

Farklı Metal/n-Si Kontakların Sayısal Olarak Modellenmesi ve Simülasyonu

Osman KAHVECİ^{1*}, Mehmet Fatih KAYA²

Öz

Bu çalışmada, Al, Mo, Cu ve Ag metalleri ile n-tipi Si yarıiletkeni kullanılarak farklı metal/yarıiletken kontak yapısı modellenmiştir. Kontakların 0-0.25 V aralığında ileri beslem yarı logaritmik akım-gerilim karakteristiği termiyonik emisyon teorisi kullanılarak elde edilmiştir. Kontak modellerin metalin iş fonksiyonuna bağlı olarak engel yükseklikleri ve idealite faktörleri hesaplanmıştır. En düşük engel yüksekliği 0.64 eV olarak Al/n-Si model kontak için, en büyük engel yüksekliği ise 0.82 eV olarak Ag/n-Si model kontak için hesaplanmıştır. Kontak modelleri ayrı hacimsel hücrelere bölünerek bir ağ oluşturma işlemi gerçekleştirilmiştir. Böylece akım iletimi sırasında, kontak geometrisi boyunca, yüzeyin elektron konsantrasyonu, hol konsantrasyonu ve elektriksel potansiyel değişimleri modellenerek farklı parametrelerin etkileri simule edilerek kontak üzerindeki değişimleri incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Sayısal modelleme, Schottky Engel Yüksekliği, Akım-gerilim karakteristiği, COMSOL.

Numerical Modeling and Simulation of Various Metal/n-Si Contacts

Abstract

In this study, various metal/semiconductor contact structures were simulated using Al, Mo, Cu and Ag metals and n-type Si semiconductor. The semi-logarithmic forward current-voltage characteristics of the contacts were obtained using thermionic emission theory between 0 to 0.25 V range. The barrier heights and ideality factors of the contact models were calculated depending on the work function of the metal. Lowest obstacle height is calculated in Al/n-Si contact model as 0.64 eV and the highest obstacle height is calculated in Ag/n-Si contact model as 0.82 eV. A meshing process was performed by dividing the contact models into separate volumetric cells. Thus, during the current conduction, the electron concentration of the surface, the hole concentration and the electrical potential changes along the contact geometry were simulated and the effects of different parameters were also examined by simulation of Schottky contact.

Keywords: Numerical Modelling, Schottky Barrier Height, Current–Voltage Characteristic, COMSOL.

¹Erciyes Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Kayseri, Türkiye, kahveci@erciyes.edu.tr

²Erciyes Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Enerji Sistemleri Mühendisliği Bölümü, Isı Tekniği Anabilim Dalı, Kayseri, Türkiye, kayamehmetfatih@erciyes.edu.tr

¹<https://orcid.org/0000-0001-5053-0577>

²<https://orcid.org/0000-0002-2444-0583>

1. Giriş

Schottky diyotlar diğer nokta kontak yapılarla kıyaslandığında yüksek güç kapasitesi, düşük gürültü ile çalışma ve daha düşük seri direnç gibi özellikleri ile daha kullanışlı bir yapıya sahiptir (Rhoderick & Williams). Metal-yarıiletken kontaklar hakkındaki ilk bilimsel ilerlemeler Braun (1874)'un (Braun, 1874) ilk çalışmasına kadar uzanır. Bu araştırmacı, bakır ve demir sülfat gibi yarıiletkenler ile metal kontaklar arasında elektriksel iletimin asimetrik tabiatını ortaya çıkarmıştır. Doğrultma mekanizması anlaşılmasına rağmen, metal noktalar ve metalik sülfatlar arasındaki kontaklar radyo ile ilgili ilk deneylerde detektör olarak yaygın şekilde kullanılmıştır (Rhoderick & Williams). Bu yüzden yarıiletken teknolojiler haberleşme ve iletişim alanında çok önemli bir yere sahiptirler.

Yüksek vakum sisteminde metallerin buharlaştırılması gibi teknolojilerin geliştirilmesiyle 1950 ve 1960'lı yıllarda yoğun bir çalışma ile başlatılan nokta kontaklardan, çok daha kararlı ve seri üretime uygun kontaklar oluşturulmuştur. Metal-yarıiletken diyot elde edilmesi, bunların üretimlerinin kolay olmayışı ve aynı zamanda da mekanik olarak emniyetli olmamasından dolayı bu yarıiletkenler 1950'lerde p-n eklemi ile yer değiştirmiştir. Daha sonralarda ise yarıiletken ve vakum teknolojisinin gelişmesi kontakları emniyetli hale getirmiştir. Bu gelişmelerle birlikte, yarıiletken teknolojisinde kontaklar önemli bir yere sahip olmuş ve konu ile ilgili araştırmalar da çeşitlenmiştir. Özellikle, Schottky engellerine dayalı kontaklar mikro elektronikte zamanla artan bir şekilde kullanılmıştır (Neamen; Rhoderick & Williams).

Kontakların akım iletimi mekanizmasını doğru bir şekilde tanımlamak ve çalışma koşullarını belirlemek için kontakların engel yüksekliği (Φ_b) iyi bilinmelidir. Schottky ve Mott engel yüksekliğini hesaplamak için bir model önermiştir (Mott, 1938; Rhoderick & Williams; Schottky, Stormer, & Waibel, 1931). Schottky-Mott kuralına (Rhoderick & Williams) göre, ideal şartlarda, engel yüksekliğini etkileyen faktörler yarıiletkenin elektron ilgisi (χ_s) ve metalin iş fonksiyonudur (ϕ_m) ve basitçe Eş.1'deki gibi ifade edilebilir:

$$\Phi_b = \phi_m - \chi_s \quad (1)$$

Farklı yarıiletken alt taşlar kullanılarak, farklı metallerle yapılan metal-yarıiletken kontakların engel yüksekliği birçok çalışmada araştırılmıştır (Abdullah Akkaya, 2021; Ayyıldız et al., 1996; Kahveci, Akkaya, Ayyıldız, & Türüt, 2017; Keskin, Akkaya, Ayyıldız, Uygun Öksüz, & Özbay Karakuş, 2019; Tung, 2014) . Metal-yarıiletken kontakların engel yüksekliği birçok çalışmada araştırılmıştır (Abdullah Akkaya, 2021; Ayyıldız et al., 1996; Kahveci et al., 2017; Keskin et al., 2019; Tung, 2014). Farklı metaller ile yarıiletkenlerin oluşturacağı kontakların engel yüksekliği

üzerinde oldukça önemli bir etkisi vardır. Hatta metal ve yarıiletken birleştiğinde oluşan ara yüz bileşiminin engel yüksekliği üzerinde etkisi ara yüzey yapısından daha etkili olduğu bildirilmektedir (Aboelfotoh, 1987). Belirli bir amaca hizmet edecek diyotların üretimi sırasında diyot parametrelerinin belirlenmesi için farklı iş fonksiyonlarına sahip metallerin veya yarıiletkenlerin kullanılması genellikle yeterlidir (Abdullah Akkaya, 2021; Myburg, Auret, Meyer, Louw, & Van Staden, 1998). İş fonksiyonu, malzeme yüzeylerinin en temel özelliklerinden biridir ve metal-yarıiletken kontakların elektriksel özelliklerini doğrudan etkilemektedir (Ishii, Matsumura, Sakai, & Sakata, 2001). Dolayısıyla farklı iş fonksiyonlarına sahip metal kontaklar, yarıiletken aygıtların elektriksel parametrelerini doğrudan etkileyecektir. Metal yarıiletken kontak üretimi yüksek vakum altında, oldukça titiz çalışma koşullarında gerçekleştirilmesi gereken deneysel bir süreçtir. Kontak üretimini simüle etmek, deneme yapılacak kontakların üretim öncesinde bazı özelliklerini görebilmeye imkân sağlayacaktır. Ayrıca kontakların sayısal modellenmesi zaman ve maddi açıdan da tasarruf sağlayacaktır. Modellemede kullanılan yarıiletken malzeme Si kristalidir. Si, hem mikro hem de optoelektronik uygulamalarda kullanılan cihazlar için önemli bir alttaş malzemesidir ve aynı zamanda en yaygın kullanıma sahip olanlardan biridir.

Üretilen bir devre elemanının tam kapasite ile çalışabilmesi, devreyi oluşturan temel yapının, bütün özelliklerinin bilinmesine bağlıdır. Schottky kontağın parametrelerini geleneksel ve yeni yaklaşımlarla çıkarmak için modelleme konusunda farklı bilimsel çalışmalar yapılmaktadır (Eledlebi, Ismail, & Rezeq, 2016; Qin et al., 2018; Rezeq et al., 2018; Tang & Stake, 2011; Timpa et al., 2021; Vieira & Cendula, 2021). Simülasyon işlemi gerçekleştirilirken; ilk olarak modelin geometrisi tanımlanarak, modeli oluşturan öğelerin özellikleri ile beraber fizik kanunlarıyla değişen değerleri tanımlanır. Bu işlemlerin sonucunda raporlar, grafikler ve görselleştirmeler biçimindeki model çıktıları elde edilmiş olur. Schottky kontakların modelleme çalışmalarında çeşitli yazılımlardan faydalanılmaktadır. Bu yazılımlar arasında Comsol Multiphysics yazılımı ile hesaplanan verilerin deneysel çalışmalarla büyük uyum içerisinde olduğu literatür verileri ile de bildirilmiştir (Abbate et al., 2014; Eledlebi et al., 2016; Saxena & Gorji, 2019).

Alüminyum (Al), Molibden (Mo), Bakır (Cu) ve Gümüş (Ag) metalleri bu Schottky kontak modelleme çalışması için belirlenmiş olan metallerdir. Seçilen metallerin iş fonksiyonları 4 eV ile 5 eV aralığında değişmekte olup birbirinden farklı değerlere sahiptir. Ayrıca Schottky kontak çalışmalarında yaygın olarak da tercih edilmektedirler. Bu metallerin her birinin farklı önemli özellikleri tercih edilmelerini sağlamaktadır. Örneğin, Al, yarıiletken cihaz teknolojisinde önemli bir metaldir. Si ile Al kontakları, hem Schottky kontak (n-tipi Si için) hem de ohmik kontak (p-tipi Si ve n-tipi Si için) için tek elemanlı metalizasyon sistemlerinde kullanılmak için oldukça uygundur (Vali et al., 2018). Mo gibi yansıtıcı metaller ise Schottky kontakların, ısı işlemlerde daha fazla esnekliğe ve yüksek sıcaklıklarda daha fazla güvenilirliğe sahip olması nedeniyle tercih

edilmektedir (Takano et al., 2000). Diğer önemli metallere olan Cu ve Ag ise yüksek iletkenlikleri ve yarıiletken alttaşlar ile iyi temas etmeleri nedeniyle tercih edilmektedirler (Abdullah Akkaya, 2021; Bakkaloğlu, Ejderha, Efeoğlu, Karataş, & Türüt, 2021).

Bu çalışmanın amacı, metal / yarıiletken (Schottky) kontağı modelleyerek, fiziksel özelliklerini, parametrelerini simule etmek ve bu özelliklerden faydalanarak, Schottky kontağın yapısal özelliklerini geliştirmeye katkıda bulunmaktır. Bu amaçla, farklı metal/n-Si kontak parametrelerinin metalin iş fonksiyonuna bağlı olarak değişimi Comsol Multiphysics yazılımı kullanılarak modellenmiştir ve kontak bölgesinde taşıyıcı yoğunluğu ve uygulama geriliminin dağılımını görsel olarak incelenmesini sağlayan bir sayısal modelleme çalışması yapılmıştır. Bu sayede modellenen kontakların akım-gerilim grafikleri elde edilerek kontak parametreleri hesaplanmıştır.

2. Materyal ve Metot

2.1. Matematiksel Model

Akım iletim mekanizmasının açıklanması için kullanılan modellemenin temeli, engelin homojen olduğunu varsayan, termiyonik emisyon teorisine dayanmaktadır. Bu akım iletim mekanizması orta derecede katkılanmış ($N_d < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) kontaklar için baskın mekanizmadır. Termiyonik emisyonla ilgili akım iletimi, ileri besleme geriliminin küçük değerleri için, metal/n-tipi yarıiletken kontaklarda engel üzerinden, yarıiletkenden metale doğru elektron hareketiyle gerçekleşmektedir. Yarıiletkenden metale doğru potansiyel engeli aşabilecek yeterli enerjiye sahip elektronların konsantrasyonuna bağlı olarak akım yoğunluğunun temel denklemi Eş.2'deki sınır değerlerine sahip integral şeklindedir (Rhoderick & Williams):

$$J = \int_{E_F + q\Phi_b}^{\infty} qv_x dn \quad (2)$$

Burada, E_F Fermi enerjisi olmak üzere, $E_F + q\Phi_b$, termiyonik emisyon için minimum enerjidir, v_x , iletim doğrultusundaki taşıyıcının (n tipinde elektronlar) hızı, q , elektronun yükü ve dn , parçacık yoğunluğudur. Bu temel denklemde gerekli düzenlemeler yapılarak ve yaklaşımlar kullanılarak, çözümlemede kullanılan asıl denklemlere ulaşılmaktadır. Termiyonik emisyon teorisine göre, ileri besleme bölgesinde ($V \geq 3kT/q$ için) diyotun kontak bölgesinden geçen akım yoğunluğu $J(\text{A cm}^{-2})$ Eş.3'teki gibi hesaplanır (Rhoderick & Williams):

$$J = J_0 \left(e^{qV/nkT} \right) \quad \left\{ J_0 = A^* T^2 e^{-q\Phi_b/kT} \right\} \quad (3)$$

Burada A^* , etkin Richardson sabiti, T , sıcaklık, Φ_b , engel yüksekliği, V , uygulama gerilimi k , Boltzmann sabitidir ve n , idealite faktörü olmak üzere Eş.4'teki gibi yarı logaritmik J-V grafiğinin eğiminden hesaplanmaktadır:

$$n = \left(q / kT \right) \left(\partial V / \partial \ln J \right) \quad (4)$$

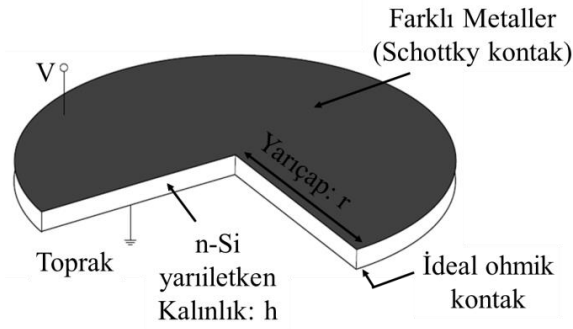
Kontakların Φ_b , engel yüksekliği ise Eş.5'teki gibi hesaplanır:

$$q\Phi_b = (kT) \ln \left(A^* T^2 / J_0 \right) \quad (5)$$

Uygulama gerilimi 0V değerinden 0.25V sınır değerine kadar uygulandığında metal/yarıiletken kontakların bu aralıkta yarı logaritmik ileri beslem J-V karakteristiği elde edilebilmektedir. Termiyonik emisyon teorisine dayalı olarak geliştirilen matematiksel model, kontakların karakteristik verilerinin sayısal olarak elde edilmesini sağlamaktadır. Daha sonra bu matematiksel modelin uygulanacağı model geometrisi, ağ oluşturma ve parametrelerin sayısal değerlerinin belirlemesi işlemine geçilmektedir.

2.2. Model Geometrisi ve Parametrelerinin Belirlenmesi

Çalışmanın amacına uygun olacak şekilde, kontakın geometrisi dairesel olarak belirlenmiştir. Metal kontaklar için iş fonksiyonu 4 ev ile 5 eV aralığında değişen dört farklı metal; Alüminyum (Al), Molibden (Mo), Bakır (Cu) ve Gümüş (Ag) tercih edilmiştir. Yarıiletken alttaş olarak n tipi Si seçilerek kontak modeli elde edilmiştir (Şekil 1). Aygıtın uygulama gerilimi kontakın alt ve üst kısımlarından olacak şekilde belirlenmiştir.



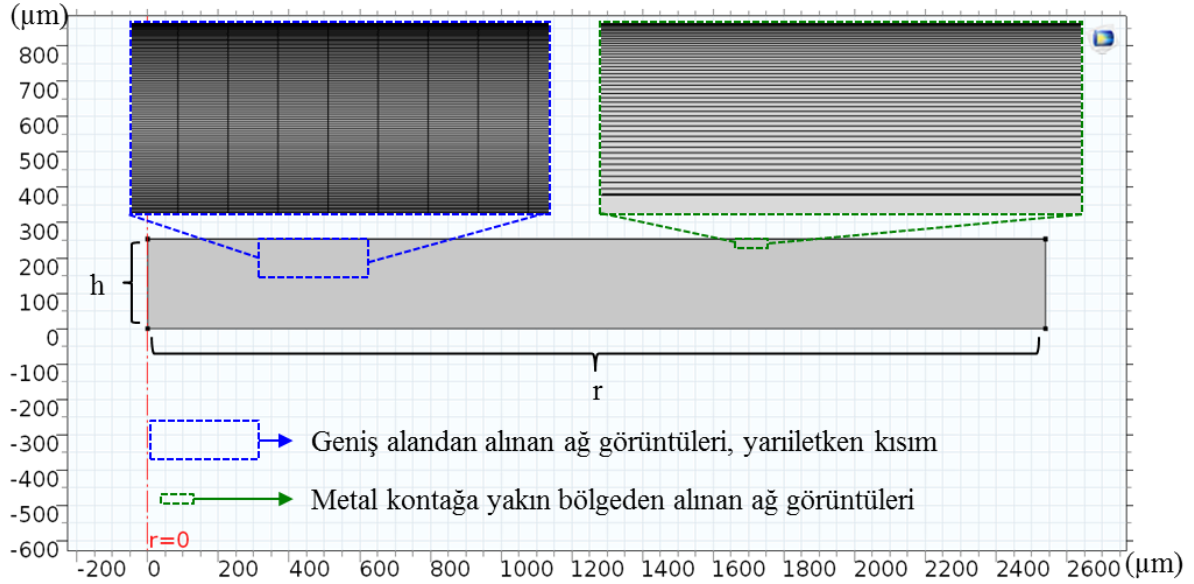
Şekil 1. Metal/yarıiletken kontak modeli.

Model geometrisi oluşturulduktan sonra, malzemelerin seçim işlemleri, malzemeye ait fiziksel özelliklerin değerleri ve sabitlerin değerleri gibi veriler programa işlenmiştir. Dairesel kantağın belirlenen boyutları, bazı fiziksel parametreler ve sabitler Tablo 1'de yer almaktadır.

Tablo 1. Metal/yarıiletken kontak modeli için giriş parametreleri, boyutlar ve sabitler.

Parametre	Değeri	Birimi	Açıklama
V	0-0.25	V	Gerilim
ϕ_m	Al	4.41	Metallerin iş fonksiyonu (Yoshitake, 2021)
	Mo	4.53	
	Cu	4.59	
	Ag	4.64	
h	254	μm	Yarıiletken alttaş kalınlığı
r	2540		Kontakların yarıçapı
T	298	K	Sıcaklık
N_d	1×10^{16}	cm^{-3}	n tipi Si donör konsantrasyonu (Printz, 2015)
A^*	110	$\text{Acm}^{-2}\text{K}^{-2}$	n tipi Si için etkin Richardson sabiti (Tōyama, 1988)
E_g	1.12	V	Si yarıiletken bant aralığı (Wang et al., 2014)
ρ	2.329	g cm^{-3}	Si yoğunluğu (Kozdon & Spieweck, 1992)

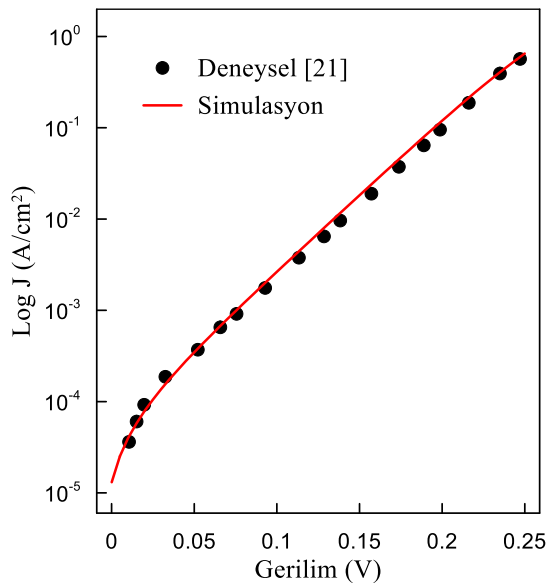
Daha sonra modelin ayrı geometrik ve topolojik hücrelere bölünmesi işlemi olan bir ağ oluşturma işlemi gerçekleştirilmiştir. Hem enine hem boyuna çizgilerle belirlenen sıklıkta dikdörtgen ağlar oluşturulmuştur. Akım iletim mekanizmalarının simülasyonunun daha iyi anlaşılması amacıyla, farklı sıklığa sahip üç bölge oluşturulmuştur. Örneğin, metalle yarıiletkenin bulunduğu kontak bölgelerinde daha sıkı bir ağ yapısı oluşturulmuştur. Şekil 2' de kantağın iki boyutlu kesit geometrisi ve kontak üzerindeki farklı bölgelerin ağ desenleri görülmektedir.



Şekil 2. Modellenen Metal/yarıiletken kontağın iki boyutlu görseli ve ağ desenleri.

2.3. Deneysel Doğrulama

Kontak modelinin matematiksel, geometrik tanımlama işlemleri gerçekleştirildiğinde deneysel doğrulama aşamasına geçilmiştir. Program yardımıyla, matematiksel model denklemlerinin, geometrik ağ modeline yakınsama yaparak çözümlenmesi sonucu kontak modelinin karakteristik parametreleri elde edilmiştir. Deneysel doğrulama için ise Schottky diyot konusunda temel çalışmalardan olan Crowell ve ark. (Crowell, Sarace, & Sze, 1965) tarafından gerçekleştirilen Tungsten(W) / Yarıiletken (n tipi Silisyum) kontakların deneysel çalışması referans olarak alınmıştır. Buradaki deneysel sonuçlar ile COMSOL Multiphysics programıyla modellenen kontakın akım-gerilim karakteristiğinin uyumunu gösteren grafik Şekil 3'te görülmektedir.

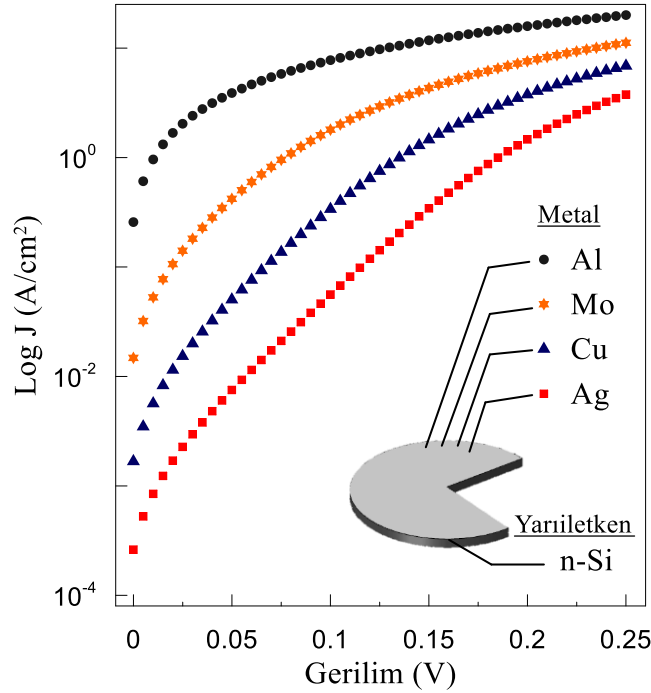


Şekil 3. W/n-Si Schottky kontağın akım-gerilim grafiği.

3. Bulgular ve Tartışma

3.1. Akım-Gerilim Karakteristiği

Farklı iş fonksiyonuna sahip metaller ile n tipi Si Schottky kontakların yarı logaritmik ileri beslem J-V karakteristiği Şekil 4'te gösterilmektedir. Uygulama gerilimi 0 V'den başlayarak 5×10^{-3} V adımlar ile 0.25 V değerine kadar uygulanmıştır. Modelleme ile elde edilen grafiğin ileri beslem bölgesine baktığımızda, artan iş fonksiyonuna bağlı olarak kontakların doğrultma oranı da artmaktadır. Örneğin n-Si ile kontağı modellenen, 4.41 eV iş fonksiyonuna sahip Al'nin doğrultma özelliği en düşük iken, 4.64 eV iş fonksiyonuna sahip Ag'nin doğrultma özelliği en güçlü olan kontak olarak görülmektedir. Akım doğrultma oranının iş fonksiyonuyla ilişkili olduğu (Abdullah Akkaya, 2021) ve artan iş fonksiyonuna bağlı olarak artışı literatürde deneysel olarak da elde edilen bir sonuçtur (Yoon et al., 2015).



Şekil 4. Modelleme ile elde edilen metal/n-Si kontağın yarı logaritmik J-V grafiği.

Modellenen diyotların n ve Φ_b değerleri, yarı logaritmik J-V karakteristiği yardımıyla, bir grafik ara yüze sahip olan SeCLaS-PC programı (A Akkaya & Ayyıldız, 2020a, 2020b) kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplama sonuçları Tablo 2'de yer almaktadır.

Tablo 2. Farklı metal/n-Si kontakların karakteristik parametreleri

Metal (Schottky kontak)	Φ_m (eV)	n	Φ_b (eV)
Al	4.41	2.13	0.64
Mo	4.53	1.12	0.72
Cu	4.59	1.06	0.77
Ag	4.64	1.02	0.82

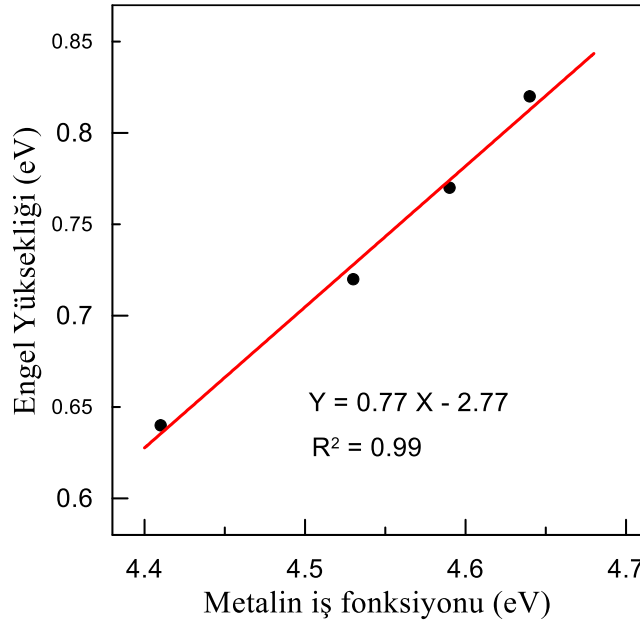
Tablo 2'yi incelediğimizde idealite faktörü 1'e en yakın olan Ag metal/n-Si kontağı olduğu görülmektedir. Engel yüksekliği değerlerine baktığımızda en yüksek değer yine Ag metal/n-Si kontağına aittir. Model kontakların engel yüksekliği değerlerinin literatürdeki deneysel sonuçlarla karşılaştırması Tablo 3'te yer almaktadır.

Tablo 3'de de verildiği gibi Ag metal/n-Si kontağın modelleme ile elde edilen 0.82 eV engel yüksekliği değeri literatürde (Keffous et al., 2004) deneysel olarak elde edilen 0.85 eV Ag/n-Si kontağın engel yüksekliği değerine oldukça yakındır. Yine başka bir deneysel çalışmada (Sato & Yasumura, 1985) ise Mo/n-Si kontağın engel yüksekliği 0.68 eV olarak elde edilmiş, bu çalışmada ise Mo/n-Si kontak modelinin engel yüksekliği 0.72 eV olarak hesaplanmıştır.

Tablo 3. Model kontakların Φ_b değerlerinin literatürdeki deneysel sonuçlarla karşılaştırılması.

Metal (Schottky kontak)	Yarıiletken tipi	Φ_b (eV)	Kaynak
Al	n-Si	0.64	Bu çalışma
Al	p-Si	0.65	(Altindal, Farazin, Pirgholi-Givi, Maril, & Azizian-Kalandaragh, 2020)
Mo	n-Si	0.72	Bu çalışma
Mo	n-Si	0.68	(Sato & Yasumura, 1985)
Cu	n-Si	0.77	Bu çalışma
Cu	n-Si	0.74	(Bakkaloğlu et al., 2021)
Ag	n-Si	0.82	Bu çalışma
Ag	n-Si	0.85	(Keffous et al., 2004)

Metalin iş fonksiyonuna bağlı olarak hesaplanan engel yüksekliği değerleri de değişmektedir. Şekil 5'te engel yüksekliğinin iş fonksiyonuna bağlı değişimi görülmektedir.

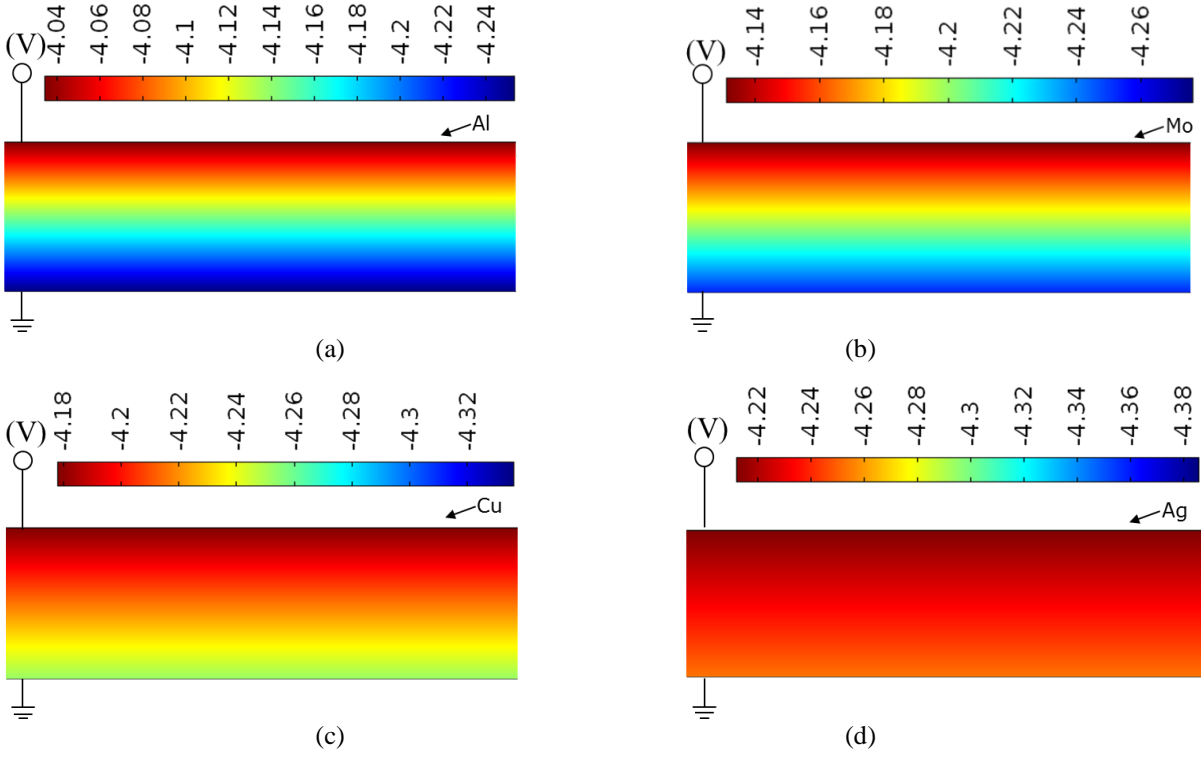


Şekil 5. Kontakların iş fonksiyonuna bağlı olarak engel yüksekliğinin değişimi.

Modelleme ile elde edilen sonuçlardan metalin iş fonksiyonu arttığında engel yüksekliğinin de arttığı görülmektedir. Örneğin 4.41 eV sahip Al için hesaplanan engel yüksekliği değeri, 0.64 eV iken 4.64 eV iş fonksiyonuna sahip Ag için hesaplanan engel yüksekliği değeri, 0.82 eV olmaktadır. Şekil 5'teki değişim grafiği incelenirse engel yüksekliği ile iş fonksiyonu arasında yaklaşık lineer bir ilişki vardır. Engel yüksekliği ile metalin iş fonksiyonu arasında lineer bir ilişki olduğu durumda $\Phi_b - \phi_m$ grafiğinin eğimi arayüzey hallerinin yoğunluğunu vermektedir. Şekil 5'te sonuçlara uydurulan lineer doğrunun eğimi 0.77 olarak hesaplanmıştır ve 1'e yakındır. Eğer lineer doğrunun eğimi 1'e yakınsa Schottky limiti olarak adlandırılmaktadır ve bu durumda arayüzey hallerinin yoğunluğunun oldukça düşük olduğu anlamına gelmektedir (Cohen, 1979). Bu durum literatürde deneysel çalışmalarda elde edilen $\Phi_b - \phi_m$ ilişkisiyle uyum içerisindedir (Abdullah Akkaya, 2021).

3.2. Elektriksel Potansiyelin Dağılımı

Schottky kontakların akım iletiminde bazen elektronlar etkin olurken bazen de holler etkin olabilmektedir. Metalle n tipi yarıiletken kontak yapıldığında yarıiletkenden metale doğru elektron akışı meydana gelmektedir. Bu geçişle birlikte yarıiletkende pozitif yüklü donör atomları kalmış olur. Böylece kontak bölgesindeki yük dağılımındaki değişimden kaynaklanan elektrik alan oluşur (Neamen). Kontak bölgesinin ileri beslem altında, elektriksel potansiyelinin dağılımını gösteren bir simülasyon Şekil 6'da verilmiştir.

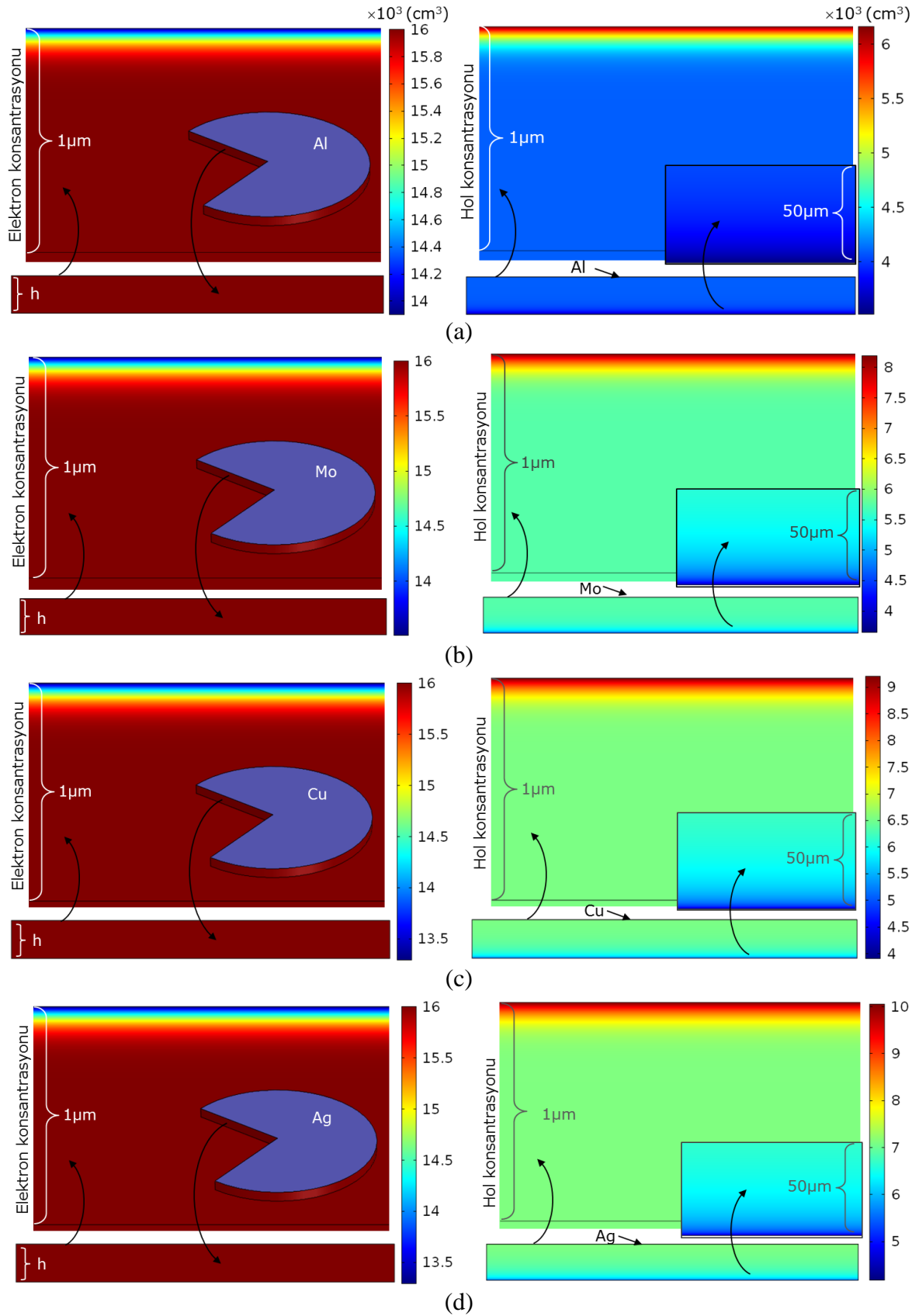


Şekil 6. İleri beslem altında kontakın elektriksel potansiyelinin simülasyonu a) Al, b) Mo, c) Cu ve d) Ag.

Modellenen kontakların elektriksel potansiyel dağılımı Al/n-Si için (Şekil 6. a), Mo/n-Si için (Şekil 6. b), Cu/n-Si için (Şekil 6.c) ve Ag/n-Si için (Şekil 6.d) sırasıyla, -4.04V ila -4.24V aralığında , -4.14V ila -4.26V aralığında, -4.18V ila -4.32V aralığında ve -4.22V ile -4.38V aralığında değişmektedir.

3.3. Elektron ve Hol Konsantrasyonu

Termiyonik emisyon yoluyla elektron hareketi akım iletimini sağlarken kontak bölgesinin elektron ve hol konsantrasyonlarında ileri beslem altında ne gibi değişiklikler olabileceğini görsel olarak görmemizi sağlayan bir simülasyon elde edilmiştir. Modellenen kontaklara ait elektron ve hol konsantrasyonlarının simülasyonu Şekil 7'de yer almaktadır.



Şekil 7. Modellenen kantağın elektron ve hol konsantrasyonlarının dağılımı a) Al, b) Mo, c) Cu ve d) Ag.

Şekil 7'de elektron konsantrasyonlarının dağılımını göstermek amacıyla kontakların metale yakın olan $1\mu\text{m}$ 'lik kısmı büyütülerek verilmiştir. Bütün metaller için elektron konsantrasyonları kontak yapısı boyunca yaklaşık benzerdir. Yüzeydeki hol konsantrasyonlarının dağılımını göstermek amacıyla yarıiletkenin metale yakın (Schottky kontak bölgesi) $1\mu\text{m}$ 'lik kısmı ve yarıiletkenin ohmik kontağa yakın olan $50\mu\text{m}$ 'lik kısımları büyütülerek verilmiştir. Hol konsantrasyonlarının dağılımı Al/n-Si kontak için (Şekil 7. a) yaklaşık $6\times 10^3\text{ cm}^3$ ile $3.5\times 10^3\text{ cm}^3$ aralığında değişmektedir ve kontağın çoğunluğunda $4-4.5\times 10^3\text{ cm}^3$ değeri baskındır. Mo/n-Si kontak için (Şekil 7. b) yaklaşık $8\times 10^3\text{ cm}^3$ ile $4\times 10^3\text{ cm}^3$ aralığında değişmektedir ve kontağın çoğunluğunda $6\times 10^3\text{ cm}^3$ değeri baskın, Cu/n-Si kontak için (Şekil 7. c) yaklaşık $9\times 10^3\text{ cm}^3$ ile $4\times 10^3\text{ cm}^3$ aralığında değişmektedir ve kontağın çoğunluğunda $6.5-7\times 10^3\text{ cm}^3$ değeri baskın ve Ag/n-Si kontak için (Şekil 7. d) ise hol konsantrasyonu yaklaşık $10\times 10^3\text{ cm}^3$ ile $4.5\times 10^3\text{ cm}^3$ aralığında değişirken kontağın çoğunluğunda $7-7.5\times 10^3\text{ cm}^3$ değeri daha baskındır. Sonuçlara baktığımızda farklı engel yüksekliğine sahip kontaklar için elektron ve hol konsantrasyonlarının da farklı dağılım gösterdiği görülmektedir. İş fonksiyonundaki farklılıklar Schottky engel yüksekliğinin de farklı olmasına neden olmaktadır. Engel yüksekliğinin büyük olması hollerin taşınımını zorlaştırmaktadır. Bununla birlikte kontak bölgesindeki deplasyon bölgesinin genişliğini de etkileyerek yapı içerisinde elektron ve hol konsantrasyonlarında farklılıkların oluşmasını sağlayacaktır (Lai & Chen, 2009).

4. Sonuçlar ve Öneriler

İş fonksiyonları 4-5 eV aralığındaki dört farklı metal (Al, Mo, Cu, Ag) ile n tipi katkılı yarıiletken (Si) kullanılarak metal/yarıiletken kontakların sayısal modellenmesi başarılı bir şekilde gerçekleştirilmiştir. İleri beslem altında kontakların yarı logaritmik akım-gerilim karakteristiklerinden idealite faktörü ve engel yükseklikleri hesaplanmıştır. En düşük engel yüksekliği Al/n-Si model kontak için 0.64 eV olarak hesaplanırken, en büyük engel yüksekliği ise Ag/n-Si model kontak için 0.82 eV olarak hesaplanmıştır. Mo/n-Si ve Cu/n-Si model kontakların engel yükseklikleri ise sırasıyla 0.72 eV ve 0.77 eV olarak hesaplanmıştır. Artan iş fonksiyonuna bağlı olarak engel yüksekliği değerleri de artmaktadır. Bulgular literatürdeki deneysel sonuçlarla uyumludur. Modelleme sayesinde kontak geometrisi boyunca elektron ve hol konsantrasyonlarının dağılımını görsel olarak incelenebilmektedir. Ayrıca ileri beslem altında yüzeyin elektriksel potansiyel dağılımı da incelenebilmektedir. Metal/yarıiletken kontakların modellenmesinde Comsol Multiphysics yazılımının kullanılabilir olduğu görülmüştür. Özellikle deneysel zorluk içeren çalışmalarda, çalışma hakkında ön bilgi vermesi için veya deneysel süreci tamamlayan çalışmaların sonuçlarının bilimsel olarak açıklanmasında modelleme çalışmaları yardımcı olabilir. Bu çalışmada

da modelleme çalışması sayesinde elektron ve hol konsantrasyonlarının farklı malzemelerde nasıl dağılım gösterdiği ortaya çıkarılmıştır.

İlerleyen araştırmalarda zor çalışma şartlarına sahip alaşımlar ile yarıiletkenlerin oluşturacağı kontakların özelliklerini incelemek amacıyla modelleme çalışmaları yapılarak literatüre daha farklı katkılar yapılması planlanmaktadır.

Yazarların Katkısı

Tüm yazarlar çalışmaya eşit katkıda bulunmuştur.

Çıkar Çatışması Beyanı

Yazarlar arasında herhangi bir çıkar çatışması bulunmamaktadır.

Araştırma ve Yayın Etiği Beyanı

Yapılan çalışmada araştırma ve yayın etiğine uyulmuştur.

Kaynaklar

- Abbate, C., Busatto, G., Cova, P., Delmonte, N., Giuliani, F., Iannuzzo, F., . . . Velardi, F. (2014). Thermal damage in SiC Schottky diodes induced by SE heavy ions. *Microelectronics Reliability*, 54(9-10), 2200-2206.
- Aboelfotoh, M. (1987). Schottky-barrier behavior of a Ti-W alloy on Si (100). *Journal of applied physics*, 61(7), 2558-2565.
- Akkaya, A. (2021). Au–Ag binary alloys on n-GaAs substrates and effect of work functions on Schottky barrier height. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 32(13), 17448-17461.
- Akkaya, A., & Ayyıldız, E. (2020a). Automation software for semiconductor research laboratories: electrical parameter calculation program (SeCLaS-PC). *Journal of Circuits, Systems and Computers*, 29(13), 2050215.
- Akkaya, A., & Ayyıldız, E. (2020b). Automation software for semiconductor research laboratories: measurement system and instrument control program (SeCLaS-IC). *Mapan*, 35(3), 343-350.
- Altındal, S., Farazin, J., Pirgholi-Givi, G., Maril, E., & Azizian-Kalandaragh, Y. (2020). The effects of (Bi₂Te₃–Bi₂O₃-TeO₂-PVP) interfacial film on the dielectric and electrical features of Al/p-Si (MS) Schottky barrier diodes (SBDs). *Physica B: Condensed Matter*, 582, 411958.
- Ayyıldız, E., Türüt, A., Efeoğlu, H., Tüzemen, S., Sağlam, M., & Yoğurtçu, Y. K. (1996). Effect of series resistance on the forward current-voltage characteristics of Schottky diodes in the presence of interfacial layer. *Solid-State Electronics*, 39(1), 83-87.
- Bakkaloğlu, Ö. F., Ejderha, K., Efeoğlu, H., Karataş, Ş., & Türüt, A. (2021). Temperature dependence of electrical parameters of the Cu/n-Si metal semiconductor Schottky structures. *Journal of Molecular Structure*, 1224, 129057.

- Braun, F. (1874). On the current conduction through metal sulphides. *Ann. Phys. Chem*, 153, 556.
- Cohen, M. L. (1979). Schottky and Bardeen limits for Schottky barriers. *Journal of Vacuum Science and Technology*, 16(5), 1135-1136.
- Crowell, C., Sarace, J., & Sze, S. (1965). Tungsten-semiconductor Schottky barrier diodes. *Trans. Met. Soc. AIME*, 233, 478.
- Eledlebi, K., Ismail, M., & Rezeq, M. d. (2016). Finite element simulation and analysis of nanometal-semiconductor contacts. *Nanotechnology Reviews*, 5(3), 355-362.
- Ishii, R., Matsumura, K., Sakai, A., & Sakata, T. (2001). Work function of binary alloys. *Applied surface science*, 169, 658-661.
- Kahveci, O., Akkaya, A., Ayyıldız, E., & Türüt, A. (2017). Comparison of the Ti/n-GaAs Schottky CONTACTS' Parameters fabricated using DC magnetron sputtering and thermal evaporation. *Surface Review and Letters*, 24(04), 1750047.
- Keffous, A., Siad, M., Cheriet, A., Benrekaa, N., Belkacem, Y., Menari, H., . . . Dahmani, A. (2004). Comparison of electrical and optical parameters of Au/n-Si and Ag/n-Si Schottky barrier photodiodes. *Applied surface science*, 236(1-4), 42-49.
- Keskin, M., Akkaya, A., Ayyıldız, E., Uygun Öksüz, A., & Özbay Karakuş, M. (2019). Investigation of the temperature-dependent electrical properties of Au/PEDOT: WO₃/p-Si hybrid device. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 30(17), 16676-16686.
- Kozdon, A., & Spieweck, F. (1992). Determination of differences in the density of silicon single crystals by observing their flotation at different pressures. *IEEE transactions on instrumentation and measurement*, 41(3), 420-426.
- Lai, P. Y., & Chen, J.-S. (2009). Influence of electrical field dependent depletion at metal-polymer junctions on resistive switching of poly (N-vinylcarbazole)(PVK)-based memory devices. *Organic Electronics*, 10(8), 1590-1595.
- Mott, N. F. (1938). *Note on the contact between a metal and an insulator or semi-conductor*. Paper presented at the Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society.
- Myburg, G., Auret, F., Meyer, W., Louw, C., & Van Staden, M. (1998). Summary of Schottky barrier height data on epitaxially grown n-and p-GaAs. *Thin solid films*, 325(1-2), 181-186.
- Neamen, D. *Semiconductor physics and devices*. 2003: McGraw-Hill Higher Education.
- Printz, M. (2015). T-CAD analysis of electric fields in n-in-p silicon strip detectors in dependence on the p-stop pattern and doping concentration. *Journal of Instrumentation*, 10(01), C01048.
- Qin, G., Zhang, X., Ma, S., Zhang, Q., Fan, C., & Zhao, M. (2018). An accurate computational method for analysis of electromechanical properties of structures with metal-GaN piezoelectric semiconductor contact. *Computational Materials Science*, 152, 70-77.
- Rezeq, M. d., Ali, A., Patole, S. P., Eledlebi, K., Dey, R. K., & Cui, B. (2018). The dependence of Schottky junction (I-V) characteristics on the metal probe size in nano metal-semiconductor contacts. *AIP Advances*, 8(5), 055122.
- Rhoderick, E., & Williams, R. *Metal-Semiconductor Contacts*, Clarendon Press, Oxford 1988.
- Sato, K., & Yasumura, Y. (1985). Study of forward I-V plot for Schottky diodes with high series resistance. *Journal of applied physics*, 58(9), 3655-3657.
- Saxena, P., & Gorji, N. E. (2019). COMSOL simulation of heat distribution in perovskite solar cells: Coupled optical-electrical-thermal 3-D analysis. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 9(6), 1693-1698.
- Schottky, W., Stormer, R., & Waibel, F. (1931). Rectifying action at the boundary between CuProus oxide and applied metal electrodes. *Z. Hoch Frequenztechnik*, 37, 162.
- Takano, H., Kimura, M., Ando, T., Niemcharoen, S., Yasumura, Y., & Sato, K. (2000). Optical response of planar Mo/n-Si/Mo structures with long neutral region and Schottky barriers at both ends. *Solid-State Electronics*, 44(12), 2161-2164.
- Tang, A. Y., & Stake, J. (2011). Impact of eddy currents and crowding effects on high-frequency losses in planar Schottky diodes. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 58(10), 3260-3269.

- Timpa, S., Rahimi, M., Rastikian, J., Suffit, S., Mallet, F., Lafarge, P., . . . Della Rocca, M. L. (2021). Role of metal contacts on the electric and thermoelectric response of hBN/WSe₂ based transistors. *Journal of applied physics*, 130(18), 185102.
- Tōyama, N. (1988). Variation in the effective Richardson constant of a metal-silicon contact due to metal-film thickness. *Journal of applied physics*, 63(8), 2720-2724.
- Tung, R. T. (2014). The physics and chemistry of the Schottky barrier height. *Applied Physics Reviews*, 1(1), 011304.
- Vali, I. P., Shetty, P. K., Mahesha, M., Keshav, R., Sathe, V., Phase, D., & Choudhary, R. (2018). Gamma irradiation effects on Al/n-Si Schottky junction properties. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 436, 191-197.
- Vieira, J. A., & Cendula, P. (2021). SolCelSim: simulation of charge transport in solar cells developed in Comsol Application Builder. *International Journal of Modelling and Simulation*, 1-11.
- Wang, Q., Xu, B., Sun, J., Liu, H., Zhao, Z., Yu, D., . . . He, J. (2014). Direct band gap silicon allotropes. *Journal of the American Chemical Society*, 136(28), 9826-9829.
- Yoon, H. S., Joe, H.-E., Jun Kim, S., Lee, H. S., Im, S., Min, B.-K., & Jun, S. C. (2015). Layer dependence and gas molecule absorption property in MoS₂ Schottky diode with asymmetric metal contacts. *Scientific reports*, 5(1), 1-10.
- Yoshitake, M. (2021). *Work Function and Band Alignment of Electrode Materials*: Springer.