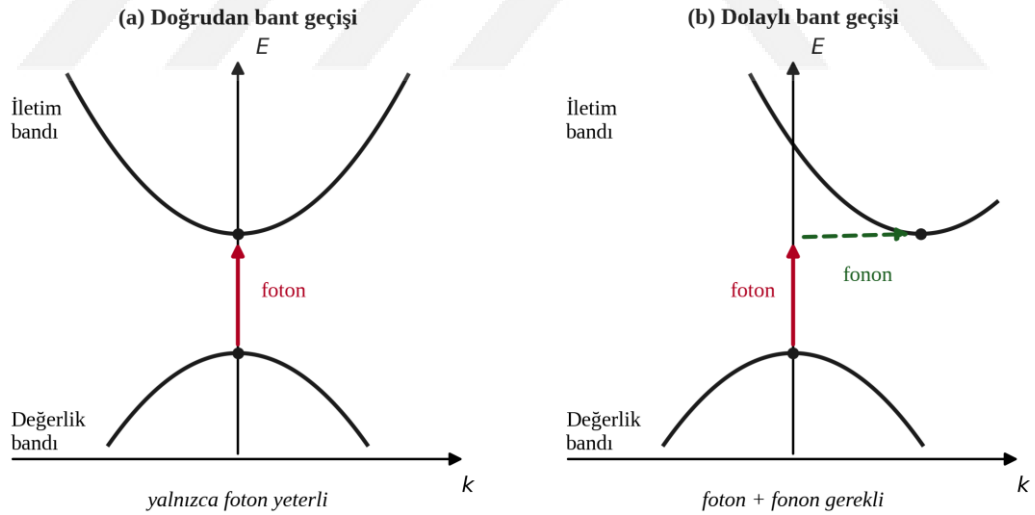
Şekil 2.2 Katkılamanın Fermi düzeyi (E_F) konumuna etkisi: (a) *n*-tipi, (b) asal ve (c) *p*-tipi yarıiletkenlerin şematik bant diyagramları. Dolu daireler elektronları, boş daireler oyukları temsil etmektedir

Fazladan elektron sağlayan verici (*donor*) atomlarla katkılanan malzemede çoğunluk taşıyıcı elektronlar olur ve malzeme *n-tipi* olarak adlandırılır; bu durumda Fermi

düzeyi iletim bandına yaklaşır. Elektron eksikliği oluşturan alıcı (*acceptor*) atomlarla katkılama yapıldığında ise çoğunluk taşıyıcı oyuklar olur, malzeme *p-tipi* davranış gösterir ve Fermi düzeyi değerlik bandına kayar (Şekil 2.2).

Bu tez kapsamında kullanılan dört alt tabaka (*n*-Si, *n*-GaAs, *n*-InP ve *n*-4H-SiC) *n*-tipi katkılıdır; eklemin p-tarafını oluşturan *p*-MoO_3 katmanı ise, Bölüm 2.2'de açıklanacağı üzere, klasik katkılama yerine yüzey transfer katkılaması mekanizmasıyla *p*-tipi benzeri davranış sergilemektedir.

Optoelektronik aygıt tasarımı açısından belirleyici olan bir diğer sınıflandırma ölçütü, bant geçişinin niteliğidir. *Doğrudan bant aralıklı* yarıiletkenlerde iletim bandının minimumu ile değerlik bandının maksimumu momentum uzayında aynı dalga vektörüne (*k*) karşılık gelir; bu nedenle bir elektron, momentum korunumunu bozmadan yalnızca bir foton salarak ya da soğurarak bantlar arasında geçiş yapabilir. Bu durum ışık soğurma ve yayma verimini yüksek kılar. *Dolaylı bant aralıklı* yarıiletkenlerde ise bu iki uç nokta farklı *k* değerlerinde bulunduğundan, geçişin gerçekleşebilmesi için fotona ek olarak bir kafes titreşiminin (*fonon*) de sürece katılması gerekir; üç parçacığın eşzamanlı katılımını gerektiren bu süreç daha düşük olasılıkla gerçekleşir ve ışıma verimini belirgin biçimde düşürür (Şekil 2.3).



Şekil 2.3 Momentum uzayında (*E*–*k*) (a) doğrudan ve (b) dolaylı bant geçişlerinin şematik gösterimi. Doğrudan geçişte yalnızca foton yeterliyken, dolaylı geçişte momentum korunumu için ek olarak bir fonona gereksinim duyulmaktadır

Bu tezde kullanılan alt tabakalardan GaAs ve InP doğrudan, Si ve 4H-SiC ise dolaylı bant aralığına sahiptir. Söz konusu ayrım, Bölüm 4.3'te sunulan fotoyanıt sonuçlarının yorumlanmasında doğrudan işlevseldir: doğrudan bant aralıklı InP'nin soğurma kenarı yakın kızılötesi bölgede (≈920 nm) yer almakla birlikte, doğrudan geçiş nedeniyle soğurma katsayısının 395 nm'yi de kapsayan geniş bir aralıkta yüksek kalması, bu alt tabakanın 395 nm'de en yüksek özgül algılama değerine ulaşmasının temel nedenidir.

Yarıiletkenler bileşimlerine göre de sınıflandırılır. Silisyum ve germanyum gibi tek elementten oluşan malzemeler element yarıiletkenler olarak; GaAs, InP ve GaN gibi periyodik tablonun III. ve V. gruplarındaki elementlerin birleşiminden oluşanlar III-V bileşik yarıiletkenler olarak adlandırılır. SiC, IV-IV grubunda yer alırken; MoO_3, ZnO ve TiO_2 gibi malzemeler oksit yarıiletkenler sınıfına girmektedir. Bant aralığının genişliği açısından ise yaklaşık 1,5 eV'nin altındaki malzemeler dar bant aralıklı, 2,5 eV'nin üzerindekiler ise geniş bant aralıklı olarak nitelendirilir; geniş bant aralıklı yarıiletkenler düşük içsel taşıyıcı yoğunlukları sayesinde yüksek güç, yüksek sıcaklık ve morötesi algılama uygulamalarında tercih edilmektedir.

Bu tez kapsamında, *p*-MoO_3 ara katmanının alt tabakaya bağlı davranışını geniş bir malzeme yelpazesinde sınayabilmek amacıyla, yukarıda özetlenen sınıflandırma eksenlerinin farklı uçlarını temsil eden dört *n*-tipi yarıiletken alt tabaka seçilmiştir. *n*-Si (1,12 eV, dolaylı), olgun üretim teknolojisi ve düşük maliyetiyle mikroelektroniğin referans malzemesidir; dolaylı bant aralığı ışıma verimini sınırlasa da görünür bölgede etkin bir soğurucu olarak davranmaktadır. *n*-InP (1,35 eV, doğrudan), doğrudan bant geçişi sayesinde geniş bir spektral aralıkta yüksek soğurma katsayısı ve yüksek elektron hareketliliği ile yüksek frekanslı ve fotonik uygulamalarda öne çıkmaktadır. *n*-GaAs (1,42 eV, doğrudan), yüksek taşıyıcı hareketliliği sayesinde görünür bölgede güçlü fotoyanıt sunmakta; ancak yüzeyinin kimyasal olarak reaktif olması ve doğal oksit oluşumuna yatkınlığı, arayüz kalitesi açısından sınırlayıcı bir etken oluşturmaktadır. *n*-4H-SiC (3,26 eV, dolaylı), geniş bant aralığı, yüksek ısıl iletkenliği ve kimyasal kararlılığı ile yüksek güç ve yüksek sıcaklık elektroniğinde kritik önemdedir; düşük içsel taşıyıcı yoğunluğu, karanlık akımın etkin biçimde bastırılmasına imkân tanımaktadır. Söz konusu dört malzemenin bant aralığı, geçiş türü ve yüzey kimyası bakımından belirgin biçimde ayrışması, aynı *p*-MoO_3

katmanının farklı arayüz fiziği üretip üretmediğinin sistematik olarak sınanabilmesini sağlamış; böylece alt tabakanın edilgen bir taşıyıcı değil, etkin bir tasarım parametresi olduğu yönündeki tezin ana savı sınanabilir hâle gelmiştir.

2.2 Geçiş Metali Oksitleri ve MoO_3: Elektronik Yapı ve Kusur Kimyası

Geçiş metali oksitleri (transition metal oxides, TMO'lar); enerji depolama, optoelektronik, kataliz ve algılama gibi çok çeşitli uygulamalarda kullanılan modern katı-hâl elektroniğinin önemli bir bileşenidir (Bhimanapati vd., 2015; Madaka vd., 2024). Bu bileşiklerin sunduğu üstünlükler; yüksek sıcaklıklardaki kayda değer kararlılıkları, denetlenebilir özellikleri ve üretilebilirlikleri ile ilişkilendirilmektedir. Son yıllarda MoO_3; istisnai derecede yüksek iş fonksiyonu (≈ 6,8 eV), ayarlanabilir oksijen boşluğu yoğunluğu ve geniş bir yarıiletken yelpazesiyle uyumlu bant hizalanması nedeniyle arayüz mühendisliği açısından en umut verici TMO'lardan biri olarak öne çıkmıştır (Meyer vd., 2012; Menon ve Krishnamoorthy, 2023). Bu özellikler MoO_3'ü, yalnızca optoelektronik aygıtlardaki taşıyıcı-seçici kontaklar *(carrier-selective contacts)* için değil, aynı zamanda heteroeklem yapılarda arayüzdeki yük taşınımının ve kusur kaynaklı yeniden birleşme süreçlerinin denetlenmesi bakımından da oldukça çekici kılmaktadır. MoO_3 ayrıca derin değerlik bandı tepesine (*deep-lying valence band maximum*, VBM) ve görünür dalga boyu aralığında yüksek optik geçirgenliğe sahiptir (Bao vd., 2010; Zong vd., 2025).

Geçiş metali oksitleri, periyodik tabloda geçiş metalleri (d-bloğu elementleri) olarak adlandırılan elementlerin oksijenle oluşturduğu bileşiklerdir. Bu metaller kısmen dolu d orbitallerine sahip olduklarından, oksitleri sıradan yalıtkan oksitlerden farklı ve teknolojik açıdan değerli elektronik, optik ve manyetik özellikler sergiler. Optoelektronik ve enerji uygulamalarında en yaygın kullanılanlar arasında MoO_3, WO_3, V_2O_5, NiO ve TiO_2 bulunurken; Fe_2O_3, Cr_2O_3, CuO ve Co_3O_4 gibi oksitler manyetik ve korelasyonlu-elektron özellikleriyle öne çıkar. Bu oksitleri diyot ve fotodiyot yapıları açısından değerli kılan başlıca nitelikler; geniş optik bant aralığı, iyi kimyasal kararlılık, oksijen boşluğu yoğunluğunun (dolayısıyla stokiyometrinin) ayarlanmasıyla özelliklerin kontrol edilebilmesi ve soy metallerle kıyaslanabilir ya da onları aşan yüksek iş fonksiyonudur.

Tablo 2.1 Diyot ve fotodiyot uygulamalarında öne çıkan geçiş metali oksitlerinin yarıiletken tipi, yaklaşık bant aralığı ve temel işlevleri

Geçiş Metali Oksiti	Yarıiletken Tipi	Yaklaşık Bant Aralığı (Eg)	Diyot/Fotodiyottaki Temel Görevi
MoO_3 (molibden trioksit)	*n*-tipi (yüzeyde *p*-benzeri)	≈2,9–3,2 eV	Yüksek iş fonksiyonu sayesinde oyuk taşıma/çıkarma tabakası (HTL/HEL); yarıiletkenle arayüzde *p*-*n* benzeri heteroeklem oluşturur
WO_3 (tungsten trioksit)	*n*-tipi	≈2,6–3,0 eV	Delik taşıma/tampon tabaka; elektrokromik ve gaz-algılama diyotlarında aktif katman
V_2O_5 (vanadyum pentoksit)	*n*-tipi	≈2,2–2,3 eV	Delik enjeksiyon/taşıma tabakası; anot arayüz düzenleyici
NiO (nikel oksit)	*p*-tipi	≈3,6–4,0 eV	Klasik *p*-tipi oyuk taşıma tabakası; *p*-NiO/*n*-yarıiletken heteroeklemlerde *p*-taraf
TiO_2 (titanyum dioksit)	*n*-tipi	≈3,0–3,2 eV	Elektron taşıma tabakası (ETL); UV fotodiyotlarda aktif/pencere katmanı
ZnO*	*n*-tipi	≈3,3–3,4 eV	Elektron taşıma tabakası; UV fotodedektörlerde aktif katman ve nanoyapılı heteroeklem tarafı
Cu_2O (bakır(I) oksit)	*p*-tipi	≈2,0–2,2 eV	*p*-tipi soğurucu/HTL; düşük maliyetli *p*-*n* heteroeklem güneş gözesi ve fotodiyot tarafı
CuO (bakır(II) oksit)	*p*-tipi	≈1,2–1,5 eV	Dar bantlı *p*-tipi soğurucu; görünür–NIR fotoyanıtta aktif katman
Fe_2O_3 (hematit)	*n*-tipi	≈2,0–2,2 eV	Fotoanot/soğurucu; görünür ışıkta fotoelektrokimyasal ve fotodiyot yapıları
Cr_2O_3 (krom oksit)	*p*-tipi	≈3,0–3,4 eV	*p*-tipi pencere/arayüz tabakası; yüksek bariyerli doğrultucu kontaklar
Co_3O_4 (kobalt oksit)	*p*-tipi	≈1,5–2,2 eV	*p*-tipi oyuk taşıma/soğurucu; heteroeklem fotodedektör tarafı
Nb_2O_5 / Ta_2O_5	*n*-tipi	≈3,4–4,0 eV	Geniş bantlı ETL ve yalıtkan arayüz tabakası (MIS yapılarda tünelleme/bariyer katmanı)

**ZnO, çinko bir geçiş metali olduğundan çoğu kaynakça geçiş metali oksitleri içinde anılır; bazı katı-hâl sınıflandırmalarında ise ayrı ele alınır. Bant aralığı değerleri faza, stokiyometriye ve üretim yöntemine göre değişebilen tipik literatür aralıklarıdır.*

Bir geçiş metali oksitinin fotodiyottaki işlevi, büyük ölçüde iletkenlik tipiyle ilişkilidir: *n*-tipi geniş bantlı oksitler (TiO_2, ZnO, Nb_2O_5) genellikle elektron taşıma veya pencere katmanı olarak; *p*-tipi oksitler (NiO, Cu_2O, Cr_2O_3) ise oyuk taşıma tabakası veya *p*-taraf olarak kullanılır. Bu çalışmanın merkezindeki MoO_3 ise özel bir konumdadır. Stokiyometrik MoO_3, oksijen-boşluğu kaynaklı iletim bandı kuyruğu durumları nedeniyle resmî olarak *n*-tipi bir yarıiletken sayılır; ancak yaklaşık 6,7 eV'lik yüksek elektron ilgisi ve buna karşılık gelen yaklaşık 6,8 eV'lik iş fonksiyonu sayesinde bir

yarıiletkenle temas ettiğinde arayüzde oyukça zengin bir birikim bölgesi oluşturarak *p*-tipi benzeri davranış sergiler. Bu tez kapsamında incelenen heteroeklemlerdeki "*p*-MoO_3" adlandırması da bu yüzey transfer katkılama (*surface transfer doping*) etkisinden kaynaklanmaktadır. Öne çıkan geçiş metali oksitlerinin yarıiletken tipi, yaklaşık bant aralığı ve temel işlevleri Tablo 2.1'de özetlenmiştir.

Tablo 2.2 Diyot ve fotodiyot uygulamalarında öne çıkan geçiş-sonrası (ana grup) metal oksitlerinin yarıiletken tipi, yaklaşık bant aralığı ve temel işlevleri

Metal Oksiti	Yarıiletken Tipi	Yaklaşık Bant Aralığı (E_g)	Diyot/Fotodiyottaki Temel Görevi
β-Ga_2O_3 (galyum oksit)	*n*-tipi	≈4,8–4,9 eV	Güneş-körü derin-UV (<280 nm) algılamada aktif katman; yüksek kırılma alanı sayesinde güç diyotları
SnO_2 (kalay dioksit)	*n*-tipi	≈3,6 eV	Saydam iletken oksit (TCO) ve elektron taşıma tabakası; UV fotodedektörlerde pencere katmanı
In_2O_3 (indiyum oksit)	*n*-tipi	≈3,6–3,8 eV	Yüksek hareketlilikli ETL; ITO biçiminde saydam elektrot olarak yaygın kullanım
SnO (kalay(II) oksit)	*p*-tipi	≈2,7–3,0 eV	Ana grup oksitleri arasındaki nadir *p*-tipi malzeme; saydam *p-n* eklemlerinde oyuk tarafı
Bi_2O_3 (bizmut oksit)	*p*-tipi	≈2,5–2,8 eV	Görünür bölge soğurucusu; fotoelektrokimyasal ve fotokatalitik dedektör yapıları
Al_2O_3 (alüminyum oksit)	Yalıtkan	≈8,8 eV	Yalıtkan ara/pasivasyon tabakası; MIS yapılarda tünelleme bariyeri ve kapsülleme katmanı

Al_2O_3, bant aralığının çok geniş olması nedeniyle bir yarıiletken değil yalıtkandır; aygıt yapılarındaki işlevsel rolü gereği karşılaştırma amacıyla tabloya dâhil edilmiştir. Bant aralığı değerleri faza, stokiyometriye ve üretim yöntemine göre değişebilen tipik literatür aralıklarıdır.

Geçiş metali oksitlerinin yanı sıra, periyodik tablonun *p*-bloğunda yer alan ve *d* kabukları tümüyle dolu olan geçiş-sonrası (*post-transition*) metallerin oksitleri de optoelektronik aygıtlarda önemli bir yer tutmaktadır. Galyum, kalay, indiyum ve bizmut gibi ana grup metallerinin oksitleri, geçiş metali oksitlerinden farklı bir elektronik yapı sergiler ve çoğunlukla geniş bant aralığına sahiptir; bu nedenle literatürde sıklıkla *geniş bant aralıklı metal oksitler* başlığı altında da anılırlar. Bu ailenin en dikkat çekici üyesi olan Ga_2O_3, yaklaşık 4,8 eV'lik son derece geniş bant aralığı sayesinde, atmosferdeki ozon tabakası tarafından soğurulan 280 nm altı bölgede çalışabilen güneş-körü (*solar-blind*) derin morötesi fotodedektörler için son on yılın

en çok araştırılan malzemesi hâline gelmiştir. Diyot ve fotodiyot uygulamalarında öne çıkan geçiş-sonrası metal oksitleri Tablo 2.2'de özetlenmiştir.

Bu iki oksit ailesi arasındaki temel ayrım, iletim bandının hangi atomik orbitallerden türediğine dayanır ve gözlenen tüm makroskopik farklılıkların kökeni bu elektronik yapı farkıdır. Geçiş metali oksitlerinde iletim bandının tabanı, metalin kısmen dolu *d* orbitallerinden oluşur. Bu orbitaller uzaysal olarak yönlenmiş ve göreli olarak lokalize olduklarından, dar ve düşük dağınımlı (düşük dispersiyonlu) enerji bantları meydana getirir; sonuç olarak elektronların etkin kütlesi büyür, hareketlilikleri düşer ve taşınım çoğu zaman küçük polaron atlaması biçiminde ilerler. Buna karşılık geçiş-sonrası metal oksitlerinde iletim bandının tabanı, metalin küresel simetrik *n*s orbitallerinden türer. Küresel simetri, komşu katyonlar arasında güçlü örtüşmeye ve dolayısıyla geniş, yüksek dağınımlı bir iletim bandına yol açar; bu da düşük etkin kütle ve yüksek elektron hareketliliği anlamına gelir. Bu yapısal üstünlük, söz konusu oksitlerin amorf hâlde bile yüksek hareketlilik koruyabilmesinin ve saydam iletken oksit olarak kullanılabilmelerinin temel nedenidir.

Tablo 2.3 Geçiş metali oksitleri ile geçiş-sonrası metal oksitlerinin temel özellikleri bakımından karşılaştırılması

Ölçüt	Geçiş Metali Oksitleri (ör. MoO_3, WO_3, NiO)	Geçiş-Sonrası Metal Oksitleri (ör. Ga_2O_3, SnO_2, In_2O_3)
Elektronik yapı	Kısmen dolu *d* kabuğu	Tümüyle dolu *d* kabuğu; değerlik *s*/*p* orbitalleri
İletim bandı tabanı	Metal *d* orbitalleri; dar, düşük dağınımlı bant	Metal *n*s orbitalleri; geniş, yüksek dağınımlı bant
Elektron hareketliliği	Düşük; taşınım sıklıkla polaron atlaması ile	Yüksek; amorf hâlde bile korunabilir (saydam iletken oksitler)
Değerlik kimyası	Çoklu yükseltgenme basamağı → ayarlanabilir kusur kimyası, elektrokromizm	Ağırlıklı olarak tek değerlik → sınırlı ancak öngörülebilir kusur kimyası
Manyetik davranış	Manyetik düzenlenme ve elektron korelasyonu mümkün	Manyetik düzenlenme gözlenmez
Tipik bant aralığı	Genellikle 1,2–4,0 eV → görünür ve yakın-UV	Genellikle 2,5–4,9 eV → UV ve derin-UV (güneş-körü)
Fotodedektördeki rol	Taşıyıcı-seçici kontak (HTL/ETL) ve ara katman; görünür–UV aktif katman	Geniş bant aralıklı aktif katman (derin-UV) ve saydam elektrot/pencere

Elektronik yapıdaki bu ayrım, aygıt düzeyinde üç önemli sonuç doğurur. Birincisi, geçiş metallerinin birden çok kararlı yükseltgenme basamağına sahip olması (örneğin Mo^{6+}/Mo^{5+} veya V^{5+}/V^{4+}), oksijen boşluğu yoğunluğu üzerinden iş fonksiyonunun ve iletkenliğin geniş bir aralıkta ayarlanabilmesine imkân tanır; elektrokromizm ve bu tezin merkezindeki tavlamayla stokiyometri denetimi de bu çoklu değerlik kimyasının doğrudan sonucudur. Geçiş-sonrası metaller ise ağırlıklı olarak tek ve kararlı bir değerlik sergilediğinden, kusur kimyaları daha sınırlı ancak daha öngörülebilirdir. İkincisi, kısmen dolu *d* kabukları geçiş metali oksitlerinde manyetik düzenlenme ve güçlü elektron korelasyonu gibi olgulara yol açarken, dolu *d* kabuklu ana grup oksitlerinde bu olgular gözlenmez. Üçüncüsü, geçiş-sonrası metal oksitleri tipik olarak daha geniş bant aralığına sahip olduğundan derin morötesi bölgeye erişebilirken, geçiş metali oksitleri görünür ve yakın morötesi bölgede daha etkin çalışır. Söz konusu farklar Tablo 2.3'te karşılaştırmalı olarak özetlenmiştir.

Bu karşılaştırma, tez kapsamında MoO_3'ün seçilmesinin gerekçesini de açıklığa kavuşturmaktadır. Ga_2O_3 gibi geçiş-sonrası oksitler, derin morötesi algılamada üstün olmakla birlikte kararlı *p*-tipi iletkenlik elde edilememesi nedeniyle çoğunlukla n-tarafı olarak kullanılabilmekte ve *p*-n eklemi oluşturmak için NiO gibi *p*-tipi bir geçiş metali oksitine gereksinim duymaktadır; nitekim NiO/Ga_2O_3 tam-oksit eklemleriyle kendinden beslemeli güneş-körü dedektörler bildirilmiştir (Liu vd., 2026). MoO_3 ise çoklu değerlik kimyası ve çok yüksek iş fonksiyonu sayesinde, katkılamaya gerek kalmadan yüzey transfer katkılaması yoluyla oyuk-seçici bir kontak oluşturabilmekte; böylece dört farklı yarıiletken alt tabaka üzerinde tek ve ortak bir üretim protokolüyle doğrultucu eklem kurulabilmesine imkân tanımaktadır. Bu esneklik, tezin karşılaştırmalı yöntembilimi açısından belirleyici olmuştur.

Önceki çalışmalar büyük ölçüde; fotodedektörler, güneş gözeleri ve taşıyıcı-seçici kontaklar (*carrier-selective contacts*) gibi belirli uygulamalar için tasarlanmış münferit MoO_3 tabanlı heteroeklemlere odaklanmıştır (Alaya vd., 2025; Sharmila ve Dwivedi, 2022). Ne var ki bildirilen sonuçlar; yarıiletken alt tabakaya, üretim koşullarına ve biriktirme sonrası işlemlere bağlı olarak çoğu zaman önemli ölçüde değişmektedir. Bunun bir sonucu olarak, alt tabaka malzemesinin MoO_3 tabanlı heteroeklemlerin arayüzel elektriksel davranışını belirlemedeki temel rolü hâlâ

yeterince anlaşılamamıştır. InP ve GaAs gibi yarıiletkenler; doğrudan bant aralıklı yapıları ve yüksek elektron hareketlilikleri nedeniyle yüksek frekanslı ve fotonik sistemlerde kritik bir rol oynamaktadır (Papež vd., 2021; Yue vd., 2023). Öte yandan SiC; üstün ısıl iletkenliği, yüksek kritik kırılma alanı ve kimyasal kararlılığı sayesinde yüksek güç ve yüksek sıcaklık gerektiren elektronik uygulamalarda büyük önem taşımaktadır (Friedrichs ve Rupp, 2005; Langpoklakpam vd., 2022; La Via vd., 2023). Yeni nesil güç elektroniğindeki teknolojik önemine karşın MoO_3/SiC heteroeklemleri üzerine yapılan çalışmalar, Si ve GaAs gibi geleneksel yarıiletken sistemlerle karşılaştırıldığında hâlâ oldukça sınırlıdır. Özellikle düşük sıcaklıkta tavlamanın MoO_3/SiC yapılarının arayüzel taşınımına ve dielektrik tepkisine etkisi henüz kapsamlı biçimde aydınlatılmamıştır.

Tavlama işlemi; arayüzdeki MoO_3 tabakasının kimyasal bileşimini, türlerin karşılıklı difüzyon davranışını, kusur yoğunluğunu ve stokiyometrik oranları önemli ölçüde değiştirebilmektedir (Baek vd., 2013; Dalle Feste vd., 2021). Bu mikroyapısal dönüşümler, aygıtın elektriksel başarımını doğrudan etkilemekte ve arayüz durum yoğunluğu (N_{ss}), seri direnç, idealite faktörü ve bariyer yüksekliği gibi kritik parametrelerde belirleyici bir rol üstlenmektedir (Çetinkaya vd., 2025; Çiçek vd., 2021). Bununla birlikte, ısıl tavlamanın teknolojik açıdan önemli yarıiletkenler üzerinde aynı işlem koşullarında üretilen MoO_3 heteroeklemlerinin arayüz durumlarını, dielektrik gevşeme mekanizmalarını ve taşıyıcı taşınım özelliklerini nasıl değiştirdiğini ele alan sistematik karşılaştırmalı incelemeler hâlâ eksiktir. Ayrıca I–V, C–V–f, G–V–f ve dielektrik spektroskopi analizlerini tek bir karşılaştırmalı çerçevede birleştiren çalışmalar literatürde çok kısıtlıdır; oysa ilgili çalışmalarda vurgulandığı üzere, I–V karakterizasyonuyla belirlenen diyot davranışı, farklı frekans değerlerinde elde edilen C–V ve G–V karakteristiklerinin ortaya koyduğu kapasitif özelliklerle birlikte değerlendirilmelidir (Nicollian ve Brews, 2002; Schroder, 2015).

Karmaşık geçirgenlik, elektrik modülü (*electric modulus, M**) ve AC iletkenlik cinsinden değerlendirilen dielektrik özellikler; polarizasyon mekanizmaları, yük taşınım süreçleri ile yığın (*bulk*) oksidin ve arayüzlerinin niteliği hakkında ayrıntılı bilgi sağlamaktadır (Çiçek vd., 2021; Tan vd., 2022). Bu çok yönlü karakterizasyon yaklaşımı; yığın yarıiletkenin, MoO_3 filminin ve bunlar arasındaki kritik arayüzün

katkılarının belirlenmesi ve birbirinden ayırt edilmesi açısından önem taşımaktadır. Literatürde ısıl tavlamanın arayüz kusur yoğunluğunu azaltarak heteroeklem arayüzündeki yük taşıyıcı taşınımını iyileştirebildiği yaygın olarak bildirilmektedir (Christensen vd., 2017; Wang vd., 2021); ancak Bölüm 1.2'de belirtildiği üzere bu etkinin alt tabakaya göre yön değiştirebileceği yeterince irdelenmemiştir.

Esas olarak tek alt tabakalı sistemlere odaklanan önceki çalışmaların aksine bu tez; MoO_3 tabanlı heteroeklem yapıların ısıl işleme verdiği alt tabakaya bağlı yanıtı ve elektriksel evrimini anlamak için birleşik bir karşılaştırmalı platform sunmaktadır. Bölüm 4'te gösterileceği üzere yarıiletken alt tabaka, yalnızca edilgen bir destek tabakası değildir; arayüz kusur kimyasını ve yük taşınım yollarını belirleyen etkin bir tasarım parametresidir. Bu doğrultuda izleyen bölümlerde, dört farklı *n*-tipi alt tabaka (Si, GaAs, InP ve 4H-SiC) üzerinde üretilen *p*-MoO_3 heteroeklemlerinin tavlama öncesi ve sonrası elektriksel ve dielektrik özellikleri sistematik biçimde karşılaştırılmaktadır.

Molibden trioksitin (MoO_3) öne çıkan elektronik davranışı, kristal ve elektronik yapısından kaynaklanır. Termodinamik olarak en kararlı faz olan ortorombik α-MoO_3; MoO_6 oktahedralarının köşe ve kenarlardan paylaşımıyla oluşan çift katmanların van der Waals etkileşimleriyle istiflenmesinden meydana gelen katmanlı bir yapıya sahiptir. Değerlik bandının üst kısmı ağırlıklı olarak O 2*p* durumlarından, iletim bandının alt kısmı ise Mo 4*d* durumlarından oluşur. Dolu O 2*p* ile boş Mo 4*d* durumları arasındaki bu ayrım, yaklaşık 3 eV genişliğinde bir optik bant aralığına karşılık gelir (Guo ve Robertson, 2014; Kröger vd., 2009b).

MoO_3'ü benzer geniş bant aralıklı oksitlerden ayıran temel özellik, iletim bandının vakum düzeyine göre olağandışı derecede derin konumlanması, dolayısıyla yaklaşık 6,7 eV gibi yüksek bir elektron ilgisi (χ) ve yaklaşık 6,8 eV'a varan bir iş fonksiyonudur (Guo ve Robertson, 2014; Kröger vd., 2009b). İletim bandının bu derin konumu, MoO_3'ün komşu yarıiletkenin değerlik bandından elektron çekmesine (eşdeğer olarak oyuk enjekte etmesine) imkân tanır. Nominal olarak *n*-tipi bir oksit olmasına karşın MoO_3'ün pratikte oyuk-seçici ve *p*-tipi benzeri bir kontak gibi davranmasının fiziksel kökeni budur (Battaglia vd., 2014b; Greiner vd., 2012).

MoO_3'ün elektronik özellikleri kusur kimyasıyla, özellikle oksijen boşluklarıyla (V_O) güçlü biçimde belirlenir. Her oksijen boşluğu, geride komşu molibden atomlarına lokalize olan iki elektron bırakır; bu elektronlar iki Mo^{6+} iyonunu Mo^{5+}'e indirgeyerek iletim bandının hemen altında sığ donör benzeri kusur durumlarının oluşmasına yol açar (Greiner vd., 2012; Guo ve Robertson, 2014). Sonuçta ortaya çıkan stokiyometri-altı MoO_{3-x} ($0 < x < 1$), Fermi düzeyini iletim bandına doğru kaydırarak iletkenliği artırır; ancak iş fonksiyonu, oksijen içeriğine ve yüzey dipollerine bağlı olarak geniş bir aralıkta ayarlanabilir kalır.

Bu kusur duyarlılığı, tezin merkezindeki ısıl tavlama olgusunun da temelini oluşturur: ortam havasında uygulanan tavlama, oksijen boşluğu yoğunluğunu, stokiyometriyi ve dolayısıyla MoO_3'ün iş fonksiyonu ile arayüzdeki bant hizalamasını değiştirebilir (Greiner vd., 2012). Ancak bu değişim yalnızca oksit tabakasının içinde gerçekleşmez; alt tabaka da doğal oksidiyle oksijen alışverişi, karşılıklı difüzyon ve arayüzde tetiklenen kendine özgü tepkimeler yoluyla sürece etkin biçimde katılır. Bu nedenle aynı ısıl işlem, farklı yarıiletken alt tabakalar üzerinde birbirinden ayrışan, kimi durumda birbirine karşıt sonuçlar doğurabilir.

Yukarıda özetlenen özellikler bir araya getirildiğinde, MoO_3'ün bu tez kapsamında fotodedektör ara katmanı olarak seçilme gerekçesi üç noktada toplanabilir. Birincisi, yaklaşık 6,8 eV'lik iş fonksiyonu, *n*-tipi bir yarıiletkenle temas ettiğinde büyük bir yerleşik potansiyel ve belirgin bir bant bükülmesi oluşturur; böylece klasik katkılama, difüzyon veya iyon implantasyonu gerekmeksizin, yüzey transfer katkılaması yoluyla oyuk-seçici ve doğrultucu bir kontak elde edilir. Bu durum, sıfır beslemede ($V_{bias} = 0$ V) çalışan bir fotodiyodun gereksinim duyduğu taşıyıcı ayrıştırma alanını doğrudan sağlamaktadır. İkincisi, yaklaşık 3 eV'lik geniş optik bant aralığı (≈413 nm soğurma kenarı) sayesinde MoO_3 görünür bölgede geçirgendir; dolayısıyla bu bölgede soğurucu katman değil, ışığı alttaki yarıiletkene ileten bir pencere tabakası işlevi görür. Bu ayrım, görünür bölgedeki fotoyanıtın alt tabakanın soğurma kenarı tarafından belirlenmesini ve böylece tezdeki alt tabaka karşılaştırmasının anlamlı olmasını mümkün kılar. Bu çalışmada kullanılan 365 ve 395 nm'lik morötesi uyarımlar ise MoO_3'ün soğurma kenarının üzerinde kaldığından, morötesi bölgede oksit tabakasının da kısmi soğurma yoluyla yanıta katkı vermesi olasıdır. Üçüncüsü, çoklu değerlik

kimyası (Mo^{6+}/Mo^{5+}) ve oksijen boşluğu yoğunluğunun ısıl işlemle denetlenebilmesi, tezin ikinci ekseni olan tavlama çalışmasının fiziksel temelini oluşturmaktadır.

Bu üç özelliğin aynı malzemede birleşmesi, yöntemsel açıdan da belirleyici olmuştur. Tezin araştırma sorusu alt tabakanın etkisini nicelemek olduğundan, alt tabaka dışındaki tüm değişkenlerin sabit tutulması gerekmiş; bu ise dört farklı yüzey kimyasına (*n*-Si, *n*-GaAs, *n*-InP ve *n*-4H-SiC) tek ve ortak bir üretim protokolüyle doğrultucu eklem kurabilen bir ara katmanı zorunlu kılmıştır. MoO_3, düşük sıcaklıkta fiziksel buhar biriktirme ile, katkılama ve çözelti kimyası gerektirmeksizin bu koşulu sağlamaktadır. Tablo 2.1–2.3'te karşılaştırılan diğer adaylar aynı ölçütü bu düzeyde karşılamamaktadır: WO_3 ve V_2O_5'in iş fonksiyonları daha düşük olduğundan yerleşik potansiyel zayıf kalmakta; NiO gerçek *p*-tipi olmakla birlikte gerektirdiği daha yüksek işlem sıcaklığı ortak protokol koşulunu bozmakta (ayrıca taşıyıcı hareketliliği düşük kalmakta); Ga_2O_3 ise kararlı *p*-tipi iletkenlik elde edilemediğinden eklemin *p*-tarafını tek başına oluşturamamaktadır.

2.3 Akım İletim Mekanizmaları: Termiyonik Emisyon ve MIS/Schottky Kuramı

p-MoO_3/*n*-yarıiletken yapıları, bir doğrultucu (Schottky benzeri) kontak gibi davranır ve çoğu durumda ince bir arayüz oksit/ara tabakanın varlığı nedeniyle metal–yalıtkan–yarıiletken (MIS) yapısı olarak ele alınır. Orta sıcaklıklarda ve düşük beslemelerde baskın iletim mekanizması termiyonik emisyondur. Termiyonik emisyon kuramına göre aygıt akımı (*I*), uygulanan voltaja (V) aşağıdaki gibi bağlıdır (Aydoğan, 2015; Sze ve Ng, 2007):

$$I = I_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1\right] \tag{2.1}$$

$$I_0 = AA^*T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_B}{kT}\right) \tag{2.2}$$

Burada I_0 doyum akımı, A kontak alanı, A^* etkin Richardson sabiti, T mutlak sıcaklık, q elektron yükü, k Boltzmann sabiti, Φ_B bariyer yüksekliği ve n idealite faktörüdür. İdealite faktörü, akım–voltaj eğrisinin doğrusal bölgesinin eğiminden elde edilir ve

birimden sapması (n > 1), ideal termiyonik emisyondan uzaklaşmayı —arayüz durumları, ara tabaka veya tünelleme/üretim-yeniden birleşme katkılarını— yansıtır (Aydoğan, 2014). İdeal Schottky–Mott yaklaşımında bariyer yüksekliği, metalin (veya yüksek iş fonksiyonlu MoO_3'ün) iş fonksiyonu ile yarıiletkenin elektron ilgisi farkına eşittir:

$$\Phi_B = \Phi_m - \chi_s \tag{2.3}$$

Gerçek aygıtlarda Fermi düzeyi sabitlenmesi ve arayüz dipolleri nedeniyle ölçülen bariyer yüksekliği bu ideal değerden saparak büyük ölçüde alt tabakaya bağlı kalır. Yüksek besleme bölgesinde seri direnç (R_s) ve ara tabaka etkileri belirginleşir; bu parametrelerin ayrıştırılması için yaygın olarak Cheung–Cheung yöntemi kullanılır (Cheung ve Cheung, 1986):

$$\frac{dV}{d(\ln I)} = R_s I + \frac{nkT}{q} \tag{2.4}$$

$$H(I) = V - \frac{nkT}{q}\ln\left(\frac{I}{AA^*T^2}\right) = n\Phi_B + R_s I \tag{2.5}$$

Denklem 2.4'daki $dV/d(\ln I)$–I grafiğinin eğiminden seri direnç, kesim noktasından idealite faktörü elde edilir; buradan bulunan n değeri Denklem 2.5'de kullanılarak çizilen $H(I)$–I grafiğinin kesim noktasından bariyer yüksekliği, eğiminden ise seri direnç ikinci kez (tutarlılık denetimi olarak) belirlenir. Alternatif olarak Norde yöntemi de bariyer yüksekliği ve seri direncin belirlenmesinde kullanılır (Norde, 1979). Bu parametrelerin alt tabakaya ve tavlama durumuna göre değişimi, arayüz mühendisliğinin aygıt başarımı üzerindeki etkisini nicel olarak ortaya koyar.

Schottky engelli eklemlerin bu tezdeki fotodiyot uygulaması açısından iki temel niteliği Streetman ve Banerjee (2014, s. 229–233) tarafından açık biçimde ortaya konur. Birincisi doğrultmanın fiziksel kaynağıdır: doyum akımı, metalden (bu tezde yüksek iş fonksiyonlu MoO_3'ten) yarıiletkene elektron enjeksiyonunu sınırlayan engelin büyüklüğüne Boltzmann çarpanı üzerinden bağlıdır ($I_0 \propto \exp(-q\Phi_B/kT)$) ve bu engel ideal durumda besleme geriliminden etkilenmez; doğru beslemede yalnızca yarıiletken tarafındaki yerleşik potansiyel $V_0 - V$'ye düşerek akımı üstel biçimde

artırır. İkincisi, Schottky engelli diyotların azınlık taşıyıcı enjeksiyonu ve buna bağlı depolama gecikmesi içermeyen çoğunluk taşıyıcı aygıtlar olmasıdır; yüksek frekans ve anahtarlama başarımlarının tipik *p*–*n* eklemlerinden genellikle daha iyi olması bu özellikten kaynaklanır ve kendinden beslemeli fotodiyotlarda hızlı tepki beklentisinin kuramsal dayanağını oluşturur. Aynı bölümde omik kontakların pratikte kontak bölgesinin ağır katkılanmasıyla, yani tükenim bölgesi taşıyıcıların tünelleyebileceği kadar inceltilerek elde edildiği belirtilir; bu ilke, tezdeki aygıtların arka omik kontaklarının işlevi ve *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtında gözlenen yüksek arayüz direncinin (tam omik/doğrultucu geçiş oluşumunun daha yüksek işlem sıcaklığı gerektirmesinin) yorumlanması bakımından doğrudan ilgilidir.

2.4 Dielektrik Gevşeme ve Atlama (*Hopping*) İletkenliği

Frekansa bağlı kapasitans ve iletkenlik ölçümleri, heteroeklem arayüzündeki polarizasyon ve yük taşınımı mekanizmaları hakkında zengin bilgi sağlar. Karmaşık dielektrik geçirgenlik (ε^*), gerçek (ε', depolanan enerji) ve sanal (ε'', kayıp) bileşenlerinden oluşur:

$$\varepsilon^* = \varepsilon' - j\varepsilon'' \tag{2.6}$$

İdeal, tek gevşeme zamanlı (τ) bir sistem için frekansa (ω) bağlı dielektrik tepki Debye modeliyle tanımlanır:

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + j\omega\tau} \tag{2.7}$$

Burada ε_s ve ε_∞ sırasıyla statik ve yüksek frekans geçirgenlikleridir. Denklem 2.7, malzemedeki tüm dipollerin dış alana tek bir gevşeme zamanıyla tepki verdiğini varsayar; bu nedenle tek gevşeme zamanlı (*single relaxation time*) model olarak da anılır. Gerçek ve sanal bileşenler ayrıştırıldığında

$$\varepsilon' = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau^2} \tag{2.7a}$$

$$\varepsilon'' = \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2} \tag{2.7b}$$

elde edilir. Denklem 2.7b'ye göre ε'', $\omega\tau = 1$ koşulunda (yani $\omega = 1/\tau$) en büyük değerini alır; gevşeme frekansı bu tepe konumundan belirlenir. Ölçülen ε″ ayrıca $\sigma_{dc}/(\omega\varepsilon_0)$ biçiminde bir iletim katkısı içerir ve düşük frekanslarda bu terim baskın hâle gelir. Gerçek aygıtlarda gevşeme genellikle tek bir τ ile değil, bir gevşeme zamanı dağılımıyla gerçekleşir; bu Debye dışı davranış, bir dağılım parametresi (α) içeren Cole–Cole bağıntısıyla daha iyi betimlenir (Cole ve Cole, 1941):

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1+(j\omega\tau)^{1-\alpha}} \tag{2.8}$$

Cole–Cole modeli, Debye modelinin tek gevşeme zamanı varsayımını genişleterek malzemedeki gevşeme zamanlarının dağılımını dikkate alan bir dielektrik gevşeme modelidir. Modelde yer alan Cole–Cole dağılım parametresi (α), malzemenin Debye davranışından sapma derecesini ifade eder: $\alpha = 0$ için Denklem 2.8 Debye modeline indirgenirken, $0 < \alpha < 1$ aralığındaki değerler gevşeme zamanlarının bir dağılım gösterdiği Debye dışı davranışa karşılık gelir; α büyüdükçe dağılım genişler ve Cole–Cole eğrisinin (ε''–ε' düzlemindeki yarım dairenin) merkezi gerçek eksenin altına kayar. Bu nedenle Cole–Cole modeli, heterojen yapıya sahip ince filmler ve yarıiletken heteroeklemlerin dielektrik özelliklerinin analizinde yaygın olarak kullanılmaktadır.

Arayüz ve iletim kayıplarının dielektrik tepkiyi baskıladığı durumlarda, gevşeme süreçlerini ayırt etmek için elektrik modülü (M^*) gösterimi tercih edilir:

$$M^* = \frac{1}{\varepsilon^*} = M' + jM'' \tag{2.9}$$

Frekansa bağlı alternatif akım (AC) iletkenliği ise çoğu düzensiz ve yarıiletken malzemede Jonscher'in evrensel güç yasasına uyar (Jonscher, 1977):

$$\sigma_{ac}(\omega) = \sigma_{dc} + A\,\omega^s \tag{2.10}$$

Burada σ_{dc} doğru akım iletkenliği, A bir sabit ve s ($0 < s < 1$) frekans üssüdür. Üs *s*'nin sıcaklıkla azalması, ilişkili engel atlaması (*correlated barrier hopping*, CBH) mekanizmasına işaret eder; bu da yük taşınışının lokalize durumlar arasında termal olarak etkinleşen atlamalarla gerçekleştiğini gösterir (Elliott, 1987). Bu tezde gözlenen

Debye dışı gevşeme ve atlama temelli AC iletkenlik, *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken arayüzündeki kusur durumlarının ve polarizasyon süreçlerinin alt tabakaya bağlı doğasını yansıtır.

2.5 Otomatik SEM Görüntü İşleme ile Metroloji

Aktif molibden trioksit (MoO_3) filminin morfolojik özelliklerinin ve arayüz kalitesinin optimize edilmesi, optoelektronik uygulamalarda MoO_3/yarıiletken aygıtların yüksek başarım göstermesinin önündeki başlıca belirleyicidir. Son araştırmalar, bu morfolojik özelliklerin özellikle ısıl işlem parametrelerinden belirgin biçimde etkilendiğini göstermiştir. Katman kalınlığı ve oksijen akış hızı gibi işlem değişkenlerinin optoelektronik başarım üzerindeki etkisi, termal oksidasyon gibi basit tekniklerle üretilen *n*-MoO_3/*p*-Si aygıtlarında kanıtlanmıştır. Talebi ve Eshghi (2024) tarafından yapılan iki farklı araştırmada gösterildiği gibi, α-MoO_3 filminin kalınlığının (50 nm) optimize edilmesi, UV'den IR'ye kadar geniş bir spektral aralıkta maksimum optik geçirgenliği garanti ederek en yüksek fotoyanıt oranını sağlamaktadır. Ek olarak, termal oksidasyon sürecinde oksijen akış hızının en uygun değer olan 60 sccm'de tutulması, film içerisindeki oksijen boşluğu yoğunluğunu ve buna bağlı olarak gelişen stokiyometri-altı α-MoO_{3-x} bileşimini ($MoO_{2,84}$) denetim altına alarak en yüksek doğrultma oranının ve kızılötesi (IR) fotoyanıt oranının elde edilmesini sağlamıştır (Talebi ve Eshghi, 2023). Bu bulgular, hem kristal faz oluşumu (ortorombik α-MoO_3) hem de filmdeki kimyasal kusurların ısıl işlemle denetlendiğini ve bunun da aygıt başarımını etkilediğini göstermektedir. Bununla birlikte, ısıl tavlama işlemleri de arayüz kalitesini doğrudan iyileştirmek için gereklidir. Xu vd. (2021), tavlama sıcaklığını ve MoO_x/*n*-Si yapısındaki ultra ince Al_2O_3 tünelleme pasivasyon tabakasını ayarlayarak yüksek algılama hassasiyetine sahip NIR fotodedektörler oluşturmayı başarmıştır. Bu, arayüzdeki tuzak merkezlerinin ısıl işlemlerle başarılı bir şekilde pasifleştirilebileceğini göstermektedir. Bununla birlikte, Çaldıran vd. (2021), arayüzdeki homojen olmama ve seri direnç gibi morfolojik kusurların, MoO_3/*n*-Si aygıtlarında görülen yüksek idealite faktörleriyle bağlantılı olduğuna işaret etmiştir. Bu, aygıtın ideal elektriksel davranışından sapmaları önlemek için termal işleme yoluyla elde edilen morfolojik kontrolün ne kadar kritik olduğunu vurgulamaktadır. Sonuç olarak, MoO_3/yarıiletken fotodedektörlerdeki yüksek başarım, ısıl işlem

parametrelerinin hassas biçimde ayarlanması yoluyla film morfolojisinin (*kalınlık, kristal yapı*) ve arayüz kalitesinin optimize edilmesine bağlıdır.

Bu çalışmada üretilen kontak yapıları, gelişmiş optoelektronik uygulamalar için temel yapı taşları olan heteroeklemleri oluşturur. Özellikle, bir MoO_3 tabakasının çeşitli *n*-tipi yarıiletken alt tabakalarla (Si, 4H-SiC, InP ve GaAs) entegrasyonu, anizotipik *p-n* heteroeklemler oluşturur. Stokiyometrik MoO_3 nominal olarak bir *n*-tipi malzeme olsa da, ısıl buharlaştırmayla elde edilen stokiyometri-altı MoO_3 filmleri, çok yüksek bir elektron ilgisi (≈ 6,7 eV) ve derin bir Fermi seviyesi sergiler. Bu, arayüzde bir yüzey transferi doping etkisi meydana getirerek, üretilen heteroeklemlerde etkili bir şekilde güçlü *p*-tipi benzeri (oyuk seçici) bir davranışı belirleyen oyuk bakımından zengin bir birikim bölgesi oluşturur (Battaglia vd., 2014b; Greiner vd., 2012). Arayüz özellikleri yük taşıyıcı dinamiklerini, bariyer yüksekliklerini ve genel aygıt verimliliğini doğrudan belirlediğinden, bu heteroeklemlerin kesin tipini ve davranışını belirlemek çok önemlidir. Güncel literatür, bu tür heteroeklem yapılarının önemini açıkça ortaya koymaktadır; örneğin, MoO_3 tabanlı heteroeklemlerin elektriksel ve optoelektronik davranışlarının, arayüz kalitesine, kusur durumlarına ve aydınlatma koşullarına karşı belirgin biçimde duyarlı olduğu gösterilmiştir (Çaldıran vd., 2021). Ayrıca, iyi tanımlanmış anizotipik heteroeklemlerin üretimi, yüksek performanslı diyotlar, fotodedektörler ve sensör uygulamaları için yapısal bir temel oluşturmaktadır (Çaldıran vd., 2025; Liu vd., 2016). Bu nedenle, heteroeklem arayüzündeki fiziksel ve morfolojik parametrelerin optimize edilmesi, ideal diyot özelliklerine ulaşmak ve metal oksit/yarıiletken aygıtlarda kaçak akımları bastırmak için temel bir ön koşuldur (Ghuge vd., 2024; Zhen vd., 2018). Bu bağlamda, bu heteroeklemlerin hassas morfolojik karakterizasyonu vazgeçilmez hâle gelmektedir.

Taramalı elektron mikroskobu (SEM); malzeme bilimi, nanoteknoloji ve elektronik alanlarında yüzey biçimi, tabaka kalınlığı ve parçacık dağılımı gibi mikroyapısal özellikleri incelemek için temel bir araçtır. Yüksek uzamsal çözünürlük sağladığından, nanomalzemelerin karakterizasyonunda ve aygıt başarımının optimize edilmesinde önemli bir yere sahiptir (Aziz vd., 2025). Kaplama ve ince filmlerin kalınlığı çoğunlukla SEM ile ölçülür; örneğin SEM-EDS, görünür kalınlığı ve enerji kaybını hesaplamak için alt tabakadan gelen elektron iletimini ve X-ışını yoğunluğunu kullanır

(Essani vd., 2024). Pürüzlü alt tabakalar üzerindeki üstten görüntülerde ise kalınlık, biriktirme öncesi ve sonrası parlaklık oranları ve çevre uzunlukları üzerinden hesaplamalı olarak çıkarılabilir (Kondi vd., 2025). Kesit analizinde, magnetron saçtırmayla üretilen çok katmanlı yapılar için geliştirilmiş oksit tabaka teknikleri (Sikora vd., 2023) ya da yüksek hassasiyet sağlayan ancak numuneye zarar veren odaklanmış iyon demeti (FIB) aşındırma kullanılır (Giurlani vd., 2020; Skoupy vd., 2020). Genellikle elipsometri veya Rutherford geri saçılımı gibi tamamlayıcı tekniklerle %5–10 doğrulukta kalibre edilen bu yöntemler, malzemeye ve alt tabakaya göre değişen doğruluk gösterir. Güvenilirlik, eşik değeri optimizasyonu ve üç boyutlu yeniden oluşturma gibi görüntü işleme yöntemleriyle daha da artırılabilir (Liu vd., 2011; Zhang vd., 2024).

Evrişimli sinir ağları (CNN) ve model tabanlı algoritmalar, kesit görüntülerinden boyutsal parametrelerin çıkarılmasını otomatikleştiren makine öğrenmesi tabanlı görüntü işleme yöntemlerine örnektir; bu yöntemler, geçirimli elektron mikroskobuyla karşılaştırılabilir ölçüm doğruluğunu daha yüksek verimle sunduğu bildirilmiştir (Kwak ve Kim, 2023). Transfer öğrenme (*transfer learning*) ve örnek düzeyinde segmentasyon (*instance segmentation*) tabanlı derin öğrenme mimarileri sayesinde, sınırlı büyüklükteki eğitim verisiyle ve elektron demeti parametreleri (hızlandırma gerilimi, demet akımı) ile dedektör ayarlarındaki değişimlerden kaynaklanan görüntü kalitesi farklılıklarına rağmen güvenilir otomatik metroloji gerçekleştirilebilmektedir (Baderot vd., 2022). Qiao vd. (2024) tarafından geliştirilen DeepSEM-Net, yarıiletken üretiminde SEM tabanlı kusur analizi için tasarlanmış olup CNN tabanlı öznitelik çıkarımını Transformer tabanlı dikkat (*attention*) yapılarıyla birleştiren çift kollu bir mimaridir. Gerçek bir 300 mm üretim hattından alınan beş sınıflı veri kümesinde model, %97,25 sınıflandırma doğruluğuna ve segmentasyonda %84,40 IoU (*kesişim/birleşim oranı*) değerine ulaşmıştır; aynı model üzerine kurulan yarı gözetimli (*semi-supervised*) kusur analizi sisteminin ise manuel denetim yükünü belirgin biçimde azalttığı bildirilmiştir. Buna ek olarak, çok katmanlı ince film kesitlerinin SEM görüntüleri için önerilen ve uyarlanabilir eşikleme ile ilgi bölgesi (ROI) seçimine dayanan bir kenar algılama algoritmasının, düşük kontrastlı arayüzlerde sınır tespitini iyileştirdiği gösterilmiştir (Sun vd., 2024). Her iki çalışmanın konusu bu tezde ele alınan ölçüm problemiyle doğrudan örtüştüğünden, otomatik görüntü işlemenin uzman

denetimiyle bütünleştirildiği benzer bir yaklaşımın, yarıiletken heteroeklemlerin ve nanomalzeme yüzeylerinin doğru ve tekrarlanabilir biçimde karakterize edilmesine katkı sağlayabileceği değerlendirilmektedir.

Vision transformer (ViT) tabanlı ROI seçimi, tam slayt görüntülerinde analize uygun bölgelerin belirlenmesini otomatikleştirerek yüksek doğruluk sağlamıştır (Hossain vd., 2023); benzer bir yaklaşımın, MoO_x gibi oksit yüzeylerin SEM görüntülerinde parçacık analizi için ROI seçim süresini kısaltma potansiyeli taşıdığı değerlendirilebilir. Görüntü ön işlemede, kontrast sınırlı uyarlanabilir histogram eşitleme (CLAHE) ile Otsu eşikleme ve morfolojik açma işlemlerinin birleştirilmesi, kontrastı zayıf ve gürültülü görüntülerde parçacık sayımını ve yoğunluk kestirimini iyileştirmektedir (Mohammed ve Isa, 2025). Otsu yöntemi, iki modlu (*bimodal*) histogramlarda sınıflar arası varyansı en büyükleyen eşiği seçerek nesne–arka plan ayrımını sağlar (Otsu, 1979); ancak nesne ve arka plan piksellerinin iç içe geçtiği, tek modlu (*unimodal*) veya belirgin olmayan dağılımlarda başarımı düşer. Bu sınırlamayı gidermek için histogram birikim momenti kullanan geliştirilmiş Otsu algoritmaları önerilmiş ve parçacık tanıma ile boyut belirlemede etkili olduğu gösterilmiştir (Zhan ve Zhang, 2019). Eşikleme adımını morfolojik filtreleme ve bağlantılı bileşen çözümlemesiyle birleştiren bu işlem zinciri, ikili görüntüde kalan nesnelerin ayrı ayrı etiketlenip sayılmasına ve böylece parçacık boyutu ile yoğunluk dağılımının nicel olarak çıkarılmasına imkân tanır. Bu çalışmada, SEM görüntülerinden veri çıkarmak için üç işleme yöntemi birleştirilmiştir: (1) MoO_3 yüzey parçacıkları için Otsu eşikleme ve bağlantılı bileşen çözümlemesiyle bölge tabanlı (ROI) görüntü işleme; (2) gümüş (Ag) kontak noktalarında çap ve alan hesabı için ölçek çubuğu tabanlı etkileşimli ölçüm; (3) kesit görüntülerinde tabaka kalınlığı ölçümü için etkileşimli kalibrasyon ve sistematik hata düzeltme. Bu yaklaşım, manuel ölçümün hassasiyetini otomatik görüntü işlemenin verimliliğiyle birleştirerek nanometrik karakterizasyonda doğru ve tekrarlanabilir sonuçlar elde etmeyi amaçlamaktadır; ayrıca zaman tasarrufu, insan kaynaklı hataların azaltılması ve ölçeklenebilirlik gibi üstünlükler sunar. Yöntemin, yapay zekâ tabanlı uyarlanabilir kalibrasyonla ileride daha da geliştirilmesi mümkündür.

2.6 Kendinden Beslemeli Görünür–UV Fotodedektörler ve Başarım Ölçütleri

Geçiş metali oksitler (TMO'lar), son yirmi yılda kapsamlı araştırma çalışmalarının odak noktası olmuştur; bu ilginin nedeni, geniş optik bant aralığı, iyi kimyasal kararlılık, stokiyometrinin değiştirilebilmesi ve asil metallerinkiyle karşılaştırılabilir veya onları aşan iş fonksiyonu gibi sıra dışı özellikleridir (Greiner ve Lu, 2013; Meyer vd., 2012). Bunlar arasında MoO_3, organik güneş gözeleri, OLED'ler, silisyum heteroeklem güneş gözeleri ve ince film transistörleri başta olmak üzere optoelektronik ve fotovoltaik uygulamalarda büyük ilgi görmektedir (Battaglia vd., 2014a; Bullock vd., 2014; Kröger vd., 2009a; Mallem vd., 2019). Ortorombik α-MoO_3 bileşiği; MoO_6 oktahedral birimlerinin köşe ve kenar paylaşımından oluşan katmanlı bir van der Waals kristal yapısına, 2,9 ila 3,2 eV arasında bir doğrudan optik bant aralığına ve 6,6 ila 6,9 eV arasında son derece yüksek bir iş fonksiyonuna sahiptir. MoO_3'ün bu kadar yüksek iş fonksiyonu, çoğu elementel metalin iyonlaşma potansiyellerinden bile daha yüksektir (Guo ve Robertson, 2014; Kröger vd., 2009b). Stokiyometrik MoO_3, oksijen boşluğu ile ilişkili iletim bandı kuyruk durumları nedeniyle resmî olarak *n*-tipi yarıiletken olarak tanımlansa da (Greiner vd., 2012), öncelikle yaklaşık 6,7 eV'lik yüksek elektron ilgisinden kaynaklanan çok derin Fermi seviyesi, çeşitli inorganik ve organik yarıiletkenlerle birleştirildiğinde etkili bir oyuk taşıma ve oyuk çıkarma tabakası (HTL/HEL) olarak işlev görmesini sağlar (Battaglia vd., 2014b; Meyer vd., 2011).

Bu mekanizma; komşu yarıiletkenin değerlik bandından (veya en yüksek işgal edilmiş moleküler orbital, HOMO) MoO_3'ün alçak iletim bandına elektron hareketini içerir. Bu süreç, heteroeklem arayüzünde oyuk açısından zengin bir birikim bölgesi oluşturur ve bu da kontak noktasında *p*-tipi benzeri davranışa yol açar (Kanai vd., 2010; Soultati vd., 2023). Hidrojenle sonlandırılmış elmas yüzeylerdeki MoO_3 için gözlemlendiği gibi bu yüzey transferi katkılama (*doping*) etkisi; yoğunluğu MoO_3 kaplamasına büyük ölçüde bağlı olan 2D oyuk iletken kanalları gösteren, sıcaklığa bağlı Hall etkisi ölçümleriyle doğrulanmıştır (Xing vd., 2020).

Öte yandan Al/MoO_x/Al yapıları üzerinde yürütülen akım–voltaj ve spektroskopik elipsometri incelemeleri, stokiyometrik sapma gösteren MoO_x ($x \approx 2,7$) filmlerinin oda

sıcaklığında çift kutuplu (*ambipolar*) iletim sergilediğini; oyukların, değerlik bandı kenarına yakın konumlanan bir ara bant (*intermediate band*) üzerinden taşındığını ortaya koymuştur (Soultati vd., 2023). Bu bulgu, malzemenin nominal *n*-tipi karakteri ile yaygın olarak gözlenen *p*-tipi benzeri eklem davranışı arasındaki görünür çelişkiyi açıklamakta ve bu tezde incelenen *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerinin doğrultucu davranışının fiziksel temelini güçlendirmektedir.

Yüksek vakumlu termal buharlaştırma, MoO_3 tozu için en yaygın biriktirme yöntemidir; basit biriktirme prosedürü, yonga ölçeğinde üretime ölçeklenebilmesi, gerektirdiği nispeten düşük alt tabaka sıcaklığı ve sağladığı yüksek film homojenliği nedeniyle yaygın biçimde tercih edilmektedir (Hussain vd., 2019; Jiang vd., 2021). Bu yöntemde MoO_3, Mo_3O_9 ve Mo_4O_{12} kümeleri hâlinde süblimleşme eğilimindedir; süblimleşmeyi biriktirme ve ardından oksidasyon süreçleri izler ve x değeri $2 \leq x < 3$ aralığında bulunan stokiyometri-altı MoO_x filmleri elde edilir (Yahaya vd., 1998). Stokiyometriden sapma derecesi, dolayısıyla oksijen boşluklarının varlığı, iş fonksiyonu, şeffaflık ve filmdeki oyuk taşıma kabiliyeti gibi özellikleri etkiler (Jiang vd., 2021). Daha açık ifadeyle, oksijen/molibden atom oranı 3,0'a yaklaştığında iş fonksiyonu yaklaşık 6,8 eV'a yükselir ve bu da tabakayı oyuk-seçici hâle getirir. Bununla birlikte, atom oranı 2,8'den düşük olan MoO_x filmleri daha düşük iş fonksiyonlarına sahip olma eğilimindedir ve yasak bant aralığında *n*-tipi kusur durumları oluşturarak oyuk toplanmasını engeller (Han vd., 2018). Öte yandan, bu filmlerin ortam havasında ılımlı sıcaklıklarda (≈ 100°C) biriktirme sonrası tavlanması, stokiyometrinin kısmen geri kazanılmasına ve iş fonksiyonunun artmasına yol açar (Jiang vd., 2021).

Termal olarak buharlaştırılmış MoO_3'ün, *n*-tipi kristal silisyum (*n*-Si) üzerinde katkısız oyuk-seçici bir kontak olarak kullanımı Battaglia vd. (2014a) tarafından başlatılmıştır; bu araştırmacılar, herhangi bir *p*-tipi katkı içermeyen yaklaşık 15 nm kalınlığında bir MoO_x tabakası kullanarak %14,3'lük bir güneş gözesi verimliliği göstermiştir. Geissbühler vd. (2015), sonraki optimizasyonda hidrojenlendirilmiş amorf silisyum (a-Si:H) pasivasyon ara tabakasını dahil ederek bu verimi %22,5'e çıkarmış ve termal olarak buharlaştırılmış MoO_x'un, silisyum heteroeklem (SHJ) güneş gözelerinde geleneksel bor katkılı *p*-tipi yayıcıyı (*p*-emitter) tamamen ikame edebileceğini

doğrulamıştır. Daha sonraki çalışmalar, hem *n*-tipi hem de *p*-tipi silisyum yongalar üzerindeki MoO_x kontaklarının, düşük kontak direnci değerleriyle karakterize edilen yüksek oyuk seçiciliği sağladığını ve *p*-tipi yongalar üzerindeki kontakların özellikle umut verici pasivasyon kalitesi gösterdiğini ortaya koymuştur (Bullock vd., 2016). Silisyumun ötesinde, termal olarak buharlaştırılmış MoO_3 ince filmler GaAs alt tabakaları üzerinde araştırılmıştır; burada ayrıntılı yüzey bilimi araştırmaları, MoO_3'ün GaAs (001) üzerinde +6 oksidasyon durumundaki Mo ile amorf bir film olarak büyüdüğünü ve biriktirme sırasında oksijen kısmi basıncını kontrol ederek elektrik direncinin yalıtkanlıktan yarı metalik hâle ayarlanabileceği keskin (ani geçişli) bir arayüz oluşturduğunu göstermiştir (Sarkar vd., 2018). Ek olarak, RF magnetron saçtırma ile üretilen Au/MoO_3/*n*-GaAs MOS heteroeklem yapılarının sıcaklığa bağlı elektriksel karakterizasyonu, iyi tanımlanmış bir Schottky bariyeri üzerinden termiyonik emisyon taşınımıyla tutarlı diyot parametrelerine sahip yüksek doğrultma başarımı ortaya koymuştur (Çetinkaya vd., 2021). Benzer şekilde, termal buharlaştırma ile üretilen Cr/MoO_3/*n*-Si heteroeklemleri üzerine yapılan çalışmalar; MoO_3'ün eklemin idealite faktörünü ve etkin bariyer yüksekliğini değiştirdiğini ve sensör uygulamaları için uygun, ısıya duyarlı doğrultucu aygıtlar sağladığını doğrulamıştır (Çaldıran ve Taşyürek, 2021).

Bununla birlikte, 4H-SiC ve InP gibi geniş bant aralığına sahip yarıiletken malzemeler için *p*-tipi kontak arayüzlerinin oluşturulmasında kendine özgü zorluklar bulunmaktadır. Özellikle 4H-SiC'de *p*-tipi katkılama elde etmek için iyon implantasyon teknikleri kullanılarak alüminyum/bor katkılaması sıklıkla gerekli olup, bunu yüksek sıcaklıkta (>1700°C) morfolojik hasara ve kusurlara yol açabilen aktivasyon tavlama işlemleri izler (Kimoto ve Cooper, 2014). Yüksek iş fonksiyonuna sahip TMO katmanları yarıiletken yüzeylerinde bant bükülmesine yol açtığından, katkısız oyuk kontak mekanizmalarının kullanımı cazip bir alternatif hâline gelmektedir. InP aygıtlarındaki *p*-tipi kontaklar söz konusu olduğunda, Fermi seviyesi sabitlenmesi ile ilgili zorluklar mevcuttur ve TMO ara tabakalarına sahip MIS yapılarının kullanılması etkili bir yaklaşımdır (Chen vd., 2016). Nitekim, Al/MoO_3/*p*-InP ile güçlendirilmiş Schottky bariyer kontakları, MoO_3 ara tabakalarının bariyer yüksekliğini ölçülebilir şekilde artırdığını ve eklemin seri direncini azalttığını göstermiş, bu da malzemenin III-V alt tabakalar üzerinde bir arayüz oyuk taşıma

katmanı olarak kullanışlılığını teyit etmiştir (Chen vd., 2016). Çaldıran ve Taşyürek (2021) tarafından yapılan Cr/MoO_3/*n*-Si heteroeklem çalışması, MoO_3'ün çeşitli yarıiletken platformlarda oyuk taşıyıcı bir ara tabaka görevi gördüğünü daha da doğrulamaktadır. Yüksek iş fonksiyonlu oksit kontakların genel çerçevesi, hem geleneksel (Si, GaAs, InP) hem de geniş bant aralığı (4H-SiC) yarıiletkenler için bant hizalama gerekliliklerıyle tutarlıdır.

Silisyum ve seçilmiş III-V malzemelerine MoO_3 kontakları hakkında artan literatüre rağmen, tek bir deneysel çerçeve içinde teknolojik açıdan önemli çoklu yarıiletken alt tabakalar üzerinde — kaynak malzeme olarak MoO_3 tozundan biriktirilen — termal olarak buharlaştırılmış MoO_3 ince filmlerin sistematik bir karşılaştırmalı çalışması literatürde belirgin biçimde eksiktir. Özellikle, *n*-Si, *n*-GaAs, *n*-InP ve *n*-4H-SiC üzerindeki MoO_3 heteroeklemlerinin eşzamanlı değerlendirilmesi, 1,12 eV (Si) ile 3,26 eV (4H-SiC) arasındaki bant aralığını kapsayan alt tabakalar arasında eklem kalitesi, bariyer yüksekliği, idealite faktörü ve yük taşıma mekanizmalarının doğrudan ve içsel olarak tutarlı bir karşılaştırmasını mümkün kılar. Bu tür bir çalışma, MoO_3'ü yeni nesil bileşik yarıiletken aygıtlar için gerçek anlamda evrensel, katkısız bir oyuk taşıma katmanı olarak ortaya koymak açısından belirleyicidir.

Bir fotodedektörün başarımı, fiziksel olarak tanımlı bir dizi ölçütle nicelendirilir. Duyarlılık (*responsivity, R*), birim optik güç başına üretilen fotoakımı ifade eder:

$$R = \frac{I_{ph}}{P_{opt} \cdot A} \tag{2.11}$$

Burada I_{ph} net fotoakım (aydınlatma altındaki akım ile karanlık akımın farkı), P_{opt} birim alana düşen optik güç ve *A* aktif alandır. Dış kuantum verimi (*EQE),* gelen her foton başına toplanan yük taşıyıcı oranıdır ve duyarlılıkla dalga boyuna (λ) bağlı olarak ilişkilidir:

$$EQE = \frac{hc}{q\lambda} \cdot R \tag{2.12}$$

Aygıtın zayıf sinyalleri ayırt etme yeteneğini gürültüye göre niteleyen özgül algılama (specific detectivity, *D**) ve gürültü eşdeğeri güç (*NEP*), karanlık akımın (I_d) atım

gürültüsünün (shot noise) baskın gürültü kaynağı olduğu, ısıl (Johnson) ve 1/f gürültüsünün ihmal edilebildiği koşulda şöyle yazılır:

$$D^* = \frac{R\sqrt{A}}{\sqrt{2qI_d}} = \frac{\sqrt{A\Delta f}}{NEP} \tag{2.13}$$

$$NEP = \frac{\sqrt{A\Delta f}}{D^*} \tag{2.14}$$

D^* için birim Jones'dur (1 Jones = 1 cm·Hz$^{1/2}$·W^{-1}); değerin büyüklüğü aygıtın zayıf ışık algılama kapasitesiyle orantılıdır. Pratikte aygıtın ışığa tepkisi, belirli bir voltaj değerinde fotoakımın karanlık akıma oranı olarak tanımlanan ışık duyarlılığı (*photosensitivity*, *PS*) ile de değerlendirilir:

$$PS = \frac{I_{ışık}}{I_{karanlık}} \tag{2.15}$$

Son olarak, aygıtın dinamik davranışı, ışık açıldığında ve kapatıldığında fotoakımın son değerinin %10 ile %90'ı arasında değişmesi için geçen yükselme (τ_r) ve düşme (τ_f) süreleriyle nicelendirilir; bu iki ölçüt bu tez kapsamında ölçülmemiş olup Bölüm 5.5'te gelecek çalışma önerisi olarak ele alınmaktadır. Kendinden beslemeli (V_{bias} = 0 V) çalışmada bu ölçütlerin tümü, harici güç olmaksızın, heteroeklemin yerleşik elektrik alanı tarafından sağlanır, bu da fotovoltaik etkiye dayalı düşük güçlü algılama için belirleyicidir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

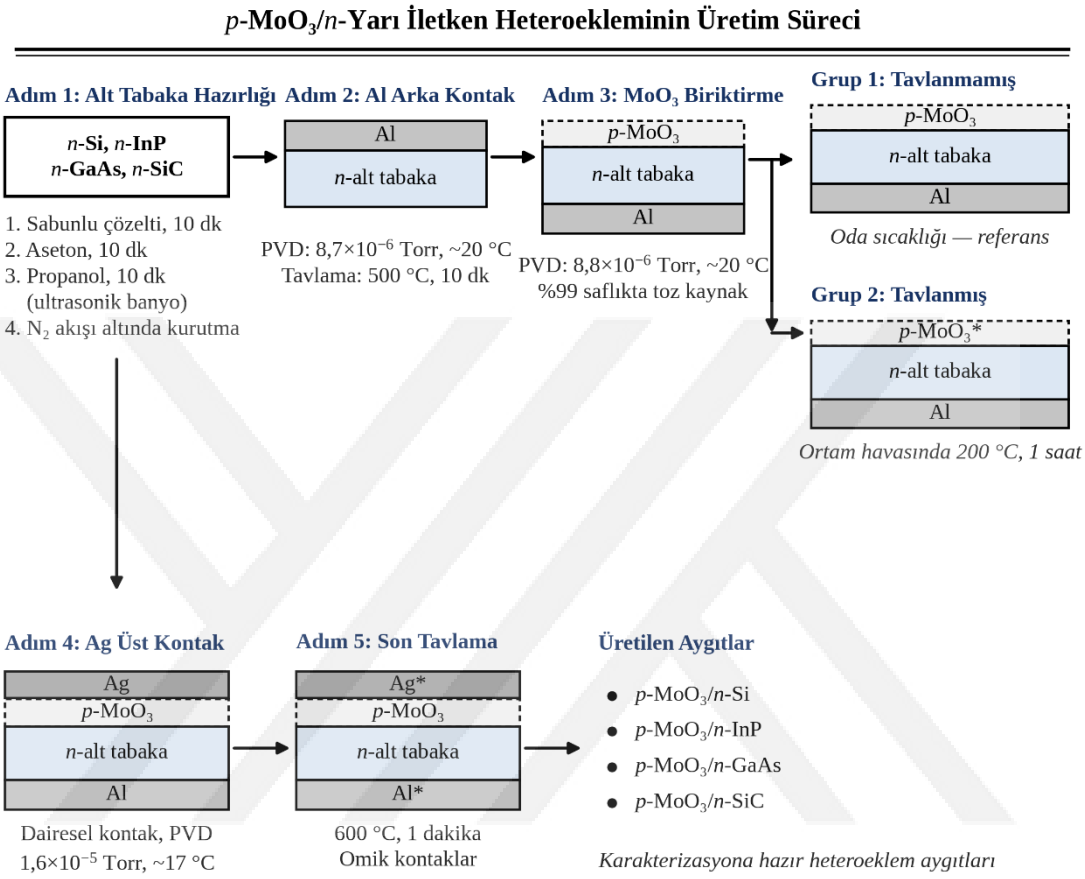
3.1 Alt Tabakaya Bağlı Termal Modülasyon: *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklemlerin Elektriksel ve Dielektrik Özellikleri

3.1.1 Ortak Aygıt Üretimi ve Alt Tabaka Hazırlığı

Tezde sunulan üç çalışmanın tamamında aynı aygıt yapısı kullanıldığından, aşağıda açıklanan üretim ve alt tabaka hazırlığı süreci üç çalışma için de ortaktır. Alt tabakalar (n-Si, n-InP, n-GaAs ve n-4H-SiC; metnin bundan sonraki kısmında kısaca n-SiC olarak anılmaktadır) birkaç aşamada temizlenmiştir: önce sabunlu çözeltide bekletilen alt tabakalar 10 dakika ultrasonik temizlemeye tabi tutulmuş, durulamanın ardından bir beher içinde asetona daldırılarak 10 dakika daha ultrasonik banyoda bekletilmiştir. Aynı işlem 10 dakika boyunca propanol ile yinelenmiş ve alt tabakalar son olarak yüksek saflıkta N_2 gazı akışı altında kurutulmuştur. *n*-Si, *n*-InP, *n*-GaAs ve *n*-SiC alt tabakalarının parlatılmamış (mat) yüzeylerine, fiziksel buhar biriktirme (physical vapor deposition, PVD) sistemi kullanılarak omik alüminyum (Al) arka kontak biriktirilmiştir. Biriktirme; $8{,}7\times10^{-6}$ Torr taban basıncında ve alt tabaka ısıtması uygulanmaksızın, 19°C vakum odası (ortam) sıcaklığında gerçekleştirilmiştir. Biriktirmenin ardından kontağın iyi omik davranış göstermesini sağlamak amacıyla alt tabakalar 500°C'de 10 dakika ısıl tavlamaya tabi tutulmuştur.

Hazırlanan *n*-Si, *n*-InP, *n*-GaAs ve *n*-SiC alt tabakaları üzerine, yüksek saflıkta (%99) toz kaynaktan PVD tekniğiyle bir molibden trioksit (MoO_3) film biriktirilmiştir. Biriktirme; $8{,}8\times10^{-6}$ Torr basınçta ve alt tabaka ısıtması uygulanmaksızın, 18 °C vakum odası sıcaklığında yapılmıştır. Her alt tabaka türü için iki ayrı örnek grubu hazırlanmıştır. İlk grup aygıtlar (*p*-MoO_3/*n*-Si, *p*-MoO_3/*n*-InP, *p*-MoO_3/*n*-GaAs ve *p*-MoO_3/*n*-SiC) biriktirildiği hâlde, yani tavlanmamış (referans) olarak bırakılmıştır. İkinci grup ise ortam havasında 200°C'de 1 saat ısıl olarak tavlanmıştır. Tavlama işleminde örnekler 20°C başlangıç sıcaklığındaki fırına yerleştirilmiş ve sıcaklık 20 °C/dakika hızla yükseltilmiştir. Film yüzeyine PVD yöntemiyle dairesel gümüş (Ag) üst kontaklar biriktirilmiştir; biriktirme $1{,}6\times10^{-5}$ Torr basınçta ve 17°C vakum odası sıcaklığında gerçekleştirilmiştir. Üst metal kontakların temas direncini azaltmak ve

omik temas oluşumunu iyileştirmek amacıyla numuneler 600°C'de 1 dakika süreyle tavlanmıştır. Tüm üretim süreci adımları Şekil 3.1'de şematik olarak gösterilmektedir. Bu tezde “tavlanmamış” ifadesi, 200°C’de ortam havasında uygulanan biriktirme sonrası tavlamanın yapılmadığını belirtir; kontak omikliğini sağlamaya yönelik bu kısa süreli 600°C tavlaması ise her iki gruba da uygulanmıştır.

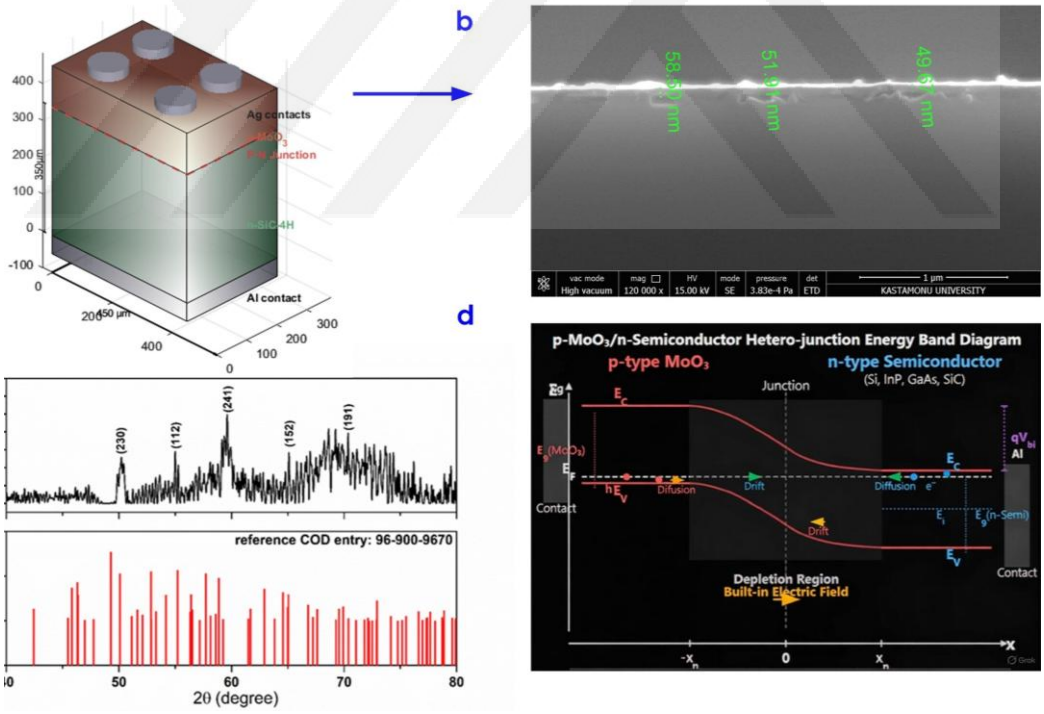


Şekil 3.1 p-MoO₃/n-tipi yarıiletken heteroeklem yapılarının adım adım üretim prosedürü

3.1.2 Yapısal Karakterizasyon

Üretilen heteroeklemlerin kapsamlı yapısal ve şematik karakterizasyonu Şekil 3.2'de sunulmaktadır. Şekil 3.2(a)'da şematik olarak gösterilen aygıt yapısı, *p*-MoO₃/*n*-SiC diyotunda kullanılan Al/*n*-SiC/*p*-MoO₃/Ag katmanlı yapısını vurgulamaktadır. Şekil 3.2(b)'deki enine kesit SEM görüntüsünden, MoO₃ tabakasının yarıiletken alt tabaka üzerine yaklaşık 50 nm kalınlıkta, iyi ve sürekli bir morfolojiyle başarıyla biriktirildiği anlaşılmaktadır. Şekil 3.2(c), yarıiletken alt tabakalar üzerine biriktirilen MoO₃ tabakasının kristalleşmesini doğrulayan XRD karakterizasyonunu göstermektedir.

Desene göre örnek; Kristalografi Açık Veritabanı'ndan (Crystallography Open Database, Giriş No: 96-900-9670) ortorombik α-MoO_3 yapısına atanan belirgin kırınım pikleriyle çok kristalli (polikristal) bir yapıya sahiptir (Sitepu vd., 2005); kafes parametreleri a = 3,9616 Å, b = 13,8560 Å ve c = 3,6978 Å'dur. MoO_3 fazının; sırasıyla 50,07°; 55,27°; 59,16°; 65,10° ve 70,37° 2θ değerlerinde (230); (112); (241); (152) ve (191) düzlemlerinde büyüdüğü gözlemlenmiştir. XRD analizlerinin dört yarıiletken alt tabakanın tümü üzerinde ayrı ayrı gerçekleştirildiği, alt tabaka kaynaklı kırınım katkılarının ise değerlendirmede göz önünde bulundurulduğu belirtilmelidir. Tüm örneklerde aynı biriktirme koşulları kullanılmış olmakla birlikte, kristal yönelimi ve mikroyapıda alt tabakaya bağlı farklılıkların ortaya çıkması tümüyle dışlanamaz. Bu nedenle XRD sonuçları, her bir yarıiletken alt tabaka üzerindeki kesin kristalografik özellikleri değil, öncelikle biriktirilen MoO_3 filminin faz oluşumunu doğrulamaktadır. Son olarak Şekil 3.2(d)'de önerilen enerji bandı diyagramı; *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken arayüzünde ısıl denge altında beklenen bant hizalanmasını betimlemekte ve elektriksel ölçümlerde gözlenen doğrultucu davranışın temelini oluşturan, yük taşıyıcıları için bir potansiyel bariyerin (Φ_B) oluşumunu göstermektedir.



Şekil 3.2 *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken heteroeklem yapılarının yapısal ve şematik karakterizasyonu: (a) üretilen *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıt yapısının şematik diyagramı, (b) MoO_3 tabakasının yarıiletken alt tabaka üzerindeki morfolojisini ve kalınlığını gösteren kesit SEM görüntüsü, (c) biriktirilen *p*-MoO_3 ince filmine ait X-ışını kırınım (XRD) deseni ve (d) denge koşullarında heteroeklem için önerilen enerji-bant diyagramı.

3.1.3 Karakterizasyon ve Ölçüm Sistemleri

Tezdeki üç çalışmada kullanılan başlıca karakterizasyon ve ölçüm sistemleri ortak olup aşağıda özetlenmiştir. Aygıtların elektriksel, dielektrik, yapısal ve optoelektronik özellikleri, oda sıcaklığında ve ortam koşullarında ölçülmüştür.

Dedektörlerin akım–gerilim (I–V) karakteristikleri, karanlıkta ve aydınlatma altında Keithley 2400 SourceMeter cihazı vasıtasıyla kaydedilmiştir. Aygıt parametreleri — idealite faktörü, bariyer yüksekliği ve seri direnç— bu ölçümlerden termiyonik emisyon kuramı çerçevesinde Cheung–Cheung ve Norde yöntemleriyle çıkarılmıştır (bkz. Bölüm 2.3).

Frekansa bağlı kapasitans–voltaj (C–V) ve iletkenlik ölçümleri ile dielektrik/empedans analizleri, bir Wayne Kerr 6500B empedans analizörü kullanılarak geniş bir frekans aralığında gerçekleştirilmiştir. Bu ölçümlerden dielektrik geçirgenlik, dielektrik kayıp, elektrik modülü (M^*) ve alternatif akım (AC) iletkenliği hesaplanmıştır (bkz. Bölüm 2.4).

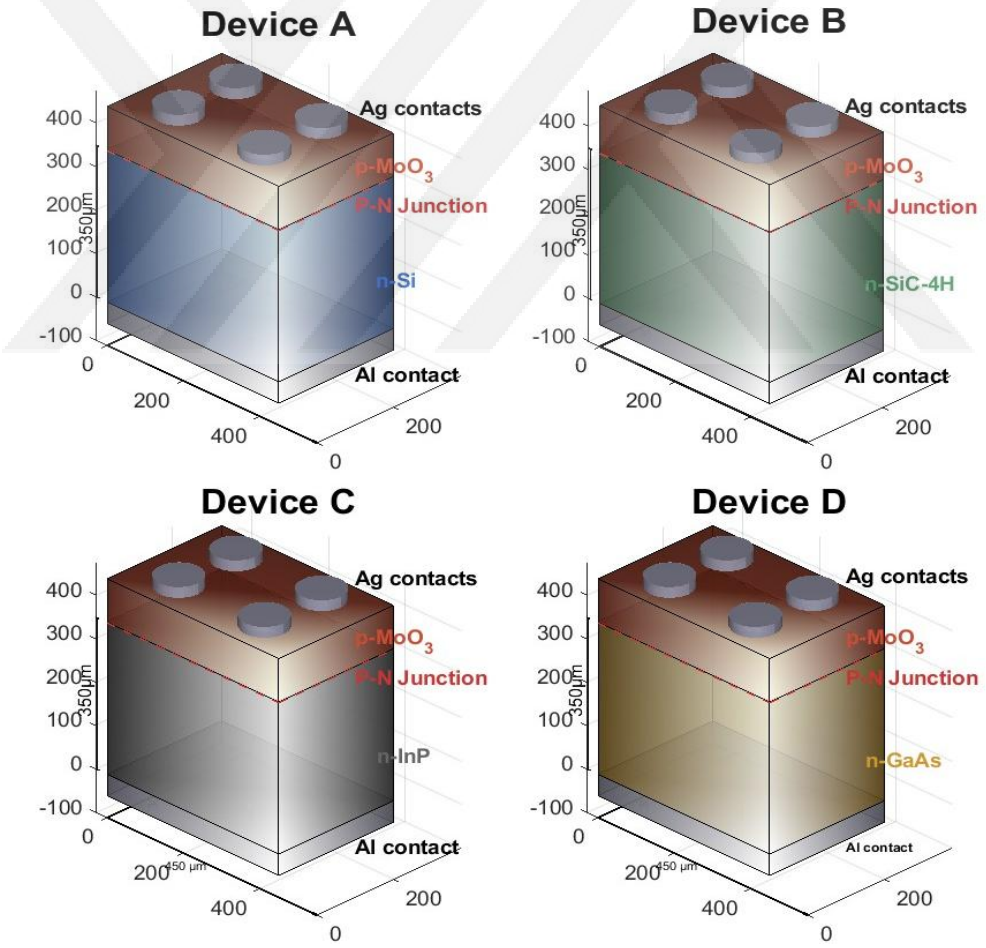
Kendinden beslemeli fotoyanıt ölçümlerinde görünür bölge aydınlatması, bir Sciencetech SF300A güneş simülatörü ile 650–1300 W/m² ışıma şiddeti aralığında sağlanmış; morötesi tepki 365 ve 395 nm dalga boylarında değerlendirilmiştir. Fotoakım ve ilişkili performans ölçütleri, sıfır öngerilim altında (V_{bias} = 0 V) aynı Keithley 2400 SourceMeter cihazı kullanılarak belirlenmiştir.

Yüzey morfolojisi, kontak geometrisi ve kesit katman yapısı, Kastamonu Üniversitesi Merkezi Araştırma Laboratuvarı (MERLAB) bünyesindeki bir FEI Quanta FEG 250 alan emisyonlu taramalı elektron mikroskobu (FEG-SEM) ile incelenmiş; kesit numuneleri odaklanmış iyon demeti (FIB) ile hazırlanmıştır. İkinci çalışmada geliştirilen otomatik görüntü işleme çerçevesi bu SEM görüntüleri üzerinden nicel metroloji sağlamıştır. Filmlerin kristal yapısı ise yine MERLAB bünyesindeki bir Bruker D8 Advance X-ışını kırınımı (XRD) sistemi ile —toz, katı ve ince film örneklerine uygun biçimde— karakterize edilmiştir.

3.2 Yarıiletken Aygıtlarda Hassas Metroloji için Otomatik SEM Görüntü İşleme

3.2.1 *p-n* Heteroeklemli Aygıtların Üretim Prosedürleri

Bu çalışmada incelenen *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtlar, Bölüm 3.1.1'de ayrıntılı olarak açıklanan ortak üretim süreciyle hazırlanmıştır. Üretilen aygıtların (Device) şematik genel görünümü Şekil 3.3'te sunulmaktadır. Üretimi tamamlanan aygıtlar; yüzey morfolojisi, kontak geometrisi ve katman bütünlüğünü değerlendirmek amacıyla kesit hazırlığı yapılmadan doğrudan taramalı elektron mikroskobu (SEM) ile; kesit görüntüleri için ise odaklanmış iyon demeti (FIB) tekniğiyle hazırlanan numuneler üzerinden karakterize edilmiştir. Bu görüntülemeden elde edilen niteliksel morfoloji bulguları Bölüm 4.2.1'de, nicel metroloji sonuçları ise Bölüm 4.2.2–4.2.4'te sunulmaktadır.



Şekil 3.3 *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerinin katman yapıları: (A) *n*-Si, (B) *n*-4H-SiC, (C) *n*-InP ve (D) *n*-GaAs alt tabakalı aygıtlar (şematik gösterim)

3.2.2 Birleştirilmiş SEM Görüntü İşleme Yaklaşımı

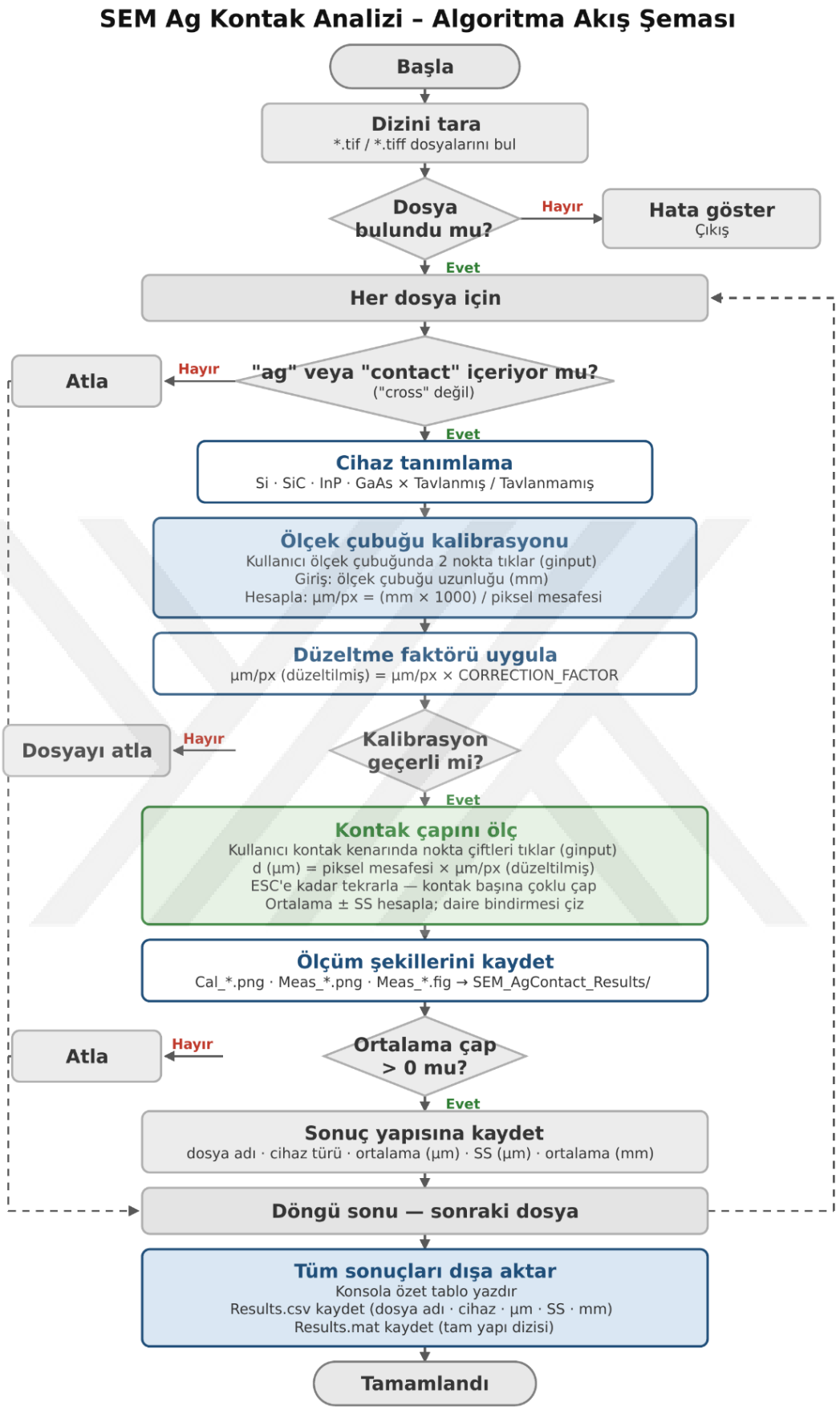
3.2.2.1 Kontak analizi

Taramalı elektron mikroskobu (SEM) kullanılarak, yarıiletken aygıt yüzeylerindeki gümüş (Ag) kontak geometrilerini nicel olarak karakterize etmek üzere yarı otomatik bir görüntü analiz protokolü oluşturulmuştur (Şekil 3.4).

Yüzey analizi sürecinden kesit görüntülerini hariç tutmak amacıyla, iş akışı tüm TIF/TIFF formatındaki görüntüleri tespit etmek üzere otomatik dizin taramasıyla başlar. Bunu, dosya adına dayalı filtreleme izler; burada "ag" veya 'contact' anahtar kelimelerini içeren görüntüler analiz için seçilirken, "cross" kelimesini içerenler hariç tutulur.

Aygıtları sınıflandırmak için sistematik dosya adı ayrıştırması kullanılır. Alt tabaka malzemesi (Si, SiC, InP, GaAs) ve termal işleme geçmişi (tavlanmış ve tavlanmamış varyantlar), sayısal önek kodlaması ile tanımlanır. Boyutsal kalibrasyon, kullanıcı etkileşimli ölçek çubuğu ölçümü yoluyla gerçekleştirilir; burada operatörler, gömülü ölçek çubuğu boyunca iki referans noktasına (başlangıç noktası yeşil daire, bitiş noktası kırmızı daire ile işaretlenmiştir) tıklar ve bilinen fiziksel uzunluğu girer; bu, sistemin her görüntünün büyütme oranına özgü piksel-mikrometre dönüştürme faktörlerini hesaplamasını sağlar.

Kullanıcı tanımlı bir CORRECTION_FACTOR çarpanı, sistematik ölçek çubuğu seçim hatalarını telafi etmek için kalibre edilmiş μm/px değerine uygulanır. Kontak çapı ölçümü, iki noktalı doğrusal ölçüm yöntemini kullanır. Kullanıcılar, kontak sınırını tanımlamak için kontak kenarındaki sınır noktalarını seçer ve sistem, Öklid piksel mesafesini hesaplayarak bunu kalibre edilmiş μm/px faktörü kullanarak mikrometreye dönüştürür.



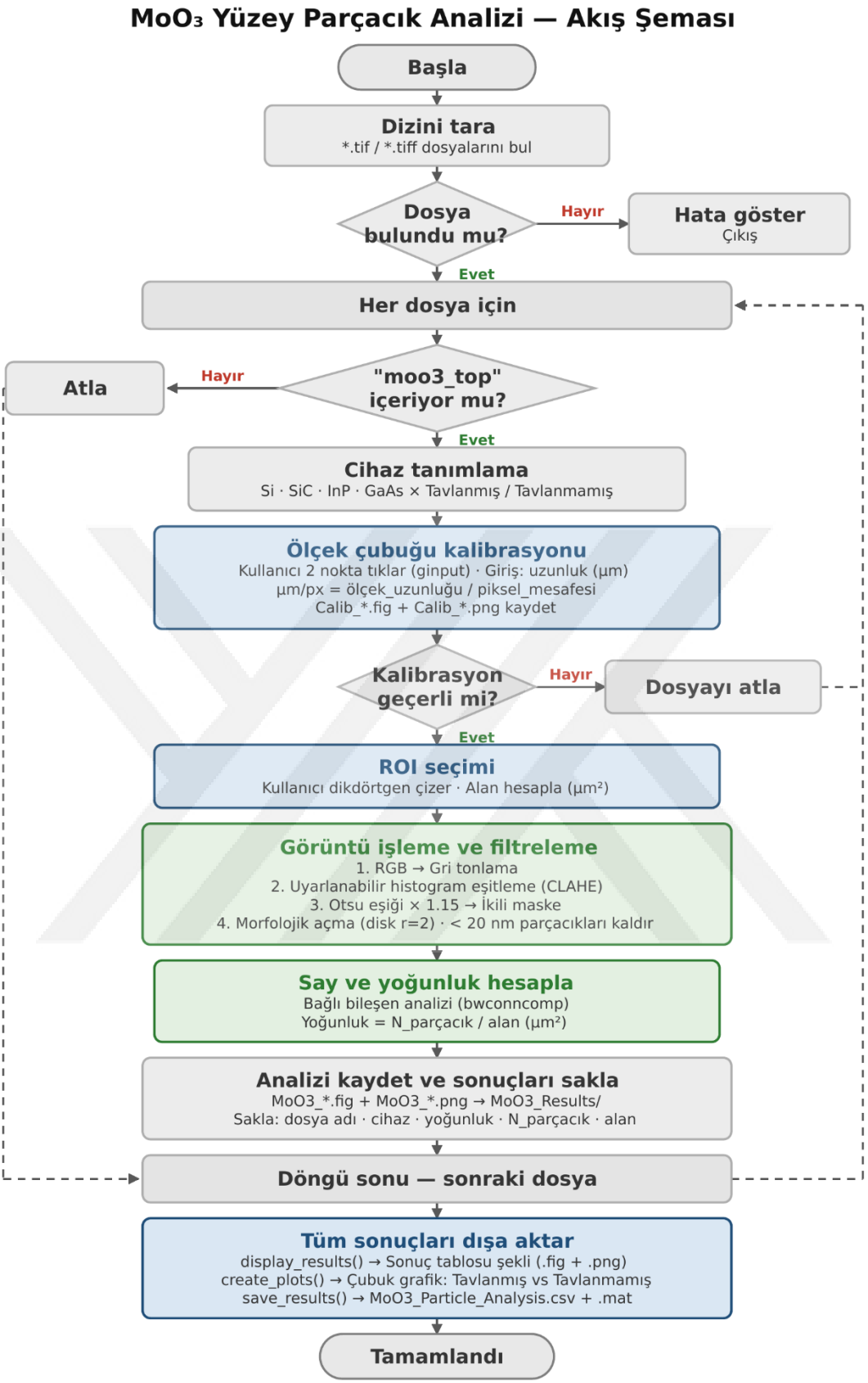
Şekil 3.4 SEM görüntülerinden Ag kontak çapı ölçümü için optimize edilmiş iş akışı

Her kontak için birden fazla çap ölçümü desteklenir; sistem tüm ölçümler için ortalama ± standart sapmayı hesaplar. Orijinal görüntünün üzerine yerleştirilen ölçüm çizgilerini, işaret sembollerini ve gerçek zamanlı boyut değerlerini gösteren üst üste bindirme grafikleri görsel geri bildirim sağlar. Her ölçümün sonuçları, ortalama çap, standart sapma, dosya adı ve aygıt kimliğini içeren yapılandırılmış bir dizide saklanır. Tüm uygun görüntüler tamamlandığında, sistem nicel analiz için CSV veri tabloları, kalibrasyon ve ölçüm üst üste bindirmelerini gösteren MATLAB.fig ve PNG formatlarında yayın kalitesinde şekiller ve sonraki MATLAB tabanlı işleme için eksiksiz veri yapısını içeren bir MAT dosyasından oluşan kapsamlı bir çıktı dışa aktarır.

3.2.2.2 MoO_3 parçacık yoğunluğunun nicelendirilmesi

Yarıiletken aygıt yapıları üzerindeki molibden trioksit (MoO_3) Nanoparçacıklarının yüzey yoğunluğunu, SEM mikrograflarının görüntü segmentasyonu (bölütlemesi) ve morfolojik analizi yoluyla nicelendirmek üzere otomatik bir parçacık analizi iş akışı geliştirilmiştir (Şekil 3.5). İş akışı, TIF/TIFF görüntüleri için dizin taramasıyla başlar ve ardından uygun üst yüzey morfolojisi görüntülerinin analizini sağlamak için yalnızca "moo3_top" içeren dosyaları seçen büyük/küçük harf duyarlı olmayan anahtar kelime filtrelemesi yapılır. Aygıt tanımlama, dosya adı öneklerinden alt tabaka türünü ve ısıl işlem geçmişini ayrıştıran yerleşik sayısal kodlama şemasını izler. Çıktı dizini (MoO_3_Results/), herhangi bir şekil kaydedilmeden önce ilk kalibrasyon çağrısında otomatik olarak oluşturulur.

Daha önce açıklanan iki noktalı referans yöntemini kullanarak manuel ölçek çubuğu kalibrasyonunu takiben, kullanıcılar ölçek çubuklarını, metin açıklamalarını ve görüntü kenarındaki artefaktları (görüntüleme kaynaklı yapay oluşumları) hariç tutarak analiz alanını kapsayan dikdörtgen bir ilgi bölgesi (ROI) tanımlar. Seçilen ROI, parçacık kontrastını artırmak ve güvenilir segmentasyonu kolaylaştırmak için çok aşamalı bir görüntü işleme sürecinden geçer: (1) RGB'den gri tonlamaya dönüştürme; (2) yerel kontrast artırma için uyarlanabilir histogram eşitleme (CLAHE);



Şekil 3.5 MoO_3 parçacık yoğunluğu ölçümü için optimize edilmiş iş akışı

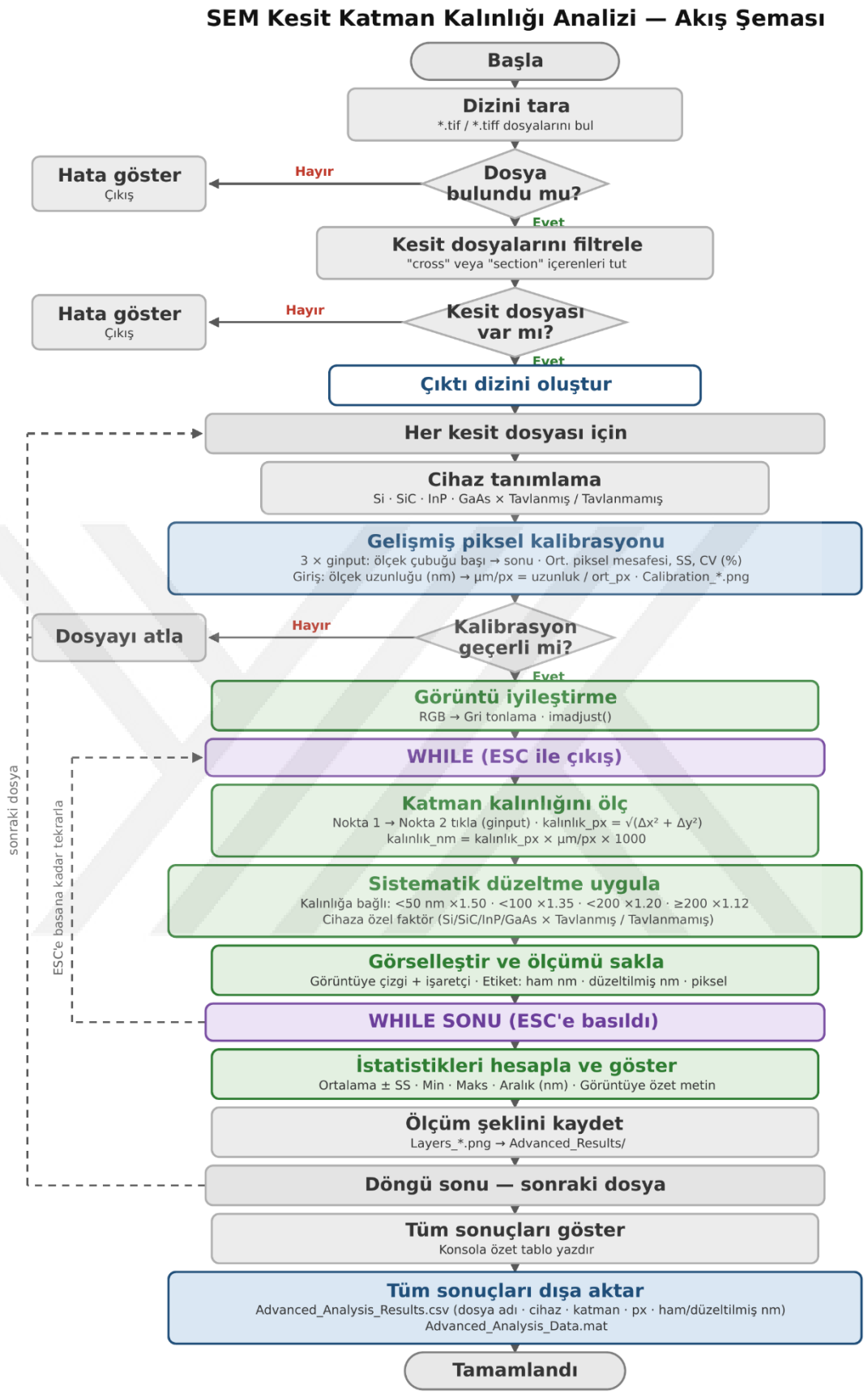
(3) MoO_3 parçacık parlaklık özelliklerini hesaba katmak için 1,15× çarpanıyla Otsu yöntemi kullanılarak ikili eşik segmentasyonu; ve (4) gürültüyü gidermek için 2 piksel yarıçaplı disk şeklindeki bir yapılandırma elemanı kullanılarak morfolojik açma.

Parçacık boyutu filtrelemesi, görüntü artefaktlarını gidermek için 20 nm eşdeğer çapından küçük nesneleri kaldırır. Bağlantılı bileşen etiketleme (bwconncomp), tek tek parçacıkları tanımlar ve sayar. Parçacık yoğunluğu, toplam parçacık sayısının kalibre edilmiş ROI alanına oranı olarak hesaplanır ve parçacık/μm^2 cinsinden ifade edilir. Kalibrasyon ve analiz şekilleri (CLAHE_.fig/.png, MoO_3_.fig/.png), her ölçümden hemen sonra ilgili işleme fonksiyonları içinde kaydedilir.

Görsel doğrulama için sistem, orijinal görüntüyü ROI sınırı katmanı ve renk kodlu tanımlanmış parçacık işaretçileriyle gösteren açıklamalı görselleştirme şekilleri oluşturur. Tüm görüntüler işlendikten sonra, üç dışa aktarma işlevi sırayla çağrılır: display_results() tablo şeklinde bir özet grafik oluşturur (MoO_3_Results_Table.fig/.png); create_plots(), alt tabaka başına tavlanmış ve tavlanmamış parçacık yoğunluklarını karşılaştıran gruplandırılmış çubuk grafikler üretir. (MoO_3_Summary_Plot.fig/.png); ve save_results(), daha ileri analizler için görüntü başına sonuçları içeren CSV veri tabloları ve bir MAT formatı veri yapısı yazar.

3.2.2.3 Sistematik düzeltmelerle kesit katman kalınlığı analizinin iş akışı

Nano ölçekli katmanlı malzemelerin elektron mikroskobu ile incelenmesinden kaynaklanan ölçüm artefaktlarını ortadan kaldırmak amacıyla, özellikle ince film aygıt yapılarının kesit SEM analizi için gelişmiş bir katman kalınlığı ölçüm sistemi oluşturulmuştur. Bu sistem, sistematik düzeltme faktörlerinden ve geliştirilmiş bir kalibrasyon prosedüründen oluşur (Şekil 3.6). Daha önceki bölümlerde özetlendiği gibi, prosedür, aygıt türü ve işleme koşulları için dosya adı yapısını ayrıştırırken "cross" veya "section" anahtar kelimelerini içeren görüntüleri bulan otomatik dosya tanımlama ile başlar. Kalibrasyon sürecinde, belirsizliği nicelendirmek ve ölçüm güvenilirliğini artırmak için üç bileşenli bir istatistiksel yaklaşım kullanılır.



Şekil 3.6 Üçlü ölçüm kalibrasyonu ve çift faktörlü sistematik düzeltmelerle kesitsel katman kalınlığı ölçümü için optimize edilmiş iş akışı

Kullanıcılar ölçek çubuğunun referans uzunluğunu bağımsız olarak üç kez ölçer; her ölçüm için renk kodlaması MATLAB'ın varsayılan sırasını izler: kırmızı (M1), yeşil (M2) ve mavi (M3). Sistem, ortalama piksel-mikrometre dönüştürme faktörünü, standart sapmayı ve varyasyon katsayısını (CV%) hesaplar. CV, operatöre bilgi amaçlı olarak bildirilir; iş akışı, bu değerden bağımsız olarak devam eder.

Dokümantasyon ve kalite kontrol amaçları için, üç referans ölçümün tümünü istatistiksel özetlerle birlikte gösteren kalibrasyon şekilleri otomatik olarak kaydedilir (Calibration_.png). Katman ölçümünden önce, boyut ilişkilerini değiştirmeden katman sınırlarının görünürlüğünü iyileştirmek için görüntüler yoğunluk ayarlaması yoluyla kontrast geliştirmeye tabi tutulur (gri tonlama dönüşümünden sonra uygulanan MATLAB'ın imadjust işlevi).

Her katmanın kalınlığını belirlemek için, kullanıcılar basit bir iki nokta yöntemi kullanarak iki sınır noktasına tıklar (nokta 1 daire işaretçisiyle, nokta 2 kare işaretçisiyle gösterilir). Sistem, Öklid piksel mesafesini hesaplar ve bunu, kalibre edilmiş ortalama μm/px faktörünü kullanarak hem mikrometre hem de nanometre değerlerine dönüştürür. Bu iki nokta ölçümü, tabaka arayüzü boyunca birbirinden ayrık üç farklı konumda yinelenir; ölçümler kalibrasyon adımıyla aynı renk sırasını izleyerek L1 (kırmızı), L2 (yeşil) ve L3 (mavi) olarak işaretlenir.

Sistem bu üç değerin ortalamasını, standart sapmasını ve varyasyon katsayısını hesaplar; raporlanan katman kalınlığı bu ortalamadır. Standart sapma, filmin ölçüm hattı boyunca yerel kalınlık değişkenliğinin bir göstergesi olarak birlikte bildirilir.

Otomatik çerçevenin doğrulanmasında referans alınan manuel ("gerçek SEM") ölçümler ise aynı kesit görüntüleri üzerinde, SEM cihaz yazılımının mesafe aracı kullanılarak bağımsız biçimde gerçekleştirilmiştir. Bu ölçümlerde de görüş alanı boyunca yaklaşık eşit aralıklı üç konumdan çizgi alınmış, ölçüm değerleri doğrudan görüntü üzerine işlenmiş ve üçünün ortalaması esas alınmıştır. Sınır konumu, parlak MoO_3 bandının üst ve alt kenarlarının görsel olarak ayırt edildiği noktalar temel alınarak belirlenmiştir; ışın penetrasyonu ve kenar etkisi nedeniyle bu geçişin keskin

bir basamak yerine bir parlaklık rampası biçiminde görünmesi, manuel ölçümdeki operatör bağımlılığının başlıca kaynağıdır.

Bu iş akışının temel yeniliği, kesitsel SEM'de iki farklı ölçüm sapması kaynağını azaltmak için sistematik düzeltme parametrelerinin uygulanmasıdır: (1) kalınlığa bağlı büyütme hataları, ince filmlerdeki kenar etkilerini ve ışın penetrasyonunu (elektron demetinin numune içinde sinyal üretecek biçimde nüfuz ettiği derinlik) hesaba katan, ampirik olarak belirlenmiş ölçekleme faktörleriyle düzeltilir (<50 nm: ×1,50; 50–100 nm: ×1,35; 100–200 nm: ×1,20; ≥200 nm: ×1,12); (2) aygıt ve koşula özgü malzeme kontrast faktörleri (Si-Tavlanmış: ×1,08; Si-Tavlanmamış: ×1,10; GaAs-Tavlanmış: ×1,12; GaAs-Tavlanmamış: ×1,10; SiC-Tavlanmış: ×1,18; SiC-Tavlanmamış: ×1,12; InP-Tavlanmış: ×1,12; InP-Tavlanmamış: ×1,08) kullanılır; bu faktörler, sınır tanımını etkileyen atom numarasına bağlı geri saçılma kontrast özelliklerini düzeltir. Her bir ham ölçüme uygulanan toplam düzeltme faktörü, kalınlığa bağlı ve aygıta özgü faktörlerin çarpımıdır. Nihai kalınlık raporlamasından önce, bu düzeltmeler ham piksel ölçümlerine sistematik olarak uygulanır. Ölçüm arayüzü sürekli bir while döngüsü olarak çalışır; her yineleme, bir katman sınırını tanımlamak için iki piksel tıklaması alır. Döngü, operatör ESC tuşuna bastığında (ginput dönüş değerinde 27 numaralı tuş kodu olarak algılanır) sona erer ve bu, mevcut görüntünün tamamlandığını gösterir. Her ölçüme, renk kodlu üst katman görselleştirmeleri ve hem ham hem de düzeltilmiş kalınlık değerlerinin gerçek zamanlı gösterimi eşlik eder. Belirli bir görüntü için tüm ölçümler tamamlandıktan sonra, sistem ortalama kalınlık ± standart sapma, minimum, maksimum ve aralığı hesaplar ve bu istatistikleri açıklamalı görüntü üzerinde bir metin üst katmanı olarak görüntüler.

Her katman ölçümü için ham piksel mesafesini, nanometre cinsinden ham kalınlığı hem nanometre hem de mikrometre cinsinden sistematik olarak düzeltilmiş kalınlığı, tıklanan her iki noktanın x/y koordinatlarını, katman indeksini, dosya adını ve aygıt türünü yakalayan kapsamlı bir veri yapısı oluşturulur. Tüm görüntüler işlendikten sonra, display_advanced_results() işlevi, düzeltilmiş değerlerin yanı sıra tek tek katman kalınlıklarını listeleyen yapılandırılmış dosya başına konsol özetini yazdırır; bunu dosya başına ortalama ± standart sapma ve kalınlık aralığı izler.

İstatistiksel analiz, sonuçları aygıt türüne ve işleme koşuluna göre sınıflandırarak katman homojenliğinin ve işleme etkilerinin karşılaştırmalı bir değerlendirmesine imkân tanır.

Çıktı sistemi, “save_advanced_results()” aracılığıyla iki çıktı dosyası oluşturur: dosya adı, aygıt, katman indeksi, piksel cinsinden kalınlık, ham nanometre değeri ve düzeltilmiş nanometre değerini içeren katman başına kayıtları barındıran ve harici istatistik yazılımları için uygun bir CSV tablosu (Advanced_Analysis_Results.csv) ile, daha ileri MATLAB tabanlı işleme için tam layer_results yapısını koruyan bir MAT dosyası (Advanced_Analysis_Data.mat). Her bir görüntü analiz edildikçe, tek tek katman ölçüm şekilleri (Layers_.png) ve kalibrasyon şekilleri (Calibration_.png) ilgili ölçüm fonksiyonları içinde kaydedilir.

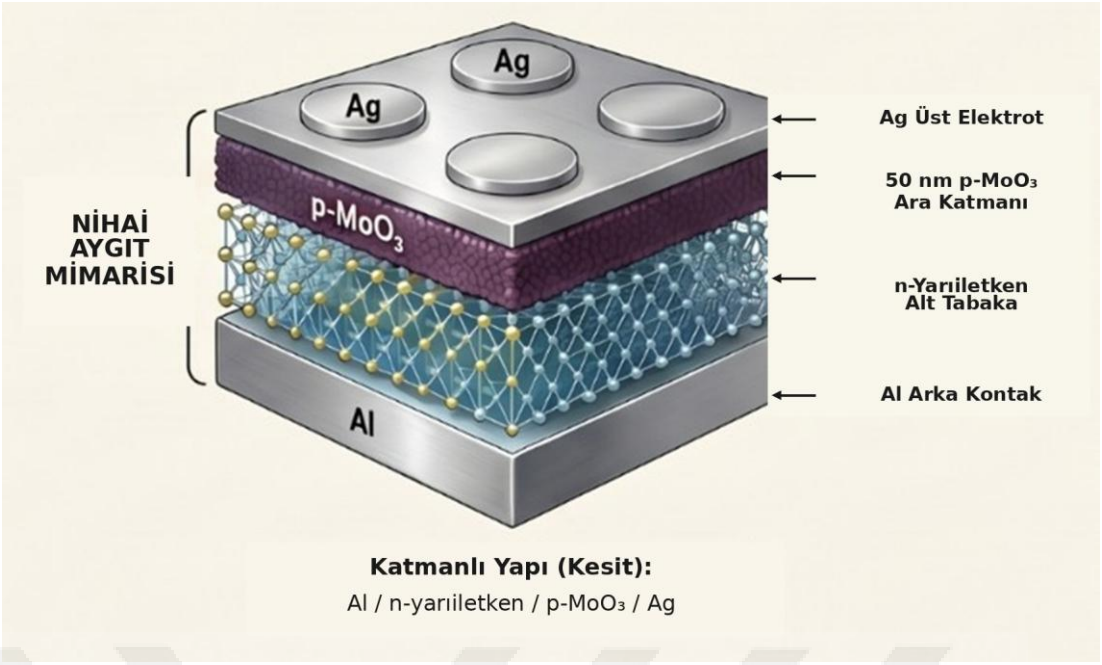
3.3 *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroekleme Dayalı Kendinden Beslemeli Görünür-UV Fotodiyot Özellikleri

Bu çalışmada karakterize edilen dört adet *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken (*n*-Si, *n*-GaAs, *n*-InP ve *n*-4H-SiC) heteroeklem fotodedektör aygıtı, Bölüm 3.1.1'de açıklanan ortak üretim süreciyle hazırlanmıştır. Aygıtların tam üretim akışı adım adım Şekil 3.7'de özetlenmektedir.



Şekil 3.7 *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerin üretim süreci akışı: (a) alt tabaka hazırlığı ve Al arka kontak biriktirme, (b) yaklaşık 50 nm α-MoO_3 filminin PVD ile büyütülmesi, (c) Ag üst kontak desenlendirme (A = 7,85×10^{-2} cm^2) ve (d) havada 200 °C'de 1 saat süreyle biriktirme sonrası tavlama

Tavlanmamış ve tavlanmış heteroeklem konfigürasyonlarının kesit mimarisi Şekil 3.8'de gösterilmiştir.



Şekil 3.8 Üretilen *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemin şematik gösterimi

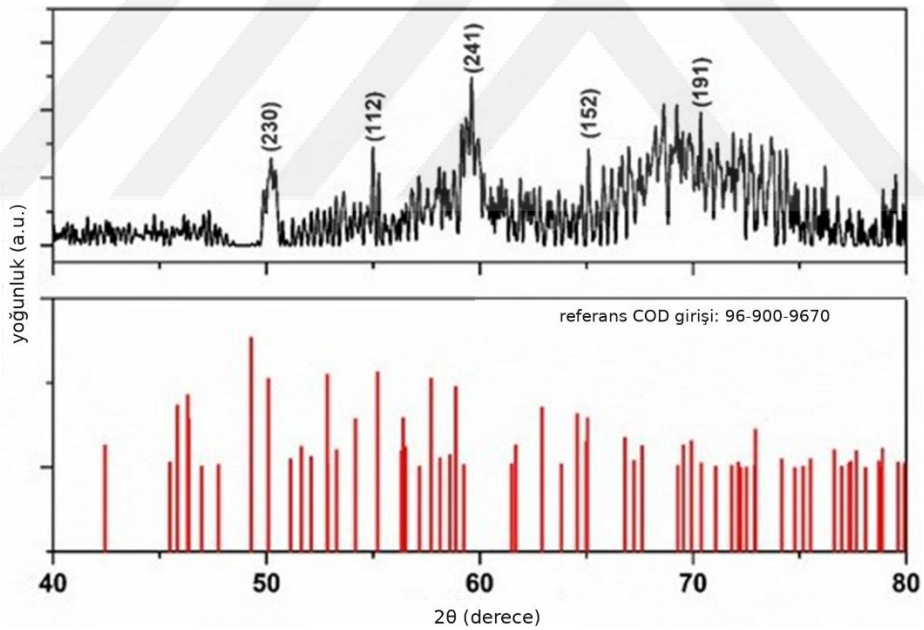
Akım–voltaj (*I–V*) karakteristikleri, Keithley 2400 SourceMeter kaynak-ölçü birimi kullanılarak oda sıcaklığında (T = 300 K) ±3 V'luk bir besleme aralığında kaydedilmiştir. Ölçümler karanlık koşullar altında ve dört farklı görünür ışık yoğunluğunda (650; 1000; 1225 ve 1300 W/m², Sciencetech SF300A güneş simülatörü, kalibre edilmiş halojen kaynak) ve iki UV dalga boyunda (365 nm ve 395 nm, dar bantlı LED, her biri yaklaşık 0,98 mW toplam optik güç) gerçekleştirilmiştir (Şekil 3.9). İdealite faktörü (n), bariyer yüksekliği (Φ_{B0}), doyum akımı (I_0), seri direnç (R_s) ve şönt direnç (R_{sh}) gibi elektronik parametreler, termiyonik emisyon (TE) teorisi ve Ohm kanunu kullanılarak elde edilmiştir. Kendinden beslemeli fotodedektör parametreleri (PS, *R*, *D**, SNR), Bölüm 2.6'da tanıtılan başarım ölçütleri çerçevesinde ve Bölüm 4.3'te açık biçimde verilen Denklem (4.22)–(4.25) uyarınca V_{bias} = 0 V'da değerlendirilmiştir.

Biriktirilen MoO_3 ince filmlerin kristal yapısı ve yüzey morfolojisi, elektriksel ölçümlerden önce X-ışını kırınımı (XRD) ve taramalı elektron mikroskobu (SEM) ile karakterize edilmiştir. XRD desenleri, 10–80° 2θ aralığında CuKα radyasyonu (λ = 1,5406 Å) kullanılarak kaydedilmiştir. Kırınım desenleri, biriktirilen filmlerin polikristal ortorombik α-MoO_3 fazı sergilediği doğrulanmıştır. (Kristalografi Açık Veritabanı, COD no. 96-900-9670; Sitepu vd., (2005); kafes parametreleri: a = 3,9616

Å, b = 13,8560 Å, c = 3,6978 Å); bu, dört alt tabakanın tümünde ve her iki aygıt konfigürasyonunda tutarlı olmuştur (Şekil 3.10). 2θ = 50,07°; 55,27°; 59,16°; 65,10° ve 70,37°'de gözlemlenen ana yansımalar, sırasıyla α-MoO_3'ün (230), (112), (241), (152) ve (191) kristalografik düzlemlerine indekslenmiştir. İkincil MoO_2 veya diğer oksit fazları tespit edilmemiştir; bu da biriktirilen filmlerin faz saflığını doğrulamaktadır.



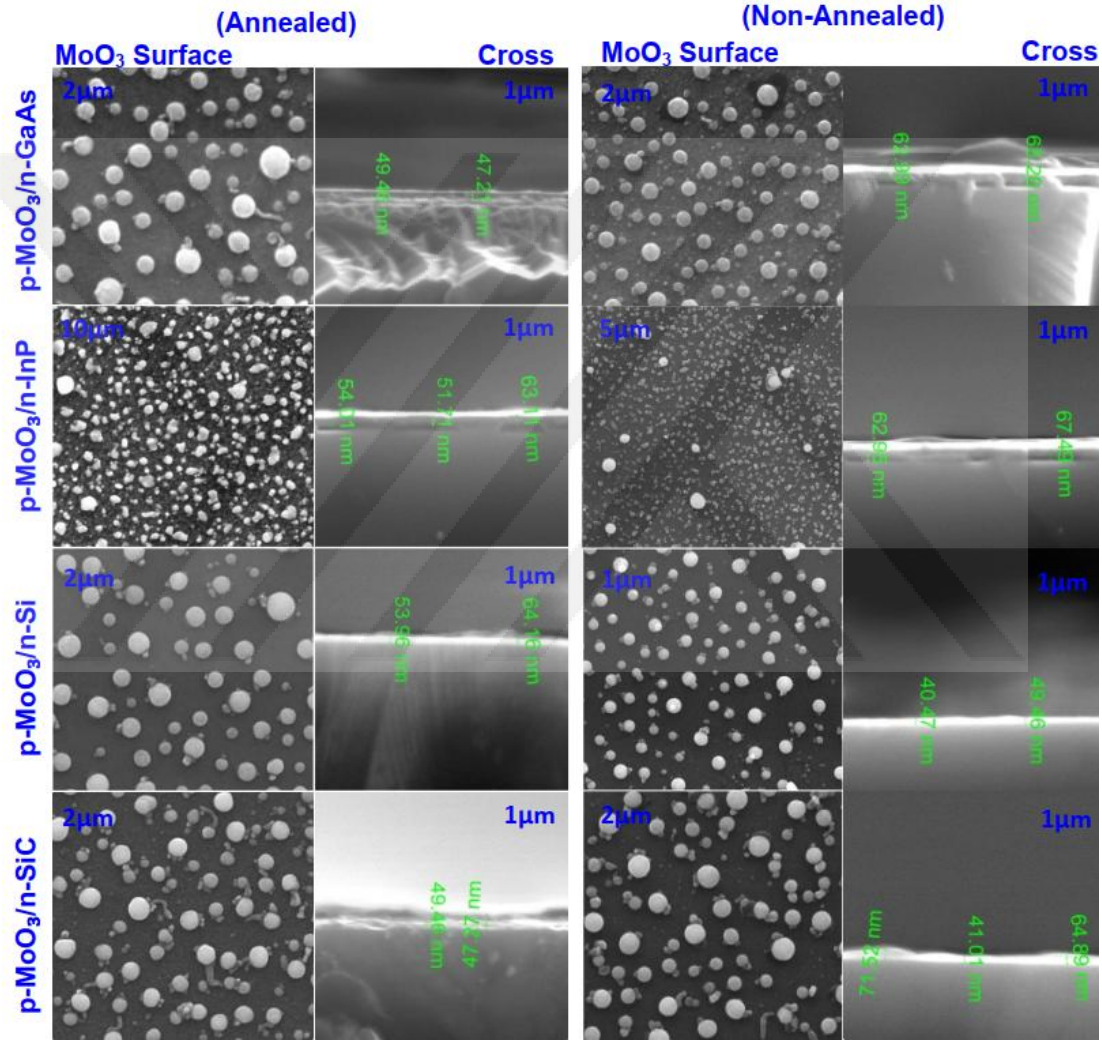
Şekil 3.9 Üretilen *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklem için ölçüm sistemi



Şekil 3.10 *n*-Si, *n*-GaAs, *n*-InP ve *n*-4H-SiC üzerindeki α-MoO_3 ince filminin XRD deseni

Dört alt tabakanın tümünde α-MoO_3 filminin homojenliğini ve kalınlığını incelemek için 15 kV hızlandırma geriliminde SEM kesit görüntüleri elde edilmiştir (Şekil 3.11). SEM görüntüleri, MoO_3 tabakasının tüm alt tabakalar üzerinde sürekli bir ince film

oluşturduğunu göstermektedir. Üst yüzey morfolojisinde gözlemlenen ada benzeri/granüler yapı, düşük sıcaklıklarda PVD ile büyütülmüş polikristal MoO_3 ince filmler için karakteristik bir davranıştır (Li vd., 2017). Tavlama işleminden sonra yüzeyde kısmi bir yeniden düzenlenme gözlemlense de önemli bir tane irileşmesi oluşumu tespit edilmemiştir. Kesit SEM görüntüleri, MoO_3 tabakasının tüm alt tabakalar üzerinde yaklaşık 50 nm kalınlığında homojen bir ince film olarak büyüdüğünü doğrulamaktadır. Tavlama işleminden sonra tabaka kalınlığında önemli bir değişiklik gözlemlenmemiştir.



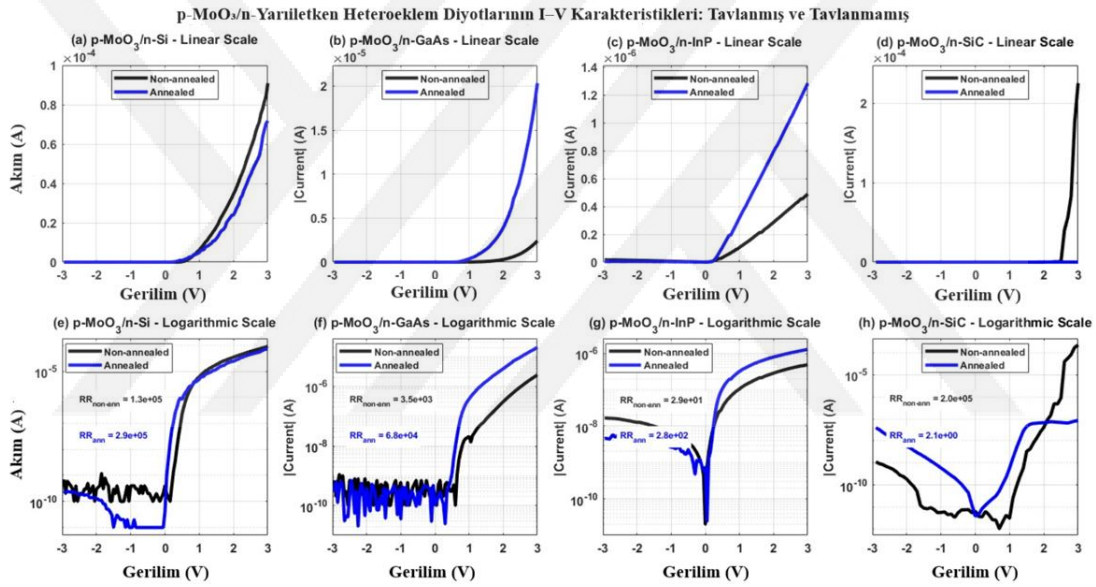
Şekil 3.11 Heteroeklem aygıtlarının SEM görüntüleri; hem tavlanmamış hem de tavlanmış durumlarda p-MoO_3/n-Si, p-MoO_3/n-GaAs, p-MoO_3/n-InP ve p-MoO_3/n-4H-SiC'nin kesit ve üst yüzey morfolojilerini göstermekte olup, yaklaşık 50 nm'lik tek tip bir MoO_3 ara tabakasının oluştuğunu doğrulamaktadır

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1 Alt Tabakaya Bağlı Termal Modülasyon: *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklemlerin Elektriksel ve Dielektrik Özellikleri

4.1.1 Akım–Voltaj (I–V) Karakteristikleri ve Diyot Parametreleri

Üretilen tüm heteroeklemlerin ısıl tavlama işlemi öncesi ve sonrasındaki doğrultma davranışı ve temel elektronik özellikleri akım–voltaj (I–V) ölçümleriyle incelenmiştir. Şekil 4.1, *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken diyotların Tavlanmış (Annealed) ve Tavlanmamış (Non-annealed) ileri ve geri besleme altındaki yarı-logaritmik I–V eğrilerini göstermektedir.



Şekil 4.1 *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken heteroeklem diyotlarının ileri ve geri besleme koşullarındaki yarı-logaritmik I–V karakteristikleri

Tüm yapılar belirgin bir doğrultucu davranış sergileyerek heteroeklem diyodunun oluştuğunu ortaya koymaktadır. Bununla birlikte, yarıiletken alt tabakaya ve tavlama işlemine bağlı olarak güçlü değişimler gözlenmektedir. İleri besleme I–V karakteristikleri, aşağıdaki bağıntıyla tanımlanan termiyonik emisyon kuramı çerçevesinde yorumlanmıştır (Sharma, 1984; Sze ve Ng, 2007):

$$I = I_0 \left[\exp\left(\frac{q(V-IR_S)}{nkT}\right) - 1\right] \quad (4.1)$$

Burada I_0 doyum akımı, n idealite faktörü ve Rs seri dirençtir. Doyum akımı, bariyer yüksekliği Φ_{B0} ile aşağıdaki bağıntıyla ilişkilidir (Sharma, 1984; Sze ve Ng, 2007):

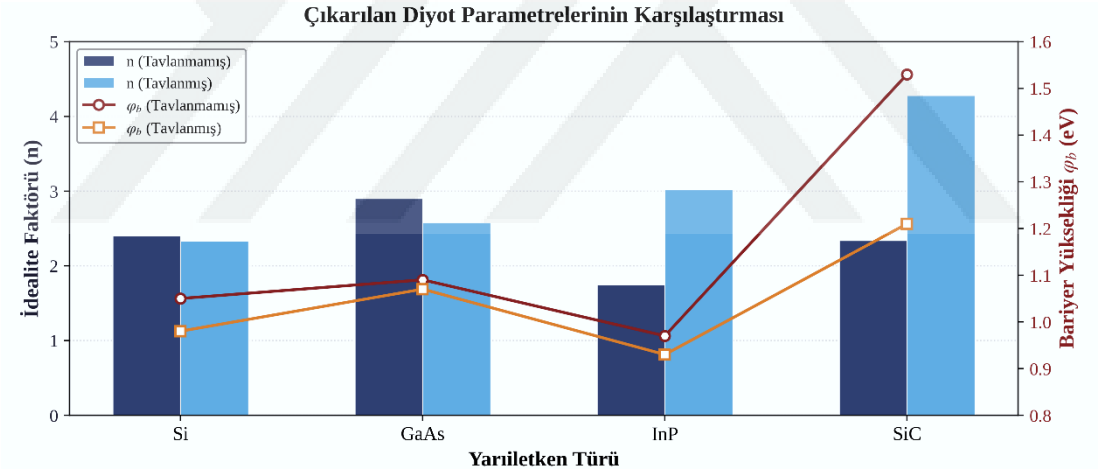
$$I_0 = AA^*T^2\exp\left(-\frac{q\Phi_{B0}}{kT}\right) \quad (4.2)$$

Burada A kontak alanı, A^* etkin Richardson sabiti ve T mutlak sıcaklıktır. Kontak alanı olarak, Şekil 3.7'de belirtilen ve tüm aygıtlarda ortak kullanılan nominal değer (A = 7,85×10⁻² cm²) esas alınmıştır; bu seçimin, SEM ile ölçülen gerçek kontak alanlarına (Tablo 4.5) göre bariyer yüksekliğinde yol açtığı sistematik kayma Bölüm 4.3'te nicel olarak değerlendirilmiştir. Çıkarılan parametre değerleri Tablo 4.1'de listelenmiştir. Tablo 4.1, tavlamanın etkisinin alt tabakaya göre değiştiğini göstermektedir. *p*-MoO_3/*n*-Si diyotlarında tavlama sonrasında idealite faktöründe %1,6'lık bir iyileşme (2,379 → 2,340) ve doğrultma oranında %121,5'lik bir artış (1,30×10⁵ → 2,88×10⁵) elde edilmiştir. Her iki parametrede de aynı yönde değişim gözlenmiştir.

Tablo 4.1 Temel diyot parametreleri ve doğrultma başarımı (RR: doğrultma oranı)

Aygıt	Durum	Temel Dirençler		Aygıt Parametreleri			Doğrultma Oranı (RR)
		R_s (Ω)	R_{sh} (Ω)	n	I_0 (A)	Φ_{B0} (eV)	
p-MoO_3/*n*-Si	Tavlanmamış	3,49×10⁴	4,21×10⁹	2,379	3,84×10⁻¹¹	1,037	1,30×10⁵
	Tavlanmış	4,18×10⁴	1,18×10¹⁰	2,340	1,16×10⁻⁹	0,949	2,88×10⁵
	Değişim	+%19,8	+%180,3	−%1,6	30,2×	−0,09	+%121,5
p-MoO_3/*n*-GaAs	Tavlanmamış	1,33×10⁶	4,21×10⁹	2,902	2,02×10⁻¹³	1,105	3,46×10³
	Tavlanmış	1,56×10⁵	9,83×10⁹	2,597	9,86×10⁻¹³	1,064	6,78×10⁴
	Değişim	−%88,3	+%133,5	−%10,5	4,9×	−0,04	+%1860
p-MoO_3/*n*-InP	Tavlanmamış	6,17×10⁶	1,77×10⁸	1,765	8,90×10⁻¹¹	0,951	2,93×10¹
	Tavlanmış	2,34×10⁶	6,44×10⁸	2,989	3,81×10⁻¹⁰	0,913	2,81×10²
	Değişim	−%62,1	+%263,8	+%69,3	4,3×	−0,04	+%859
p-MoO_3/*n*-SiC	Tavlanmamış	1,64×10⁴	2,60×10⁹	2,348	2,51×10⁻¹⁹	1,531	2,02×10⁵
	Tavlanmış	3,68×10⁷	7,32×10⁷	4,286	7,97×10⁻¹⁴	1,203	2,12×10⁰
	Değişim	+%224290	−%97,2	+%82,5	3,17×10⁵×	−0,33	−%100

Yüksek bariyer yüksekliğine sahip *p*-MoO_3/*n*-GaAs kontağında tavlama; seri direnci yaklaşık %88 azaltmış, idealite faktörünü 2,902'den 2,597'ye iyileştirmiş ve doğrultma oranını %1860 artırmıştır ($3{,}46\times10^3 \rightarrow 6{,}78\times10^4$); doyum akımı ise 4,9 kat artmıştır. En büyük değişim *p*-MoO_3/*n*-SiC yapısında ortaya çıkmaktadır. Tavlanmamış aygıt, $2{,}02\times10^5$ gibi yüksek bir doğrultma oranı ve 1,531 eV bariyer yüksekliği sergilerken, tavlama sonrasında bariyer yüksekliği 1,203 eV'a, doğrultma oranı ise 2,12'ye düşmektedir; bu da belirgin bir arayüz modifikasyonuna işaret etmektedir. Bu durum, ortam havasında 200 °C'de yapılan tavlamanın — olasılıkla MoO_3 stokiyometrisinin bozulması ve arayüz durum yoğunluğunun artması yoluyla — *p*-MoO_3/*n*-SiC ekleminde doğrultucu karakterin kaybolmasına yol açtığını göstermektedir. Bu sonuç, SiC tabanlı aygıtlarda biriktirilmiş (tavlanmamış) durumun korunmasının uygun olduğuna işaret etmektedir. *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemleri için elde edilen yüksek idealite faktörleri (n = 1,765–4,286), klasik ideal diyot davranışından belirgin bir sapmaya işaret etmektedir (Şekil 4.2). Bu durum; yüksek arayüz tuzak yoğunluğuna, bariyer homojensizliğine ve tuzak destekli tünelleme mekanizmasına atfedilebilir.



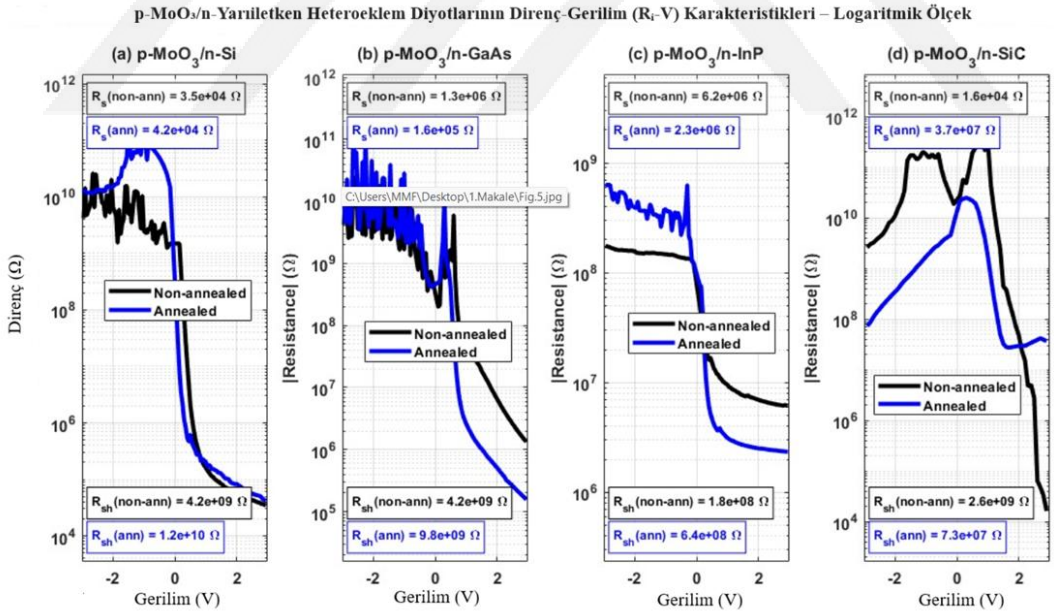
Şekil 4.2 *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken heteroeklem diyotlarının Φ_{B0} ve *n* değerleri

Tavlanmamış örneklerde dahi gözlenen tutarlı doğrultucu davranış, başlangıçtaki eklem oluşum mekanizmasının tartışılmasını gerektirmektedir. Biriktirme sonrası tavlama, arayüz özelliklerini değiştirse de biriktirilmiş hâldeki örneklerde doğrultmanın varlığı, MoO_3 biriktirme sırasında işlevsel bir heteroeklemin hemen oluştuğunu güçlü biçimde düşündürmektedir. MoO_3'ün yüksek iş fonksiyonunun, komşu *n*-tipi yarıiletkende güçlü bant bükülmesi oluşturarak ısıl işlem öncesinde dahi

elektronlar için bir tükenim bölgesi ve potansiyel bariyer meydana getirdiği bildirilmiştir (Chen vd., 2019; Kröger vd., 2009b).

200°C'de yapılan tavlamanın diyot parametrelerinde yol açtığı belirgin ve alt tabakaya göre yön değiştiren değişim, arayüzel tabakanın özelliklerinde önemli bir dönüşüm olduğuna işaret etmektedir. Söz konusu değişimin *p*-MoO_3/*n*-GaAs yapısında iyileşme, *p*-MoO_3/*n*-SiC yapısında ise bozulma yönünde olması, ısıl işlemin tek bir "iyileştirme" mekanizması değil, alt tabakaya özgü rekabet hâlindeki süreçler bütünü olarak değerlendirilmesi gerektiğini göstermektedir. Bu tavlama sürecinin iki amaca hizmet ettiği değerlendirilmektedir: birincisi, daha iyi difüzyon sağlayarak Ag ve Al kontaklarının omik niteliğini iyileştirmek; ikincisi ise yarıiletken ile MoO_3 tabakası arasındaki arayüzel tabakayı tavlayarak MoO_3 tabakasının ideal stokiyometrisine yaklaşmasına katkı sağlamaktır.

Şekil 4.3, heteroeklemler için seri direnç (R_s) ve şönt direncinin (R_{sh}) voltajla değişimini göstermektedir. R_s değeri, ileri voltajın artmasıyla tutarlı biçimde azalmaktadır; bu, tükenim genişliğinin daralmasıyla birlikte Schottky benzeri p-n heteroeklemlerin tipik bir özelliğidir.



Şekil 4.3 *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken heteroeklem diyotlarının uygulanan voltajın fonksiyonu olarak R_s ve R_{sh} grafikleri

R_{sh} için ise, düşük ileri voltajlarda yüksek kalan değerin, akımın akmaya başladığı eşik (turn-on) voltajı olarak bilinen belirli bir noktada aniden düştüğü gözlenmektedir. Seri direnç değerlerini bağımsız olarak doğrulamak amacıyla Cheung–Cheung yöntemi uygulanmıştır (Cheung ve Cheung, 1986):

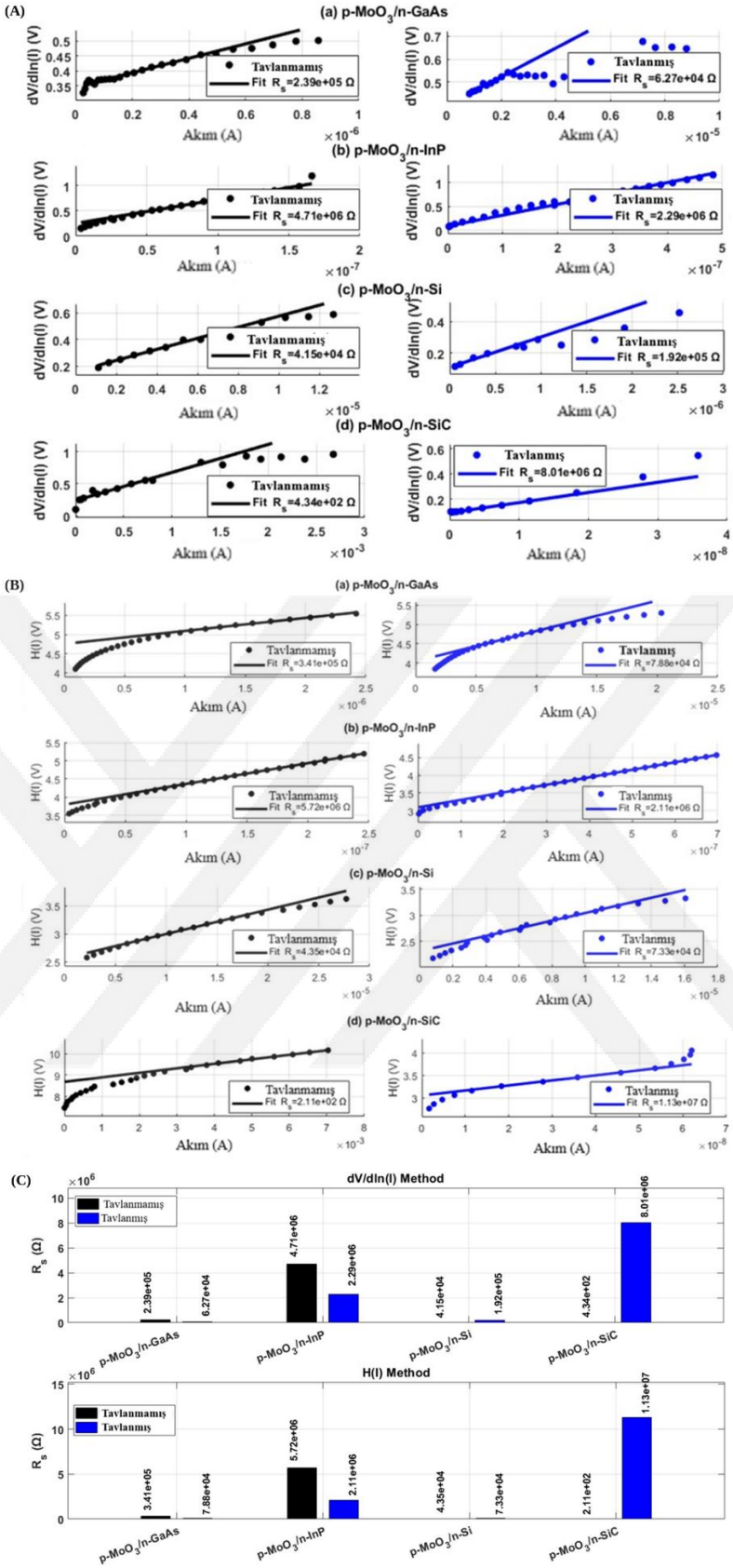
$$\frac{dV}{d(\ln I)} = R_S I + n\frac{kT}{q} \tag{4.3}$$

$$H(I) = V - n\frac{kT}{q}\ln\left(\frac{I}{AA^*T^2}\right) = n\Phi_{B0} + IR_s \tag{4.4}$$

Şekil 4.4'te görüldüğü gibi, tüm heteroeklemler için *dV*/*d*(ln*I*)–*I* ve *H(I)–I* grafiklerindeki doğrusal bölgeler bu yaklaşımın uygulanabilirliğini doğrulamaktadır. Bu grafiklerin eğimleri, seri direncin (R_s) alternatif bir biçimde belirlenmesini sağlamaktadır (Cheung ve Cheung, 1986). Cheung fonksiyonlarından ve standart yöntemden elde edilen R_s değerlerinin karşılaştırmalı bir özeti Tablo 4.2'de verilmiştir.

Tablo 4.2 Standart yöntem ve Cheung fonksiyonları ile elde edilen R_s değerlerinin ayrıntılı karşılaştırması

Aygıt	Yöntem	Tavlanmamış R_s (Ω)	Tavlanmış R_s (Ω)	Değişim (%)
p-MoO_3/*n*-Si	dV/d(lnI)	$4{,}15\times10^4$	$1{,}92\times10^5$	+%363
	H(I)	$4{,}35\times10^4$	$7{,}33\times10^4$	+%68,7
	Standart	$3{,}49\times10^4$	$4{,}18\times10^4$	+%19,8
p-MoO_3/*n*-GaAs	dV/d(lnI)	$2{,}39\times10^5$	$6{,}28\times10^4$	%73,7 ↓
	H(I)	$3{,}41\times10^5$	$7{,}88\times10^4$	%76,9 ↓
	Standart	$1{,}33\times10^6$	$1{,}56\times10^5$	%88,3 ↓
p-MoO_3/*n*-InP	dV/d(lnI)	$4{,}71\times10^6$	$2{,}29\times10^6$	%51,3 ↓
	H(I)	$5{,}72\times10^6$	$2{,}11\times10^6$	%63,0 ↓
	Standart	$6{,}17\times10^6$	$2{,}34\times10^6$	%62,1 ↓
p-MoO_3/*n*-SiC	dV/d(lnI)	$4{,}34\times10^2$	$8{,}01\times10^6$	+%1845622
	H(I)	$2{,}11\times10^2$	$1{,}13\times10^7$	+%5344305
	Standart	$1{,}64\times10^4$	$3{,}68\times10^7$	+%224290



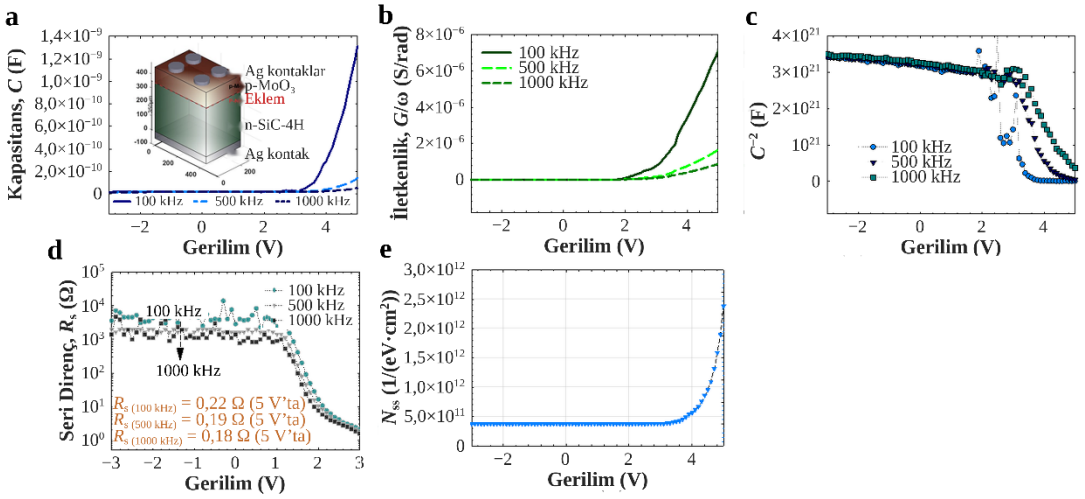
Şekil 4.4 p-MoO_3/n-tipi yarıiletken heteroeklem diyotlarında seri direncin Cheung yöntemiyle belirlenmesi: (A) dV/dln(I) ve (B) H(I) fonksiyonlarının dört alt tabaka (a: GaAs, b: InP, c: Si, d: SiC) için doğrusal uyarlamaları ile (C) her iki yöntemden elde edilen Rs değerlerinin karşılaştırması. Siyah: tavlanmamış, mavi: tavlanmış

Üç yöntemin karşılaştırılması, seri direncin çıkarım yöntemine duyarlılığını ortaya koymaktadır. *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtında tavlanmamış durum için üç yöntem aynı mertebede (3,49–4,35×10^4 Ω) sonuç vermekte; *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtında ise hem mertebe hem de değişim yönü bakımından yakın bir uyum (−%51 ile −%63 arası) gözlenmektedir. Buna karşılık *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtının tavlanmamış durumunda Cheung fonksiyonlarından elde edilen değerler (4,34×10^2 ve 2,11×10^2 Ω), standart yöntemin verdiği 1,64×10^4 Ω'dan yaklaşık iki mertebe düşüktür. Bu ayrışma, Cheung fonksiyonlarının yalnızca ileri beslemenin yüksek akım bölgesindeki doğrusal kesime duyarlı olmasından, standart yöntemin ise akım–voltaj eğrisinin bütününü temsil etmesinden kaynaklanmaktadır; yüksek arayüz durum yoğunluğuna ve tuzak destekli taşınıma sahip yapılarda bu iki bölge farklı etkin dirençler vermektedir.

Yöntemler arasındaki mutlak farklara karşın, tavlamanın yol açtığı değişimin yönü üç yöntemde de aynıdır: *p*-MoO_3/*n*-GaAs ve *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtlarında seri direnç azalmakta, *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtında sınırlı ölçüde artmakta, *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtında ise üç yöntemin tamamında birkaç mertebe yükselmektedir. *p*-MoO_3/*n*-SiC yapısındaki bu keskin artış, aynı aygıtta doğrultma oranının 2,02×10^5'ten 2,12'ye düşmesiyle birlikte değerlendirildiğinde, tavlamanın bu alt tabakada eklem niteliğini iyileştirmediğini, aksine arayüzde yüksek dirençli bir tabaka oluşturarak doğrultucu karakteri ortadan kaldırdığını doğrulamaktadır.

4.1.2 Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC Heteroekleminin Dielektrik Karakteristikleri

Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC yapısının frekansa bağlı C–V ve G–V grafikleri incelenmiş ve sonuçlar Şekil 4.5'te sunulmuştur. Şekil 4.5(a)'dan, 5 V'taki birikim kapasitansının frekansla önemli ölçüde değiştiği; 100 kHz'de 1,13 nF'tan 1000 kHz'de 52 pF'a düştüğü görülmektedir. Bu davranış, arayüzde yüksek frekanslı AC sinyalini izleyemeyen tuzakların bulunduğunu göstermektedir. Şekil 4.5(b)'deki G–V grafikleri, tükenim bölgesinde frekans arttıkça genlikleri azalan pikler sergileyerek bu durumu doğrulamaktadır.



Şekil 4.5 Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklem diyotlarının frekansa bağlı C–V, G–V, C^{-2}–V, R_s–V ve arayüz durum yoğunluğu karakteristikleri

Kapasitansların hassas biçimde çözümlenmesi için aşağıdaki bağıntı kullanılarak C^{-2}–V grafiği çizilmiştir (Alarabi vd., 2024; Çiçek vd., 2021; Sze ve Ng, 2007):

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2(V_{bi}+V_R)}{q\varepsilon_s\varepsilon_0 A^2 N_D} \tag{4.5}$$

Burada V_R geri besleme voltajı, q temel yük, ε_s ve ε_0 sırasıyla yarıiletkenin ve boşluğun dielektrik sabitleri (4H-SiC için ε_s = 9,76; Kimoto ve Cooper, 2014) ve A diyot kontaklarının alanıdır. C^{-2}–V grafiklerinden elde edilen başlıca elektronik parametreler Tablo 4.3'te listelenmiştir. Yüksek frekanslı C–V ve G–V grafiklerinden elde edilen, uygulanan voltaja bağlı seri direnç Şekil 4.5(d)'de gösterilmiştir ve aşağıdaki bağıntıyla hesaplanmıştır:

$$R_s = \frac{G_m}{{G_m}^2+\omega^2{C_m}^2} \tag{4.6}$$

R_s değerleri geri besleme koşullarında frekans arttıkça azalmakta ve yüksek frekanslarda voltajdan bağımsız hâle gelebilmektedir; bu da yüksek frekanslarda arayüz durumlarının katkısının azaldığını göstermektedir.

C–V–f verilerinden hesaplanan, bant aralığı boyunca arayüz durum yoğunluğu (N_{ss}) dağılımı Şekil 4.5(e)'de sunulmaktadır. Grafikten görüldüğü üzere *Nss*; düşük ve orta voltaj aralığında (yaklaşık −3 V ile +3,5 V arası) yaklaşık 2×10^{11} $eV^{-1}\cdot cm^{-2}$ değerinde

neredeyse sabit kalarak MoO_3/SiC arayüzünde orta düzeyde bir arayüz durum yoğunluğuna işaret etmektedir. Ancak pozitif voltaj +3,5 V'un üzerine çıktıkça N_{ss}'in hızla artarak +5 V dolayında yaklaşık 3×10^{12} $eV^{-1}\cdot cm^{-2}$ değerine ulaşması, yüksek elektrik alanları altında arayüzdeki tuzak seviyelerinin etkinleştiğini ve özellikle elektron tuzaklanmasının önemli ölçüde devreye girdiğini ortaya koymaktadır. Bu keskin artış, arayüzel kusurların veya oksit kaynaklı tuzakların yüksek ileri besleme koşullarında daha etkin hâle geldiğini ve dolayısıyla aygıt başarımının bu voltaj rejiminde tuzak davranışıyla sınırlandığını göstermektedir (Sze ve Ng, 2007).

Maksimum elektrik alanı (E_m), yerleşik (built-in) potansiyel (V_{bi}) ile doğrudan ilişkili olup aşağıdaki bağıntıyla verilir:

$$E_m = \sqrt{\frac{2qN_D(V_{bi}+V_R)}{\varepsilon_s\varepsilon_0}} \tag{4.7}$$

C^{-2}–V eğrilerinden ölçülen V_{bi} değeri, frekans arttıkça belirgin biçimde artmaktadır (3,610 V'tan 4,977 V'a; Tablo 4.3). Bunun başlıca nedeni, yüksek frekanslarda arayüz durumlarının ve seri direncin kapasitans ölçümü üzerindeki etkisinin azalarak ölçümün yapının gerçek iç potansiyeline yaklaşmasıdır. V_{bi}'deki bu artış, maksimum elektrik alanı şiddetinin (E_m) de $3{,}24\times10^3$ V/cm'den $4{,}17\times10^3$ V/cm'ye yükselmesine yol açmaktadır. Donör yoğunluğu (N_D) ise 7,19–9,36×10^{12} cm^{-3} aralığında görece sabit kalmaktadır. Bariyer yüksekliği Φ_B ile V_{bi}, E_F ve $\Delta\Phi_B$ arasındaki ilişki şu şekildedir (Sze ve Ng, 2007):

$$\Phi_B = V_{bi} + E_F + \frac{\mathrm{kT}}{\mathrm{q}} - \Delta\Phi_B \tag{4.8}$$

Burada $\Delta\Phi_B$, görüntü kuvveti kaynaklı bariyer alçalması etkisini temsil etmekte olup şöyle hesaplanır (Sze ve Ng, 2007):

$$\Delta\Phi_B = \sqrt{\frac{qE_m}{4\pi\varepsilon_s\varepsilon_0}} \tag{4.9}$$

Heteroeklem yapısı için Fermi seviyesi (E_F) ise aşağıdaki bağıntıyla belirlenmiştir (Sze ve Ng, 2007):

$$E_F = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_C}{N_D}\right) \tag{4.10}$$

Burada N_C etkin durum yoğunluğu olup SiC için 1,66×10¹⁹ cm⁻³ değerindedir (Kimoto ve Cooper, 2014). Bariyer yüksekliği (Φ_B), arayüzel bir tabakanın ve arayüz durumlarının varlığına atfedilerek frekansla birlikte 4,006 eV'tan 5,367 eV'a belirgin bir artış göstermektedir (Alarabi vd., 2024). Tükenim genişliği (W_D) Denklem (4.11) ile hesaplanmıştır:

$$W_D = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s\varepsilon_0(V_{bi}+V_R)}{qN_D}} \tag{4.11}$$

Denklem (4.11) uyarınca hesaplanan tükenim genişliği, frekans arttıkça 22,3 μm ile 25,3 μm arasında değişmekte ve monoton bir eğilim göstermemektedir (100 kHz: 22,3 μm; 500 kHz: 25,3 μm; 1000 kHz: 23,9 μm). W_D, V_{bi}/N_D oranının kareköküyle orantılı olduğundan bu davranış, frekansla birlikte hem V_{bi}'nin hem de C^{-2}–V eğiminden çıkarılan N_D değerinin değişmesinden kaynaklanmaktadır: 100 kHz'den 500 kHz'e geçişte V_{bi}'nin artması ve N_D'nin bir miktar azalması W_D'yi genişletirken, 1000 kHz'de N_D'nin 9,36×10¹² cm⁻³'e yükselmesi bu artışı kısmen tersine çevirmektedir. Düşük frekanslarda arayüz durumlarının ve yarıiletkenin derinliklerindeki yavaş yüklerin AC sinyaline yanıt verebilmesi, yüksek frekanslarda ise bu yanıtın ortadan kalkması, hem V_{bi} hem de N_D üzerinde eşzamanlı etki yarattığından, elde edilen W_D değerleri gerçek tükenim genişliği yerine frekansa bağlı görünür değerler olarak yorumlanmalıdır. Seri direncin (R_s) frekansla birlikte 5 V besleme altında 0,22 Ω'dan 0,18 Ω'a azalması da aynı biçimde, yüksek frekanslarda arayüz durumlarının katkısının azalmasıyla uyumludur (Tablo 4.3). Denklem (4.9) uyarınca hesaplanan görüntü kuvveti kaynaklı bariyer alçalması ($\Delta\Phi_B$) ise 6,9–7,9 meV aralığında kalmakta; bu düzeydeki bir katkı, eV mertebesindeki bariyer yüksekliği değerleri yanında ihmal edilebilir düzeydedir.

Tablo 4.3'te verilen Φ_B(C–V) değerlerinin (4,006–5,367 eV) 4H-SiC'in yasak bant aralığından (3,26 eV) büyük olması ve I–V ölçümlerinden elde edilen 1,531 eV değerinden yaklaşık üç kat sapması, bu değerlerin gerçek bir bariyer yüksekliği olarak değil, görünür (apparent) parametreler olarak yorumlanması gerektiğini göstermektedir.

Tablo 4.3 Farklı frekanslarda tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklem diyotunun hesaplanan elektronik parametreleri

f (kHz)	V_{bi} (V)	N_D (cm^{-3})	E_F (eV)	Φ_B (C–V) (eV)	$\Delta\Phi_B$ (meV)	W_D (µm)	E_m (V/cm)	R_s (Ω) (5 V)
100	3,610	$7,81\times10^{12}$	0,377	4,006	6,9	22,3	$3,24\times10^{3}$	0,22
500	4,285	$7,19\times10^{12}$	0,379	4,683	7,1	25,3	$3,39\times10^{3}$	0,19
1000	4,977	$9,36\times10^{12}$	0,373	5,367	7,9	23,9	$4,17\times10^{3}$	0,18

Sapmanın kaynağı, Denklem (4.8)'in girdisi olan V_{bi} değeridir: C^{-2}–V eğrilerinden okunan 3,610–4,977 V'luk yerleşik potansiyel, I–V verileriyle (Φ_{B0} = 1,531 eV, E_F = 0,377 eV) tutarlı olacak biçimde beklenen yaklaşık 1,15 V düzeyinin oldukça üzerindedir. Bu durum, MoO_3/SiC arayüzündeki yalıtkan benzeri arayüzel tabakanın ve arayüz durumlarının ölçülen kapasitansa seri bir bileşen olarak katılmasından, ayrıca yüksek seri direncin C^{-2}–V eğrisinin eğimini bozmasından kaynaklanmaktadır. Klasik Mott–Schottky çözümlemesi tek bir tükenim bölgesi varsayımına dayandığından, arayüzel tabaka içeren bu yapıda doğrudan uygulanabilirliği sınırlıdır. Dolayısıyla Φ_B(C–V) değerleri, arayüzel tabakanın ve arayüz durumlarının varlığının niteliksel bir göstergesi olarak ele alınmış; bariyer yüksekliğinin nicel değeri olarak I–V'den elde edilen Φ_{B0} esas alınmıştır. Benzer biçimde, admitans ölçümlerinden $Rs = Gm/(Gm^2 + \omega^2Cm^2)$ *bağıntısıyla* elde edilen ve 5 V beslemede 0,22–0,18 Ω düzeyinde kalan seri direnç değerleri, aynı aygıt için I–V karakteristiğinden çıkarılan $1,64\times10^4$ Ω ile doğrudan karşılaştırılabilir nitelikte değildir. Bu fark, admitans yönteminin yalnızca küçük sinyal (AC) rejiminde ve tek bir besleme noktasında etkin olan direnci ölçmesinden, standart yöntemin ise DC ileri besleme boyunca eklemin bütününü temsil etmesinden kaynaklanmaktadır; bu nedenle her iki değer de kendi ölçüm rejimi içinde yorumlanmıştır.

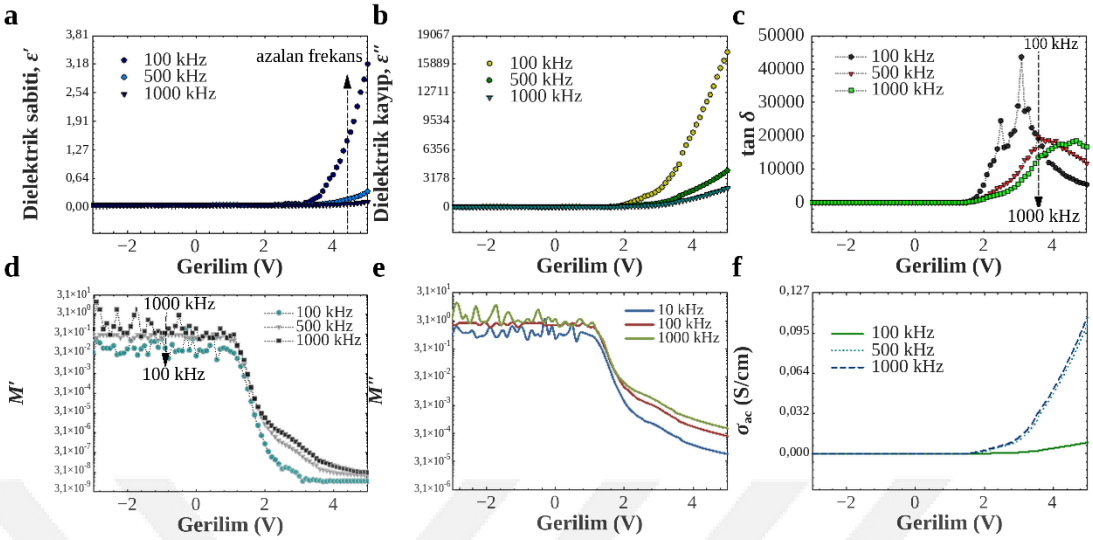
Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroekleminin frekansa bağlı dielektrik davranışı admitans spektroskopisiyle daha ayrıntılı incelenmiştir. Nicollian ve Brews'un yaklaşımı izlenerek (Nicollian ve Brews, 2002; Yerişkin vd., 2019), arayüz özelliklerini ve dielektrik gevşeme süreçlerini karakterize etmek üzere karmaşık admitans ($Y = G_m + j\omega C_m$) kullanılmıştır. Burada C_m ölçülen paralel kapasitans, G*m* ise ölçülen iletkenlik değeridir. Karmaşık geçirgenliğin ($\varepsilon^* = \varepsilon' - i\varepsilon''$) gerçek ($\varepsilon'$) ve sanal ($\varepsilon''$) bileşenlerinin voltaja bağlı profilleri, kayıp tanjantı (tan δ) ile birlikte Şekil

4.6(a–c)'de sunulmaktadır. ε' değerleri (Şekil 4.6a), düşük frekanslarda (örn. 100 kHz) birikim bölgesinde belirgin bir artış göstererek birkaç birim mertebesine ulaşmaktadır. Bu güçlü düşük-frekans dağılımı; yük taşıyıcılarının MoO_3/SiC arayüzünde ve polikristal MoO_3 tabakası içindeki tane sınırlarında birikerek toplam polarizasyona önemli katkı sağladığı arayüz polarizasyonunun tipik bir göstergesidir. Frekans arttıkça, yavaş arayüz durumları ve iyonik yükler AC elektrik alanının hızlı değişimini artık izleyemediğinden ε' değerleri belirgin biçimde azalmaktadır (Hill ve Jonscher, 1983; Nicollian ve Brews, 2002).

Şekil 4.6(b)'deki dielektrik kayıp (ε'') spektrumları, özellikle düşük ve orta frekanslarda belirgin olmak üzere tükenim bölgesinde belirgin pikler sergilemektedir. Bu piklerin genliği frekans arttıkça azalmakta, piklerin oluştuğu voltajda da küçük bir kayma gözlenmektedir. Pikler, doğrudan arayüz durumlarında yük taşıyıcılarının yeniden yönelimi ve tuzaklanma/tuzaktan kurtulma süreçleriyle kaybedilen enerjiyle ilişkilidir. Belirli bir voltajda bu piklerin varlığı, SiC bant aralığındaki en etkin arayüz tuzaklarının enerji düzeyine işaret etmektedir (Hill ve Jonscher, 1983). Şekil 4.6(c)'de gösterilen kayıp tanjantı ($\tan \delta = \varepsilon''/\varepsilon'$), dielektrik sistemin kaybedilen enerjisinin depolanan enerjiye oranını kestirmek için kullanılır. $\tan \delta$'daki, en belirgin olarak 3–4 V arasında gözlenen pikler, AC sinyalinin malzemedeki arayüz tuzak durumlarıyla rezonant etkileşimine karşılık gelen maksimum dielektrik kayıp noktalarını temsil etmektedir.

Yüksek kapasitans etkilerini bastırmak ve dielektrik gevşeme olgularını kolayca tanımlayıp çözümlemek amacıyla karmaşık elektrik modülü ifadesi ($M^* = 1/\varepsilon^* = M' + jM''$) kullanılmıştır. Elektrik modülünün gerçek (M') ve sanal (M'') bileşenleri sırasıyla Şekil 4.6(d) ve Şekil 4.6(e)'de gösterilmektedir. Şekil 4.6(e)'deki M'' grafikleri; frekans arttıkça daha yüksek voltajlara kayan asimetrik gevşeme pikleri sergilemektedir. Bu, bir gevşeme zamanı dağılımına sahip Debye dışı gevşeme sürecinin karakteristiğidir ve değişen arayüz durum yoğunluklarına sahip heterojen yarıiletken arayüzlerinde gözlenmektedir (Halder ve Bhattacharya, 2023). M″'deki gevşeme piki, uzun erimli yük hareketliliğinden kısa erimli hareketliliğe geçişi göstermekte; frekans bağımlılığı ise dielektrik gevşemenin ısıl olarak etkinleştiğini ortaya koymaktadır (Chanu vd.,

2023). Son olarak AC elektriksel iletkenlik hesaplanmış ve voltajla değişimi Şekil 4.6(f)'de gösterilmiştir:



Şekil 4.6 Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklem diyotu için farklı frekanslarda voltaja bağlı ε' (a), ε'' (b), tan δ (c), M' (d), M'' (e) ve σ_{ac} (f) karakteristikleri

$$\sigma_{ac} = \omega\varepsilon_0\varepsilon'' \tag{4.12}$$

σac değerleri, tüm voltaj değerlerinde frekansla birlikte sistematik bir güçlenme göstermiştir. Frekans bağımlılığı, lokalize yüzey durumlarında atlama (hopping) veya tünelleme iletiminin karakteristiği olan evrensel güç yasasına ($\sigma_{ac} \propto \omega^s$) uymaktadır (Fang vd., 2023). İletkenlik düşük frekanslarda uygulanan voltajdan bağımsızken, yüksek frekanslarda değeri uygulanan voltaja güçlü biçimde bağımlı hâle gelmiştir; bu durum, farklı frekans ve voltaj değerlerinde devreye giren farklı iletim süreçlerinden kaynaklanmaktadır (Hill ve Jonscher, 1983).

Dielektrik tabakanın karakterizasyonu amacıyla, güçlü birikim (strong accumulation) bölgesinden elde edilen parametreler Tablo 4.4'te özetlenmiştir. Boşluk kapasitansı C_0 = ε_0A/d bağıntısıyla hesaplanmış; burada A olarak Bölüm 4.2.2'de SEM görüntülerinden ölçülen sekiz kontağın ortalama alanı ($2{,}29\times10^{-2}$ cm²; Tablo 4.5), d olarak ise Bölüm 4.2.4'te aynı aygıt (SiC-Tavlanmamış) için kesit SEM'den belirlenen MoO_3 kalınlığı (59,1 nm; Tablo 4.7) kullanılmıştır. Bu yaklaşım, dielektrik çözümlemenin geometrik girdilerini varsayıma değil, doğrudan ölçüme dayandırmaktadır. Elde edilen C_0 = $3{,}43\times10^{-10}$ F değeri, tanımı gereği frekanstan

bağımsızdır. Aygıta özgü kontak alanı (SiC-Tavlanmamış için $2{,}21\times10^{-2}$ cm²) kullanıldığında $C_0 = 3{,}31\times10^{-10}$ F elde edilmekte ve etkin dielektrik sabiti 100 kHz'de 4,0, 500 kHz'de 4,3 değerini almaktadır; %3,5 düzeyindeki bu fark aşağıdaki yorumları değiştirmemektedir.

Tablo 4.4 Tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklem diyotunun C_0, C_{0x} ve ε'_{max} değerleri

Büyüklük	**100 kHz**	**500 kHz**	**1000 kHz**
A (cm²) — SEM	$2{,}29\times10^{-2}$	$2{,}29\times10^{-2}$	$2{,}29\times10^{-2}$
d (nm) — SEM kesit	59,1	59,1	59,1
C_0 (F)	$3{,}43\times10^{-10}$	$3{,}43\times10^{-10}$	$3{,}43\times10^{-10}$
C_{0x} (F) (3 V)	$1{,}31\times10^{-9}$	$1{,}42\times10^{-9}$	$5{,}2\times10^{-11}$
ε'_{max}	3,8	4,1	0,15*

* Bu değer fiziksel bir dielektrik sabiti değil, seri direncin baskın olduğu ölçüm rejiminin göstergesidir.

Güçlü birikim koşullarında MoO_3 tabakasının kapasitansı olarak tanımlanan oksit kapasitansı (C_{0x}) ise belirgin bir frekans bağımlılığı göstermekte; değeri 100 kHz'de $1{,}31\times10^{-9}$ F'tan 1000 kHz'de $5{,}2\times10^{-11}$ F'a keskin biçimde düşmektedir. Bu güçlü azalma, yüksek frekansta arayüz durumlarının ve MoO_3 filmi içindeki dipolar gevşemelerin AC sinyalini izleyememesinin bir sonucudur (Hill ve Jonscher, 1983).

Buna karşılık gelen etkin dielektrik sabiti ($\varepsilon'_{max} = C_{0x}/C_0$), 100 kHz'de 3,8 ve 500 kHz'de 4,1 değerlerini almaktadır. Bu büyüklükler, ısıl buharlaştırmayla biriktirilmiş ince MoO_3 filmleri için bildirilen değerlerle aynı mertebededir ve yapının düşük frekanslarda arayüz polarizasyonu ile iyonik polarizasyonun yönettiği bir dielektrik tepki sergilediğini göstermektedir. 1000 kHz'de hesaplanan 0,15 değerinin birimden küçük çıkması ise fiziksel bir dielektrik sabiti olarak yorumlanamaz; bu frekansta ölçülen kapasitansın artık oksit tabakasını değil, seri direncin ve yanıt veremeyen arayüz durumlarının baskın olduğu bir eşdeğer devreyi temsil ettiğini göstermektedir. Dolayısıyla 1000 kHz değeri, MoO_3 tabakasının dielektrik sabiti için bir alt sınır olarak değerlendirilmelidir.

Bu çalışma, hava atmosferinde 200°C'de gerçekleştirilen düşük sıcaklıklı tavlama işleminin, *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken heteroeklem diyotlarında arayüz mühendisliği açısından etkili, ancak alt tabaka türüne bağlı olarak seçicilik gösteren bir yöntem

olduğunu ortaya koymaktadır. Bu çalışmanın önemli bulgularından biri, *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklem diyodunun elektriksel karakteristiğinde tavlama sonrasında gözlenen belirgin değişimdir. Tavlama öncesinde bariyer yüksekliği ve doğrultma oranı sırasıyla 1,531 eV ve $2{,}02\times10^5$ iken, tavlama sonrasında bu değerler 1,203 eV ve 2,12'ye düşmüştür. Bu değişim, MoO_3 tabakasının tavlama sırasında oksijen kaybederek stokiyometri-altı MoO_{3-x} bileşimine dönüşmesi ve MoO_3/SiC arayüzünde ek elektronik durumların oluşması ile ilişkilendirilebilir. Oluşan oksijen boşlukları ve arayüz durumları, etkin bariyer yüksekliğinin azalmasına ve tuzak destekli taşıyıcı taşınımının artmasına katkıda bulunarak doğrultucu davranışın büyük ölçüde zayıflamasına neden olmuştur.

Buna karşılık *p*-MoO_3/*n*-GaAs heteroekleminde aynı ısıl işlem doğrultma başarımını iyileştirmiş; seri direnç yaklaşık %88 azalırken doğrultma oranı yaklaşık yirmi kat artmıştır. *p*-MoO_3/*n*-InP yapısında ise seri direnç azalmasına karşın idealite faktörünün bozulduğu ara bir sonuç gözlenmiş; *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtında ise her iki parametre de sınırlı ölçüde değişmiştir. Bu eğilim, söz konusu malzeme sistemlerinde arayüz tuzaklarının giderilmesi ile tuzakların ısıl etkinleşmesi arasında birbiriyle rekabet eden süreçlerle tutarlıdır. Tamamlayıcı dielektrik analizler, *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroekleminin frekansa bağlı tepkisinin Debye dışı gevşeme, arayüz polarizasyonu ve AC atlama (hopping) iletkenliği ile ilişkili olduğunu; bu davranışların ise arayüz durum yoğunluğu ve enerji dağılımından önemli ölçüde etkilendiğini göstermektedir.

Sonuç olarak elde edilen bulgular, yarıiletken alt tabakanın yalnızca mekanik bir taşıyıcı olmadığını, aynı zamanda MoO_3 tabanlı heteroeklemlerde arayüzel termodinamik süreçleri belirleyen temel bileşenlerden biri olduğunu göstermektedir. Ayrıca yarıiletken alt tabakanın, arayüz kusur kimyasını, yük taşınım mekanizmalarını ve dielektrik gevşeme davranışını belirleyen etkin bir parametre olduğu ortaya konmuştur. Bu alt tabakaya bağlı tavlama yaklaşımı, MoO_3 tabanlı güç elektroniği ve optoelektronik aygıtların gelecekteki tasarımına yönelik önemli çıkarımlar sunmaktadır.

4.2 Hassas Metroloji için Otomatik SEM Görüntü İşleme

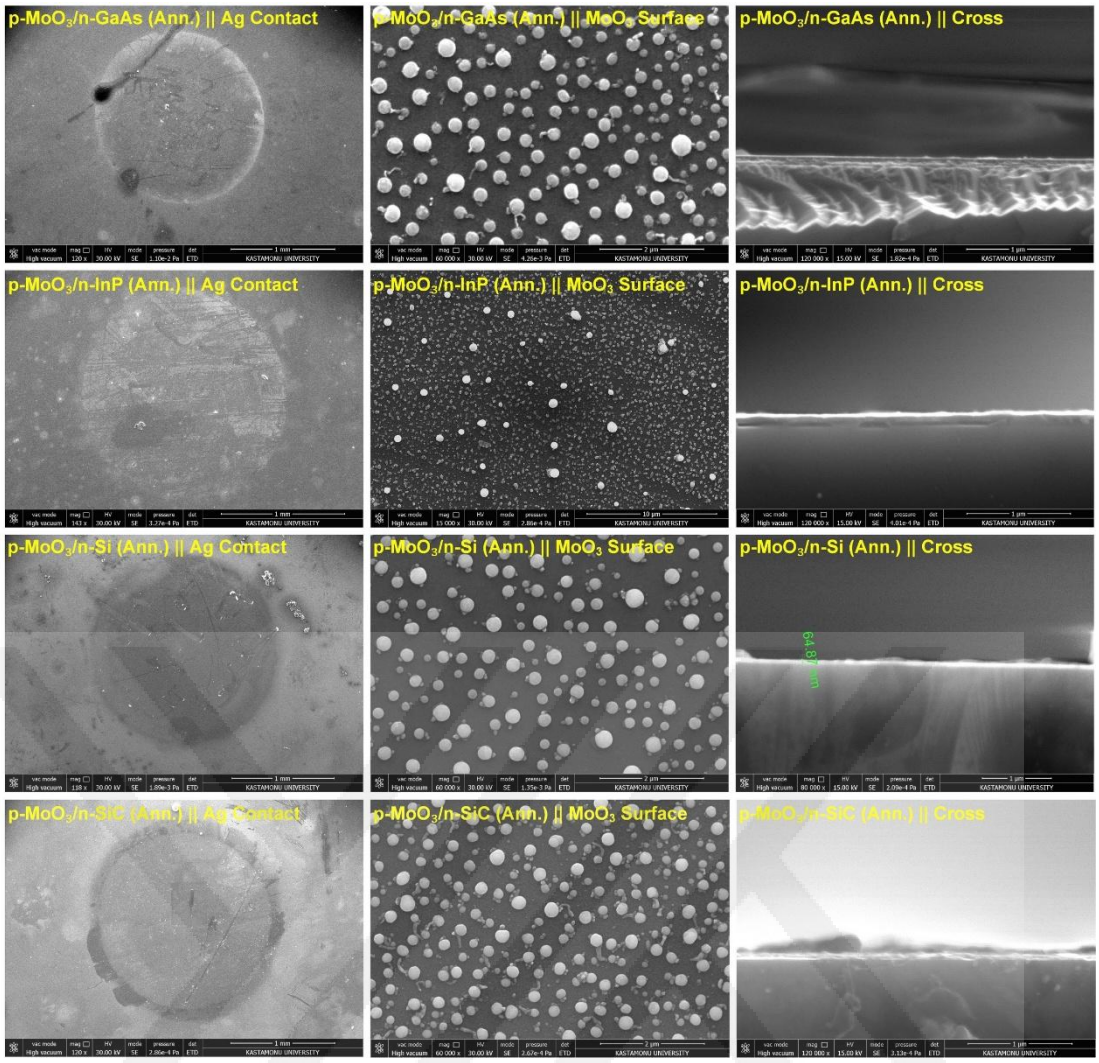
4.2.1 *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Aygıtların Niteliksel SEM Karakterizasyonu

p-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtların morfolojik özellikleri, hem tavlanmış hem de tavlanmamış koşullar altında dört farklı yarıiletken alt tabaka (Si, SiC, InP ve GaAs) üzerinde SEM kullanılarak sistematik olarak incelenmiştir. Bu alt bölümde, Bölüm 3.2'de açıklanan görüntüleme protokolüyle elde edilen SEM görüntüleri önce niteliksel olarak değerlendirilmekte; aynı görüntüler üzerinden yürütülen nicel metroloji sonuçları ise izleyen alt bölümlerde (Bölüm 4.2.2–4.2.4) sunulmaktadır. Aygıtlar, *n*-tipi yarıiletken alt tabaka, *p*-tipi molibden trioksit tabakası ve dairesel gümüş kontaklardan oluşan ve etkili *p*-*n* heteroeklemler oluşturan üç katmanlı bir mimariye sahiptir.

Her aygıt, Ag kontakların üstten görüntülenmesi, MoO_3 tabakasının yüzey morfolojisi analizi ve tabaka bütünlüğü ile arayüz kalitesini değerlendirmek için kesit incelemesi olmak üzere üç ölçüm konfigürasyonu aracılığıyla kapsamlı bir şekilde karakterize edilmiştir. Şekil 4.7, ısıl işlem görmüş aygıtların SEM karakterizasyonunu göstermekte ve tüm alt tabakalarda tavlamaya bağlı morfolojik değişimleri ortaya koymaktadır.

Tavlanmış gümüş kontaklar, iyi tanımlanmış dairesel geometrilerle birlikte daha iyi kenar tanımlaması ve homojenlik sergilemektedir. MoO_3 yüzey morfolojisi, tüm yarıiletken alt tabakalar üzerinde tekdüze ve özdeş olan minik nanoparçacıkların oluşumu ile karakterize edilmektedir. Si, SiC, InP veya GaAs üzerinde, kaplamalar oldukça iyi bir yüzey kaplaması, homojen bir dağılım ve nano ölçekte alt tabakadan bağımsız büyüme davranışı sergilemektedir.

Kesit incelemesi, nominal olarak yaklaşık 50 nm hedeflenen ve Bölüm 4.2.4'te nicel olarak 37–72 nm aralığında ölçülen (Tablo 4.7) MoO_3 kalınlığı ile net bir tabaka sınırlaması, SEM çözünürlüğünde belirgin karşılıklı difüzyon izine rastlanmayan kabul edilebilir arayüz kalitesi ve ölçülen tüm konumlarda tutarlı tabaka gelişimi ortaya koymaktadır.

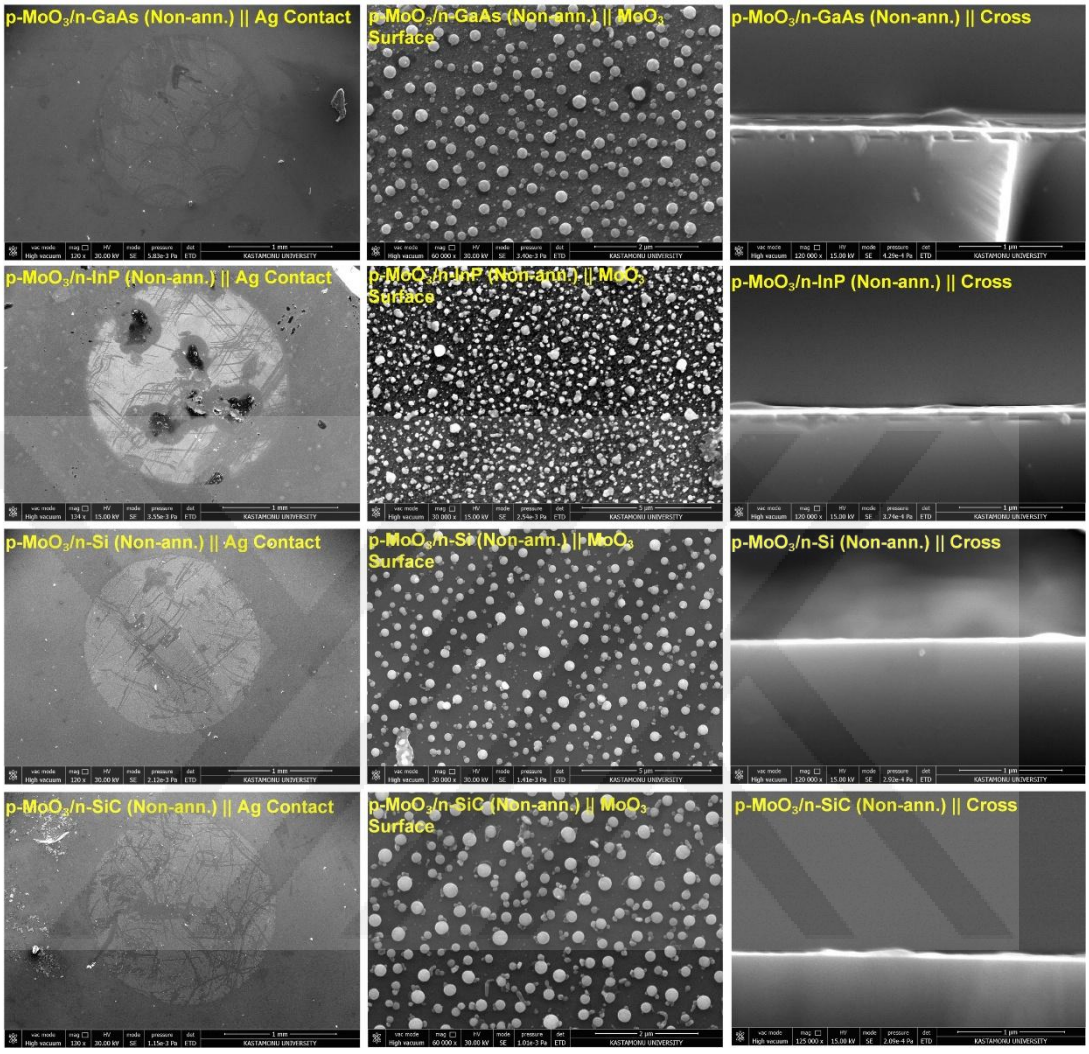


Şekil 4.7 Tavlanmış *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtların SEM görüntüleri. Şekil, dört yarıiletken alt tabaka üzerinde karşılaştırmalı morfolojik analizi göstermektedir: GaAs (satır 1), InP (satır 2), Si (satır 3) ve SiC (satır 4)

Isıl işlem görmemiş, tavlanmamış aygıtların morfolojik özellikleri, önemli bir referans karşılaştırması sunan Şekil 4.8'de gösterilmiştir. SiC ve GaAs tabanlı aygıtlarda, tavlanmamış gümüş kontaklar düzensiz oluşumlar ve daha az belirgin sınırlar sergilemektedir.

MoO_3 yüzeyleri farklı nanoyapısal özellikler sergilemektedir: Si alt tabakaları, küçük ve sık dağılmış parçacıklardan oluşan nispeten pürüzsüz yüzeyler sergilemekte ve tavlanmamış seri içinde en yüksek parçacık yoğunluğuna ulaşmaktadır; SiC, geniş bir boyut dağılımına sahip orta düzeyde bir parçacık yoğunluğu göstermektedir; InP ise en düşük ve en düzensiz parçacık kaplamasına sahiptir; GaAs ise Si'ye benzer özelliklere sahiptir, ancak parçacıkları biraz daha büyüktür. Bu niteliksel gözlemlerin

nicel karşılıkları Bölüm 4.2.3'te (Tablo 4.6) verilmektedir. Tüm alt tabakalar, kesit olarak incelendiğinde keskin arayüzlere sahip temiz, iyi tanımlanmış katmanlar sergilemektedir, ancak ara sıra arayüz seviyelerinde yüzey pürüzlülüğü görülmektedir.



Şekil 4.8 Temel karşılaştırma için tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtların SEM görüntüleri. Şekil, aynı dört yarıiletken alt tabaka üzerinde tavlanmamış aygıt morfolojisini göstermektedir: GaAs (satır 1), InP (satır 2), Si (satır 3) ve SiC (satır 4)

Isıl işlemin aygıt morfolojisi üzerindeki etkileri, tavlanmış ve tavlanmamış aygıtların karşılaştırılmasıyla açıkça gösterilmektedir. Ag/MoO_3 arayüzündeki kontak oluşumunda, MoO_3 tabakasındaki parçacık büyümesi ve düzenlenmesinde, arayüz tanımının keskinleşmesi yoluyla tabaka homojenliğinde ve genel nanoyapısal görünümde gözlenen değişimler tavlamayla ilişkilidir. Yarıiletken alt tabakaların morfolojik tepkileri önemli ölçüde farklılık göstermektedir: galyum arsenit, iyi bir homojenlikle ara özellikler sergilerken; indiyum fosfür, tavlama sonrasında en büyük

parçacık yoğunluğu değişimini göstermekte; silisyum karbür ve silisyum üzerinde ise parçacıkların birleşerek irileştiği bir yeniden düzenlenme gözlenmektedir (bkz. Bölüm 4.2.3, Tablo 4.6). *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtların yüzey morfolojisi, test edilen tüm alt tabakalarda ısıl tavlamayla belirgin biçimde değişmiştir. Ancak bu değişimin yönü ve aygıt başarımına yansıması alt tabakaya göre farklılaşmaktadır: Bölüm 4.2.3'teki nicel çözümleme, parçacık yoğunluğunun Si ve SiC üzerinde azalıp GaAs ve InP üzerinde arttığını; Bölüm 4.1 ve Bölüm 4.3'teki elektriksel ve optoelektronik sonuçlar ise aynı ısıl işlemin GaAs aygıtında iyileştirici, SiC ve InP aygıtlarında ise bozucu etki yaptığını ortaya koymaktadır. Bu sistematik SEM gözlemleri, yapı–işleme ilişkileri için niteliksel bir çerçeve sunmakta; ilgili nicel değerlendirme izleyen alt bölümlerde (Bölüm 4.2.2–4.2.4) yapılmaktadır.

4.2.2 Kontak Analizi

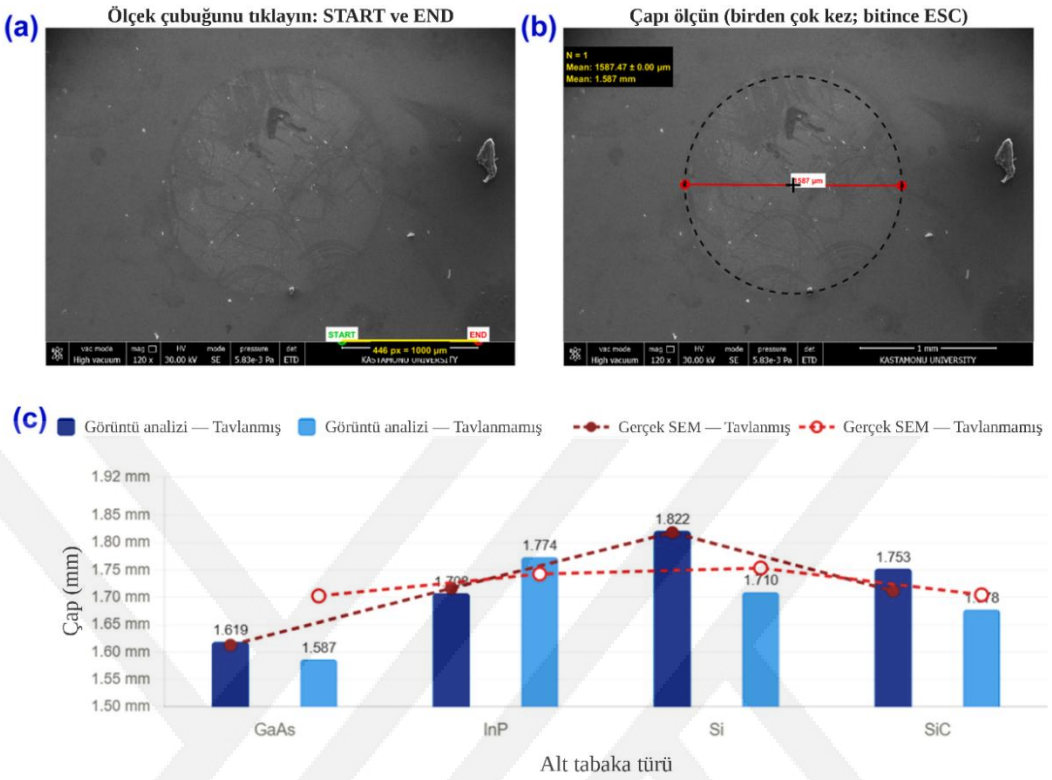
Gümüş kontak geometrilerinin nicel analizine göre (Şekil 4.9), tüm alt tabaka türleri ve ısıl işlem koşulları nispeten tekdüze kontak boyutları sergilemektedir. 1,59 mm ile 1,82 mm (Tablo 4.5) arasında değişen kontak çapları, üretim sırasında kullanılan nokta maskesi tekniğinin tutarlı bir biriktirme kontrolü sağladığını göstermektedir. Kalibre edilmiş ölçek faktörü kullanılarak, gözlemlenen piksel mesafesinden kontak çapı $D_{contact}$ belirlenmiştir. Ölçüm işlemi sırasında iki aşamalı bir kalibrasyon tekniği kullanılmıştır. İlk olarak, gözlemlenen piksel mesafesi d_{pixel} ve bilinen ölçek çubuğu uzunluğu L_{scale} kullanılarak, ölçek çubuğu piksel-mikrometre dönüştürme faktörü (μm/piksel) Denklem (4.13) kullanılarak hesaplanmıştır:

$$\mu m/pixel \; = \; L_{scale}/d_{pixel} \tag{4.13}$$

Ardından, denklem (4.14) uyarınca dairesel bir geometri varsayımıyla ölçülen piksel alanı A_{pixel}'den kontak çapı hesaplanmıştır:

$$D_{contact} = 2 \times \sqrt{A_{pixel}/\pi} \times (\mu m/pixel) \tag{4.14}$$

Tavlanmış ve tavlanmamış numuneler arasında gözlenen farklılıklar, yarı otomatik görüntü analizi protokolünün ölçüm hassasiyeti sınırları içinde sınırlı varyasyonlar sergilemektedir.



Şekil 4.9 Ag kontak çapı karakterizasyonu ve karşılaştırmalı analiz. (a) Ölçek çubuğu kalibrasyonu, (b) Kontak çapı ölçümü (kırmızı çizgi: çap, siyah kesikli daire: kontak sınırı), (c) Dört alt tabakada kontak çapı: sütunlar görüntü analizi (lacivert tavlanmış, açık mavi tavlanmamış), kesikli çizgiler gerçek SEM ölçümü (koyu kırmızı tavlanmış, kırmızı tavlanmamış)

p-MoO_3/*n*-GaAs tavlanmamış aygıtı için, ölçek çubuğu kalibrasyonu (Şekil 4.9a) ve dairesel kontak sınırının belirlenmesini (Şekil 4.9b) içeren temsili bir ölçüm iş akışı sunulmaktadır. İki grup arasında belirlenen çap farkları (Si: 112 µm, SiC: 75 µm, InP: 66 µm ve GaAs: 32 µm), yaklaşık %2–7 aralığındaki değişimlere karşılık gelmektedir. Ag üst kontaklar 200°C'de 1 saat süreyle uygulanan tavlama işleminden sonra biriktirildiğinden ve omik davranışın sağlanması için uygulanan 600°C'de 1 dakikalık ısıl işlem her iki gruba da aynı biçimde uygulandığından, bu farklılıklar ısıl işlemle ilişkilendirilememektedir. Söz konusu değişimlerin, nokta maskesiyle biriktirme sırasındaki geometrik saçılmadan ve ölçüm belirsizliğinden kaynaklandığı değerlendirilmektedir (Şekil 4.9c).

Nokta maske yöntemiyle gerçekleştirilen biriktirme işlemi, farklı alt tabakalarda çapları 1,59–1,82 mm ve kontak alanları 1,98–2,61 mm² arasında değişen dairesel kontakların yüksek tekrarlanabilirlikle üretilmesini sağlamıştır. Kontak boyutlarındaki bu yüksek tutarlılık, *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtların elektriksel karakterizasyonunun karşılaştırılabilirliğini artırmakta ve aygıtlar arası başarım değerlendirmelerinin güvenilirliğini desteklemektedir. Algoritma tabanlı ölçüm sonuçları, manuel SEM ölçümleriyle yüksek düzeyde uyum göstermiştir: sekiz numunenin yedisinde sapma %2,6'nın altında kalmış, yalnızca *p*-MoO_3/*n*-GaAs tavlanmamış numunesinde %6,8'e ulaşmıştır (Tablo 4.5).

Tablo 4.5 *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtlar için Ag kontak çapı ve alan ölçümleri

Aygıt Türü	Görüntü İşleme Çapı (mm)	Gerçek SEM Çapı (mm)	Alan(mm²)
GaAs-Tavlanmış	1,62	1,61	2,06
GaAs-Tavlanmamış	1,59	1,70	1,98
InP-Tavlanmış	1,71	1,72	2,29
InP-Tavlanmamış	1,77	1,74	2,47
Si-Tavlanmış	1,82	1,82	2,61
Si-Tavlanmamış	1,71	1,75	2,30
SiC-Tavlanmış	1,75	1,71	2,42
SiC-Tavlanmamış	1,68	1,71	2,21

Bu sonuçlar, geliştirilen yarı otomatik görüntü analiz protokolünün doğruluğunu ve güvenilirliğini ortaya koymakla birlikte, söz konusu tek sapma, kontak sınırının düşük kontrastlı olduğu görüntülerde manuel doğrulamanın gerekliliğine işaret etmektedir.

4.2.3 MoO_3 Yüzey Analizi

MoO_3 yüzey morfolojisinin nicel incelemesi, farklı aygıt konfigürasyonlarında yaklaşık 23 ile 102 parçacık/µm² arasında değişen, alt tabakaya bağlı belirgin parçacık yoğunluğu farklılıkları ortaya koymaktadır (Şekil 4.10, Tablo 4.6). Otomatik parçacık algılama (Şekil 4.10c), ilgi bölgesi seçimi (Şekil 4.10b) ve ölçek çubuğu kalibrasyonundan (Şekil 4.10a) oluşan *p*-MoO_3/*n*-InP tavlanmış aygıt için temsili prosedür, parçacık nicelleştirme için kullanılan metodik tekniği göstermektedir. Tüm

alt tabakalar karşılaştırıldığında (Şekil 4.10d), alt tabaka türüne bağlı olarak büyük ölçüde değişen termal tavlama tepkileri görülmektedir.

İdeal eşiği elde etmek için sınıf içi varyasyonu en aza indiren Otsu eşikleme yöntemi, parçacık yoğunluğu nicelemesinde kullanılmaktadır. Eşik *t*, sınıflar arası varyansı en üst düzeye çıkaracak şekilde seçilir; bu, Denklem (4.15)'e göre (Otsu, 1979) ağırlıklı sınıf içi varyansı σ_w^2'yi en aza indirmeye eşdeğerdir:

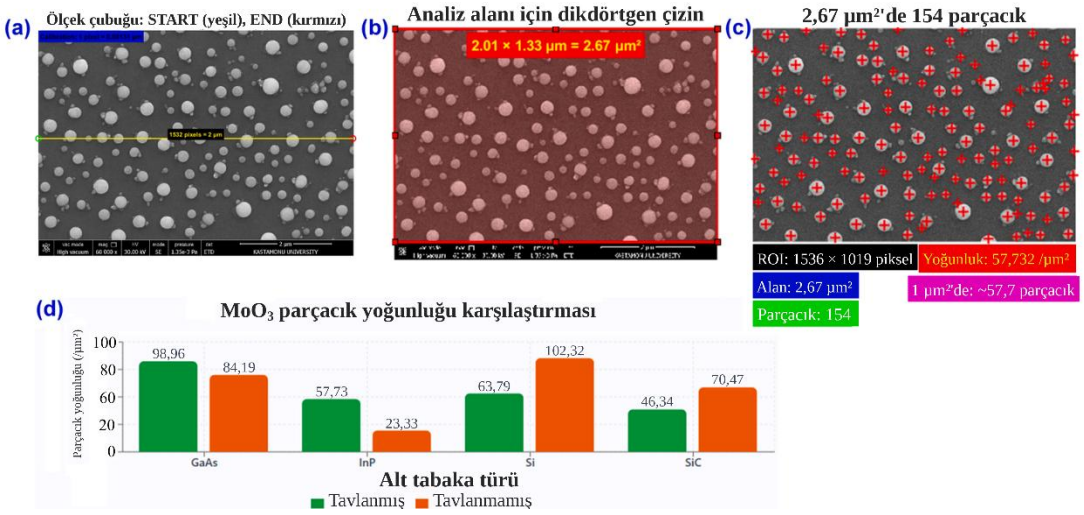
$$\sigma_w^2(t) = \omega_0(t)\sigma_0^2(t) + \omega_1(t)\sigma_1^2(t) \tag{4.15}$$

Burada $\omega_0(t)$ ve $\omega_1(t)$ sırasıyla arka plan ve ön plan sınıflarının olasılıklarını, $\sigma_0^2(t)$ ve $\sigma_1^2(t)$ ise bunlara karşılık gelen varyansları göstermektedir. İkileme işleminin ardından, bağlantılı bileşen etiketleme tek tek parçacıkları tanımlar ve parçacık yoğunluğu $\rho_{particles}$ Denklem (4.16) uyarınca hesaplanır:

$$\rho_{particles} = N_{detected} / \left(A_{analyzed} \times (\mu m/pixel)^2\right) \tag{4.16}$$

burada $N_{detected}$, bağlantılı bileşen etiketleme ile tanımlanan toplam parçacık sayısıdır ve $A_{analyzed}$, analiz edilen ilgi bölgesinin kare piksel cinsinden büyüklüğüdür. Otsu eşikleme yaklaşımı, nanomalzeme karakterizasyonunda parçacık segmentasyonu için kapsamlı bir şekilde doğrulanmıştır (Cao vd., 2019; Zhan ve Zhang, 2019) ve termal olarak işlenmiş metal oksit filmler için tipik olan değişken görüntü kontrast koşulları ve parçacık boyutu dağılımları arasında sağlamlık sergilemiştir.

Şekil 4.10(d)'de verilen parçacık yoğunluğu değerleri, 200 °C'de 1 saat süreyle uygulanan termal tavlamanın etkisinin alt tabaka türüne bağlı olarak değiştiğini göstermektedir. InP alt tabakası üzerinde parçacık yoğunluğu yaklaşık 23 parçacık/µm²'den 58 parçacık/µm²'ye yükselmiş, yani 2,5 katına çıkmıştır (≈ +147 %). Buna karşılık, Si alt tabakasında yaklaşık 102'den 64 parçacık/µm²'ye (≈ −38 %), SiC alt tabakasında 70'ten 46 parçacık/µm²'ye (≈ −34 %) azalma belirlenmiştir. GaAs alt tabakasında ise yaklaşık 84'ten 99 parçacık/µm²'ye ılımlı bir artış (≈ +18 %) gözlenmiştir.



Şekil 4.10 MoO_3 parçacık yoğunluğu iş akışı ve karşılaştırmalı analiz. (a) *p*-MoO_3/*n*-InP tavlanmış aygıt örneğinde ölçek kalibrasyonu, (b) ilgi bölgesi (ROI) seçimi (kırmızı kaplama, 2,67 µm²), (c) 154 parçacığın otomatik olarak tespit edilmesi (kırmızı çarpı işaretleri, yoğunluk: 58 parçacık/µm²), (d) Tavlanmış (yeşil) ve tavlanmamış (turuncu) koşullar için dört farklı alt tabaka üzerinde parçacık yoğunluğu karşılaştırması

Gözlenen bu farklılıklar, tavlama sırasında birbiriyle rekabet eden iki temel mekanizma ile ilişkilendirilebilir: yeni çekirdeklenme bölgelerinin oluşumu ve mevcut parçacıkların yüzey difüzyonu yoluyla birleşmesi (coalescence). InP alt tabakasında belirlenen belirgin artış, tavlamanın yeni çekirdeklenme bölgelerinin oluşumunu desteklediğine işaret etmektedir. Buna karşılık, Si ve SiC alt tabakalarında gözlenen parçacık yoğunluğu azalması, küçük parçacıkların birleşerek daha büyük yapılar oluşturduğu birleşme mekanizmasıyla uyumludur. Bu mekanizmada parçacık sayısının azalması, ortalama parçacık çapının artması ve toplam yüzey kaplama oranının yaklaşık olarak korunması beklenmektedir. GaAs alt tabakasında gözlenen ılımlı artış ise büyüme ve birleşme süreçlerinin büyük ölçüde dengede olduğu bir davranışla tutarlıdır. Bununla birlikte, yalnızca parçacık yoğunluğu verileri bu mekanizmaları kesin olarak birbirinden ayırt etmek için yeterli değildir. Bu yorumların doğrudan sınanabilmesi için aynı SEM görüntülerinden parçacık boyut dağılımı ve yüzey kaplama oranının da nicel olarak belirlenmesi gerekmektedir. Ayrıca InP ve SiC için elde edilen sonuçlar, aşağıda ayrıntılandırıldığı üzere farklı alan ölçeklerinde ölçülmüş olmaları nedeniyle daha temkinli değerlendirilmelidir.

Sonuçlar değerlendirilirken üç sınırlamanın göz önünde bulundurulması gerekmektedir. Birincisi, parçacık yoğunluğu her deney koşulu için yalnızca tek bir ilgi bölgesinden (ROI) hesaplandığından ölçümlere ilişkin istatistiksel dağılım veya

belirsizlik değerlendirilememektedir. Bu durum, özellikle küçük farkların ölçüm saçılımından ayırt edilmesini güçleştirmektedir; örneğin GaAs alt tabakası için belirlenen yaklaşık %18'lik artış, tek başına belirli bir mekanizma için kanıt oluşturmamaktadır. İkincisi, parçacık algılama duyarlılığı görüntünün büyütme düzeyine bağlıdır; Tablo 4.6'da görüldüğü üzere analiz alanları 2,66 μm² ile 66,43 μm² arasında değişmektedir.

Tablo 4.6 *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtlar için MoO_3 parçacık yoğunluğu analizi sonuçları

Aygıt türü	Analiz alanı (μm²)	Toplam parçacık	Parçacık yoğunluğu (parçacık/μm²)	Değişim (%)
GaAs-Tavlanmamış	2,66	224	84	**+18**
GaAs-Tavlanmış	2,70	267	99	
InP-Tavlanmamış	16,72	390	23	**+147**
InP-Tavlanmış	2,67	154	58	
Si-Tavlanmamış	2,69	275	102	**−38**
Si-Tavlanmış	2,68	171	64	
SiC-Tavlanmamış	16,69	1176	70	**−34**
SiC-Tavlanmış	66,43	3078	46	

Düşük büyütmeli görüntülerde çok küçük yüzey oluşumları algılanamayabilirken, yüksek büyütmeli görüntüler bu oluşumların belirlenmesini kolaylaştırarak hesaplanan parçacık yoğunluğunu artırabilmektedir. Üçüncüsü, kullanılan Otsu eşikleme yöntemi her görüntünün gri seviye histogramına göre uyarlanmış bir eşik değeri belirlediğinden, eşik değeri görüntüler arasında farklılık gösterebilmektedir. Bu nedenle burada sunulan yüzde değişimler mutlak nicel büyüklükler olarak değil, farklı alt tabakalarda gözlenen eğilimleri ortaya koyan karşılaştırmalı göstergeler olarak değerlendirilmelidir.

Tablo 4.6'da parçacık yoğunluğu, toplam parçacık sayısının analiz alanına oranı olarak hesaplanmış; değişim sütunu tavlanmamış durumdan tavlanmış duruma yüzde değişimi göstermektedir. Tabloda verilen analiz koşulları, ölçek farkının karşılaştırmaları ne ölçüde etkileyebileceğini de göstermektedir. Ölçümlerin beşi, kusur ve kirlenmeden arındırılmış homojen bölgeler seçilerek küçük ilgi bölgeleri (2,66–2,70 μm²) üzerinde gerçekleştirilmiş; SiC-tavlanmamış (16,69 μm²), InP-

tavlanmamış (16,72 μm²) ve SiC-tavlanmış (66,43 μm²) ölçümleri ise daha geniş alanlar üzerinde yapılmıştır. Buna göre karşılaştırılan tavlanmış–tavlanmamış çiftlerinden Si (2,68/2,69 μm²) ve GaAs (2,70/2,66 μm²) aynı alan ölçeğinde elde edilmişken, SiC (66,43/16,69 μm²) ve InP (2,67/16,72 μm²) çiftlerinde alanlar sırasıyla yaklaşık dört ve altı kat farklılaşmaktadır. Alan farkının kendisi birim alan başına yoğunluğa geçilerek giderilebilmekte; ancak ölçek farkının parçacık algılama duyarlılığı üzerindeki etkisi bu normalizasyonla giderilememektedir. Nitekim 2,67 μm²'lik ilgi bölgesinde bir piksel yaklaşık 1,3 nm'ye karşılık gelirken, 66,43 μm²'lik bölgede bu değer yaklaşık 6,5 nm'ye çıkmakta; uygulanan 20 nm'lik en küçük parçacık boyutu eşiği ilk durumda yaklaşık 15 piksellik, ikinci durumda ise yalnızca 3 piksellik nesnelere karşılık gelmektedir. Bu nedenle geniş alanda ölçülen numunelerde en küçük parçacıkların bir bölümünün algılanamamış ve buna bağlı olarak yoğunluğun sistematik biçimde düşük belirlenmiş olması olasıdır. Olası yanlılığın yönü, InP'de tavlanmamış numunenin, SiC'de ise tavlanmış numunenin daha geniş alanda ölçülmüş olması nedeniyle her iki durumda da gözlenen değişimin yönüyle aynı doğrultudadır; dolayısıyla bu iki alt tabaka için belirlenen yüzde değişimlerin büyüklüğü olduğundan yüksek görünüyor olabilir. Buna karşılık InP'de ölçülen değişimin büyüklüğü (2,5 kat), yalnızca algılama farkıyla açıklanamayacak ölçüdedir. Otomatik görüntü segmentasyonu protokolünde, gürültü ve görüntü kusurlarının etkisini azaltmak amacıyla 20 nm'lik en küçük parçacık boyutu eşiğiyle morfolojik filtreleme uygulanmıştır.

Alt tabakaya özgü bu morfolojik tepkiler, MoO_3 film özellikleri, yarıiletken yüzey kimyası ve termal işlem koşullarının birlikte belirleyici olduğuna işaret etmektedir. Sonuç olarak, termal tavlamanın MoO_3 parçacık morfolojisi üzerindeki etkisinin alt tabakaya bağlı olarak farklılaştığı, eşleşmiş alan ölçeğinde gerçekleştirilen Si ve GaAs ölçümleriyle ortaya konmuştur: Si üzerinde parçacık birleşmesinin baskın olduğu, GaAs üzerinde ise büyüme ve birleşme süreçlerinin dengelendiği bir davranış belirlenmiştir. InP ve SiC için elde edilen sonuçlar bu tabloyu desteklemekle birlikte, farklı alan ölçeklerinde ölçülmüş olmaları nedeniyle nicel değil niteliksel göstergeler olarak değerlendirilmelidir; alt tabakalar arasındaki mutlak yoğunluk karşılaştırmaları da aynı nedenle sınırlı geçerliliğe sahiptir. Bu bulguların kesinleştirilmesi için tüm numunelerin aynı büyütme düzeyinde ve birden fazla ilgi bölgesinde yeniden

görüntülenmesi; ayrıca parçacık boyut dağılımı ile toplam yüzey kaplama oranının nicel olarak belirlenerek birleşme mekanizmasının doğrudan sınanması önerilmektedir.

4.2.4 Katman Kalınlığının Nicel Analizi

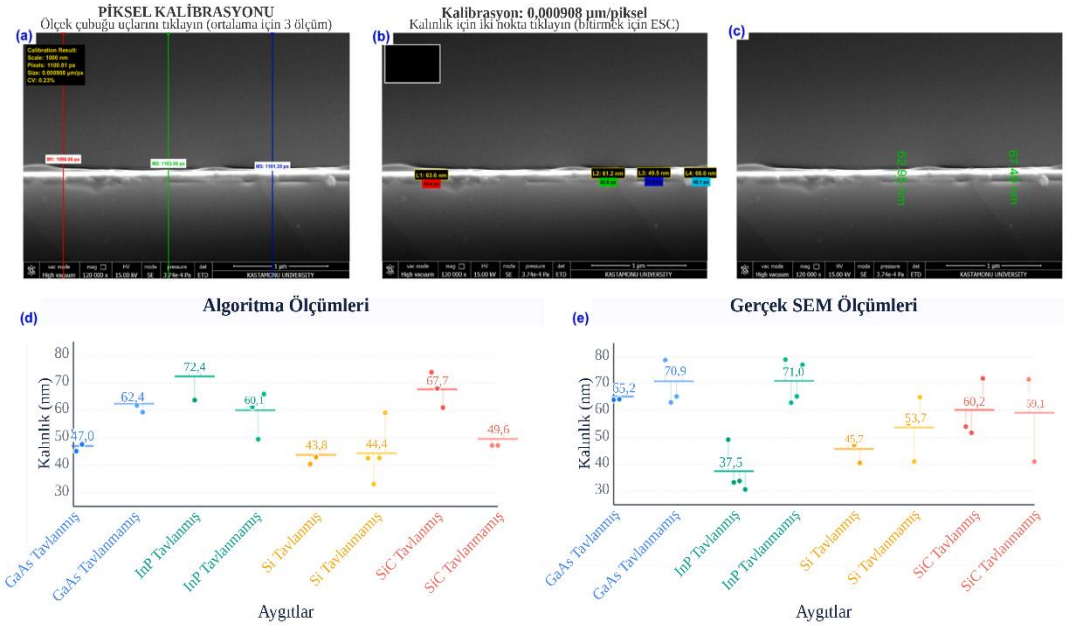
Nicel analiz sonuçlarının gösterildiği Tablo 4.7 ve Şekil 4.11'e göre, farklı aygıt konfigürasyonlarında MoO_3 katman kalınlığı alt tabaka türüne bağlı olarak 37 nm ile 72 nm arasında değişmektedir (algoritma: 44–72 nm; manuel referans: 37–71 nm).

Tablo 4.7 Algoritma tabanlı ve gerçek SEM katman kalınlığı ölçümlerinin karşılaştırmalı analizi (değerler, cihaz çözünürlüğü ve ölçüm saçılımı dikkate alınarak en yakın nanometreye yuvarlanmıştır; bağıl farklar yuvarlanmamış ölçümlerden hesaplanmıştır)

Aygıt	Algoritma Ortalaması (nm)	Gerçek SEM Ortalaması (nm)	Fark(nm)	Bağıl Fark
GaAs-Tavlanmış	47	65	-18	-%28
GaAs-Tavlanmamış	62	71	-9	-%12
InP-Tavlanmış	72	37	+35	+%93
InP-Tavlanmamış	60	71	-11	-%15
Si-Tavlanmış	44	46	-2	-%4
Si-Tavlanmamış	44	54	-10	-%17
SiC-Tavlanmış	68	60	+8	+%12
SiC-Tavlanmamış	50	59	-9	-%16

Hassasiyet doğrulaması için üçlü nokta kalibrasyonu (Şekil 4.11a), film boyunca çok noktalı kalınlık değerlendirmeleri (Şekil 4.11b) ve çoklu ölçümler yoluyla tekrarlanabilirlik değerlendirmesi (Şekil 4.11c) dahil olmak üzere sistematik ölçüm protokolü, *p*-MoO_3/*n*-InP tavlanmamış aygıtın temsili bir kesit analizi ile gösterilmiştir.

Otomatik ölçüm yöntemi, sekiz aygıt türünün tümünde algoritmik ve gerçek SEM okumaları karşılaştırılarak titizlikle doğrulanmıştır (Şekil 4.11d). Katman kalınlığı değerlendirmesindeki sistematik hataları en aza indirmek için üç nokta ölçüm tekniği kullanılmıştır.



Şekil 4.11 Kesitsel tabaka kalınlığı analizi ve algoritma ile gerçek SEM ölçümünün karşılaştırması. (a-c) *p*-MoO_3/*n*-InP tavlanmamış aygıtta üçlü kalibrasyon ve çok noktalı ölçüm örnekleri, (d) Algoritma tabanlı kalınlık ölçümleri (renkli daireler: tek tek veriler, yatay çizgi: ortalama), (e) Gerçek SEM ölçümleri

Her ölçüm konumu için kalınlık, Denklem (4.17)'ye göre katman arayüzüne dik olarak ölçülen piksel mesafesi d_{pixel}'den hesaplanır:

$$t_{raw} = d_{pixel} \times (\mu m/pixel) \times 1000 \tag{4.17}$$

$$t_{layer} = t_{raw} \times C_{thickness} \times C_{material} \tag{4.18}$$

Burada Denklem (4.17)'deki 1000 faktörü, mikrometreleri nanometreye dönüştürür. Denklem (4.18)'de, iki ardışık düzeltme faktörü sistematik ölçüm sapmalarını telafi eder. Kalınlığa bağlı büyütme faktörü $C_{thickness}$, elektron ışınının penetrasyon derinliğini ve kenar etkisi artefaktlarını hesaba katar (kalınlık aralıkları için sırasıyla <50 nm; 50–100 nm; 100–200 nm ve ≥200 nm için ×1,50; 1,35; 1,20 veya 1,12). Aygıta özgü malzeme kontrast faktörü $C_{material}$, atom numarasına bağlı geri saçılma özelliklerini telafi eder ($C_{material}$= 1,08–1,18; alt tabaka bileşimi ve ısıl işleme bağlı olarak). Bu düzeltme faktörleri, çok sayıda aygıt konfigürasyonunda otomatik sonuçları manuel SEM ölçümleriyle karşılaştıran sistematik kalibrasyon yoluyla deneysel olarak belirlenmiştir. Raporlanan nihai kalınlık, katman arayüzü boyunca farklı konumlarda alınan üç bağımsız ölçümün ortalamasıdır; bu ölçümlerin standart

sapması, filmin ölçüm hattı boyunca yerel kalınlık değişkenliğinin bir göstergesi olarak birlikte raporlanır.

Algoritma tabanlı ölçümler, kalınlığa bağlı büyütme faktörlerini ve aygıta özgü malzeme kontrast ayarlamalarını içeren gelişmiş bir düzeltme yaklaşımıyla, kesitsel SEM görüntülemede sistematik ölçüm hatalarını giderir. Film kalınlığı ve alt tabaka bileşimine bağlı olarak elektron ışını penetrasyon derinliği, kenar algılama hassasiyeti ve geri saçılma yoğunluğunda görülen önemli farklılıklar nedeniyle bu ayarlamalar gereklidir. Ölçek çubuğunun üç kez bağımsız olarak ölçülmesine dayanan kalibrasyon tekniği, piksel–mikrometre dönüşüm faktörünün varyasyon katsayısını raporlayarak kalibrasyonun güvenilirliğini denetlenebilir kılar ve ölçek çubuğunun yorumlanmasında operatöre bağlı tutarsızlıkları azaltır.

Her iki ölçüm tekniğinin de kullanıcı girdisine ihtiyaç duyduğunu belirtmek önemlidir: gerçek SEM ölçümleri yalnızca manuel nokta seçimi ve sınır belirlemeye dayanırken, algoritma ölçüm noktalarını ve kalibrasyon standartlarını belirlemek için operatör girdisine ihtiyaç duyar. Operatöre bağımlılık, farklı kullanıcılar tarafından seçilen sınır noktaları veya ölçüm bölgelerindeki farklılıklar nedeniyle, kaydedilen kalınlık değerlerinin rutin olarak yüksek veya düşük olmasına yol açabilir. Algoritmik ve gerçek SEM ölçümleri arasında görülen tutarsızlıklar, çoğunlukla alan seçimi ve kullanıcı tanımlı ölçüm parametrelerindeki farklılıkların yanı sıra algoritmik hassasiyetten kaynaklanır.

Çeşitli alt tabakalar ve ısıl işlemler, algoritmik ve gerçek SEM gözlemleri karşılaştırıldığında farklı tutarlılık düzeyleri sergilemektedir. En yüksek uyum Si-Tavlanmış aygıtta belirlenmiştir (%4; 44 nm'ye karşı 46 nm); bu sonuç, Si ile MoO_3 arasındaki zıt kontrast özelliklerinin kesitsel görüntülemede katman sınırının daha belirgin tanımlanmasını sağlamasıyla açıklanabilir. Buna karşılık Si-Tavlanmamış aygıtta sapma %17'ye (44 nm'ye karşı 54 nm) yükselmektedir; dolayısıyla ölçüm uyumu yalnızca alt tabaka türüne değil, ısıl işlem durumuna da bağlıdır.

GaAs aygıtlarda algoritma, kalınlığı sistematik olarak düşük tahmin etmektedir: GaAs-Tavlanmış aygıtta %28 (47 nm'ye karşı 65 nm), GaAs-Tavlanmamış aygıtta ise

%12 (62 nm'ye karşı 71 nm). Tutarlı biçimde düşük tahmin edilmesi, GaAs alt tabakalarında kenar ve sınır tanımlamada potansiyel zorluklara işaret etmektedir; bu durum, muhtemelen MoO_3/GaAs arayüzündeki pürüzlülüğe veya kontrast farklılıklarına atfedilebilir. SiC alt tabakalarda ise sapmanın yönü değişmektedir: SiC-Tavlanmış aygıtta %12 oranında fazla tahmin (68 nm'ye karşı 60 nm), SiC-Tavlanmamış aygıtta ise %16 oranında düşük tahmin (50 nm'ye karşı 59 nm) belirlenmiştir. Bu durum, ölçüm sapmasının yalnızca alt tabaka türüne değil, ısıl işlem durumuna da bağlı olduğunu göstermektedir.

Yöntem, InP-Tavlanmış aygıtlar için %93 oranında fazla tahmin etmektedir (72 nm'ye karşı 37 nm), bu da en önemli farka yol açmaktadır. Bu dikkate değer fark, ölçüm alanı boyunca tutarsız film kalınlığı, film morfolojisindeki yerel varyasyonlar, algoritmik ve manuel ölçümlerle analiz edilen belirli bölgelerdeki farklılıklar veya InP alt tabakaları için düzeltme faktörlerindeki potansiyel sınırlamalar dahil olmak üzere çeşitli faktörlerden kaynaklanabileceğinden, ek araştırma gerektirmektedir. InP-Tavlanmamış'ın %15 sapma (60 nm algoritma ve 71 nm gerçek SEM) ile tavlanmış varyanta kıyasla belirgin biçimde daha iyi bir uyum göstermesi dikkat çekicidir; bu, tavlanmış varyantta gözlemlenen büyük farklılığın ölçüm konumlarındaki farklardan veya lokalize film tutarsızlıklarından kaynaklanabileceğini düşündürmektedir.

Çoğu aygıt için ölçüm doğruluğu, ortalama değerler etrafındaki veri noktalarının dağılımından da görüldüğü gibi tatmin edici bir tekrarlanabilirlik sergilemektedir (Şekil 4.11d, Şekil 4.11e, Tablo 4.7). Standart sapmalar genellikle 3 ila 10 nm arasında değişmektedir; bu da %5 ila %15'lik bir göreceli hatayı göstermektedir ki bu, nano ölçekli ince film ölçümleri için kabul edilebilir bir değerdir. Her aygıt türü içindeki ölçüm gruplarının tekdüzeliğinden de görüldüğü gibi hem algoritmik hem de manuel teknikler, biriktirilmiş filmlerde mevcut olan doğal kalınlık farklılıklarını etkili bir şekilde yakalamaktadır.

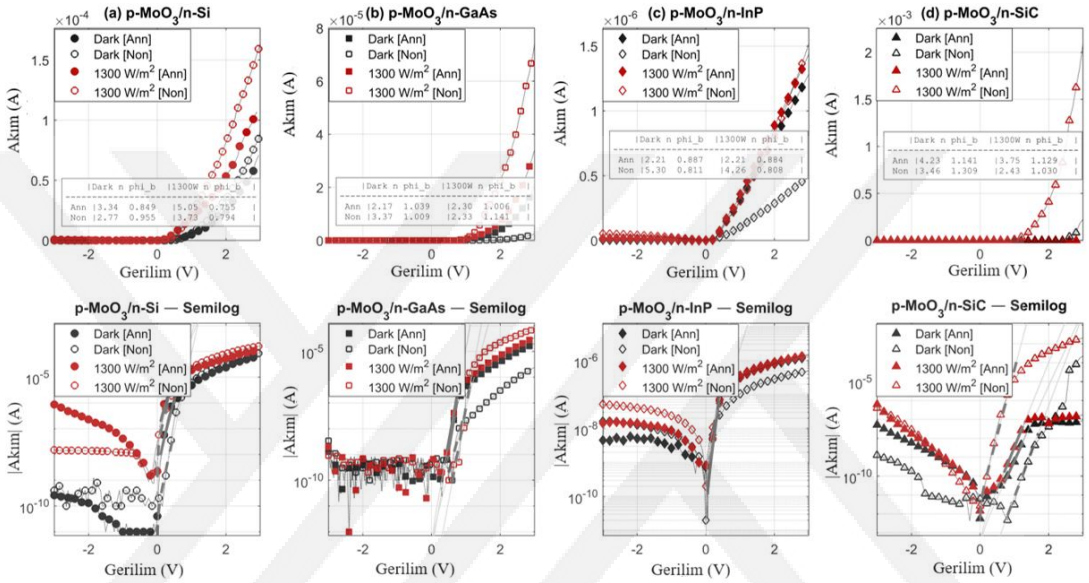
Bu bulgular, otomatik algoritmanın silisyum tabanlı aygıtlar için oldukça iyi performans gösterdiğini ve çoğu alt tabaka türü için doğru kalınlık ölçümleri sunduğunu göstermektedir. Düzeltme faktörlerini iyileştirerek veya alt tabakaya özgü kalibrasyon prosedürleri uygulayarak, bazı alt tabakalarda görülen sistematik

farklılıklar giderilebilir. Alt tabakaya özgü ölçüm zorlukları, özellikle InP-Tavlanmış aygıtlar için dikkatle değerlendirilmelidir; ancak gerçek SEM ölçümlerine göre yapılan doğrulama, otomatik yaklaşımın manuel analize kabul edilebilir ölçüde uyumlu bir doğruluk seviyesini korurken yüksek verimli karakterizasyon için uygun olduğunu göstermektedir. Düzeltme faktörlerinin manuel SEM okumalarına göre kalibre edilmiş olması, otomatik yöntemin doğruluk üstünlüğü değil tekrarlanabilirlik üstünlüğü sağladığı anlamına gelir: yöntem, operatörler ve oturumlar arası dağılımı ortadan kaldırarak ölçümü izlenebilir ve yeniden üretilebilir kılar; mutlak doğruluk ise referans olarak alınan manuel ölçümün doğruluğuyla sınırlıdır.

4.3 *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklemlerine Dayalı Kendinden Beslemeli Görünür-UV Fotodiyotlar

p-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklem fotodiyotlarının (PD'ler) I–V karakteristikleri, termiyonik emisyon (*TE*) teorisi kullanılarak analiz edilir (Cheung ve Cheung, 1986; Nicollian ve Brews, 2002); bu analizden idealite faktörü (n), potansiyel bariyer yüksekliği (Φ_{B0}), doyum akımı (I_0), seri direnç (R_s) ve şönt direnç (R_{sh}) elde edilir. R_s ve R_{sh}, sırasıyla +3 V ve −3 V ön besleme doyum sınırlarında değerlendirilen diferansiyel direnç $Ri = dV/dI$'den belirlenir (Cheung ve Cheung, 1986; Nicollian ve Brews, 2002). Oda sıcaklığında metal-oksit yarıiletken heteroeklemlerdeki birincil taşıma mekanizmasını oluşturan TE teorisine göre, eklem üzerindeki ileri besleme akımı, potansiyel bariyerini aşmak için yeterli termal enerjiye sahip çoğunluk taşıyıcıları tarafından domine edilir. Bu çerçeve; yarı logaritmik ileri I–V grafiğinin kesişim noktası ve eğiminden doğrudan doyum akımı ve bariyer yüksekliği için analitik bir durum sağlar (Nicollian ve Brews, 2002; Zhao vd., 2022). İdeal diyot davranışından sapmayı niceleyen idealite faktörü *n*; heteroeklem arayüzündeki rekombinasyon akımlarının, arayüz durumlarının, seri direnç etkilerinin ve potansiyel bariyer homojenlik bozukluklarının katkılarını yansıtır (Basyooni vd., 2023a; Nicollian ve Brews, 2002). Birden önemli ölçüde büyük *n* değerleri, genellikle arayüz katmanları, tuzak destekli tünelleme veya tükenim bölgesi içindeki oluşum-yeniden birleşme süreçlerini içeren heteroeklem yapılarında gözlemlenir (Basyooni vd., 2023a; Zhao vd., 2022).

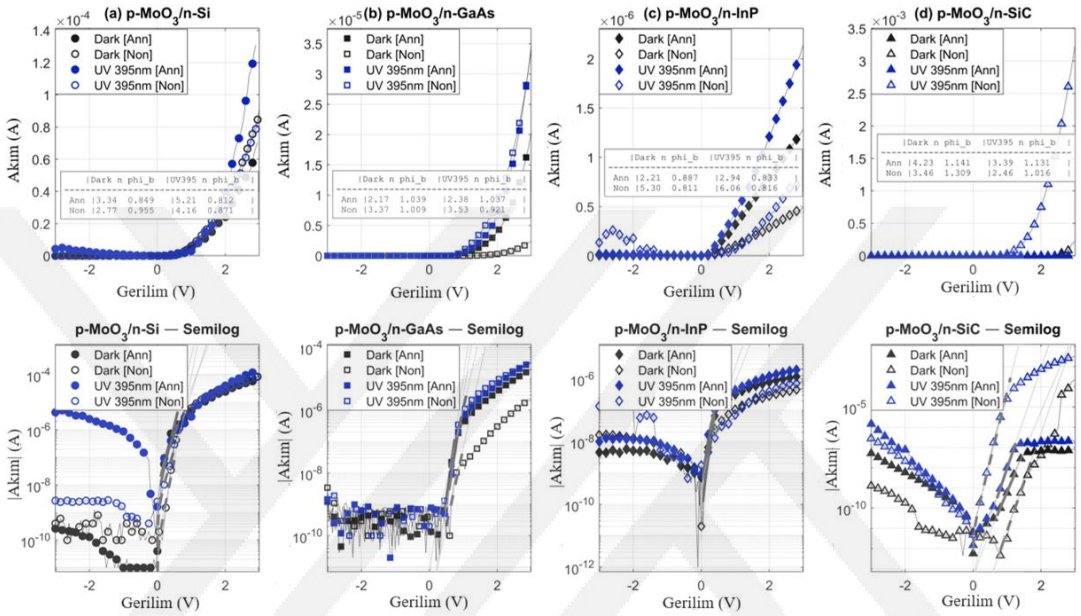
Şekil 4.12; *p*-MoO_3/*n*-Si, -GaAs, -InP ve -SiC heteroeklem PD'lerinin yarı logaritmik I–V karakteristiklerini göstermektedir. Dört aygıtın tümü, hem tavlanmamış hem de tavlanmış konfigürasyonlarda karanlıkta net bir doğrultma davranışı sergilemektedir (Cheung ve Cheung, 1986; Nicollian ve Brews, 2002). 1300 W/m² görünür ışık altında, dört alt tabakanın tümünde hem ileri hem de ters akımlarda sistematik bir artış gözlemlenmiştir; bu, heteroeklem arayüzlerinde foto-üretilen elektron-oyuk çiftlerinin ayrılmasıyla tetiklenen bir fotovoltaik tepkiyi göstermektedir (Nicollian ve Brews, 2002; Zhao vd., 2022).



Şekil 4.12 Karanlık koşullar altında ve görünür ışık aydınlatması (1300 W/m²) altında ölçülen, hem tavlanmamış hem de tavlanmış durumdaki *p*-MoO_3/*n*-Si, *p*-MoO_3/*n*-GaAs, *p*-MoO_3/*n*-InP ve *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtlarının yarı logaritmik I–V karakteristikleri

Fotoakım artışının derecesi dört alt tabaka arasında ve iki konfigürasyon arasında farklılık göstermektedir; bu durum, alt tabaka bant aralığı, arayüz kalitesi ve MoO_3 filminin tavlama kaynaklı modifikasyonlarının etkisini yansıtmaktadır (Nicollian ve Brews, 2002; Zhao vd., 2022). *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtı, geniş bant aralığı (E_g = 3,26 eV) ve düşük iç taşıyıcı konsantrasyonu nedeniyle en büyük karanlık durum doğrultmasını sergilerken; *p*-MoO_3/*n*-GaAs, GaAs'ın doğrudan bant aralığı ($E_g \approx 1,42$ eV) ve buna bağlı yüksek soğurma katsayısı nedeniyle en belirgin görünür aralıkta fotoakım artışı gösterir (Nicollian ve Brews, 2002; Zhao vd., 2022). Her iki konfigürasyon için tam görünür ışık verileri (650–1300 W/m²) Tablo 4.8'de derlenmiştir.

Şekil 4.13; karanlıkta ve 395 nm'lik temsilî dalga boyunda UV aydınlatması altında ölçülen, tavlanmamış ve tavlanmış durumlar için aynı dört *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklem PD'sinin yarı logaritmik I–V karakteristiklerini göstermektedir. UV uyarımı altında, her iki tavlama durumundaki dört alt tabakanın tümü, karanlık duruma kıyasla ters doyum akımında ve ileri fotoakımda belirgin bir artış sergilemektedir; bu da UV tarafından üretilen taşıyıcıların eklem taşınımına önemli ölçüde katkıda bulunduğunu doğrulamaktadır (Basyooni vd., 2023a; Zhao vd., 2022).



Şekil 4.13 Karanlık ve UV ışığı altında (395 nm) tavlanmamış ve tavlanmış durumlarda aynı dört aygıtın yarı logaritmik I–V karakteristikleri

Tavlanmamış numunelerle karşılaştırıldığında; tavlanmış *p*-MoO_3/*n*-Si ve *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtları tavlama sonrasında iyileştirilmiş UV doğrultma davranışı gösterirken, *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtı, tavlamanın neden olduğu arayüz durumlarının yeniden dağılımı ve yerleşik potansiyeldeki değişikliklere atfedilen belirgin şekilde farklı bir UV fotoyanıtı sergilemektedir (Basyooni vd., 2023a; Zaki vd., 2022). *p*-MoO_3/*n*-GaAs aygıtı, UV ışınımı altında hem tavlanmamış hem de tavlanmış durumlarda omik davranışa yaklaşan, zayıf doğrultucu bir I–V profilini korur; bu, MoO_3/GaAs arayüz kalitesinin 200 °C'lik ısıl işlemle önemli ölçüde geri kazanılmadığını gösterir (Basyooni vd., 2023a; Lazar vd., 2023). Her iki tavlama durumu (365 nm ve 395 nm) için eksiksiz UV ışınımı verileri Tablo 4.8'de derlenmiştir ve Denklem (4.19)–(4.21) kullanılarak bu verilerden çıkarılan diyot parametreleri aşağıdaki bölümlerde

tartışılmıştır. Bu UV fotoyanıt özellikleri, literatürde MoO_3 tabanlı heteroeklem fotodedektörleri için bildirilen davranışla tutarlıdır (Çiçek vd., 2022; Lazar vd., 2023; Qi vd., 2024; Vivek vd., 2019; Vivek vd., 2022); Burada UV kaynaklı ters voltaj altında akım artışı hem MoO_3 filminde hem de yarıiletken alt tabakada arayüz tuzağı aracılı fotogenerasyon (photogeneration) ile doğrudan bant-bant geçişlerinin birleşik katkısına atfedilmektedir (Çiçek vd., 2022; Vivek vd., 2022).

Bu birleşimleri karakterize eden elektronik parametreler, termiyonik emisyon (TE) teorisi ve Ohm yasasına dayanan aşağıdaki analitik çerçeve kullanılarak çıkarılmıştır. TE teorisinde, bir arayüz tabakası ve seri direnci R_s olan bir heteroeklemden geçen akım şu şekilde ifade edilir (Cheung ve Cheung, 1986; Nicollian ve Brews, 2002):

$$I = I_0 \left[\exp\left(\frac{q(V-IR_S)}{nkT}\right) - 1\right] \tag{4.19}$$

$$I_0 = AA^*T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_{B0}}{kT}\right) \tag{4.20}$$

Burada q elektron yüküdür ($1{,}6\times10^{-19}$ C); k Boltzmann sabitidir ($1{,}38\times10^{-23}$ J·K^{-1}); V uygulanan voltajdır; IR_s, R_s üzerindeki voltaj düşüşüdür; I_0 ters doyum akımıdır; A = $7{,}85\times10^{-2}$ cm² aktif kontak alanıdır; A^*, etkili Richardson sabitidir ve Si, GaAs, InP ve SiC için sırasıyla 112; 8,16; 9,4 ve 146 A·cm^{-2}·K^{-2} değerlerine sahiptir; n, Denklem (4.19)'dan elde edilen idealite faktörüdür; ve Φ_{B0}, Denklem (4.20)'den elde edilen potansiyel bariyer yüksekliğidir (Cheung ve Cheung, 1986; Nicollian ve Brews, 2002).

İdealite faktörü, yarı logaritmik I–V eğrisinin eğiminden aşağıdaki bağıntıyla hesaplanır (Cheung ve Cheung, 1986):

$$n = \frac{q}{kT} \cdot \frac{d(V-IR_S)}{d(\ln I)} \tag{4.21}$$

Bariyer yüksekliği hesaplamalarında, ilgili n-tipi yarıiletkenler için literatürde yaygın olarak kabul edilen teorik etkin Richardson sabiti değerleri kullanılmıştır. MoO_3/n-yarıiletken heteroeklemleri klasik metal–yarıiletken Schottky diyotlarından farklı olduğundan; arayüz durumları, bariyer homojensizliği ve MoO_3 tabakasının stokiyometrik sapması nedeniyle etkin Richardson sabiti teorik değerden

sapabilmektedir. Bununla birlikte A^* bağıntıya logaritmik olarak girdiğinden, iki kat düzeyindeki bir sapma dahi Φ_{B0} değerinde yalnızca yaklaşık 0,018 eV'luk bir kayma oluşturmaktadır. Benzer biçimde, tüm aygıtlar için ortak kullanılan kontak alanı (A = 7,85×10⁻² cm²) ile Bölüm 4.2'de SEM görüntülerinden ölçülen gerçek kontak alanları (1,98×10⁻²–2,61×10⁻² cm²; Tablo 4.5) arasındaki fark, ölçülen ortalama alan (2,29×10⁻² cm²) esas alındığında bariyer yüksekliklerinde yaklaşık 0,032 eV'luk sistematik bir kaymaya karşılık gelmektedir; aynı fark duyarlılık değerlerini yaklaşık 3,4 kat, özgül algılama değerlerini ise yaklaşık 1,9 kat değiştirmektedir. Bu iki belirsizlik kaynağının toplam etkisi 0,05 eV mertebesindedir ve tüm aygıtlar için aynı yönde olduğundan alt tabakalar arası sıralamaları değiştirmemektedir. Tavlamaya bağlı değişimlerde ise $\Delta\Phi_{B0} = (kT/q)\cdot\ln(I_{0,\text{tavlanmamış}}/I_{0,\text{tavlanmış}})$ bağıntısı gereği A ve A^* sadeleştiğinden, Tablo 4.11'de verilen oranlar ve korelasyonlar bu belirsizliklerden hiçbir biçimde etkilenmemektedir.

Tablo 4.8'de verilen parametreler, bu bölüm kapsamında yürütülen ikinci ölçüm serisinden elde edilmiştir. Bölüm 4.1'de Tablo 4.1'de sunulan karanlık parametreler ise ilk ölçüm serisine aittir. İki seri arasında yalnızca sayısal farklılıklar değil, *p*-MoO_3/*n*-Si ve *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtlarında idealite faktörü ile bariyer yüksekliğinin tavlamayla değişim yönünde de farklılık bulunmaktadır (örneğin *n*-InP için Tablo 4.1'de 1,765 → 2,989; Tablo 4.8'de 5,30 → 2,21). Bu durum, yüksek arayüz durum yoğunluğuna ve tuzak destekli taşınıma sahip bu yapılarda çıkarılan diyot parametrelerinin ölçüm turuna, kullanılan kontağa ve uyarlama aralığına duyarlı olmasından kaynaklanmaktadır; *p*-MoO_3/*n*-GaAs ve *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtlarında ise iki seri aynı yönü vermektedir. Bu nedenle her iki tablo kendi içinde tutarlı biçimde kullanılmış; Bölüm 4.1'deki elektriksel/dielektrik değerlendirmeler Tablo 4.1'e, Bölüm 4.3 ve Bölüm 4.6'daki fotoyanıt ve sentez değerlendirmeleri ise —aydınlatmalı ölçümlerle aynı seriden geldikleri için— Tablo 4.8'e dayandırılmıştır. Parametre değerlerinin mutlak büyüklüklerinden çok, aynı seri içindeki karşılaştırmalı eğilimler yorumlanmıştır.

Tablo 4.8; karanlık, görünür (1300 W/m²) ve UV (395 nm) aydınlatma altında tüm *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemler için Denklem (4.19)–(4.21) kullanılarak elde edilen elektronik parametreleri, yani n, Φ_{B0}, I_0, R_s ve R_{sh}'yi listelemektedir. *p*-MoO_3/*n*-

Si aygıtı için, tavlanmamış yapı karanlık durumda n = 2,765 ve Φ_{B0} = 0,955 eV değerleri vermektedir. Tavlama işlemi n değerini 3,337'ye hafifçe artırırken Φ_{B0} değerini 0,849 eV'ye düşürmektedir; bu da arayüzdeki MoO_3 stokiyometrisinde (malzemeyi oluşturan elementlerin ideal atomik oranında) bir değişiklik olduğunu göstermektedir. R_{sh} değeri karanlık durumda aynı mertebede kalmakta ($7{,}50\times10^{3}$ MΩ'dan $1{,}15\times10^{4}$ MΩ'a), buna karşılık doyum akımı $7{,}26\times10^{-11}$ A'dan $4{,}31\times10^{-9}$ A'ya yaklaşık iki mertebe artmaktadır. Şönt direncin korunmasına rağmen doyum akımının ve idealite faktörünün yükselmesi, tavlamanın paralel sızıntı yollarını artırmaktan çok eklem arayüzündeki taşıma mekanizmasını değiştirdiğine işaret etmektedir.

p-MoO_3/n-GaAs ve p-MoO_3/n-InP aygıtları için tavlama, elektriksel performansta belirgin bir iyileşmeye yol açar: idealite faktörü (n), karanlık durumda GaAs için 3,37'den 2,17'ye ve InP için 5,30'dan 2,21'e düşer; her ikisi de daha ideal termiyonik emisyon davranışına yaklaşır. Tavlanmış GaAs aygıtının seri direnci (R_s) yaklaşık %88 oranında azalmıştır (1240 kΩ'dan 148 kΩ'a); tavlanmış InP aygıtında ise %62'lik bir azalma görülmüştür (6127 kΩ'dan 2335 kΩ'a). Bu iyileştirmeler, 200 °C tavlama işleminden sonra MoO_3/yarıiletken arayüzünde artan arayüz düzenine ve azalan kusur yoğunluğuna atfedilebilir (Basyooni vd., 2023a; Lazar vd., 2023; Qi vd., 2024). 395 nm UV ışınımı altında hem tavlanmamış hem de tavlanmış yapılar, arayüz tuzak durumlarını kısmen perdeleyen UV kaynaklı taşıyıcı oluşumuyla tutarlı olarak n'de bir azalma ve I_0'da bir artış sergilemektedir (Vivek vd., 2019; Zhao vd., 2022). InP aygıtının bariyer yüksekliği tavlama süreci boyunca sabit kalır ($\Phi_{B0} \approx$ 0,81–0,89 eV); bu da MoO_3/InP değerlik bandı kaymasının (valence band offset) bu sıcaklıkta tavlamadan önemli ölçüde etkilenmediğini gösterir.

UV (395 nm) aydınlatma altında ise R_{sh}, tavlanmamış aygıtta 1111 MΩ, tavlanmış aygıtta 0,70 MΩ düzeyine inmekte; bu keskin düşüş belirgin bir fotoiletkenlik tepkisini yansıtmaktadır (Çiçek vd., 2022; Vivek vd., 2022). p-MoO_3/n-SiC aygıtı, tavlama üzerine en belirgin yapısal dönüşümü sergilemekte ve buna anormal arayüz değişiklikleri eşlik etmektedir. Tavlanmamış durumda Φ_{B0} 1,309 eV'ye ulaşır; bu, dört alt tabakanın tümü arasında kaydedilen en yüksek değerdir ve 4H-SiC'nin geniş bant aralığıyla (E_g = 3,26 eV) tutarlıdır.

Tablo 4.8 Karanlık, görünür (650–1300 W/m²) ve UV (365 nm, 395 nm) aydınlatma altında tavlanmamış ve tavlanmış durumdaki *p*-MoO_3/*n*-Si, -GaAs, -InP ve -SiC aygıtlarının elektronik parametreleri (*n*, Φ_{B0}, I_0, R_s, R_{sh}). Her hücre tavlanmamış / tavlanmış değerleri verir

Aygıt	Durum	n	Φ_{B0} (eV)	I_0 (A)	R_s (kΩ)	R_{sh} (MΩ)
p-MoO_3/*n*-Si	Karanlık	2,77 / 3,34	0,9547 / 0,8491	$7{,}26\times10^{-11}$ / $4{,}31\times10^{-9}$	32,94 / 41,80	$7{,}50\times10^{3}$ / $1{,}15\times10^{4}$
	Vis 650 W/m²	3,71 / 2,81	0,8002 / 0,8434	$2{,}85\times10^{-8}$ / $5{,}38\times10^{-9}$	18,32 / 24,45	588 / 23,72
	Vis 1000 W/m²	3,92 / 2,00	0,7970 / 0,9912	$3{,}24\times10^{-8}$ / $1{,}77\times10^{-11}$	18,13 / 27,57	385 / 26,98
	Vis 1225 W/m²	4,26 / 2,28	0,7743 / 0,9322	$7{,}77\times10^{-8}$ / $1{,}73\times10^{-10}$	18,62 / 18,07	227 / 12,88
	Vis 1300 W/m²	3,73 / 5,05	0,7935 / 0,7553	$3{,}70\times10^{-8}$ / $1{,}62\times10^{-7}$	18,34 / 27,15	200 / 3,43
	UV 365 nm	3,51 / 3,82	0,9084 / 0,8652	$4{,}35\times10^{-10}$ / $2{,}31\times10^{-9}$	49,66 / 24,84	2308 / 4,12
	UV 395 nm	4,16 / 5,21	0,8705 / 0,8120	$1{,}88\times10^{-9}$ / $1{,}81\times10^{-8}$	34,81 / 22,17	1111 / 0,70
p-MoO_3/*n*-GaAs	Karanlık	3,37 / 2,17	1,0091 / 1,0395	$6{,}43\times10^{-13}$ / $1{,}99\times10^{-13}$	1240 / 148	882 / 2329
	Vis 650 W/m²	1,96 / 2,17	1,1901 / 1,0295	$5{,}86\times10^{-16}$ / $2{,}93\times10^{-13}$	40,60 / 100	5900 / 1581
	Vis 1000 W/m²	2,14 / 2,17	1,0797 / 1,0278	$4{,}19\times10^{-14}$ / $3{,}13\times10^{-13}$	79,81 / 93,92	$1{,}50\times10^{4}$ / 1481
	Vis 1225 W/m²	7,34 / 3,08	0,9223 / 0,9599	$1{,}85\times10^{-11}$ / $4{,}32\times10^{-12}$	41,96 / 90,60	5000 / 2198
	Vis 1300 W/m²	2,33 / 2,30	1,1406 / 1,0064	$3{,}97\times10^{-15}$ / $7{,}14\times10^{-13}$	40,50 / 87,82	3333 / 1507
	UV 365 nm	3,30 / 2,46	0,9400 / 0,9789	$9{,}31\times10^{-12}$ / $2{,}07\times10^{-12}$	89,58 / 79,97	1154 / 1491
	UV 395 nm	3,53 / 2,38	0,9205 / 1,0366	$1{,}98\times10^{-11}$ / $2{,}22\times10^{-13}$	88,52 / 86,31	2500 / 2083
p-MoO_3/*n*-InP	Karanlık	5,30 / 2,21	0,8113 / 0,8869	$1{,}56\times10^{-9}$ / $8{,}37\times10^{-11}$	6127 / 2335	184 / 662
	Vis 650 W/m²	5,35 / 2,21	0,7943 / 0,8813	$3{,}01\times10^{-9}$ / $1{,}04\times10^{-10}$	2163 / 1874	52,25 / 478
	Vis 1000 W/m²	4,82 / 2,21	0,8052 / 0,8825	$1{,}98\times10^{-9}$ / $9{,}93\times10^{-11}$	2239 / 1969	42,45 / 389
	Vis 1225 W/m²	5,55 / 2,21	0,7868 / 0,8871	$4{,}03\times10^{-9}$ / $8{,}31\times10^{-11}$	2125 / 2350	38,08 / 266
	Vis 1300 W/m²	4,26 / 2,21	0,8084 / 0,8840	$1{,}74\times10^{-9}$ / $9{,}36\times10^{-11}$	1976 / 2086	57,93 / 210
	UV 365 nm	7,30 / 3,20	0,8240 / 0,8288	$9{,}53\times10^{-10}$ / $7{,}93\times10^{-10}$	5053 / 1875	31,07 / 392
	UV 395 nm	6,06 / 2,94	0,8156 / 0,8329	$1{,}32\times10^{-9}$ / $6{,}76\times10^{-10}$	3704 / 1402	22,41 / 300
p-MoO_3/*n*-SiC	Karanlık	3,46 / 4,23	1,3088 / 1,1414	$1{,}06\times10^{-16}$ / $6{,}89\times10^{-14}$	13,32 / $3{,}57\times10^{4}$	$2{,}35\times10^{3}$ / 58,77
	Vis 650 W/m²	4,58 / 4,23	1,0506 / 1,1260	$2{,}31\times10^{-12}$ / $1{,}25\times10^{-13}$	6,87 / $1{,}96\times10^{4}$	129 / 6,81
	Vis 1000 W/m²	4,47 / 4,03	1,0035 / 1,1330	$1{,}43\times10^{-11}$ / $9{,}54\times10^{-14}$	4,29 / $1{,}85\times10^{4}$	102 / 4,27
	Vis 1225 W/m²	2,26 / 3,92	1,0530 / 1,1340	$2{,}11\times10^{-12}$ / $9{,}20\times10^{-14}$	0,92 / $1{,}85\times10^{4}$	6,22 / 6,25
	Vis 1300 W/m²	2,43 / 3,75	1,0300 / 1,1289	$5{,}13\times10^{-12}$ / $1{,}12\times10^{-13}$	1,44 / $1{,}68\times10^{4}$	7,57 / 4,75
	UV 365 nm	3,35 / 3,61	1,3109 / 1,1595	$9{,}80\times10^{-17}$ / $3{,}42\times10^{-14}$	12,90 / $2{,}00\times10^{4}$	$2{,}59\times10^{8}$ / 7,24
	UV 395 nm	2,46 / 3,39	1,0163 / 1,1310	$8{,}73\times10^{-12}$ / $1{,}03\times10^{-13}$	0,93 / $2{,}02\times10^{4}$	10,86 / 2,07

Tavlamadan sonra Φ_{B0} 1,141 eV'ye düşerken, karanlık durum R_s değeri tavlanmamış yapıdaki 13,32 kΩ'dan yaklaşık $3{,}57\times10^{4}$ kΩ'a yükselmiştir; bu, üç mertebeyi aşan bir artışa tekabül etmektedir. Bu olağandışı direnç artışı, tavlama sonucu MoO_3/SiC

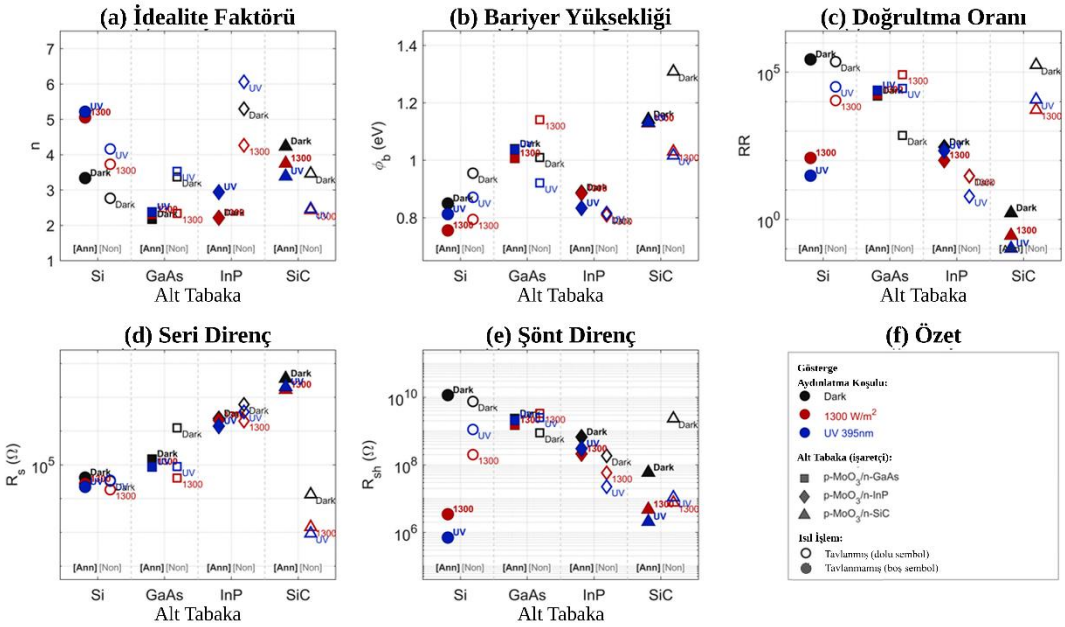
arayüzünde bir arayüz oksit tabakasının oluşmasına ve derin seviye arayüz durumlarının yeniden dağılımına bağlanmaktadır (Alialy vd., 2014; Yu vd., 2010).

SiC'nin geniş bant aralığı (E_g = 3,26 eV) ve yüksek bağ enerjisine bağlı düşük atomik hareketliliği, 200°C'de gerçekleştirilen tavlama işleminin tam bir arayüz iyileşmesi sağlayacak yeterli enerjiyi sunmadığını göstermektedir. Bu koşullarda tavlama işlemi, arayüz tuzaklarını etkin biçimde pasifleştirmek yerine sınırlı yüzey oksidasyonunu teşvik ederek yalıtkan bir bariyer tabakasının oluşmasına neden olmaktadır.

Tavlanmamış SiC aygıtında ise 1300 W/m² görünür ışık altında *R*s, karanlık durumdaki 13,32 kΩ değerinden 1,44 kΩ'a gerilemiş; doyum akımı ise $1{,}06\times10^{-16}$ A'dan $5{,}13\times10^{-12}$ A'ya, yaklaşık beş mertebe artmıştır. Bu davranış, stokiyometrik sapma içeren MoO_3 filminde ışıkla üretilen taşıyıcıların yol açtığı belirgin fotoiletkenlikle açıklanabilir (Basyooni vd., 2023a).

Dört alt tabakanın tümü karşılaştırıldığında; tavlanmamış konfigürasyondaki *p*-MoO_3/*n*-Si, dört aygıt arasında en düşük idealite faktörünü (karanlıkta n = 2,765), en yüksek R_{sh}/R_s oranını ve en güçlü görünür aralık fotoakım yanıtını birleştirerek en iyi genel bağlantı kalitesini sergilemektedir (Tablo 4.8). Tavlanmış *p*-MoO_3/*n*-Si heteroeklemi, tavlanmamış muadiline kıyasla daha düşük bir R_{sh} sergilese de, 395 nm aydınlatma altında tavlama ile sağlanan iyileştirilmiş arayüz kalitesine atfedilen yüksek UV algılama yeteneği göstermektedir (Çiçek vd., 2022; Vivek vd., 2022). Bu sonuçlar, *p*-MoO_3/*n*-Si'nin, hem tavlanmamış hem de tavlanmış konfigürasyonlarda, incelenen dört alt tabaka arasında en çok yönlü ve yüksek performanslı birleşimi sunduğunu doğrulamaktadır.

Şekil 4.14; karanlık, görünür (1300 W/m²) ve UV (395 nm) aydınlatma altında hem tavlanmamış hem de tavlanmış konfigürasyonlar için dört aygıtın tümünün n, Φ_{B0}, doğrultma oranı (RR), R_s ve R_{sh} parametrelerini özetlemektedir. Karanlık durumda (Şekil 4.14a), tavlanmamış dört aygıtın tümü 2,5'ten büyük idealite faktörleri (n) sergilemektedir; *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtı en güçlü ideal olmayan davranışı (yaklaşık 5,3) göstermektedir.



Şekil 4.14 Karanlık, görünür (1300 W/m²) ve UV (395 nm) ışık altında tavlanmamış ve tavlanmış durumdaki tüm aygıtların elektronik parametreleri (n, Φ_{B0}, RR, R_s, R_{sh})

Tavlama, GaAs ve InP aygıtlarında n değerini belirgin biçimde düşürmüştür (sırasıyla 3,37 → 2,17 ve 5,30 → 2,21); bu azalma, arayüz kalitesinin iyileştiğine ve termiyonik emisyonun taşımada daha baskın hâle geldiğine işaret etmektedir. Bariyer yüksekliklerinin (Şekil 4.14b) alt tabakaya göre sıralanışı, bant aralığı beklentisiyle kısmen uyumludur: en yüksek Φ_{B0} değeri, en geniş bant aralığına sahip p-MoO_3/n-SiC yapısında (1,31 eV) ölçülmüş, bunu p-MoO_3/n-GaAs (1,01 eV) izlemiştir. Buna karşılık p-MoO_3/n-InP, bant aralığı Si'den büyük olmasına rağmen en düşük bariyeri (0,81 eV) vermiştir; bu sapma, bariyer oluşumunda bant aralığının yanında arayüz kimyası ve Fermi seviyesi sabitlenmesinin de belirleyici olduğunu göstermektedir (Basyooni vd., 2023a; Zhao vd., 2022). Doğrultma oranı (Şekil 4.14c), tavlanmamış durumda en yüksek değerini p-MoO_3/n-SiC yapısında ($2{,}02\times10^5$), tavlanmış durumda ise p-MoO_3/n-Si yapısında ($2{,}88\times10^5$) almaktadır; tavlama, Si, GaAs ve InP aygıtlarında doğrultma oranını artırırken SiC aygıtında beş mertebe düşürmüştür. Seri direnç (Şekil 4.14d), görünür ışık altında tüm aygıtlarda karanlık duruma göre azalmakta; buna karşılık tavlanmamış Si aygıtında UV (395 nm) aydınlatmada bir miktar artış göstermektedir. Tavlanmış p-MoO_3/n-SiC yapısında ölçülen Rs değeri ($3{,}57\times10^4$ kΩ) diğer aygıtlardan iki-üç mertebe yüksektir ve bu aygıt için ayrı bir değerlendirme gerektirmektedir. Şönt direnç (Şekil 4.14e), karanlık durumda her iki ısıl işlem durumunda da p-MoO_3/n-Si yapısında en yüksektir; UV aydınlatma altında

ise tavlanmış Si aygıtında 0,70 MΩ düzeyine inerek en düşük değeri almaktadır. Bu keskin düşüş, aygıtın kendinden beslemeli çalışmada gösterdiği yüksek fotoiletken tepkiyle uyumludur. Tam sayısal değerler Tablo 4.8'de derlenmiştir.

Kendinden beslemeli (self-powered) çalışma modu; Heteroeklem fotodedektörlerin (PD) temel bir parametresi, tükenim bölgesi boyunca oluşan yerleşik elektrik alanı tarafından sürülerek, sıfır besleme geriliminde (V_{bias} = 0 V) çalışabilme yetenekleridir. Gelen fotonlar, bu dâhilî potansiyel tarafından ilgili kontaklara doğru sürüklenen elektron-oyuk çiftleri oluşturur ve herhangi bir harici güç kaynağı olmadan net bir fotoakım üretir (Basyooni-Kabatas vd., 2023; Zaki vd., 2022). Bu fotovoltaik mekanizma; düşük karanlık akımına ve güçlü bir dâhilî alana sahip, iyi tanımlanmış bir eklem gerektirir (Nicollian ve Brews, 2002; Zaki vd., 2022).

Işığa duyarlılık (PS), sıfır beslemede ışığın akıma dönüşümünün kalitesini ölçer. PS, V_{bias} = 0 V'da fotoakımın karanlık akıma oranıdır (Nicollian ve Brews, 2002):

$$PS = \frac{I_{LH}}{I_d} \tag{4.22}$$

burada I_{LH}, fotoakımdır ve I_d, karanlık akımdır; her ikisi de V_{bias} = 0 V'da ölçülür. Sıfır beslemede yüksek bir PS değeri; verimli dâhilî alan tahrikli fototaşıyıcı ayrımını ve düşük karanlık sızıntı akımını gösterir; her ikisi de büyük bariyer yüksekliği ve yüksek şönt direnç R_{sh} tarafından desteklenir (Çiçek vd., 2022; Zaki vd., 2022).

Duyarlılık (R, A/W) ve özgül algılama (D^*, Jones), sırasıyla fotodedektör/fotodiyot hassasiyeti ve gürültü performansı için standart performans göstergeleridir (Erol ve Balkan, 2015; Vivek vd., 2022; Zaki vd., 2022):

$$R = \frac{I_{LH} - I_d}{A \cdot P} \tag{4.23}$$

$$D^* = \frac{R\sqrt{A}}{\sqrt{2qI_d}} \tag{4.24}$$

burada A aktif kontak alanı (m²), P gelen güç yoğunluğu (W/m²), q elektron yükü ve I_d karanlık akımdır (Vivek vd., 2022; Zaki vd., 2022). R, birim gelen güç başına

fotoakımı karakterize ederken; D^*, duyarlılığı aygıt alanına göre normalleştirir ve karanlık akımdan kaynaklanan atış gürültüsünü hesaba katarak aygıtlar arası karşılaştırmayı mümkün kılar (Nicollian ve Brews, 2002). Kendinden beslemeli modda (V_{bias} = 0 V), R ve D^*, gelen güç yoğunluğunun artmasıyla azalır; bu davranış, fototaşıyıcı oluşumunun doygunluğuna ve daha yüksek ışık şiddetinde tuzak aracılı rekombinasyonun artmasına atfedilir (Nicollian ve Brews, 2002).

Desibel (dB) cinsinden ifade edilen sinyal-gürültü oranı (SNR), fotoakımın karanlık akıma oranını nicel olarak ifade eder ve dedektörün sinyali gürültüden ayırt etme yeteneğini yansıtır (Nicollian ve Brews, 2002):

$$SNR\ (dB) = 20\log\left(\frac{I_{LH}}{I_d}\right) \tag{4.25}$$

V_{bias} = 0 V'da yüksek bir SNR, düşük bir karanlık akım ve geniş bir doğrusal fotoakım aralığı gerektirir; bunların her ikisi de bağlantı kalitesine, arayüz durum yoğunluğuna ve R_{sh}'nin büyüklüğüne duyarlıdır (Vivek vd., 2019; Zaki vd., 2022). Bu nedenle, 200 °C'lik işlem her yarıiletken için MoO_3 arayüz stokiyometrisini farklı şekilde değiştirdiğinden, kendinden beslemeli koşuldaki SNR'nin tavlama durumu ve alt tabakaya göre değişmesi beklenir (Basyooni vd., 2023a; Qi vd., 2024).

Fotoakımın ışık şiddetine bağımlılığı, $I_{LH} = k \cdot P^{\gamma}$ bağıntısıyla ifade edilir; burada k orantı katsayısı, γ üssü ise baskın fototaşıyıcı oluşumu ve rekombinasyon mekanizmasını yansıtır. İdeal monomoleküler rekombinasyon için γ = 1, bimoleküler veya tuzak aracılı rekombinasyon süreçleri için ise γ < 1 elde edilir (Nicollian ve Brews, 2002). Her bir p-MoO_3/n-yarıiletken aygıtın kendinden beslemeli performansı; yerleşik potansiyel, azınlık taşıyıcı difüzyon uzunluğu ve arayüz tuzak durumlarının yoğunluğu arasındaki etkileşime bağlıdır. Yerleşik potansiyel, Tablo 4.8'de verilen bariyer yüksekliği (Φ_{B0}) değerleri ile temsil edilmektedir. 200 °C'de gerçekleştirilen biriktirme sonrası tavlama işlemi, Tablo 4.8'de görülen Φ_{B0}, R_s ve R_{sh} değerlerindeki sistematik değişimlerin de gösterdiği üzere, bu parametreleri dört farklı alt tabaka için farklı biçimlerde etkilemiştir. Görünür ve UV aydınlatması altında hem tavlanmamış hem de tavlanmış aygıtların kendinden beslemeli çalışma modunda (V_{bias} = 0 V) elde

edilen *PS, R, D** ve *SNR* değerleri Tablo 4.9'da sunulmuş ve aşağıda ayrıntılı olarak tartışılmıştır.

Şekil 4.15; dört *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklem aygıtı için kendinden beslemeli fotodedektör parametrelerini (*PS, R, D** ve SNR), V_{bias} = 0 V'da görünür ışık yoğunluğunun (650–1300 W/m²) bir fonksiyonu olarak göstermekte ve tavlanmamış (kesikli çizgiler, boş işaretler) ile tavlanmış (düz çizgiler, dolu işaretler) durumları karşılaştırmaktadır. Tüm aydınlatma koşulları için tam değerler Tablo 4.9'da listelenmiştir.

Şekil 4.15a'da görüldüğü üzere, tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtı, incelenen tüm görünür ışık şiddetlerinde en yüksek ışık duyarlılığı (*PS*) değerlerini sergilemekte ve yaklaşık 1225 W/m² ışık şiddetinde en yüksek değerine ulaşmaktadır. En düşük *PS* değerleri ise tavlanmamış durumda *p*-MoO_3/*n*-GaAs ve *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtlarında, tavlanmış durumda ise *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtında belirlenmiştir; bu aygıtların bazı koşullarda *PS* < 1 vermesi, ışık bastırımı davranışına işaret etmektedir. Duyarlılık açısından (Şekil 4.15b), tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtı 1225 W/m² ışık şiddetinde en yüksek değere ulaşmakta ($6{,}20\times10^{-6}$ A/W); bu değer, *n*-GaAs ve *n*-InP tabanlı aygıtlardan yaklaşık iki buçuk mertebe, *n*-SiC tabanlı aygıtlardan ise yaklaşık beş mertebe daha yüksektir. Söz konusu üstün duyarlılık, sıfır besleme geriliminde (V_{bias} = 0 V) fototaşıyıcıların etkin biçimde ayrıştırılıp kontaklarda verimli şekilde toplanmasını sağlayan yüksek R_{sh}/R_s oranıyla (Tablo 4.8, görünür aydınlatma) uyumludur (Çiçek vd., 2022; Zaki vd., 2022).

Özgül algılama (*D**) değerleri (Şekil 4.15c) de benzer bir eğilim göstermektedir; *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtı en yüksek değerleri sergilerken, *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtı tutarlı biçimde en düşük performansı göstermektedir. Bu davranış, kısmen SiC tabanlı aygıtın yüksek seri direncini (R_s, Tablo 4.8) ve buna bağlı düşük fotoakım düzeyini yansıtmaktadır. *SNR* panelinde (Şekil 4.15d) ise bazı *p*-MoO_3/*n*-GaAs, *p*-MoO_3/*n*-SiC ve *p*-MoO_3/*n*-InP veri noktaları sıfırın altına düşmektedir.

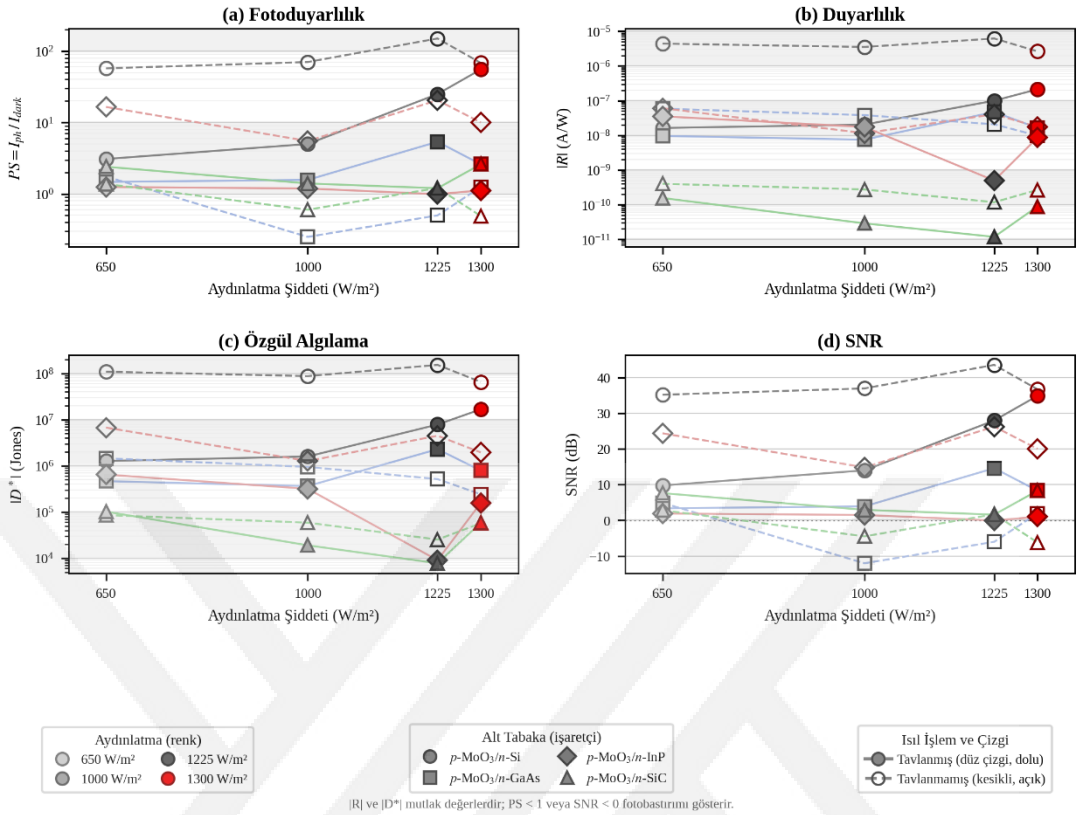
Tablo 4.9 V_{bias} = 0 V'da görünür (650–1300 W/m²) ve UV (365 nm, 395 nm) aydınlatma altında tavlanmamış ve tavlanmış durumdaki *p*-MoO_3/*n*-Si, -GaAs, -InP ve -SiC aygıtlarının kendinden beslemeli fotodedektör parametreleri (*PS*, *R*, *D**, *SNR*). Her hücre tavlanmamış / tavlanmış değerleri verir

Aygıt	Durum	PS (Oran)	R (A/W)	*D** (Jones)	SNR (dB)
p-MoO_3/*n*-Si	650 W/m²	57,25 / 3,08	$4{,}41\times10^{-6}$ / $1{,}63\times10^{-8}$	$1{,}09\times10^{8}$ / $1{,}27\times10^{6}$	35,16 / 9,76
	1000 W/m²	70,25 / 5,00	$3{,}53\times10^{-6}$ / $2{,}04\times10^{-8}$	$8{,}74\times10^{7}$ / $1{,}59\times10^{6}$	36,93 / 13,98
	1225 W/m²	150,00 / 25,00	$6{,}20\times10^{-6}$ / $9{,}98\times10^{-8}$	$1{,}53\times10^{8}$ / $7{,}82\times10^{6}$	43,52 / 27,96
	1300 W/m²	68,25 / 55,30	$2{,}64\times10^{-6}$ / $2{,}13\times10^{-7}$	$6{,}53\times10^{7}$ / $1{,}67\times10^{7}$	36,68 / 34,85
	UV 365 nm	1,50 / 0,75 *	$2{,}55\times10^{-6}$ / $-1{,}27\times10^{-7}$ *	$6{,}30\times10^{7}$ / $-9{,}97\times10^{6}$ *	3,52 / −2,50 *
	UV 395 nm	6,25 / 40,50	$2{,}67\times10^{-5}$ / $2{,}01\times10^{-5}$	$6{,}61\times10^{8}$ / $1{,}57\times10^{9}$	15,92 / 32,15
p-MoO_3/*n*-GaAs	650 W/m²	1,75 / 1,47	$5{,}88\times10^{-8}$ / $9{,}60\times10^{-9}$	$1{,}45\times10^{6}$ / $4{,}65\times10^{5}$	4,86 / 3,35
	1000 W/m²	0,25 * / 1,57	$-3{,}82\times10^{-8}$ * / $7{,}52\times10^{-9}$	$-9{,}47\times10^{5}$ * / $3{,}64\times10^{5}$	−12,04 * / 3,90
	1225 W/m²	0,50 * / 5,37	$-2{,}08\times10^{-8}$ * / $4{,}72\times10^{-8}$	$-5{,}16\times10^{5}$ * / $2{,}29\times10^{6}$	−6,02 * / 14,59
	1300 W/m²	1,25 / 2,60	$9{,}80\times10^{-9}$ / $1{,}63\times10^{-8}$	$2{,}42\times10^{5}$ / $7{,}90\times10^{5}$	1,94 / 8,29
	UV 365 nm	1,25 / 0,64 *	$1{,}27\times10^{-6}$ / $-4{,}71\times10^{-7}$ *	$3{,}14\times10^{7}$ / $-2{,}29\times10^{7}$ *	1,94 / −3,82 *
	UV 395 nm	0,50 * / 6,04	$-2{,}55\times10^{-6}$ * / $6{,}67\times10^{-6}$	$-6{,}30\times10^{7}$ * / $3{,}25\times10^{8}$	−6,02 * / 15,62
p-MoO_3/*n*-InP	650 W/m²	16,50 / 1,25	$6{,}07\times10^{-8}$ / $3{,}54\times10^{-8}$	$6{,}72\times10^{6}$ / $6{,}47\times10^{5}$	24,35 / 1,91
	1000 W/m²	5,50 / 1,19	$1{,}15\times10^{-8}$ / $1{,}74\times10^{-8}$	$1{,}27\times10^{6}$ / $3{,}17\times10^{5}$	14,81 / 1,48
	1225 W/m²	20,50 / 0,99 *	$4{,}06\times10^{-8}$ / $-4{,}96\times10^{-10}$	$4{,}48\times10^{6}$ / $-9{,}05\times10^{3}$ *	26,24 / −0,06 *
	1300 W/m²	10,00 / 1,12	$1{,}76\times10^{-8}$ / $8{,}60\times10^{-9}$	$1{,}95\times10^{6}$ / $1{,}57\times10^{5}$	20,00 / 0,98
	UV 365 nm	43,04 / 1,19	$1{,}07\times10^{-5}$ / $1{,}80\times10^{-6}$	$1{,}19\times10^{9}$ / $3{,}28\times10^{7}$	32,68 / 1,53
	UV 395 nm	87,42 / 1,25	$2{,}20\times10^{-5}$ / $2{,}39\times10^{-6}$	$2{,}44\times10^{9}$ / $4{,}34\times10^{7}$	38,83 / 1,97
p-MoO_3/*n*-SiC	650 W/m²	1,38 / 2,40	$4{,}01\times10^{-10}$ / $1{,}56\times10^{-10}$	$8{,}57\times10^{4}$ / $1{,}02\times10^{5}$	2,82 / 7,60
	1000 W/m²	0,60 * / 1,40	$-2{,}75\times10^{-10}$ * / $2{,}90\times10^{-11}$	$-5{,}88\times10^{4}$ * / $1{,}90\times10^{4}$	−4,50 * / 2,92
	1225 W/m²	1,21 / 1,20	$1{,}18\times10^{-10}$ / $1{,}18\times10^{-11}$	$2{,}53\times10^{4}$ / $7{,}76\times10^{3}$	1,68 / 1,58
	1300 W/m²	0,49 * / 2,60	$-2{,}67\times10^{-10}$ * / $8{,}91\times10^{-11}$	$-5{,}72\times10^{4}$ * / $5{,}86\times10^{4}$	−6,21 * / 8,30
	UV 365 nm	1,45 / 2,80	$3{,}04\times10^{-8}$ / $1{,}30\times10^{-8}$	$6{,}50\times10^{6}$ / $8{,}55\times10^{6}$	3,21 / 8,94
	UV 395 nm	0,89 * / 2,60	$-7{,}24\times10^{-9}$ * / $1{,}16\times10^{-8}$	$-1{,}55\times10^{6}$ * / $7{,}59\times10^{6}$	−0,98 * / 8,30

** Işık bastırımı: PS < 1 olan koşulları ve buna bağlı negatif R, D* ve SNR değerlerini gösterir.*

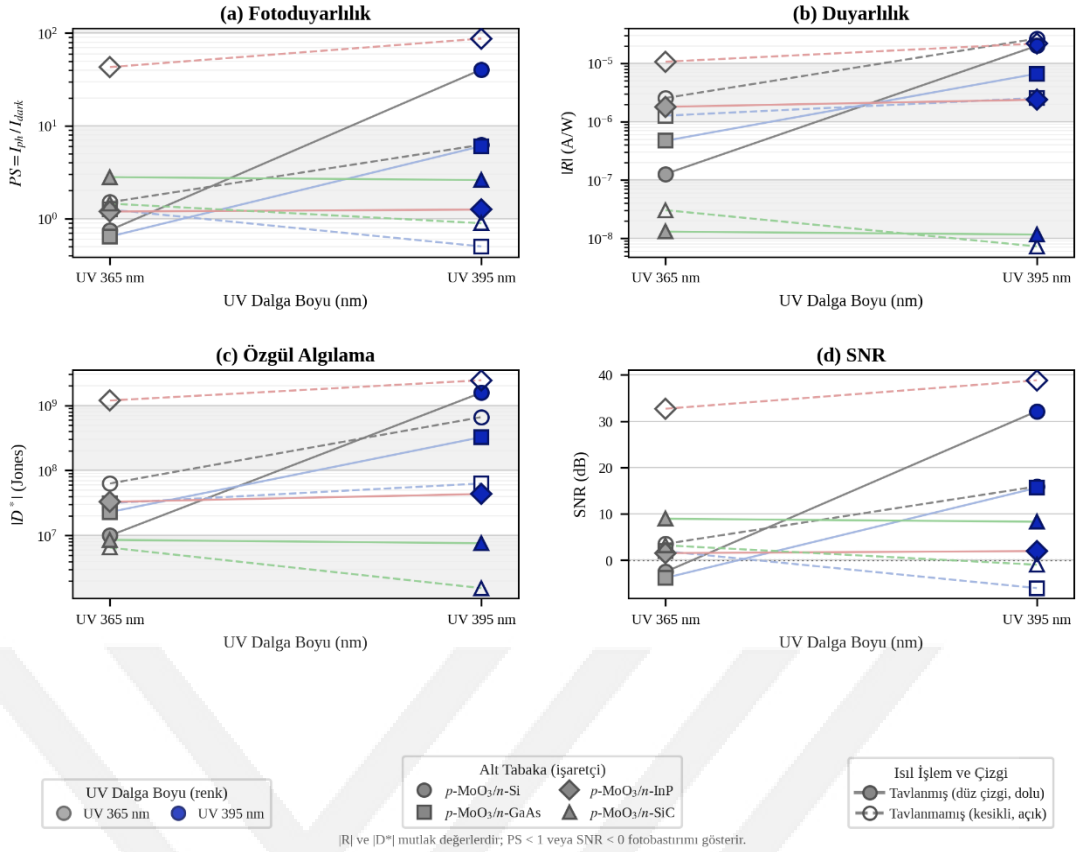
UV tepkisi açısından (Şekil 4.16), tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtı (kesikli elmas) 395 nm'de dört panelin üçünde en yüksek performansı sergilemektedir: bu aygıt, yaklaşık 87 ile en yüksek *PS* değerini (Şekil 4.16a), tavlanmamış yapılar arasında *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtından sonra ikinci en büyük |*R*| değerini (Şekil 4.16b) ve 10^9 Jones mertebesindeki *D** değerini (Şekil 4.16c) göstermektedir. Bu üstünlük, InP'nin (E_g = 1,35 eV) 395 nm'yi de kapsayan geniş bir spektral aralıkta yüksek soğurma katsayısına sahip olmasına atfedilebilir; bu özellik, gelen UV fotonlarının etkin biçimde

soğurulmasını ve MoO_3/InP arayüzü yakınında verimli fototaşıyıcı oluşumunu sağlar (Lazar vd., 2023; Vivek vd., 2022).



Şekil 4.15 *p*-MoO_3/*n*-Si, -GaAs, -InP ve -SiC aygıtlarının kendinden beslemeli fotodedektör parametreleri (*PS*, *R*, *D**, *SNR*); V_{bias} = 0 V'da görünür ışık yoğunluğunun (650–1300 W/m²) bir fonksiyonu olarak; tavlanmamış (kesikli, açık) ile tavlanmış (düz, dolu) durumların karşılaştırması

Tavlamanın etkisi Şekil 4.15'te görülmektedir. Görünür ışık aydınlatma aralığında, tavlanmış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtı (dolu daireler), aydınlatma şiddetinin artmasıyla ışık duyarlılığında (*PS*) sürekli bir artış sergilemekte ve 1300 W/m²'de en yüksek değerine ulaşmaktadır (Şekil 4.15a). Ayrıca Şekil 4.15d'de görüldüğü üzere tavlama, *p*-MoO_3/*n*-GaAs aygıtının görünür ışık *SNR* değerini belirgin biçimde artırmaktadır: tavlanmış numune (dolu kareler), tavlanmamış muadiline kıyasla özellikle 1225 W/m²'de daha yüksek *SNR* değerleri göstermektedir. Bu iyileşme, 200 °C tavlama işlemi sonrasında seri direncin (R_s) belirgin biçimde azalmasına ve arayüzdeki oksijen boşluğu yoğunluğunun düşerek stokiyometrinin ideal Mo:O oranına yaklaşmasına atfedilebilir (Çiçek vd., 2022; Lazar vd., 2023).



Şekil 4.16 V_{bias} = 0 V'da UV aydınlatması (365 nm ve 395 nm) altında, tavlanmamış ve tavlanmış durumlar için aynı dört aygıtın kendinden beslemeli fotodedektör parametreleri

UV aralığında tavlamanın en belirgin olumlu etkisi *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtında gözlemlenmiştir: Şekil 4.16, tavlanmış aygıtta (dolu daireler) dört fotodedektör parametresinin tümünde 365 nm'den 395 nm'ye keskin bir artış olduğunu ve bu aygıtın UV aydınlatma altında tüm tavlanmış yapılar arasında en yüksek *SNR* değerine ulaştığını göstermektedir (Şekil 4.16d; 32,15 dB). Bu iyileşme, UV aydınlatması altında tavlama sonrasında seri direncin (R_s) azalmasıyla tutarlıdır (Tablo 4.8; 365 nm için 49,66 → 24,84 kΩ, 395 nm için 34,81 → 22,17 kΩ); azalan seri direnç, sıfır besleme geriliminde (V_{bias} = 0 V) fotoakımın kontaklarda daha verimli toplanmasını sağlayarak *PS* ve *SNR* değerlerini yükseltmektedir (395 nm'de *PS* 6,25 → 40,50; *SNR* 15,92 → 32,15 dB) (Çiçek vd., 2022; Vivek vd., 2022).

Buna karşın görünür ışık aralığında tavlanmış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtı, tavlanmamış muadiline kıyasla daha düşük *PS* ve *R* değerleri sergilemektedir (ör. 650 W/m²'de *PS* 57,25 → 3,08); bu durum, görünür ışık şiddeti altında tavlamanın seri direnci artırmasından (Tablo 4.8; 650 W/m²'de 18,32 → 24,45 kΩ) ve buna bağlı olarak

fotoakım toplanmasının baskılanmasından kaynaklanmaktadır (Basyooni-Kabatas vd., 2023; Zaki vd., 2022). Dolayısıyla tavlamanın etkisi dalga boyuna bağlı olarak farklılaşmakta; UV bölgesinde seri direncin azalması performansı iyileştirirken, görünür bölgede seri direncin artması performansı sınırlamaktadır.

Negatif *SNR* ile karakterize edilen ışık bastırımı davranışı yalnızca tek bir yapıya özgü olmayıp, Tablo 4.9'da yıldız (*) ile işaretlendiği üzere dört alt tabaka tabanlı aygıtta da belirli aydınlatma koşullarında ortaya çıkmaktadır. Bu davranış, özellikle tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-GaAs aygıtında 395 nm'de (*SNR* = −6,02 dB) ve tavlanmış *p*-MoO_3/*n*-GaAs aygıtında 365 nm'de (*SNR* = −3,82 dB) belirgindir; söz konusu davranış, aydınlatma altında arayüz tuzaklarının dolmasıyla yerleşik potansiyelin zayıflaması ve fotoiletken bileşenin fotovoltaik bileşeni bastırması ile açıklanabilir; benzer davranış MoO_3/GaAs arayüzü için literatürde de bildirilmiştir (Doğan vd., 2008; Turut vd., 2020).

Tavlamanın neden olduğu en belirgin bozulma *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtında gözlemlenmiştir. Şekil 4.16a'da görüldüğü gibi, tavlanmış aygıt (dolu elmas) her iki UV dalga boyunda da tavlanmamış yapının (boş elmas) belirgin biçimde altına düşmekte ve *PS*, 395 nm'de yaklaşık 70 kat azalmaktadır (Tablo 4.9; 87,42 → 1,25). Bu çöküş, |*R*| (Şekil 4.16b) ve *D** (Şekil 4.16c) değerlerine de eşzamanlı olarak yansımakta olup, tavlanmış InP aygıtı bu koşulda en düşük fotoyanıtı sergilemektedir. Dikkat çekici biçimde, tavlama sonrasında bu aygıtın 395 nm altındaki diyot parametreleri iyileşmektedir (Tablo 4.8; idealite faktörü 6,06 → 2,94, R_{sh} 22,41 → 300 MΩ, I0 $1{,}32\times10^{-9}$ → $6{,}76\times10^{-10}$ A). Doğrultma davranışındaki bu iyileşmeye karşın fotoyanıtın çökmesi, performans kaybının karanlık akım kaynaklı olmadığını; bunun yerine 200 °C'lik işlemin MoO_3/InP arayüzünde teşvik ettiği karşılıklı difüzyon ve stokiyometrik değişimlerin, fototaşıyıcı üretimi ve ayrışmasını bozarak fotoyanıtı sınırladığını göstermektedir (Chen vd., 2016; Janardhanam vd., 2010).

Buna karşılık *p*-MoO_3/*n*-SiC aygıtı, tavlama sonrasında sınırlı ancak net bir iyileşme göstermektedir: Şekil 4.16d'de tavlanmış SiC aygıtı (dolu üçgen), 395 nm'de negatif *SNR*'den pozitif *SNR*'ye geçmektedir; *SNR* değeri 365 nm'de 3,21 dB'den 8,94 dB'ye, 395 nm'de ise −0,98 dB'den 8,30 dB'ye yükselerek sırasıyla yaklaşık 6 ve 9 dB'lik kazanç sağlamaktadır. UV uyarımı altındaki bu kısmi *SNR* kazanımı, karanlıkta

gözlenen doğrultma kaybından bağımsızdır ve esas olarak UV ile üretilen taşıyıcıların katkısını yansıtır; SiC'nin geniş bant aralığı (E_g = 3,26 eV) nedeniyle 200 °C'lik tavlamanın arayüzü yalnızca kısmen yeniden düzenlediği, dolayısıyla UV yanıtı üzerindeki etkisinin sınırlı kaldığı değerlendirilmektedir (Çiçek vd., 2022; Qi vd., 2024).

Şekil 4.15 ve Şekil 4.16 birlikte değerlendirildiğinde, tavlanmamış ve tavlanmış yapılar arasındaki kendinden beslemeli performans farkının büyük ölçüde alt tabakaya bağlı olduğu ve Tablo 4.8'de belgelenen Φ_{B0}, R_s ve R_{sh} değerlerindeki tavlama kaynaklı değişimler tarafından belirlendiği görülmektedir (Basyooni-Kabatas vd., 2023; Çiçek vd., 2022; Zaki vd., 2022).

Tablo 4.10, bu çalışmanın en iyi performans gösteren iki aygıtını (*p*-MoO_3/*n*-Si ve *p*-MoO_3/*n*-InP) MoO_3 tabanlı fotodedektörlerle ilgili literatürle karşılaştırmaktadır. Birkaç gözlem dikkat çekicidir. İlk olarak, tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtı, 1225 W/m²'de %15000 PS ve V_{bias} = 0 V'da 43,52 dB *SNR* değerlerine ulaşmaktadır.

Bu ışık duyarlılığı, literatürde MoO_3/Si yapıları için bildirilen değerlerin (ör. Vivek vd. (2020): *PS* = %610,51) belirgin biçimde üzerindedir ve sprey pirolizi, doping veya yüksek besleme altında çalışma gerektirmeden elde edilmiştir. Duyarlılık ve özgül algılama açısından daha yüksek değerler bildiren çalışmalar (ör. Zhao vd. (2022): *R* = 63,3 mA/W, *D** = 3,10×10¹¹ Jones) ise şeffaf ITO üst kontak ve foto-termoelektrik mekanizma gibi farklı aygıt mimarilerine dayanmaktadır. İkincisi, tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtı, UV 395 nm ve V_{bias} = 0 V'da 2,44×10⁹ Jones'luk bir *D** değeri kaydetmiştir; bu değer, kristal yarıiletken alt tabakalar üzerine fiziksel buhar biriktirme ile büyütülen katkısız *p*-tipi MoO_3 heteroeklemleri arasında Tablo 4.10'daki en yüksek kendinden beslemeli algılama duyarlılığıdır (Tablo 4.10'da 0 V'ta daha yüksek *D** bildiren çalışmalar (Zhao vd., 2015; Zhao vd., 2022) *n*-tipi MoO_3 tabanlı olup sırasıyla stokiyometri mühendisliğine ve foto-termoelektrik mekanizmaya dayanmaktadır); çözelti temelli, nanoyapılı tam-oksit ikili katmanlarla (ör. TiO_2/MoO_3; Ezhilmaran vd., 2021) karşılaştırıldığında ise aynı mertebede bir başarım sunmaktadır.

Tablo 4.10 MoO_3 tabanlı fotodedektör/fotodiyot performansının literatürle karşılaştırılması

Yapı tipi	Yapı / Aktif Katman / Alt tabaka	R (mA/W)	*D** (Jones)	PS / EQE / SNR	Yükselme / Düşüş	Ref.
Schottky (MIS)	Cu/MoO_3-ZrO_2/*p*-Si; MoO_3-ZrO_2; *p*-Si	—	—	—	—	(Vivek vd., 2019)
Schottky (MIS)	Cu/MoO_3/*p*-Si; MoO_3; *p*-Si	—	—	PS: %95,51 (@130 mW/cm²)	—	(Lazar vd., 2023)
p-n (kendinden beslemeli)	MoO_3/$MoTe_2$; MoO_3-$MoTe_2$; SiO_2	2 (@532 nm, 13 µW, V_{bias}=0 V)	—	I_{on}/I_off: 840 (@532 nm, V_{bias}=0 V)	78/49 µs (@532 nm, V_{bias}=0 V)	(Qi vd., 2024)
p-n (kendinden beslemeli)	ITO/α-MoO_3/*n*-Si/In; α-MoO_3; *n*-Si	63,3 (@405–1550 nm, V_{bias}=0 V)	$3{,}10\times10^{11}$ (V_{bias}=0 V)	—	0,47/0,76 ms (V_{bias}=0 V)	(Zhao vd., 2022)
Schottky (MIS)	Cu/Y-MoO_3/*p*-Si; Y-MoO_3; *p*-Si	1584,87 (@150 mW/cm²)	$9{,}82\times10^{11}$ (@150 mW/cm²)	PS: %4496 (@150 mW/cm²); EQE: %614,54	—	(Vivek vd., 2022)
Fotokond.	W-MoO_2-MoO_3; W katkılı MoO_2-MoO_3; eritilmiş silika FTO	2500 A/W (@365 nm, V_{bias}=5 V)	$1{,}41\times10^{8}$ (V_{bias}=5 V)	EQE: 5×10^{9}% (@365 nm, V_{bias}=5 V)	<10 s (V_{bias}=5 V)	(Zaki vd., 2022)
Bias anahtarı (kendinden beslemeli)	Ir/MoO_3/Si; Ir nanofilm + MoO_3; Si	800 (V_{bias}=0 V)	—	Neg. fotokond. (V_{bias}=0 V)	0,36/0,42 s (V_{bias}=0 V)	(Basyooni-Kabatas vd., 2023)
Schottky	Cr/MoO_3/*n*-Si; Cr/MoO_3/*p*-Si; MoO_3; *n*-Si, *p*-Si	—	—	—	—	(Çaldıran vd., 2021)
p-n	*p*-MoO_3@NiO/*n*-Si; MoO_3 katkılı NiO; *n*-Si	134,6 (@100 mW/cm² halojen)	$1{,}03\times10^{10}$ (@100 mW/cm²)	PS: %1265,4; EQE: %532,3 (@100 mW/cm²)	—	(Marnadu vd., 2025)
Schottky (MIS)	Cu/α-MoO_3/*p*-Si; α-MoO_3 nanoplak; *p*-Si	35,13 (@120 mW/cm²)	$1{,}149\times10^{11}$ (@120 mW/cm²)	PS: %610,51; EQE: %136,22 (@120 mW/cm²)	—	(Vivek vd., 2020)
p-n (çığ)	α-MoO_3 mikrokemer/*p*-Si; α-MoO_3 mikrokemer; *p*-Si	≈$4{,}5\times10^{4}$ A/W (@görünür bant)	—	I_{on}/I_off: 46,7 (@365 nm, 7,0 mW/cm²)	20/20 ms	(Tian vd., 2021)
p-n (kendinden beslemeli)	MoO_{3-x}/*n*-Si; MoO_{3-x}; *n*-Si	—	$6{,}29\times10^{12}$ (@1100 nm, V_{bias}=0 V)	—	≈1 µs (@1100 nm)	(Zhao vd., 2015)
Heteroeklem	*n*-MoO_3/*p*-Si; MoO_3; *p*-Si	—	—	Işık Tepki Oranı: 55,0 (@UV bandı)	7/7 ms (@UV bandı)	(Talebi ve Eshghi, 2024)
Fotodedektör	Ultra ince MoO_3/*n*-Si; MoO_3 (ALD); *n*-Si	81 (V_{bias}=5 V)	—	Yok (V_{bias}=5 V)	—	(Basyooni vd., 2023b)
Heteroeklem (tavlanmamış)	Ag/*p*-MoO_3/*n*-Si/Al; *p*-MoO_3 (≈50 nm, PVD); *n*-Si	0,0267 (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V)	$6{,}61\times10^{8}$ (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V)	PS: %15000 (@1225 W/m²); PS: %625 (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V); EQE: %228,20 (@UV 395 nm, V_{bias}=2,90 V); SNR: 43,52 dB	—	Bu çalışma

Tablo 4.10'un devamı

Yapı tipi	Yapı / Aktif Katman / Alt tabaka	R (mA/W)	*D** (Jones)	PS / EQE / SNR	Yükselme / Düşüş	Ref.
Heteroeklem (200 °C tavlanmış)	Ag/*p*-MoO_3/*n*-Si/Al; *p*-MoO_3 (≈50 nm, PVD); *n*-Si	0,0201 (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V)	$1,57\times10^9$ (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V)	PS: %5530 (@1300 W/m²); PS: %4050 (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V); EQE: %253,60 (@UV 395 nm, V_{bias}=2,90 V); SNR: 34,85 dB	—	Bu çalışma
Heteroeklem (tavlanmamış)	Ag/*p*-MoO_3/*n*-InP/Al; *p*-MoO_3 (≈50 nm, PVD); *n*-InP	0,0220 (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V)	$2,44\times10^9$ (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V)	PS: %8742 (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V); EQE: %1281,00 (@UV 395 nm, V_{bias}=3,00 V); SNR: 38,83 dB	—	Bu çalışma
Heteroeklem (200 °C tavlanmış)	Ag/*p*-MoO_3/*n*-InP/Al; *p*-MoO_3 (≈50 nm, PVD); *n*-InP	$2,39\times10^{-3}$ (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V)	$4,34\times10^7$ (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V)	PS: 1,25 (oran) (@UV 395 nm, V_{bias}=0 V); EQE: %3,42 (@UV 395 nm, V_{bias}=3,00 V); SNR: 1,97 dB	—	Bu çalışma
p-n / tam-oksit (kendinden beslemeli)	FTO/TiO_2/MoO_3 /Ag; TiO_2 (anataz NP) – MoO_3 (nanoyapı, çözelti); FTO cam	108 (@352 nm, 76 µW/cm², V_{bias}=0 V)	$2,26\times10^{10}$ (@352 nm, V_{bias}=0 V)	EQE: %38,04 (V_{bias}=0 V); EQE: %16223 (V_{bias}=−1 V)	—	(Ezhilmaran vd., 2021)
p-n / tam-oksit (kendinden beslemeli)	Ag/Cu_2O–MoO_3/Ag; p-Cu_2O – *n*-MoO_3 (saçtırma); cam / PET	—	—	Fotoakım: 16,6 nA (@550 nm); 39,12 nA (@1000 nm), V_{bias}=0 V; geniş bant (UV–NIR)	—	(Mondal vd., 2025)

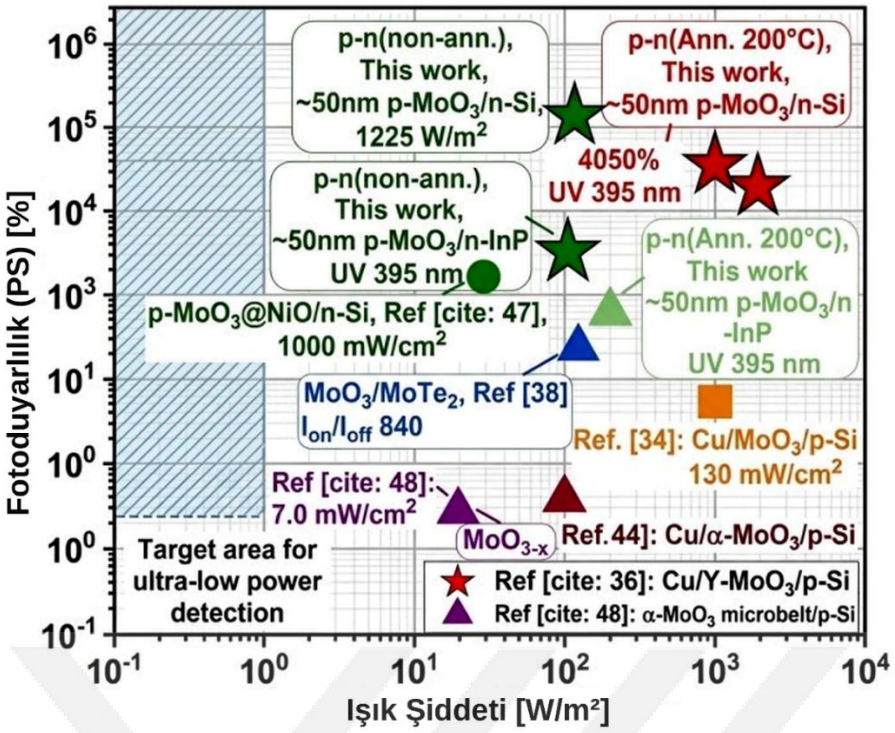
Bu çalışmada PS, fotoakımın karanlık akıma oranı olarak tanımlanmıştır ($PS = I_{LH}/I_d$, Denklem 4.22) ve yüzde biçiminde verilmiştir. Literatürde bildirilen yüzde değerleri ise genellikle $PS(\%) = [(I_{Ph} - I_D)/I_D] \times 100$ bağıntısıyla hesaplanmaktadır (ör. Vivek vd., 2022). $PS \gg 1$ olan durumlarda iki tanım arasındaki fark %1'in altında kalmakta, *PS*'in 1'e yaklaştığı durumlarda ise belirginleşmektedir; bu nedenle tavlanmış *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtı için değer oran biçiminde verilmiştir.

Bu değer, 5 V besleme gerektiren ALD ile büyütülmüş MoO_3/*n*-Si aygıtının (81 mA/W; Basyooni vd., 2023b) aksine tamamen beslemesiz koşulda elde edilmiştir; bu da kendinden beslemeli yakın UV algılama için bir alt tabaka olarak InP'nin avantajını vurgulamaktadır. Üçüncüsü, tavlanmış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtı, UV 395 nm'de *D** değerini $1,57\times10^9$ Jones'a kadar daha da iyileştirmektedir; bu değer, önemli ölçüde daha yüksek besleme altında elde edilen literatür değerleriyle karşılaştırılabilir düzeydedir.

Bu sonuçlar, gelecekteki MoO_3 tabanlı fotodedektör tasarımı için çeşitli çıkarımlar içermektedir. (i) Alt tabaka seçimi en önemli faktördür: *n*-Si ve *n*-InP, MoO_3/yarıiletken bant hizalaması ve düşük iç sızıntı akımı sayesinde sırasıyla görünür ve UV aralığında en iyi performans değerlerini sunmaktadır. (ii) Biriktirme sonrası

herhangi bir işleme tabi tutulmadan, biriktirildiği hâliyle yapılandırma hâlihazırda rekabetçi bir kendinden beslemeli performans sergilemektedir; bu da PVD ile biriktirilen *p*-MoO_3'ün kendinden beslemeli fotodedektörleri gerçekleştirmek için basit ve etkili bir yaklaşım sağladığını göstermektedir. (iii) 200°C'de seçici tavlama, *p*-*n* eklem oluşumu yoluyla Si alt tabakalar üzerinde UV performansını artırabilir, ancak InP tabanlı aygıtları bozar; bu nedenle alt tabakaya özgü tavlama protokolleri esastır. (iv) SiC gibi geniş bant aralıklı alt tabakalar, yüksek karanlık durum bariyer yükseklikleri sunarken arayüz direnci ile sınırlıdır ve tam doğrultucu eklem oluşumu için daha yüksek sıcaklıkta işlemler gerektirir; bu da gelecekteki optimizasyon için bir yol sunar. Birlikte değerlendirildiğinde bu bulgular, tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si ve *p*-MoO_3/*n*-InP heteroeklemlerini sırasıyla kendinden beslemeli geniş bantlı görünür ışık ve UV algılaması için umut vaat eden adaylar olarak belirlemekte; aynı zamanda yeni nesil MoO_3 tabanlı heteroeklem fotodedektörler geliştirilmesi ve optimizasyonu için alt tabakaya özgü bir tasarım çerçevesi sunmaktadır.

Alt tabaka bazında performans ve bu çalışmanın literatürdeki konumu, Şekil 4.17'de karşılaştırmalı olarak sunulmaktadır; bu grafik, dört aygıtın ışık duyarlılığı (*PS*) değerlerini farklı aydınlatma koşulları altında bir araya getirmekte ve literatürdeki MoO_3 tabanlı fotodedektörlerle kıyaslamaktadır. Grafik, hem alt tabakaya bağlı performans hiyerarşisini hem de bu çalışmadaki aygıtların literatüre kıyasla yüksek *PS* değerlerini açıkça ortaya koymaktadır: tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si görünür aralıkta (1225 W/m²) en yüksek ışık duyarlılığını sergilerken, tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-InP UV bölgesinde (395 nm) en yüksek PS değerine ulaşmaktadır; her iki aygıt da karşılaştırılan literatür çalışmalarının belirgin biçimde üzerinde yer almaktadır. Tavlanmış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtı ise UV 395 nm'de $PS \approx$ %4050 (oran ≈ 40,5) ile öne çıkmaktadır. Buna karşın, Şekil 4.17'de de görüldüğü üzere, tavlama sonrasında *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtının *PS* değeri tavlanmamış durumun altına düşmektedir; bu bozulma, yukarıda tartışıldığı gibi 395 nm altındaki diyot parametrelerinin iyileşmesine karşın MoO_3/InP arayüzündeki karşılıklı difüzyon ve stokiyometrik değişimlerin fotoyanıtı sınırlamasından kaynaklanmaktadır.



Şekil 4.17 Tek bir entegre şekilde MoO_3 tabanlı fotodedektörlerin performans karşılaştırması: çeşitli konfigürasyonlar için ışık duyarlılığı ve ışık yoğunluğu

4.4 Tavlamanın Alt Tabakaya Bağlı Etki Mekanizması ve Enerji-Bant Yorumu

Önceki bölümlerde sunulan elektriksel, dielektrik ve optoelektronik bulguların ortak paydası, aygıt başarımının güçlü biçimde alt tabakaya ve ısıl işlem geçmişine bağlı olmasıdır. Bu bağımlılığın fiziksel kökeni, *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken arayüzündeki enerji-bant yapısı ve arayüz kimyası ile açıklanabilir (Şekil 3.2d).

MoO_3'ün çok yüksek iş fonksiyonu (yaklaşık 6,8 eV), tüm alt tabakalarla temas ettiğinde büyük bir yerleşik potansiyel (qV_{bi}) ve belirgin bir bant bükülmesi oluşturur (Greiner ve Lu, 2013; Meyer vd., 2012). Bu yapı, yarıiletkenin değerlik bandındaki oyukların MoO_3'e doğru toplanmasını sağlarken iletim bandı elektronları için yüksek bir engel sunar; dolayısıyla heteroeklem, oyuk-seçici bir doğrultucu gibi davranır (Battaglia vd., 2014b; Greiner vd., 2012). Yerleşik potansiyelin alt tabakalar arasındaki sıralaması, ölçülen bariyer yükseklikleri ve doğrultma oranlarındaki farklılıklarla büyük ölçüde aynı yöndedir; her iki ölçütte de en yüksek değerler *p*-MoO_3/*n*-SiC, en düşük değerler ise *p*-MoO_3/*n*-InP heteroekleminde elde edilmiştir.

p-MoO_3/*n*-SiC heteroekleminde 200 °C'de ortam havasında uygulanan tavlamanın bariyer yüksekliğini 1,531 eV'tan 1,203 eV'a düşürmesi, idealite faktörünü 2,348'den 4,286'ya yükseltmesi ve seri direnci $1{,}64\times10^{4}$ Ω'dan $3{,}68\times10^{7}$ Ω'a çıkarması, birbirini tamamlayan iki mekanizmayla açıklanabilir. İlk olarak ısıl işlem sırasında MoO_3 tabakası oksijen kaybederek stokiyometri-altı MoO_{3-x} bileşimine kaymakta; oksijen boşluğu yoğunluğundaki bu artış, tabakanın etkin iş fonksiyonunu düşürerek arayüzdeki bant hizalamasını bozmakta ve bariyer yüksekliğinin azalmasına yol açmaktadır (Greiner vd., 2012; Guo ve Robertson, 2014). Bu yorum, doyum akımının beş mertebe artmasıyla tutarlıdır. İkinci olarak 4H-SiC yüzeyi kimyasal açıdan kararlı olduğundan (Friedrichs ve Rupp, 2005; La Via vd., 2023), ısıl işlem arayüzde iyi tanımlı bir reaksiyon tabakası oluşturmak yerine MoO_3 filminin yeniden düzenlenmesine ve arayüzde ek elektronik durumların ortaya çıkmasına neden olmaktadır. Artan arayüz durum yoğunluğu, taşınımın giderek tuzak destekli hâle gelmesini ve idealite faktörünün birimden uzaklaşmasını açıklamaktadır; seri dirençteki büyük artış ise MoO_3 tabakasının süreksizleşmesi ve arayüzde yüksek dirençli bir bölgenin oluşmasıyla ilişkilendirilebilir. Sonuç olarak doğrultma oranı $2{,}02\times10^{5}$'ten 2,12'ye gerilemekte ve eklem doğrultucu karakterini yitirmektedir.

Buna karşılık *p*-MoO_3/*n*-GaAs aygıtında aynı ısıl işlem, doğrultma karakteristiklerini iyileştirmektedir: seri direnç %88,3 azalmakta ($1{,}33\times10^{6} \rightarrow 1{,}56\times10^{5}$ Ω), idealite faktörü 2,902'den 2,597'ye gerilemekte ve doğrultma oranı yaklaşık yirmi kat artmaktadır ($3{,}46\times10^{3} \rightarrow 6{,}78\times10^{4}$). Bu davranış, 200°C'lik ısıl bütçenin GaAs için görece ılımlı olmasıyla açıklanabilir. Arsenik atomlarının yüzeyden dışa difüzyonu ile Ga_2O_3 ve As_2O_3 gibi düzensiz doğal oksitlerin belirgin biçimde büyümesi, literatürde genellikle daha yüksek sıcaklıklarda bildirilen süreçlerdir (Sarkar vd., 2018); bu sıcaklıkta baskın etkinin, biriktirilmiş hâldeki arayüzde bulunan kusurların kısmen pasive olması ve MoO_3/GaAs temasının yoğunlaşarak iyileşmesi olduğu düşünülmektedir (Doğan vd., 2008). Bariyer yüksekliğindeki sınırlı azalma (1,105 → 1,064 eV) ve doyum akımındaki 4,9 katlık artış da bu çerçeveyle uyumludur. *n*-Si ve *n*-InP alt tabakaları bu iki uç davranış arasında orta düzeyde tepkiler sergiler: silisyumun görece kararlı yüzey kimyası tavlamaya daha toleranslıyken, InP'de ise ikinci ölçüm serisinde (Tablo 4.8) karanlık diyot parametreleri, özellikle idealite faktörü, belirgin biçimde iyileşmekle birlikte (5,30 → 2,21), fosfor kaybı ve arayüz

reaksiyonları optoelektronik yanıtı sınırlamaktadır (Chen vd., 2016; Janardhanam vd., 2010).

Genel olarak, tavlamanın etkisini belirleyen baskın etken, alt tabaka yüzeyinin termal/kimyasal kararlılığı ile arayüzde oluşan reaksiyon ürünleridir. Bu nedenle MoO_3 tabanlı heteroeklemlerde ısıl işlemin etkisi alt tabakaya göre nitelik değiştirmektedir: reaktif yüzeyli GaAs'ta arayüz kusurlarının kısmen giderilmesiyle doğrultma başarımı iyileşirken, kimyasal açıdan kararlı ancak MoO_3 ile ısıl uyumu sınırlı olan 4H-SiC'de aynı işlem, oksijen kaybı ve arayüz durum oluşumu yoluyla doğrultucu karakteri bozmaktadır. Dolayısıyla ısıl işlem tek tip bir iyileştirme adımı olarak değil, her alt tabaka için ayrı ayrı optimize edilmesi gereken bir parametre olarak ele alınmalıdır.

4.5 Bütünleştirici Tartışma

Bu tezde sunulan üç çalışma, ortak bir aygıt yapısının — bant aralıkları 1,12–3,26 eV arasında değişen dört n-tipi alt tabaka (Si, GaAs, InP ve 4H-SiC) üzerindeki *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerinin— birbirini tamamlayan üç kesitini oluşturmaktadır. Bulgular bir araya getirildiğinde, alt tabakanın yalnızca pasif bir taşıyıcı değil; aygıtın elektriksel, morfolojik ve optoelektronik davranışını eşzamanlı olarak belirleyen merkezî bir tasarım değişkeni olduğu görülmektedir.

İkinci çalışmada geliştirilen otomatik SEM metroloji çerçevesi, birinci ve üçüncü çalışmalarda gözlenen alt tabakaya bağlı farklılıkların nesnel yapısal temelini sağlamıştır. Kontak çapı, MoO_3 parçacık yoğunluğu ve kesit film kalınlığının (37–72 nm) tekrarlanabilir biçimde nicelendirilmesi; elektriksel ve optoelektronik başarımdaki alt tabakalar arası farklılıkların morfolojik kökenine bağlanabilmesini mümkün kılmış, böylece üç çalışma arasındaki karşılaştırmaların güvenilirliğini artırmıştır.

Birinci çalışmada ortaya konan, tavlamanın alt tabakaya seçici etkisi, üçüncü çalışmadaki optoelektronik bulgularla doğrudan ilişkilidir. Aynı 200 °C ısıl tavlama; *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroekleminde bariyer yüksekliğini 1,531 eV'tan 1,203 eV'a düşürüp doğrultma oranını $2{,}02\times10^{5}$'ten 2,12'ye indirerek doğrultucu karakteri ortadan

kaldırırken, *p*-MoO_3/*n*-GaAs aygıtında seri direnci %88 azaltmış ve doğrultma oranını yaklaşık yirmi kat artırmıştır. Bu durum, aynı aygıtların fotodedektör olarak çalıştırıldığı üçüncü çalışmada başarımın güçlü biçimde alt tabakaya ve işlem geçmişine bağlı kalmasıyla tutarlıdır.

Üç çalışmanın bulguları birlikte değerlendirildiğinde, alt tabaka seçiminin uygulama hedefine göre yönlendirilmesi gerektiği ortaya çıkmaktadır: güç elektroniği açısından kritik olan doğrultma başarımı ve dielektrik karakterizasyon için biriktirilmiş (tavlanmamış) *p*-MoO_3/*n*-SiC öne çıkarken; görünür bölge fotoyanıtı için tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si (1225 W/m²'de %15000 ışık duyarlılığı ve 43,52 dB *SNR*), morötesi özgül algılama için ise *p*-MoO_3/*n*-InP (395 nm'de $D^* = 2{,}44\times10^9$ Jones) en uygun seçenekler olmuştur. Bu bütünleşik tablo, MoO_3 tabanlı heteroeklem aygıtların tasarımında "alt tabaka + tavlama" ikilisinin, hedeflenen işleve göre ayarlanabilen ortak bir tasarım ilkesi sunduğunu göstermektedir.

4.6 Çalışmalar Arası Nicel Sentez: Morfoloji–Eklem Kalitesi İlişkisi ve Fotoyanıt Ayrışması

Tezin üç çalışması, aynı aygıt yapısı üzerinde yürütüldüğünden, ikinci çalışmada elde edilen nesnel morfolojik nicelikler ile birinci ve üçüncü çalışmalarda ölçülen elektriksel ve optoelektronik parametrelerin doğrudan eşleştirilmesine imkân tanımaktadır. Bu bölümde, söz konusu eşleştirme nicel olarak yapılmakta ve tezin bütünleştirici savı sınanmaktadır. Karşılaştırmada, tavlamanın MoO_3 parçacık yoğunluğunda yol açtığı bağıl değişim ($\Delta\rho$) bağımsız değişken; karanlık koşullarda ölçülen diyot parametrelerindeki değişimler (Δn, $\Delta\Phi_{B0}$, R_s ve R_{sh} oranları) ile UV özgül algılamadaki değişim ise bağımlı değişkenler olarak ele alınmıştır. Kullanılan veriler Tablo 4.6, Tablo 4.8 ve Tablo 4.9'dan alınmış olup, bu bölümdeki karşılaştırmada, karanlık diyot parametreleri —aydınlatmalı ölçümlerle aynı seriden gelmeleri ve dolayısıyla fotoyanıt değişimleriyle doğrudan eşleştirilebilir olmaları nedeniyle— Tablo 4.8'den alınmıştır. Bölüm 4.1'de sunulan ilk ölçüm serisi (Tablo 4.1) kullanıldığında *n*-Si ve *n*-InP aygıtları için Δn işaretleri değişmekte; bu nedenle aşağıda verilen korelasyon katsayıları, tüm ölçüm serilerini kapsayan genel bir sonuç değil, ilgili seri içindeki eğilimin göstergesi olarak değerlendirilmelidir.

Söz konusu korelasyon katsayıları Pearson yöntemiyle hesaplanmıştır; katsayı, iki değişken arasındaki doğrusal ilişkinin yönünü ve gücünü −1 (tam ters yönlü ilişki) ile +1 (tam aynı yönlü ilişki) arasında nicelendirir (Montgomery ve Runger, 2018):

$$r = \frac{\sum(x_i-\overline{x})(y_i-\overline{y})}{\sqrt{\sum(x_i-\overline{x})^2\sum(y_i-\overline{y})^2}} \tag{4.26}$$

Burada x_i ve y_i eşleştirilmiş gözlemleri, $\bar{x}$ ve $\bar{y}$ örneklem ortalamalarını göstermektedir. Katsayının istatistiksel anlamlılığı, H_0: $r = 0$ hipotezine karşı $n - 2$ serbestlik dereceli iki kuyruklu Student t testi ile değerlendirilmiştir:

$$t = \frac{r\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-r^2}} \tag{4.27}$$

p değeri, t dağılımının kümülatif olasılığından iki kuyruklu olarak hesaplanmış ve anlamlılık eşiği $\alpha = 0{,}05$ alınmıştır.

Tablo 4.11 Tavlamanın morfolojik etkisi (Δρ) ile karanlık diyot parametrelerindeki ve UV özgül algılamadaki değişimlerin alt tabaka bazında karşılaştırılması. Oranlar, tavlanmış değerin tavlanmamış değere bölümüdür

Alt tabaka	Δρ (%)	Δn	ΔΦ_{B0} (eV)	R_s oranı	R_{sh} oranı	$\lvert D^*\rvert$ oranı (395 nm)
***n*-Si**	−37,7	+0,57	−0,106	1,27×	1,53×	2,4× ↑
***n*-4H-SiC**	−34,2	+0,77	−0,167	$2{,}68\times10^{3}$	$2{,}50\times10^{-2}$	4,9× ↑
***n*-GaAs**	+17,5	−1,20	+0,030	0,12×	2,64×	5,2× ↑
***n*-InP**	+147,4	−3,09	+0,076	0,38×	3,60×	56× ↓

p-MoO_3/*n*-GaAs ve *p*-MoO_3/*n*-4H-SiC aygıtlarının tavlanmamış durumdaki D^* değerleri negatiftir (395 nm'de ışık bastırımı); bu iki satırda oran mutlak değerler üzerinden hesaplanmış olup işaret değişimini yansıtmamaktadır. Alt tabaka sayısı dört olduğundan, tabloya dayalı korelasyon katsayıları eğilim göstergesi olarak yorumlanmalıdır.

Tablo 4.11'deki en dikkat çekici bulgu, morfolojik değişimin yönü ile karanlık diyot parametrelerindeki değişimlerin yönü arasındaki büyük ölçüde tutarlı uyumdur. Tavlama sonrası parçacık yoğunluğunun arttığı sistemlerde (*n*-GaAs ve *n*-InP) idealite faktörü düşmekte, bariyer yüksekliği artmakta, seri direnç azalmakta ve şönt direnç yükselmektedir; parçacık yoğunluğunun azaldığı sistemlerde (*n*-Si ve *n*-4H-SiC) ise dört parametrenin tamamı ters yönde değişmektedir. Dört alt tabakanın her biri için dört karanlık diyot parametresi (Δn, ΔΦ_{B0}, R_s ve R_{sh}) değerlendirildiğinde, toplam on altı karşılaştırmanın on beşinde işaret uyumu sağlanmıştır; tek istisna, parçacık

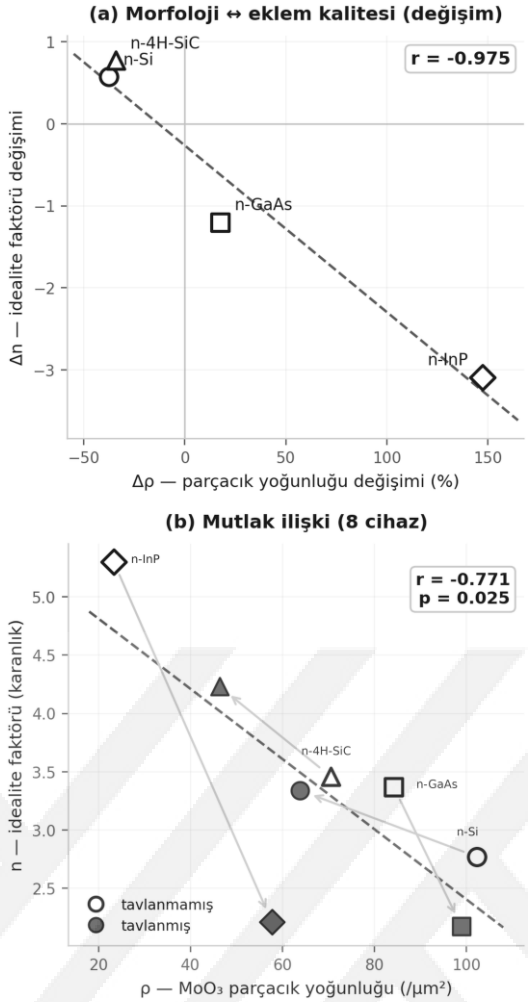
yoğunluğu azalmasına karşın şönt direncin bir miktar arttığı (1,53×) *n*-Si alt tabakasıdır. Nicel olarak, Δρ ile Δ*n* arasındaki Pearson korelasyon katsayısı $r = -0{,}975$ ($n = 4$; $p = 0{,}025$); Δρ ile $\Delta\Phi_{B0}$ arasındaki katsayı ise $r = +0{,}856$ olarak hesaplanmıştır ($n = 4$; $p = 0{,}143$; Şekil 4.18a). Alt tabaka sayısının dört ile sınırlı olması nedeniyle bu katsayılar kesin istatistiksel çıkarımdan çok eğilim göstergesi olarak değerlendirilmelidir; nitekim $\Delta\Phi B_0$ ilişkisi %5 anlamlılık düzeyinde istatistiksel olarak anlamlı değildir.

Bu ilişkinin yalnızca değişimlerde değil, mutlak değerlerde de geçerli olduğu görülmüştür. Tavlanmış ve tavlanmamış sekiz aygıtın tamamı birlikte değerlendirildiğinde, parçacık yoğunluğu ile idealite faktörü arasında tutarlı bir ters ilişki bulunmaktadır ($r = -0{,}771$; $p = 0{,}025$; Şekil 4.18b). Şekil 4.18b'de her simge türü bir alt tabakayı temsil etmekte olup içi boş simgeden dolu simgeye uzanan oklar tavlama yörüngelerini gösterir: *n*-InP, grafiğin sol üst köşesinden (düşük ρ, yüksek *n*) sağ alta uzanan en uzun iyileşme yörüngesini çizerken; *n*-Si ve *n*-4H-SiC ters yönde, parçacık yoğunluğu azalırken idealite faktörünün bozulduğu bölgeye kaymaktadır. Bu zıt yönlü yörüngelerin aynı eğilim çizgisi etrafında toplanması, gözlenen ilişkinin tek bir aygıttan kaynaklanmadığını görsel olarak da doğrulamaktadır. Söz konusu sekiz nokta dört aygıtın tavlanmamış ve tavlanmış hâllerinden oluştuğundan birbirinden tümüyle bağımsız değildir; bu nedenle ilişki, kesin bir istatistiksel anlamlılık iddiası olarak değil, gözlenen eğilimin tutarlılığının bir göstergesi olarak değerlendirilmelidir. Bununla birlikte bulgu, bağıntının tavlama işlemine özgü bir rastlantı olmadığını, MoO_3 filminin morfolojisi ile eklem kalitesi arasındaki yapısal bir bağıntıyı yansıttığını göstermektedir. Fiziksel olarak bu davranış, parçacık yoğunluğunun artmasının daha ince taneli ve daha konform bir kaplamaya karşılık gelmesiyle açıklanabilir: bu durumda alt tabaka yüzeyi daha eksiksiz örtülür, şönt yolları azalır ve bariyer yüksekliği dağılımı daha homojen hâle gelir; sonuç olarak idealite faktörü birime yaklaşır ve şönt direnç yükselir (Baek vd., 2013). Buna karşılık parçacık yoğunluğunun azalması, tanelerin birleşerek daha iri fakat daha seyrek adalar oluşturmasına, dolayısıyla kaplamanın süreksizleşmesine ve etkin kontak alanının küçülmesine işaret eder; bu da bariyer homojensizliğini ve seri direnci artırır.

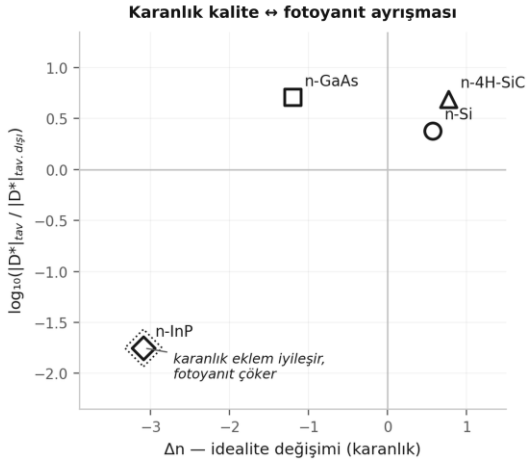
Bununla birlikte, karanlık diyot kalitesindeki iyileşmenin fotodedektör başarımına doğrudan yansımadığı görülmüştür. Bu ayrışma en belirgin biçimde *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtında ortaya çıkmaktadır: tavlama, bu aygıtın karanlık idealite faktörünü 5,30'dan 2,21'e düşürerek eklem kalitesinde tezdeki en büyük iyileşmeyi sağlamasına karşın, 395 nm'deki özgül algılamayı $2{,}44\times10^{9}$ Jones'tan $4{,}34\times10^{7}$ Jones'a, yani yaklaşık 56 kat düşürmektedir. Tersine *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtında tavlama, karanlık idealite faktörünü kötüleştirmesine (2,77 → 3,34) rağmen UV özgül algılamasını $6{,}61\times10^{8}$'den $1{,}57\times10^{9}$ Jones'a çıkarmaktadır. Şekil 4.19'da görüldüğü üzere, karanlık idealite değişimi ile özgül algılama değişimi arasındaki ilişki beklenenin tersi yöndedir.

Bu ayrışma, tezin bütünleştirici çıkarımını oluşturmaktadır: *MoO_3* film morfolojisi öncelikle karanlık yük taşınımını yönetirken, fotoyanıt başarımını belirleyen asıl etken arayüzün kimyasal bütünlüğüdür.

Parçacık yoğunluğundaki artış, karanlık sızıntı yollarını bastırarak daha ideal bir diyot üretir; ancak aynı ısıl işlem arayüzde karşılıklı difüzyon ve stokiyometrik bozulma meydana getiriyorsa (Dalle Feste vd., 2021) — ki *n*-InP'de In ve P türlerinin MoO_3 tabakasına difüzyonunun bu duruma yol açtığı değerlendirilmektedir (Bölüm 4.3) — foto-üretilen taşıyıcıların toplanma verimi çöker ve fotoyanıt, karanlık ölçütlerdeki iyileşmeye rağmen bozulur. Dolayısıyla bir heteroeklem fotodedektörün başarımı, yalnızca karanlık diyot parametrelerine (n, Φ_{B0}, R_s, R_{sh}) bakılarak öngörülemez; morfolojik yoğunlaşma ile arayüz kimyasal kararlılığının birlikte değerlendirilmesi gerekir. Bu çıkarım, tavlanmamış aygıtların neden en yüksek kendinden beslemeli başarımı sergilediğini de açıklamaktadır: tavlanmamış durumda arayüz kimyasal olarak bozulmamıştır ve fototaşıyıcı toplama verimi korunmaktadır.



Şekil 4.18 Morfoloji ile karanlık eklem kalitesi arasındaki çalışmalar arası ilişki. (a) Tavlamanın yol açtığı parçacık yoğunluğu değişimi (Δρ) ile karanlık idealite faktörü değişimi (Δ*n*) arasındaki ilişki; (b) sekiz aygıtın tamamı için parçacık yoğunluğu (ρ) ile idealite faktörü (*n*) arasındaki mutlak ilişki (içi boş işaretler: tavlanmamış, dolu işaretler: tavlanmış; oklar tavlama yönünü gösterir)



Şekil 4.19 Karanlık eklem kalitesi ile UV fotoyanıt başarımı arasındaki ayrışma. Yatay eksen tavlamayla karanlık idealite faktöründeki değişimi, düşey eksen UV özgül algılamadaki (*D**) logaritmik oran değişimini gösterir; *n*-InP'de karanlık eklem iyileşirken fotoyanıtın çökmesi

Son olarak, ikinci çalışmadaki metrolojik altyapının birinci çalışmaya doğrudan girdi sağladığı bir bağlantı da bu sentez kapsamında kurulmuştur. Dielektrik çözümlemede boşluk kapasitansının (C_0) hesaplanması, kontak alanı ve film kalınlığının bilinmesini gerektirmektedir; bu iki büyüklük literatürde çoğunlukla nominal maske boyutundan ve hedeflenen biriktirme kalınlığından varsayım yoluyla alınmaktadır. Bu tezde ise dielektrik çözümlemede her iki büyüklük de aynı aygıtın SEM görüntülerinden nicel olarak ölçülmüş ($A = 2{,}29\times10^{-2}$ cm²; d = 59,1 nm) ve bu çözümlemeye doğrudan girdi olarak verilmiştir.

Böylece MoO_3 tabakasının etkin dielektrik sabiti, varsayılmış bir geometriye değil ölçülmüş bir geometriye dayanarak elde edilmiştir. Bu bağlantı, ikinci çalışmada geliştirilen otomatik ölçüm çerçevesinin yalnızca betimleyici bir morfoloji aracı olmadığını, elektriksel modelin nicel doğruluğunu belirleyen bir bileşen olduğunu göstermektedir.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu bölümde, Giriş'in 1.3 kısmında tanımlanan dört araştırma sorusu elde edilen bulgular ışığında yanıtlanmakta; ardından her çalışmaya ilişkin sonuçlar ve gelecek çalışmalara yönelik öneriler sunulmaktadır.

(i) Ortam havasında uygulanan 200°C ısıl tavlamanın etkisi alt tabakaya güçlü biçimde bağlıdır: tavlama, *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroekleminde bariyer yüksekliğini düşürüp seri direnci artırarak doğrultucu davranışı ortadan kaldırırken, *p*-MoO_3/*n*-GaAs aygıtında seri direnci azaltıp doğrultma oranını artırmıştır. Dielektrik ölçümlerin gerçekleştirildiği tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-SiC yapısında ise Debye dışı gevşeme, arayüz polarizasyonu ve atlama (hopping) temelli AC iletkenlik gözlenmiştir.

(ii) Kontak çapı, MoO_3 parçacık yoğunluğu ve kesit film kalınlığını nesnel ve tekrarlanabilir biçimde ölçen otomatik bir SEM görüntü işleme çerçevesi kurulabilmiştir; çerçeve, manuel ölçümlerle karşılaştırıldığında bağıl farkın %4 (Si-Tavlanmış aygıt) ile %93 (InP-Tavlanmış aygıt) arasında değiştiği; sekiz aygıtın altısında bu farkın %20'nin altında kaldığı belirlenmiştir. Uyum düzeyi alt tabakaya ve ısıl işlem durumuna bağlı olarak belirgin biçimde farklılaşmıştır.

(iii) Aynı heteroeklemler, harici besleme olmadan (V_{bias} = 0 V) çalışan görünür–UV fotodedektörler olarak işlev görmüş ve başarım alt tabakaya bağlı kalmıştır: en yüksek görünür ışık duyarlılığı tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtında, en yüksek morötesi özgül algılaması ise 395 nm'de *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtında elde edilmiştir.

(iv) Elektriksel/dielektrik davranış, yapısal metroloji ve optoelektronik başarım birlikte değerlendirildiğinde, alt tabaka ve tavlama temelli ortak bir tasarım ilkesi tanımlanabilmiş; uygulama hedefine göre en uygun alt tabaka–işlem birleşiminin seçilebildiği gösterilmiştir. Çalışmalar arası nicel sentez, tavlamanın yol açtığı morfolojik değişim ($\Delta\rho$) ile karanlık diyot parametrelerindeki değişimler arasında dört alt tabaka ve dört parametre için yapılan on altı karşılaştırmanın on beşinde işaret uyumu ve güçlü korelasyonlar ortaya koymuş ($\Delta\rho$–Δn için $r = -0{,}975$; $\Delta\rho$–$\Delta\Phi_{B0}$ için

r = +0,856); buna karşılık karanlık eklem kalitesi ile fotoyanıt başarımının birbirinden ayrıştığını göstermiştir (ayrıntılı sentez için bkz. Bölüm 4.6).

5.1 Alt Tabakaya Bağlı Termal Modülasyon: *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklemlerin Elektriksel ve Dielektrik Özellikleri

Bu çalışma, hava atmosferinde 200 °C'de uygulanan düşük sıcaklıkta tavlama işleminin, *p*-MoO_3/*n*-tipi yarıiletken heteroeklem diyotlarında arayüz mühendisliği için etkili ancak alt tabakaya seçici bir yöntem olarak hizmet ettiğini göstermektedir. Araştırmanın dikkat çekici bulgularından biri, *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroeklem diyodunun elektriksel karakteristiğinde tavlama sonrasında meydana gelen belirgin değişimdir. Tavlama öncesinde bariyer yüksekliği ve doğrultma oranı sırasıyla 1,531 eV ve $2{,}02\times10^5$ iken, tavlama sonrasında bu değerler sırasıyla 1,203 eV ve 2,12'ye düşmektedir. Bu değişim, MoO_3 tabakasının ısıl işlem sırasında oksijen kaybederek stokiyometri-altı MoO_{3-x} bileşimine dönüşmesi ve MoO_3/SiC arayüzünde ek elektronik durumların oluşması ile açıklanabilir. Oksijen eksikliğine bağlı olarak oluşan boşluklar ve arayüz durumları etkin bariyer yüksekliğini azaltırken, tuzak destekli taşıyıcı taşınımını artırarak doğrultucu karakterin büyük ölçüde ortadan kalkmasına neden olmaktadır.

p-MoO_3/*n*-GaAs heteroekleminde ise aynı tavlama koşulu ters yönde sonuç vermiş; seri direncin yaklaşık %88 oranında düşmesine eşlik eden yaklaşık yirmi katlık doğrultma oranı artışıyla aygıt başarımı belirgin biçimde yükselmiştir. *p*-MoO_3/*n*-InP yapısında ise ilk ölçüm serisinde (Tablo 4.1) seri direnç azalmasına karşın idealite faktörünün bozulduğu ara bir sonuç gözlenmiştir; ikinci ölçüm serisinde (Tablo 4.8) ise idealite faktörü belirgin biçimde iyileşmiştir. Bu aygıtta parametre çıkarımının ölçüm serisine duyarlı olması, yüksek arayüz durum yoğunluğunun bir göstergesi olarak yorumlanmış ve Bölüm 4.3'te ayrıntılı biçimde ele alınmıştır. *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtında ise her iki parametre de sınırlı ölçüde değişmiştir. Gözlenen bu alt tabakaya bağlı farklılaşma, ısıl işlem sırasında arayüz tuzaklarının pasivasyonu ile ısıl yolla etkinleşmesinin eş zamanlı ve birbiriyle yarışan süreçler olarak işlediği yorumunu desteklemektedir. Tamamlayıcı bir dielektrik çalışma; *p*-MoO_3/*n*-SiC heteroekleminin tepkisinin, arayüz durum yoğunluğu ve enerji dağılımından doğrudan etkilenen Debye

dışı gevşeme, arayüz polarizasyonu ve AC atlama (hopping) iletkenliğinden kaynaklandığını ortaya koymaktadır.

Özetle bu sonuçlar; alt tabakanın yalnızca mekanik destek sağlamaktan çok daha fazlasını etkilediğini, aksine MoO_3 tabanlı heteroeklemlerin arayüzel termodinamik süreçlerinde kilit bir bileşen olduğunu kanıtlamaktadır. Elde edilen bulgular, yarıiletken alt tabakanın arayüz kusur kimyasını, yük taşınım yollarını ve dielektrik gevşeme davranışını yöneten etkin bir parametre olduğunu açıkça göstermektedir. Bu alt tabakaya bağlı tavlama metodolojisi, MoO_3'ün gelecekteki güç elektroniği ve optoelektronik aygıtlara dâhil edilmesine ilişkin değerli tasarım bilgileri sunmaktadır.

5.2 Yarıiletken Aygıtlarda Hassas Metroloji için Otomatik SEM Görüntü İşleme

İkinci çalışmada, *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken aygıtlarının yapısal niceliklerini ölçmek için yarı ve tam otomatik tekniklerin birleştirildiği bir SEM görüntü analizi çerçevesi geliştirilmiştir. Çerçeve üç ölçüm görevini kapsamaktadır: ölçek çubuğu kalibrasyonuna dayalı yarı otomatik A_g kontak çapı ölçümü, Otsu eşiklemesiyle tam otomatik MoO_3 parçacık yoğunluğu analizi ve sistematik düzeltme faktörleriyle kesit film kalınlığı ölçümü. Manuel ölçümlerle karşılaştırıldığında kesit kalınlık değerlerindeki bağıl fark %4 (Si-Tavlanmış aygıt) ile %93 (InP-Tavlanmış aygıt) arasında değişmiş; sekiz aygıtın altısında bu fark %20'nin altında kalmıştır (Tablo 4.7). En yüksek uyum Si-Tavlanmış aygıtta elde edilmiş olup, bu durum Si ile MoO_3 arasındaki zıt kontrast özelliklerinin kesit görüntülemede katman sınırını daha belirgin kılmasıyla açıklanmıştır. En büyük sapmanın görüldüğü InP-Tavlanmış aygıtta ise ölçüm alanı boyunca tutarsız film kalınlığı, film morfolojisindeki yerel değişimler ve InP alt tabakası için kullanılan düzeltme faktörlerinin sınırlılıkları olası nedenler olarak değerlendirilmiş olup, bu durum ek araştırma gerektirmektedir. Böylece elektriksel ve optoelektronik başarımdaki alt tabakalar arası farklılıklar, nesnel ve tekrarlanabilir morfolojik niceliklerle ilişkilendirilebilmiştir. Çerçevenin ileride derin öğrenme tabanlı segmentasyon ve alt tabakaya özgü kalibrasyonla genişletilmesi, ölçüm doğruluğunu daha da artırabilir.

5.3 *p*-MoO_3/*n*-Yarıiletken Heteroeklemlerine Dayalı Kendinden Beslemeli Görünür-UV Fotodiyotlar

Üçüncü çalışmada, dört alt tabaka (*n*-Si, *n*-GaAs, *n*-InP ve *n*-4H-SiC) üzerindeki *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemleri, tavlanmamış ve tavlanmış durumlarda hem elektriksel olarak karakterize edilmiş hem de kendinden beslemeli fotodedektör olarak sınanmıştır. En dikkat çeken sonuç, tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtında elde edilmiştir: 1225 W/m²'de %15000 ışık duyarlılığı ve V_{bias} = 0 V'ta 43,52 dB sinyal-gürültü oranı. Bu değerler, aygıtın harici bir güç kaynağı olmadan çalıştığını ve literatürde bildirilen MoO_3 tabanlı fotodedektörlerin çoğundan daha iyi başarım gösterdiğini ortaya koymaktadır (Tablo 4.10). Morötesi bölgede ise en yüksek özgül algılama, tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtında görülmüş (D^* = 2,44×10^9 Jones, 395 nm), bu da InP'yi yakın-UV algılama için elverişli bir alt tabaka konumuna getirmiştir. Tavlamanın etkisi burada da alt tabakaya göre değişmektedir: *p*-MoO_3/*n*-Si'de UV özgül algılamasını yükseltirken (D^* 6,61×10^8 → 1,57×10^9 Jones), *p*-MoO_3/*n*-InP'de fosfor kaybı ve arayüzde tuzakla güçlenen karanlık sızıntı nedeniyle tüm başarım ölçütlerini düşürmektedir. *p*-MoO_3/*n*-SiC'de tavlama sonrası R_s'de görülen yaklaşık üç buçuk mertebelik artış, oksijen kaybına bağlı yüksek dirençli bir arayüz bölgesinin oluşmasıyla ilişkilendirilmiş; bu da 200 °C'lik ısıl bütçenin geniş bant aralıklı alt tabakalarda arayüzü tümüyle yeniden düzenlemeye yetmediğini göstermektedir. Sonuç olarak, en uygun alt tabaka–işlem birleşimi hedeflenen işleve göre değişmekte; görünür bölge için tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-Si, morötesi için ise tavlanmamış *p*-MoO_3/*n*-InP öne çıkmaktadır.

5.4 Çalışmalar Arası Nicel Sentez ve Çapraz Doğrulama

Tezin üç çalışmasının aynı aygıt yapısı üzerinde yürütülmüş olması, Bölüm 4.6'da sunulan çalışmalar arası nicel sentezi mümkün kılmıştır. Tavlamanın MoO_3 parçacık yoğunluğunda yol açtığı bağıl değişim (Δρ) ile karanlık diyot parametrelerindeki değişimler arasında, dört alt tabaka ve dört parametre için yapılan on altı karşılaştırmanın on beşinde işaret uyumu bulunmuş; Δρ ile Δ*n* arasında $r = -0{,}975$, Δρ ile $\Delta\Phi_{B0}$ arasında $r = +0{,}856$ düzeyinde güçlü korelasyonlar hesaplanmıştır. Sekiz aygıtın tamamı için parçacık yoğunluğu ile idealite faktörü arasındaki mutlak ilişkinin

de tutarlı biçimde ters yönlü olması ($r = -0{,}771$), bu bağıntının tavlama işlemine özgü bir rastlantı olmadığını, MoO_3 film morfolojisi ile eklem kalitesi arasındaki yapısal bir ilişkiyi yansıttığını göstermektedir.

Buna karşılık, karanlık eklem kalitesindeki iyileşmenin fotoyanıt başarımına doğrudan yansımadığı saptanmıştır: tavlama, *p*-MoO_3/*n*-InP aygıtında idealite faktörünü 5,30'dan 2,21'e düşürerek tezdeki en büyük eklem kalitesi iyileşmesini sağlamasına karşın 395 nm'deki özgül algılamayı yaklaşık 56 kat azaltmış; *p*-MoO_3/*n*-Si aygıtında ise idealite faktörünü kötüleştirmesine rağmen özgül algılamayı yaklaşık 2,4 kat artırmıştır. Bu ayrışma, tezin bütünleştirici çıkarımını oluşturmaktadır: MoO_3 film morfolojisi öncelikle karanlık yük taşınımını yönetirken, fotoyanıt başarımını belirleyen asıl etken arayüzün kimyasal bütünlüğüdür. Dolayısıyla bir heteroeklem fotodedektörün başarımı yalnızca karanlık diyot parametrelerine bakılarak öngörülemez; morfolojik yoğunlaşma ile arayüz kimyasal kararlılığının birlikte değerlendirilmesi gerekir. Bu çıkarım, tavlanmamış aygıtların neden en yüksek kendinden beslemeli başarımı sergilediğini de açıklamaktadır.

Ayrıca, dielektrik çözümlemenin geometrik girdilerinin (kontak alanı ve film kalınlığı) varsayım yerine doğrudan SEM ölçümlerinden alınması (Bölüm 4.6), geliştirilen metrolojik çerçeveyi betimleyici bir morfoloji aracı olmaktan çıkarıp elektriksel modelin nicel doğruluğunu belirleyen bir bileşen hâline getirmekte ve tezin üç çalışmasını ortak bir ölçüm temeli üzerinde birleştirmektedir.

5.5 Öneriler ve Gelecek Çalışmalar

Bu tezde elde edilen bulgular, *p*-MoO_3/*n*-yarıiletken heteroeklemlerinin alt tabakaya ve ısıl tavlamaya bağlı davranışına ilişkin bütünleşik bir çerçeve sunmakta, aynı zamanda izlenmeye değer birkaç araştırma yönünü de açığa çıkarmaktadır. Bu çalışmanın doğrudan devamı niteliğindeki öneriler, aşağıda beş eksende toplanmıştır.

Malzeme ve işlem ekseninde, tavlamanın alt tabakaya seçici etkisi göz önüne alındığında, her alt tabaka için tavlama sıcaklığı, süresi ve atmosferinin (kontrollü oksijen kısmi basıncı, vakum veya şekillendirici gaz) sistematik olarak taranması; özellikle bu tezde karakteristikleri bozulan *p*-MoO_3/*n*-4H-SiC heteroeklemi için en

uygun işlem penceresinin belirlenmesi önerilir. MoO_3 filminin stokiyometrisi ve oksijen boşluğu yoğunluğu, farklı biriktirme yöntemleriyle (atomik katman biriktirme, magnetron saçtırma veya çözelti temelli teknikler) denetimli biçimde ayarlanarak iş fonksiyonu ve bant hizalaması ince ayarlanabilir. *n*-InP'de gözlenen In ve P dış difüzyonunu bastırmak için ise MoO_3/alt tabaka arayüzüne ultra ince difüzyon bariyeri ara tabakalarının (örneğin Al_2O_3 veya SiO_2) eklenmesi, tavlamayla kazanılan eklem kalitesinin fotoyanıt kaybı olmadan korunup korunamayacağını sınamak açısından değerli olacaktır.

Aygıt yapısı ekseninde, mimarinin p-i-n yapılarına, pasivasyon ara tabakalarına ve MoO_3 kalınlığının optimizasyonuna genişletilmesi; ayrıca yapının GaN, β-Ga_2O_3 ve elmas gibi diğer geniş bant aralıklı veya esnek alt tabakalara taşınması, tasarım uzayını genişletir ve alt tabakaya bağlı tasarım ilkesinin ne ölçüde genellenebildiğini sınamaya imkân verir.

Metroloji ekseninde, bu tezde geliştirilen otomatik SEM görüntü işleme çerçevesinin derin öğrenme tabanlı (evrişimli sinir ağları veya ViT mimarileri) bir segmentasyon ve nicelendirme hattına dönüştürülerek operatör bağımlılığının en aza indirilmesi ve iş akışının açık kaynak bir araç olarak yayımlanarak bağımsız biçimde sınanabilir kılınması önerilir. Ayrıca kalınlığa bağlı düzeltme yaklaşımının basamaklı yapıdan sürekli bir fonksiyona dönüştürülmesi ve bu tezde 15 kV'ta alınan kesit görüntülerinin daha düşük hızlandırma gerilimlerinde (1–3 kV) yinelenmesiyle elektron etkileşim hacminin küçültülmesi, kenar belirsizliklerinin ve buna bağlı düzeltme gereksiniminin azaltılmasına katkı sağlayabilir. Bununla birlikte, kullanılan görüntüleme parametrelerinin (hızlandırma gerilimi, çalışma mesafesi, dedektör kipi ve büyütme) sistematik olarak kaydedilip raporlanması, ölçüm izlenebilirliği ve sonuçların tekrarlanabilirliği açısından önemlidir. Bu adımlar birlikte uygulandığında çerçeve, yalnızca bu tezdeki aygıtlarla sınırlı kalmadan farklı oksit/yarıiletken ince film sistemlerinde izlenebilir ve tekrarlanabilir bir metroloji temeli sağlayabilir. Dielektrik çözümlemenin geometrik girdilerinin (kontak alanı ve film kalınlığı) SEM metrolojisinden sağlanması yaklaşımının tüm alt tabakalara ve elipsometri gibi üçüncü bir bağımsız tekniğe taşınması, metrolojik güvenilirliği daha da sağlamlaştıracaktır.

Başarım ve kararlılık ekseninde, fotodedektör duyarlılığının ve özgül algılamasının yapısal değişikliklerle daha da artırılması; bu tez kapsamında ölçülmeyen zamana bağlı fotoyanıtın (yükselme ve düşme süreleri) darbeli aydınlatma altında belirlenerek kendinden beslemeli çalışmanın hız başarımının nicelleştirilmesi; sürekli aydınlatma ve çevresel koşullar altında uzun süreli kararlılık ile işletim güvenilirliğinin değerlendirilmesi ve kendinden besleme mekanizmasının (yerleşik alan ve fotovoltaik etki) ayrıntılı olarak incelenmesi gerekmektedir. Spektral tepkinin daha derin morötesine ve yakın kızılötesine genişletilmesi ve dizi/görüntüleme entegrasyonu ise uygulama alanını genişletebilir. Ayrıca Bölüm 4.6'da ortaya konan morfoloji–fotoyanıt ayrışması göz önüne alındığında, aday aygıtların değerlendirilmesinde karanlık diyot parametrelerinin yanı sıra arayüzün kimyasal kararlılığının da bir ölçüt olarak kullanılması önerilir. Kullanılan sistemde enerji dağılımlı X-ışını spektroskopisi (EDS) donanımı bulunmakla birlikte, 15–30 kV'ta etkileşim hacminin (yaklaşık 1,8–5,7 μm) film kalınlığını iki mertebe aşması ve yöntemin oksidasyon durumu ayrımı sağlayamaması nedeniyle yaklaşık 60 nm'lik MoO_3 tabakasının stokiyometrisi EDS ile güvenilir biçimde belirlenememektedir; bu nedenle arayüz kimyasının ve Mo^{6+}/Mo^{5+} oranının izlenmesinde XPS ile derinlik profillemeli SIMS önerilmektedir.

Modelleme ekseninde ise yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) ve aygıt benzetimleri (TCAD) kullanılarak bant hizalaması, arayüz durumları ve alt tabakaya bağlı davranışın modellenmesi; frekansa bağlı dielektrik ölçümlerde gözlenen Debye dışı gevşeme ve atlama (hopping) iletkenliği mekanizmalarının sıcaklığa bağlı empedans spektroskopisiyle daha ayrıntılı incelenmesi, deneysel bulguların kuramsal temelini güçlendirecek bir sonraki adımı oluşturmaktadır. Buna ek olarak, Bölüm 4.1.2'de görünür parametreler olarak yorumlanan C–V kaynaklı bariyer yüksekliklerinin, arayüzel tabakayı ve seri direnci açıkça içeren bir eşdeğer devre modeliyle yeniden çözümlenmesi; böylece I–V ve C–V yöntemlerinin verdiği bariyer değerleri arasındaki farkın nicel olarak açıklanması gerekmektedir.

KAYNAKLAR

Alarabi, A. A., Çiçek, O., Makara, H., Ünal, F., Zurnacı, M., & Altındal, Ş. (2024). Comparison of *p*-n and p-i-n vertical diodes based on *p*-PMItz/*n*-Si, *p*-PMItz/*n*-4HSiC and *p*-PMItz/i-SiO_2/*n*-Si heterojunctions. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 35*, 957.

Alaya, C. B., Zaghouani, R. B., & Bouaicha, M. (2025). Impact of infrared rapid thermal annealing on molybdenum oxide films for improved surface passivation in textured silicon substrates. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 36*, 1–16.

Alialy, S., Altındal, Ş., Tanrıkulu, E. E., & Yıldız, D. E. (2014). Analysis of temperature dependent current-conduction mechanisms in Au/TiO_2/*n*-4H-SiC (metal/insulator/semiconductor) type Schottky barrier diodes. *Journal of Applied Physics, 116*, 084506.

Aydoğan, Ş. (2014). *Katıhal fiziği* (2. basım). Nobel Akademik Yayıncılık.

Aydoğan, Ş. (2015). *Katıhal elektroniği*. Nobel Akademik Yayıncılık.

Aziz, A., Shaikh, H., Abbas, A., Zehra, K. E., & Javed, B. (2025). Microscopic techniques for nanomaterials characterization: a concise review. *Microscopy Research and Technique, 88*(5), 1599–1614.

Baderot, J., Grould, M., Misra, D., Clément, N., Hallal, A., Martinez, S., & Foucher, J. (2022). Application of deep-learning based techniques for automatic metrology on scanning and transmission electron microscopy images. *Journal of Vacuum Science, & Technology B, 40*, 054003.

Baek, J., Kang, N. S., Lee, Y. D., Kang, B. H., Dong, K. Y., Lim, J. A., & Ju, B. K. (2013). Thermal annealing effects of molybdenum oxide interfacial layer based on organic solar cells. *Science of Advanced Materials, 5*, 1775–1780.

Bao, Q. Y., Yang, J. P., Li, Y. Q., & Tang, J. X. (2010). Electronic structures of MoO_3-based charge generation layer for tandem organic light-emitting diodes. *Applied Physics Letters, 97*, 063303.

Basyooni-Kabatas, M. A., En-nadir, R., Rahmani, K., & Eker, Y. R. (2023). Positive and negative photoconductivity in an Ir nanofilm-coated MoO_3 bias-switched photodetector. *Micromachines, 14*, 1860.

Basyooni, M. A., Achehboune, M., Boukhoubza, I., Gaballah, A. E. H., Tihtih, M., Belaid, W., En-nadir, R., Derkaoui, I., Abdelbar, A. M., Zaki, S. E., Ateş, Ş., & Eker, Y. R. (2023a). Impact of thickness on optoelectronic properties of α-MoO_3 film photodetectors: Integrating first-principles calculations with experimental analysis. *Physica B: Condensed Matter, 670*, Article 415373. https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415373

Basyooni, M. A., Gaballah, A. E. H., Tihtih, M., Derkaoui, I., Zaki, S. E., Eker, Y. R., & Ateş, Ş. (2023b). Thermionic emission of MoO_3/Si UV photodetectors fabricated by atomic layer deposition. *Materials, 16*, 2766.

Battaglia, C., Martín de Nicolás, S., De Wolf, S., Yin, X., Zheng, M., Ballif, C., & Javey, A. (2014b). Silicon heterojunction solar cell with passivated hole selective MoO_x contact. *Applied Physics Letters, 104*(11), 113902. https://doi.org/10.1063/1.4868880

Battaglia, C., Yin, X., Zheng, M., Sharp, I. D., Chen, T., McDonnell, S., Azcatl, A., Carraro, C., Ma, B., Maboudian, R., Wallace, R. M., & Javey, A. (2014a). Hole selective MoO_x contact for silicon solar cells. *Nano Letters, 14*(2), 967–971. https://doi.org/10.1021/nl404389u

Bhimanapati, G. R., Lin, Z., Meunier, V., Jung, Y., Cha, J., Das, S., & Robinson, J. A. (2015). Recent advances in two-dimensional materials beyond graphene. *ACS Nano, 9*(12), 11509–11539.

Bullock, J., Cuevas, A., Allen, T., White, T., Weber, S. J., De Wolf, S., & Battaglia, C. (2014). Molybdenum oxide MoO_x: A versatile hole contact for silicon solar cells. *Applied Physics Letters, 105*, 232109.

Bullock, J., Hettick, M., Wang, J. Y. W., Allen, T., White, T., Weber, S. J., De Wolf, S., & Cuevas, A. (2016). Efficient silicon solar cells with dopant-free asymmetric heterocontacts. *Nature Energy, 1*, 1–7.

Cao, X., Li, T., Li, H., Xia, S., Ren, F., Sun, Y., & Xu, X. (2019). A robust parameter-free thresholding method for image segmentation. *IEEE Access, 7*, 3448–3458. https://doi.org/10.1109/ACCESS.2018.2889013

Chanu, T. S., Singh, K. J., Singh, W. J., & Devi, K. N. (2023). Dielectric relaxation behavior and electrical conduction mechanism of PVA/ZnO nanocomposites for flexible electronic device application. *Physica Status Solidi A, 220*, 2300531.

Chen, J., Lv, L., Wang, Q., Zhang, Y., Liu, H., & Zhang, X. (2016). Electronic properties of Al/MoO_3/*p*-InP enhanced Schottky barrier contacts. *Thin Solid Films, 616*, 145–150.

Chen, J., Wang, Q., Sheng, Y., Cao, G., Yang, P., Shan, Y., & Qiu, Z. J. (2019). High-performance WSe_2 photodetector based on a laser-induced *p–n* junction. *ACS Applied Materials, & Interfaces, 11*, 43330–43336.

Cheung, S. K., & Cheung, N. W. (1986). Extraction of Schottky diode parameters from forward current-voltage characteristics. *Applied Physics Letters, 49*, 85–87.

Christensen, D. V., von Soosten, M., Trier, F., Jespersen, T. S., Smith, A., Chen, Y., & Pryds, N. (2017). Controlling the carrier density of $SrTiO_3$-based heterostructures with annealing. *Advanced Electronic Materials, 3*, 1700026.

Cole, K. S., & Cole, R. H. (1941). Dispersion and absorption in dielectrics I. Alternating current characteristics. *The Journal of Chemical Physics, 9*(4), 341–351.

Çaldıran, Z., & Taşyürek, L. B. (2021). The role of molybdenum trioxide in the change of electrical properties of the Cr/MoO_3/*n*-Si heterojunction and the temperature-dependent electrical characterization of this device. *Sensors and Actuators A: Physical, 328,* 112765.

Çaldıran, Z., Taşyürek, L. B., & Nuhoğlu, Y. (2021). The effect of different frequencies and illuminations on the electrical behavior of MoO_3/Si heterojunctions. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 32,* 27950–27961.

Çaldıran, Z., Taşyürek, L. B., Deniz, A. R., & Biber, M. (2025). Design and detailed electrical characterization of MoO_3 supported Au/*n*-Si junction diodes. *Micro and Nanostructures, 205,* 208217.

Çetinkaya, Ç., Kurt, M., Korkmaz, H., Özdemir, S., Yıldız, A., & Çetin, E. (2021). Determination of the surface morphology and electrical properties of a MoO_3 layer deposited on a GaAs substrate by RF magnetron sputtering. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 32,* 12330–12339.

Çetinkaya, H. G., Badali, Y., & Altındal, Ş. (2025). On the possible current transport mechanisms, energy-dependent distribution profile of interface states, and temperature sensitivity in Au/(PEG:Er–$MnFe_2O_4$)/*n*–Si structures. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 36,* 890.

Çiçek, O., Karasüleymanoğlu, M., Kurnaz, S., Öztürk, Ö., & Taşcı, A. T. (2022). Self-powered visible-UV light photodiodes based on ZnO nanocubes-silicon heterojunctions by surface modification and structural improvement. *Optik, 261,* 169137.

Çiçek, O., Koca, G., & Altındal, Ş. (2021). High dielectric performance of heterojunction structures based on spin-coated graphene-PVP thin film on silicon with gold contacts for organic electronics. *IEEE Transactions on Electron Devices, 69,* 304–310.

Dalle Feste, P., Crisci, M., Barbon, F., Tajoli, F., Salerno, M., Drago, F., & Lamberti, F. (2021). Work function tuning in hydrothermally synthesized vanadium-doped MoO_3 and Co_3O_4 mesostructures for energy conversion devices. *Applied Sciences, 11,* 2016.

Doğan, H., Yıldırım, N., & Türüt, A. (2008). Thermally annealed Ni/*n*-GaAs(Si)/In Schottky barrier diodes. *Microelectronic Engineering, 85,* 655–660.

Elliott, S. R. (1987). A.c. conduction in amorphous chalcogenide and pnictide semiconductors. *Advances in Physics, 36*(2), 135–217.

Erol, A. ve Balkan, N. (2015). *Yarıiletkenler ve optoelektronik uygulamaları* (2. baskı). Seçkin Yayıncılık.

Essani, M., Pastore, J., Stalport, F., & Cottin, H. (2024). A simple and accurate approach for thickness measurement of particles and thin films using SEM-EDS. *Microscopy and Microanalysis, 30*(Suppl. 1), 173–175.

Ezhilmaran, B., Dhanasekar, M., & Bhat, S. V. (2021). Solution processed transparent anatase TiO_2 nanoparticles/MoO_3 nanostructures heterojunction: High performance self-powered UV detector for low-power and low-light applications. *Nanoscale Advances, 3*(4), 1047–1056.

Fang, T. T., Lu, Y. C., & Hsiang, H. I. (2023). Innovative model of the universal power law of dielectric and ac conductivity behavior of nonferroelectric materials. *Materialia, 27*, 101645.

Friedrichs, P., & Rupp, R. (2005). Silicon carbide power devices—current developments and potential applications. *Proceedings of the European Conference on Power Electronics and Applications*, 1–11.

Geissbühler, J., Werner, J., Martin de Nicolas, S., Barraud, L., Hessler-Wyser, A., Despeisse, M., De Wolf, S., & Ballif, C. (2015). 22.5% efficient silicon heterojunction solar cell with molybdenum oxide hole collector. *Applied Physics Letters, 107*, 081601.

Ghuge, R. S., Rekha, S. M., Vikraman, H. K., Jayaraman, S. V., Kiran, M. S. R. N., Bhat, S. V., & Sivalingam, Y. (2024). Transparent TiO_2/MoO_3 heterojunction-based photovoltaic self-powered triethylamine gas sensor with iot-enabled smartphone interface. *ACS Sensors, 9*(12), 6592–6604.

Giurlani, W., Berretti, E., Innocenti, M., & Lavacchi, A. (2020). Measuring the thickness of metal coatings: a review of the methods. *Coatings, 10*(12), 1211.

Greiner, M. T., & Lu, Z.-H. (2013). Thin-film metal oxides in organic semiconductor devices: Their electronic structures, work functions and interfaces. *NPG Asia Materials, 5*, e55.

Greiner, M. T., Lu, Z.-H., Lee, J. H., Armstrong, N. R., & Kahn, A. (2012). Transition metal oxide work functions: The influence of cation oxidation state and oxygen vacancies. *Advanced Functional Materials, 22*, 4557–4568.

Guo, Y., & Robertson, J. (2014). Origin of the high work function and high conductivity of MoO_3. *Applied Physics Letters, 105*, 222110.

Halder, P., & Bhattacharya, S. (2023). Debye to non-Debye type relaxation in MoO_3 doped glassy semiconductors: A portrait on microstructure and electrical transport properties. *Physica B: Condensed Matter, 648*, 414374.

Han, B., Zhang, Y., Li, J., Wang, H., Zhang, Y., & Zhang, X. (2018). Effect of post-annealing on the properties of thermally evaporated molybdenum oxide films: The interdependence of work function and oxygen-to-molybdenum ratio. *Materials Science in Semiconductor Processing, 75*, 166–172.

Hill, R. M., & Jonscher, A. K. (1983). The dielectric behaviour of condensed matter and its many-body interpretation. *Contemporary Physics, 24*, 75–110.

Hossain, M. S., Shahriar, G. M., Syeed, M. M. M., Uddin, M. F., Hasan, M., Shivam, S., & Advani, S. (2023). Region of interest (ROI) selection using vision transformer for automatic analysis using whole slide images. *Scientific Reports, 13*(1), Article 11314. https://doi.org/10.1038/s41598-023-38109-6

Hussain, S. Q., Rehman, A. U., Iqbal, M. A., Matin, M. A., Khan, S. A., & Rafique, M. M. (2019). A versatile hole-carrier selective MoO_x contact for high efficiency silicon heterojunction solar cells: A review. *Transactions on Electrical and Electronic Materials, 20*, 1–6.

Janardhanam, V., Reddy, V. R., Choi, C.-J., & Reddy, P.-N. (2010). Temperature dependence and carrier transport mechanisms of Ti/*p*-type InP Schottky rectifiers. *Journal of Alloys and Compounds, 504*, 146–150.

Jiang, Y., Zhang, X., Chen, H., Liu, Y., Li, J., & Zhang, X. (2021). Post-annealing effect on the optical and electronic properties of thermally evaporated MoO_x thin films as hole-selective contacts for *p*-Si solar cells. *Nanoscale Research Letters, 16*, 87.

Jonscher, A. K. (1977). The 'universal' dielectric response. *Nature, 267*(5613), 673–679. https://doi.org/10.1038/267673a0

Kanai, K., Tsuda, T., Ouchi, S., Seki, K., & Ishii, H. (2010). Electronic structure of the anode interface with a molybdenum oxide buffer layer. *Organic Electronics, 11*, 188–194.

Kimoto, T., & Cooper, J. A. (2014). *Fundamentals of silicon carbide technology: Growth, characterization, devices and applications*. Wiley.

Koike, K., Wada, R., Yagi, S., Harada, Y., Sasa, S., & Yano, M. (2014). Characteristics of MoO_3 films grown by molecular beam epitaxy. Japanese Journal of Applied Physics, 53(5S1), 05FJ02.

Kondi, A., Papia, E.-M., Constantoudis, V., Nioras, D., Syngelakis, I., Aivalioti, C., Aperathitis, E., & Gogolides, E. (2025). Measurement of thickness of thin coatings on rough substrates via computational analysis of SEM images. *Micro and Nano Engineering*, *28*, 100315.

Kröger, M., Hamwi, S., Meyer, J., Riedl, T., Kowalsky, W., & Kahn, A. (2009a). P-type doping of organic wide band gap materials by transition metal oxides: A case-study on molybdenum trioxide. *Organic Electronics, 10*, 932–938.

Kröger, M., Hamwi, S., Meyer, J., Riedl, T., Kowalsky, W., & Kahn, A. (2009b). Role of the deep-lying electronic states of MoO_3 in the enhancement of hole-injection in organic thin films. *Applied Physics Letters, 95*, 123301.

Kwak, H., & Kim, J. (2023). Semiconductor multilayer nanometrology with machine learning. *Nanomanufacturing and Metrology, 6*, 15.

La Via, F., Alquier, D., Giannazzo, F., Kimoto, T., Neudeck, P., Ou, H., & Tudisco, S. (2023). Emerging SiC applications beyond power electronic devices. *Micromachines, 14*, 1200.

Langpoklakpam, C., Liu, A. C., Chu, K. H., Hsu, L. H., Lee, W. C., Chen, S. C., & Kuo, H. C. (2022). Review of silicon carbide processing for power MOSFET. *Crystals, 12*, 245.

Lazar, T., Gowrisankar, P., Esakki, E. S., Balaprakash, V., & Seeniammal, R. (2023). Fabrication and photosensitivity analysis of MIS Schottky barrier diodes with MoO_3 thin films of different molar concentrations. *Solid State Communications, 369*, 115194.

Li, Y., Yu, H., Huang, X., Wu, Z., & Chen, M. (2017). A facile synthesis method to prepare a molybdenum oxide hole-transport layer for efficient polymer solar cells. *RSC Advances, 7*, 7890–7900.

Liu, C., Shi, B., Zhou, J., & Tang, C. (2011). Quantification and characterization of microporosity by image processing, geometric measurement and statistical methods: application on SEM images of clay materials. *Applied Clay Science, 54*(1), 97–106.

Liu, H., Lv, T., Zhu, C., & Zhu, Z. (2016). Direct bandgap narrowing of TiO_2/MoO_3 heterostructure composites for enhanced solar-driven photocatalytic activity. *Solar Energy Materials and Solar Cells, 153*, 1–8.

Liu, L., Shen, K., Su, H., Xu, J., Lin, J., Li, Y., Zhang, S., Lan, L., & Peng, J. (2026). NiO/Ga_2O_3 heterojunction with tunable oxygen vacancies for efficient self-powered solar-blind UV detection. *Materials, 19*(3), 530.

Madaka, R., Kumar, D., Pandey, B., Bandaru, N., Dasari, J. R., Zuala, L., & Rath, J. K. (2024). Two-dimensional transition metal oxides (TMOs) for solar cell applications. *Two-Dimensional Hybrid Composites: Synthesis, Properties and Applications* içinde (s. 53–86).

Mallem, K., Hegde, S. S., Sarkar, S. K., Krishna, P. S. R., Alam, M. A., & Reddy, K. N. (2019). Molybdenum oxide: A superior hole extraction layer for replacing *p*-type hydrogenated amorphous silicon with a high efficiency heterojunction Si solar cell. *Materials Research Bulletin, 110*, 90–96.

Marnadu, R., Arunkumar, S., Sugarthi, S., Jananakumar, D., AlFaify, S., Shkir, M., & Reddy, V. R. M. (2025). The role of MoO_3 doping in tuning the optical absorption, energy gap and photoluminescence properties of NiO nanoparticles for photodetector applications. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 36*, 2110.

Menon, V. S., & Krishnamoorthy, A. (2023). Hole selectivity of *n*-type molybdenum oxide carrier selective layer for commercial and emerging thin-film photovoltaics: A critical analysis of interface energetics and ensuant device physics. *Energy Technology, 11*, 2300608.

Meyer, J., Hamwi, S., Kröger, M., Kowalsky, W., Riedl, T., & Kahn, A. (2012). Transition metal oxides for organic electronics: Energetics, device physics and applications. *Advanced Materials, 24,* 5408–5427.

Meyer, J., Zilberberg, M., Riedl, T., & Kahn, A. (2011). Electronic structure of molybdenum-oxide films and associated charge injection mechanisms in organic devices. *Journal of Photonics for Energy, 1*, 011109.

Mohammed, I. M., & Isa, N. A. M. (2025). Contrast limited adaptive local histogram equalization method for poor contrast image enhancement. *IEEE Access, 13,* 62600–62632.

Mondal, A., Ramakrishnan, K., Deb, S., Ajitha, B., & Reddy, Y. A. K. (2025). Self-powered photodetector based on p(Cu_2O)–n(MoO_3) junction architecture: Analyzing the influence of depletion region width on the photodetector properties. *ACS Applied Energy Materials, 8*(15), 11719–11731.

Montgomery, D. C., & Runger, G. C. (2018). *Applied statistics and probability for engineers* (7. baskı). Wiley.

Nicollian, E. H., & Brews, J. R. (2002). *MOS (metal oxide semiconductor) physics and technology*. Wiley.

Norde, H. (1979). A modified forward I-V plot for Schottky diodes with high series resistance. *Journal of Applied Physics, 50*(7), 5052–5053.

Otsu, N. (1979). A threshold selection method from gray-level histograms. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, 9*(1), 62–66.

Papež, N., Dallaev, R., Ţălu, Ş., & Kaštyl, J. (2021). Overview of the current state of gallium arsenide-based solar cells. *Materials, 14,* 3075.

Qi, R., Ding, Y., Nan, H., Zhou, L., Wang, C., Wu, Z., Zhao, W., Song, J., Cai, Z., Xiao, S., & Gu, X. (2024). Ultrafast $MoTe_2$-based photodetector achieved through the optimization of the MoO_3 interface layer. *Applied Surface Science, 671,* 160645.

Qiao, Y., Mei, Z., Luo, Y., & Chen, Y. (2024). DeepSEM-Net: enhancing SEM defect analysis in semiconductor manufacturing with a dual-branch CNN-Transformer architecture. *Computers, & Industrial Engineering, 193,* 110301.

Sarkar, A., Banerjee, S., Ray, S. K., Raychaudhuri, A. K., & Ray, S. K. (2018). MoO_3/GaAs(001) interface structure and composition. *Journal of Physics: Condensed Matter, 30,* 155001.

Schroder, D. K. (2015). *Semiconductor material and device characterization*. Wiley.

Sharma, B. (1984). *Metal-semiconductor Schottky barrier junctions and their applications*. Plenum Press.

Sharmila, B., & Dwivedi, P. (2022). Ultrasensitive, highly repeatable, ultrafast MoO_3/*p*-Si heterostructure-based photodetector. *IEEE Sensors Journal, 23*, 2047–2054.

Sikora, M., Wojcieszak, D., Chudzyńska, A., & Zięba, A. (2023). Improved methodology of cross-sectional SEM analysis of thin-film multilayers prepared by magnetron sputtering. *Coatings*, *13*(2), 316.

Sitepu, H., O'Connor, B. H., & Li, D. (2005). Comparative evaluation of the March and generalized spherical harmonic preferred orientation models using X-ray diffraction data for molybdite and calcite powders. *Journal of Applied Crystallography, 38*, 158–167.

Skoupy, R., Fort, T., & Krzyzanek, V. (2020). Nanoscale estimation of coating thickness on substrates via standardless BSE detector calibration. *Nanomaterials*, *10*(2), 332.

Soultati, A., Papadimitropoulos, G., Georgiadou, D., Kennou, S., Gardelis, S., & Tsoukalas, D. (2023). Ambipolar surface conduction in oxygen sub-stoichiometric molybdenum oxide films. *Scientific Reports, 13*, 21166.

Streetman, B. G. ve Banerjee, S. K. (2014). *Katıhal elektroniği devre elemanları* (M. Merdan, Çev.). Palme Yayıncılık.

Sun, W., Duan, F., Zhu, J., Yang, M., & Wang, Y. (2024). An edge detection algorithm for SEM images of multilayer thin films. *Coatings, 14*(3), 313.

Sze, S. M., & Ng, K. K. (2007). *Physics of semiconductor devices*. Wiley.

Talebi, S., & Eshghi, H. (2023). Achievement of high infrared photoresponse in *n*-MoO_3/*p*-Si heterostructure photodiode prepared via the thermal oxidation method, the influence of oxygen flow rate. *Materials Chemistry and Physics, 303*, 127792.

Talebi, S., & Eshghi, H. (2024). The *n*-MoO_3/*p*-Si heterojunction photodiode: influence of the MoO_3 film thickness on the ultraviolet and infrared photodetector performance. *Optical Materials, 157*(1), 116080.

Tan, S. O., Çiçek, O., Türk, Ç. G., & Altındal, Ş. (2022). Dielectric properties, electric modulus and conductivity profiles of Al/Al_2O_3/*p*-Si type MOS capacitor in large frequency and bias interval. *Engineering Science and Technology, an International Journal, 27*, 10101.

Tian, Y., Yu, N., Du, S., Liu, D., & Wu, Y. (2021). High-performance UV–visible light avalanche photodetector based on a single α-MoO_3 microbelt/*p*-Si heterostructure. *Bulletin of Materials Science, 44*, 195.

Turut, A., Yıldız, D. E., Karabulut, A., & Orak, İ. (2020). Electrical properties of atomic-layer-deposited Au/Ti/HfO_2/*n*-GaAs MIS diodes in a wide temperature range. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 31*, 7839–7849.

Vivek, P., Chandrasekaran, J., & Balasubramani, V. (2022). Fabrication of Cu/Y-MoO_3/*p*-Si type Schottky barrier diodes by facile spray pyrolysis technique for photodetection application. *Sensors and Actuators A: Physical, 335*, 113361.

Vivek, P., Chandrasekaran, J., Marnadu, R., Maruthamuthu, S., & Balasubramani, V. (2020). Fabrication of illumination-dependent Cu/*p*-Si Schottky barrier diodes using MoO_3 nanoplates as an interlayer by the JNSP technique. *Journal of Electronic Materials, 49*, 4249–4264.

Vivek, P., Chandrasekaran, J., Marnadu, R., Maruthamuthu, S., Balasubramani, V., & Balraju, P. (2019). Zirconia modified nanostructured MoO_3 thin films deposited by spray pyrolysis technique for Cu/MoO_3-ZrO_2/*p*-Si structured Schottky barrier diode application. *Optik, 199*, 163351.

Wang, S., Shen, Z., Sun, Y., Li, H., Zhang, K., Wu, L., & Zhang, Y. (2021). Defects and surface electrical property transformation induced by elemental interdiffusion at the *p–n* heterojunction via high-temperature annealing. *ACS Applied Materials, & Interfaces, 13*, 12211–12220.

Xing, K., Zhang, Y., Wang, J., Wang, H., Li, Y., Li, Y., & Wang, X. (2020). MoO_3 induces *p*-type surface conductivity by surface transfer doping in diamond. *Applied Surface Science, 509*, 144890.

Xu, Y., Shen, H., Xu, B., Wang, Z., Li, Y., Lai, B., & Zhang, J. (2021). High-performance MoO_x/*n*-Si heterojunction NIR photodetector with aluminum oxide as a tunneling passivation interlayer. *Nanotechnology*, *32*(27), 275502.

Yahaya, M., Salleh, M. M., & Talib, I. A. (1998). Optical properties of MoO_3 thin films for electrochromic windows. *Solid State Ionics, 113–115*, 421–423.

Yerişkin, S. A., Demir, G. E., & Yücedağ, İ. (2019). On the frequency-voltage dependence profile of complex dielectric, complex electric modulus and electrical conductivity in Al/ZnO/*p*-GaAs type structure at room temperature. *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics, 14*, 1126–1132.

Yu, J., Shafiei, M., Wlodarski, W., Li, Y. X., & Kalantar-zadeh, K. (2010). Enhancement of electric field properties of Pt/nanoplatelet MoO_3/SiC Schottky diode. *Journal of Physics D: Applied Physics, 43*, 025103.

Yue, L. Q., Shi, Y. L., Sun, N. F., Qiang, S., Qin, J. K., Zhen, L., & Xu, C. Y. (2023). InP low-dimensional nanomaterials for electronic and optoelectronic device applications: A review. *Advanced Sensor Research, 2*, 2200101.

Zaki, S. E., Buyukharman, M., Basyooni, M. A., Görmez, A. E., Sezgin, A., Eker, Y. R., & Yılmaz, M. (2022). Phase modulation of MoO_2–MoO_3 nanostructured thin films via W-doping; the use of UV photodetection and gas sensing applications. *Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fen Dergisi, 48*(1), 34–45.

Zhan, Y., & Zhang, G. (2019). An improved OTSU algorithm using histogram accumulation moment for ore segmentation. *Symmetry*, *11*(3), 431.

Zhang, Z., Cui, C., & Wu, Z. (2024). A novel method to determine the optimal threshold of SEM images. *Marine and Petroleum Geology*, *163*, 106804.

Zhao, C., Liang, Z., Su, M., Liu, P., Mai, W., & Xie, W. (2015). Self-powered, high-speed and visible–near-infrared response of a MoO_{3-x}/*n*-Si heterojunction photodetector with enhanced performance by interface engineering. *ACS Applied Materials, & Interfaces, 7*, 25981–25990.

Zhao, S., Liu, Y., Wu, Y., Liu, Y., Guo, F., Li, S., Yu, W., Liu, G., Hao, J., & Wang, H. (2022). Self-powered broadband α-MoO_3/Si photodetector based on the photo-induced thermoelectric effect. *Ceramics International, 48*, 25079–25085.

Zhen, Y., Wang, J., Li, J., Fu, M., Fu, F., Zhang, Y., & Feng, J. (2018). Enhanced photocatalytic degradation for thiophene by Ag/α-MoO_3 heterojunction under visible-light irradiation. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 29*(5), 3672–3681. https://doi.org/10.1007/s10854-017-8298-z

Zong, W., Liu, Z., & Qin, D. (2025). A high-work function *n*-type thin film modifies the MoO_3/anode interface for the efficiency increase of inverted organic solar cell. *Synthetic Metals*, 117982.

EKLER

EK A. SEM Görüntü İşleme Parametreleri ve Aygıt Etiketleme Şeması

SEM görüntü analiz hattı dört bağımsız rutinden oluşur: ölçek çubuğu kalibrasyonu, gümüş (Ag) kontak geometrisi, MoO_3 yüzey parçacık yoğunluğu ve kesit katman kalınlığı. Tablo A.1, bu rutinlerde operatörden bağımsız olarak sabit tutulan görüntü işleme parametrelerini listeler.

Tablo A 1 SEM görüntü işleme rutinlerinde kullanılan sabit parametreler

Parametre	Değer	Rutin	Açıklama
Ölçek çubuğu varsayılanı	10 µm / 1000 nm	Tümü	inputdlg başlangıç değeri (yüzey/kontak ve kesit)
Kontrast eşitleme	adapthisteq	MoO_3 yüzey	Yerel (CLAHE) histogram eşitleme
İkilileştirme eşiği	Otsu × 1,15	MoO_3 yüzey	graythresh sonrası eşik çarpanı
Morfolojik açma	disk, r = 2 px	MoO_3 yüzey	imopen ile gürültü giderme
En küçük parçacık	20 nm (alan eşd.)	MoO_3 yüzey	bwareaopen alt sınırı
Kenar belirleme	Canny, [0,10 0,20]	Kesit	Ölçek çubuğu kenar tespiti
Alt-piksel örnekleme	2× aşırı örnekleme	Kesit	interp2 (kübik) gri seviye profili
Kalibrasyon kalite eşiği	%0,5 / %1 / %2	Kesit	Ham–iyileştirilmiş piksel farkı sınıfları

Tablo A 2 Dosya adı ilk karakterine göre aygıt etiketleme şeması

Dosya adı ilk karakteri	Alt tabaka	Tavlama durumu
1	Si	Tavlanmış
2	Si	Tavlanmamış
3	SiC	Tavlanmış
4	SiC	Tavlanmamış
5	InP	Tavlanmış
6	InP	Tavlanmamış
7	GaAs	Tavlanmış
8	GaAs	Tavlanmamış

Görüntü dosyaları, dosya adının ilk karakterine göre alt tabaka ve tavlama durumuna eşlenir (Tablo A.2). İlk karakterin sayısal olmadığı durumlarda kod, dosya adındaki si, sic, inp, gaas ve anneal anahtar sözcüklerine dayalı bir yedek eşleme kuralı uygular.

Kesit kalınlığı analizinde, Bölüm 3.2.2.3'te tanımlanan alt tabakaya bağlı sistematik düzeltme katsayıları uygulanır (Tablo A.3). Bu katsayılar operatör tarafından tanımlanan sabit oransal düzeltmelerdir; izlenebilirlik için ham (düzeltilmemiş) ve düzeltilmiş kalınlık değerleri sonuç dosyalarında ayrı sütunlar hâlinde saklanır.

EK A’nın Devamı

Tablo A.3 Kesit katman kalınlığı analizinde uygulanan sistematik düzeltme katsayıları

Alt tabaka	Tavlanmış	Tavlanmamış
Si	%8	%10
SiC	%18	%12
InP	%12	%8
GaAs	%12	%10
Tanımsız (varsayılan)	%10	%10

EK B. SEM Görüntü İşleme Algoritmaları ve MATLAB Kod Özütleri

Aşağıdaki kod özütleri, Bölüm 3.2.2'de iş akışı düzeyinde tanımlanan her rutinin algoritmik çekirdeğini gösterir. Ekrana yazdırma, figür kaydetme ve arayüz yardımcı satırları okunabilirlik için çıkarılmıştır; değişken adları özgün kaynak kodla birebir korunmuştur. Bütün rutinler, kalibrasyonlu piksel–uzunluk dönüşümü (`um_per_pixel`) üzerinden fiziksel birimlere geçer.

EK B.1. Ölçek Çubuğu Kalibrasyonu ve Alt-Piksel İyileştirme

Kalibrasyon, kullanıcının ölçek çubuğunun iki ucunu işaretlemesiyle piksel uzunluğunu ve bunun karşılık geldiği fiziksel uzunluğu (µm) ilişkilendirir. Kesit rutininde bu ham ölçüm, ölçek çubuğu boyunca çıkarılan gri seviye profilinin türevindeki kenar geçişlerinden alt-piksel çözünürlükle yeniden hesaplanır; geçerli bir kenar bulunamazsa ham ölçüme geri dönülür.

(a) Etkileşimli ölçek çubuğu kalibrasyonu

```
[x1, y1] = ginput(1);                    % ölçek çubuğu başlangıcı
[x2, y2] = ginput(1);                    % ölçek çubuğu bitişi
scale_pixels = sqrt((x2-x1)^2 + (y2-y1)^2);
answer = inputdlg({'Scale bar length (um):'}, 'Scale Bar', [1 35], {'10'});
scale length um = str2double(answer{1});
um_per_pixel = scale_length_um / scale_pixels;   % piksel basina um
```

(b) Gri seviye profiline dayalı alt-piksel iyileştirme

```
num_points = round(sqrt((x2-x1)^2 + (y2-y1)^2)) * 2;   % 2x asiri ornekleme
xi = linspace(x1, x2, num_points);
yi = linspace(y1, y2, num_points);
profile = interp2(double(gray_img), xi, yi, 'cubic');  % gri seviye profili
profile_diff = diff(profile);
[~, start_idx] = max(profile_diff);   % koyu -> acik kenar
[~, end_idx]   = min(profile_diff);   % acik -> koyu kenar
if abs(end_idx - start_idx) > 5
    scale_pixels_refined = abs(end_idx-start_idx)*(num_points/length(profile));
else
    scale_pixels_refined = sqrt((x2-x1)^2 + (y2-y1)^2);   % geri dusus
end
```

EK B.2. Gümüş (Ag) Kontak Geometrisi

Gümüş üst kontağın çapı, kullanıcının işaretlediği iki uç nokta arasındaki mesafeden elde edilir; kontak alanı dairesel geometri varsayımıyla hesaplanır.

```
[x1, y1] = ginput(1);   [x2, y2] = ginput(1);   % cap uc noktalari
diameter_pixels = sqrt((x2-x1)^2 + (y2-y1)^2);
diameter_um = diameter_pixels * um_per_pixel;
area_um2    = pi * (diameter_um/2)^2;            % dairesel kontak alani
```

EK B.3. MoO_3 Yüzey Parçacık Segmentasyonu

Seçilen ilgi bölgesi (ROI) gri seviyeye dönüştürülür, yerel kontrast eşitleme (`adapthisteq`) ile iyileştirilir ve Otsu eşiğinin 1,15 katıyla ikilileştirilir. Morfolojik açma ve alan tabanlı eleme (20 nm alt sınır) sonrası bağlı bileşenler sayılır; parçacık yoğunluğu, ROI alanına (μm^2) bölünerek elde edilir.

```
roi_img  = img(y0:y0+h-1, x0:x0+w-1, :);          % secilen ROI
gray_roi = rgb2gray(roi_img);
enhanced = adapthisteq(gray_roi);                 % CLAHE kontrast esitleme
level    = graythresh(enhanced);                  % Otsu esigi
bw       = imbinarize(enhanced, level * 1.15);    % esik carpani 1.15
bw       = imopen(bw, strel('disk', 2));          % gurultu temizleme
min_particle_pixels = round((20/1000 / um_per_pixel)^2);  % 20 nm alt sinir
bw       = bwareaopen(bw, max(5, min_particle_pixels));
cc       = bwconncomp(bw);
total_particles   = cc.NumObjects;
particles_per_um2 = total_particles / area_um2;   % yogunluk (/um^2)
```

EK B.4. Kesit Katman Kalınlığı ve Sistematik Düzeltme

Katman kalınlığı, işaretlenen iki sınır noktası arasındaki mesafenin kalibrasyonlu piksel boyutuyla çarpımından hesaplanır. Ardından Tablo A.3'teki alt tabakaya bağlı katsayıyla oransal sistematik düzeltme uygulanır; ham ve düzeltilmiş değerler birlikte saklanır.

(a) Kalınlık hesabı ve sistematik düzeltmenin uygulanması

```
thickness_pixels = sqrt((x2-x1)^2 + (y2-y1)^2);   % katman sinirlari arasi
thickness_nm     = thickness_pixels * um_per_pixel * 1000;
device_correction      = get_minimal_device_correction(device_type);
corrected_thickness_nm = thickness_nm * (1 + device_correction);
```

(b) Alt tabakaya bağlı düzeltme katsayıları (get_minimal_device_correction)

```
corrections('Si-Annealed')    = 0.08;  corrections('Si-NonAnnealed')  = 0.10;
corrections('SiC-Annealed')   = 0.18;  corrections('SiC-NonAnnealed') = 0.12;
corrections('InP-Annealed')   = 0.12;  corrections('InP-NonAnnealed') = 0.08;
corrections('GaAs-Annealed')  = 0.12;  corrections('GaAs-NonAnnealed')= 0.10;
% eslesme yoksa varsayilan: 0.10
```

EK B.5. SEM Panellerinin Otomatik Dizilmesi

Birleşik SEM figürleri, dosya adının ilk karakterine göre dört sütuna (Si, SiC, InP, GaAs) ayrılır; her sütunda satır sırası Ag kontak, MoO_3 yüzey ve kesit olacak şekilde düzenlenir. Aşağıda tavlanmamış aygıtlar için sınıflandırma çekirdeği verilmiştir; tavlanmış aygıtlar için aynı mantık `Annealed` anahtar sözcüğüyle çalışır.

```
for i = 1:length(tif_files)
    filename = tif_files(i).name;
    if     startsWith(filename,'2'), images_col1{end+1}=filename;  % n-Si
    elseif startsWith(filename,'4'), images_col2{end+1}=filename;  % n-SiC
    elseif startsWith(filename,'6'), images_col3{end+1}=filename;  % n-InP
    elseif startsWith(filename,'8'), images_col4{end+1}=filename;  % n-GaAs
    end
end
% satir sirasi: 1 = Ag kontak, 2 = MoO3 yuzey, 3 = kesit
```

EK C. İstatistiksel Hesaplamaların Bağımsız Doğrulaması İçin Kod Özütleri

Bölüm 4.6'da raporlanan Pearson korelasyon katsayıları ve iki kuyruklu p değerleri, Denklem (4.26) ve (4.27)'nin iki farklı ortamdaki doğrudan gerçeklemeleriyle bağımsız olarak doğrulanmıştır. Aşağıdaki özütler aynı girdi verilerini (Tablo 4.11) kullanmakta ve metinde raporlanan $r = -0{,}975$ ($p = 0{,}025$), $r = +0{,}856$ ($p = 0{,}143$) ve sekiz noktalı $r = -0{,}771$ ($p = 0{,}025$) değerlerini birebir üretmektedir. Tezdeki şekiller Bölüm 3'te tanımlanan analiz ortamında üretilmiş olup buradaki kodların işlevi yalnızca doğrulamadır.

EK C.1. Java Kod Özütü

Özüt, hiçbir istatistik kütüphanesine bağımlı olmayan hesaplama çekirdeğidir; grafik arayüz kodu kapsam dışıdır. p değeri, Student t dağılımının kümülatif olasılığını veren düzenlenmiş eksik beta fonksiyonunun sürekli kesir gerçeklemesiyle hesaplanır.

```
// Veri (Tez Tablo 4.11): Drho (%), Dn, DPhiB0 (eV) ve 8 aygitlik kume
static final double[] DRHO = {-37.7, 17.5, 147.4, -34.2};
static final double[] DN   = { 0.57, -1.20, -3.09,  0.77};
static final double[] DPHI = {-0.106, 0.030, 0.076, -0.167};
static final double[] RHO8 = {102, 84, 23, 70, 64, 99, 58, 46};
static final double[] N8   = {2.77, 3.41, 5.30, 3.46,
                              3.34, 2.21, 2.21, 4.23};

static double pearson(double[] x, double[] y) { // Denklem (4.26)
    double mx = 0, my = 0;
    for (int i = 0; i < x.length; i++) { mx += x[i]; my += y[i]; }
    mx /= x.length;  my /= y.length;
    double sxy = 0, sxx = 0, syy = 0;
    for (int i = 0; i < x.length; i++) {
        sxy += (x[i]-mx)*(y[i]-my);
        sxx += (x[i]-mx)*(x[i]-mx);
        syy += (y[i]-my)*(y[i]-my);
    }
    return sxy / Math.sqrt(sxx * syy);
}

static double pIkiKuyruk(double r, int n) {     // Denklem (4.27)
    double t  = r * Math.sqrt(n - 2) / Math.sqrt(1 - r*r);
    double df = n - 2;                  // p = I_x(df/2, 1/2)
    return betai(df/2.0, 0.5, df/(df + t*t));   // x = df/(df+t^2)
}

// Duzenlenmis eksik beta I_x(a,b) — surekli kesir gerceklemesi
// (Press vd., Numerical Recipes)
static double betai(double a, double b, double x) {
    if (x <= 0) return 0;  if (x >= 1) return 1;
    double bt = Math.exp(gammln(a+b) - gammln(a) - gammln(b)
                         + a*Math.log(x) + b*Math.log(1-x));
    if (x < (a+1)/(a+b+2)) return bt * betacf(a, b, x) / a;
    return 1 - bt * betacf(b, a, 1-x) / b;
}
static double betacf(double a, double b, double x) {
```

EK C.1'in Devamı

```
        double qab = a+b, qap = a+1, qam = a-1;
        double c = 1, d = 1 - qab*x/qap;
        d = 1/d;  double h = d;
        for (int m = 1; m <= 200; m++) {
            int m2 = 2*m;
            double aa = m*(b-m)*x/((qam+m2)*(a+m2));
            d = 1 + aa*d;  c = 1 + aa/c;  d = 1/d;  h *= d*c;
            aa = -(a+m)*(qab+m)*x/((a+m2)*(qap+m2));
            d = 1 + aa*d;  c = 1 + aa/c;  d = 1/d;
            double del = d*c;  h *= del;
            if (Math.abs(del - 1) < 3e-12) break;
        }
        return h;
    }
    static double gammln(double xx) {
        double[] cof = {76.18009172947146, -86.50532032941677,
                        24.01409824083091, -1.231739572450155,
                        0.1208650973866179e-2, -0.5395239384953e-5};
        double x = xx, y = xx, tmp = x + 5.5;
        tmp -= (x + 0.5) * Math.log(tmp);
        double ser = 1.000000000190015;
        for (int j = 0; j <= 5; j++) ser += cof[j] / ++y;
        return -tmp + Math.log(2.5066282746310005 * ser / x);
    }
    // Cikti: r = -0.975 (p = 0.025);  r = +0.856 (p = 0.143);
    //        r = -0.771 (p = 0.025)
```

EK C.2. MATLAB Kod Özütü

Aynı doğrulama, MATLAB R2020a'nın temel işlevleriyle (araç kutusu gerektirmeden) yapılabilir; corrcoef işlevi *r* ve *p* değerlerini birlikte döndürür, betainc ise Denklem (4.27) üzerinden elle sağlama imkânı verir.

```
% Veri (Tez Tablo 4.11)
dRho = [-37.7 17.5 147.4 -34.2];
dN   = [0.57 -1.20 -3.09 0.77];
dPhi = [-0.106 0.030 0.076 -0.167];
rho8 = [102 84 23 70 64 99 58 46];
n8   = [2.77 3.41 5.30 3.46 3.34 2.21 2.21 4.23];

[R,P] = corrcoef(dRho, dN);
fprintf('r = %+.3f, p = %.3f\n', R(1,2), P(1,2));
[R,P] = corrcoef(dRho, dPhi);
fprintf('r = %+.3f, p = %.3f\n', R(1,2), P(1,2));
[R,P] = corrcoef(rho8, n8);
fprintf('r = %+.3f, p = %.3f\n', R(1,2), P(1,2));

% Denklem (4.26)-(4.27) uzerinden elle dogrulama:
pElle = @(r,n) betainc((n-2)./((n-2)+r.^2.*(n-2)./(1-r.^2)), ...
                (n-2)/2, 0.5);
% Cikti: r = -0.975 (p = 0.025);  r = +0.856 (p = 0.143);
%        r = -0.771 (p = 0.025)
```