박막 실리콘 내 도핑 농도 변화에 따른 포논과 전자의 열전도율 기여도에 대한 수치해석

진재식[†] · 이준식^{*}

Predictions of Phonon and Electron Contributions to Thermal Conductivity in Silicon Films with Varying Doping Density

Jae Sik Jin and Joon Sik Lee

Key Words: Thermal conductivity contribution(열전도율 기여도), Doping density(도핑 농도), Thin film silicon(박막 실리콘), BTE(볼츠만 수송방정식)

Abstract

The relative contributions of phonon and electron to the thermal conductivity of silicon film with varying doping density are evaluated from the modified electron-phonon interaction model, which is applicable to the micro/nanoscale simulation of energy transport between energy carriers. The thermal conductivities of intrinsic silicon layer thicknesses from 20 nm to 500 nm are calculated and extended to the variation in n-type doping densities from 1.0×10^{18} to 5.0×10^{20} cm⁻³, which agree well with the experimental data and theoretical model. From simulation results, the phonon and electron contributions to thermal conductivity are extracted. The electron contribution in the silicon is found to be not negligible above 10^{19} cm⁻³, which can be classified as semimetal or metal by the value of its electrical resistivity at room temperature. The thermal conductivity due to electron is about 57.2% of the total thermal conductivity at doping concentration 5.0×10^{20} cm⁻³ and silicon film thickness 100 nm.

기호설명 C: 비열(J/m ³ K) d: 정반사도 dx: 박막층의 두께(m) D(ω): 포논의 상태밀도(1/m ³) E: 에너지(J) $\langle E_e \rangle$: 전자의 평균에너지(J) f: 포논 분포함수 $ar{F}$: 외부력(kg·m/s ²) \hbar : 기준화된 Plank 상수(1.054×10 ⁻³⁴ Js) k: 열전도율(W/mK) k _B : 볼츠만 상수(1.38×10 ⁻²³ J/K)	K : 파수(m ⁻¹) m*: 전자의 유효질랑(kg) N _{band} : 총 포논 띠 수 P: 운동량(kg·m/s) t : 시간(s) r : 불순물의 원자 반경(m) T : 온도(K) ⊽ : 포논의 군속도(m/s) valaction 고리스문자 γ : 산란률(1/s) τ : 이완시간(s) ρ : 도핑 농도(cm ⁻³)
↑ 서울대학교 대학원 기계항공공학부	Ω : 입체각(sr)
E-mail : jinjs91@snu.ac.kr TEL : (02)880-7123 FAX : (02)875-6632 * 서울대학교 기계항공공학부	하첨자 a : 음향포논

상첨자

0:평형상태

1. 서 론

최근 몇 년간 MEMS 공정의 급속한 발전으로 인하여 박막 단결정(single crystal) 실리콘은 센서 및 작동기(actuator), 반도체 소자 등 광범위한 응 용이 가능해졌다. 덩어리(bulk) 실리콘은 우수한 열전도율(thermal conductivity) (상온에서 약 148 W/mK)을 갖고 있으나, MEMS 공정에 응용되는 박 막 실리콘의 경우, 특성길이(characteristic length)가 실리콘의 주요 에너지 전달자인 포논의 평균자유 행로(mean free path, 상온에서 약 300 nm) 보다 작 아지게 된다. 결국, 포논의 실리콘 경계면 산란 (scattering)의 영향으로 열전도율이 덩어리 실리콘 에 비해 현저히 감소함이 기존 연구를 통해 잘 알 려져 있다^(1~4). 또한, 박막 실리콘의 응용과정에서 전기적 특성을 위해 도핑(doping)을 한다. 예를 들 면 박막 트랜지스터(SOI transistor)의 경우 드레인 (drain)과 소스(source) 영역의 형성을 위해서 박막 실리콘에 도핑을 한다. 이런 경우 불순물 첨가에 따른 포논과 불순물의 산란 증가로 인하여 열적 전달 특성이 더욱 나빠진다⁽⁵⁾.

기존의 마이크로/나노스케일의 에너지 전달 예 측에 대한 연구를 살펴보면, 이런 길이스케일에서 의 에너지 전달 예측은 기존의 열확산 방정식 (Heat diffusion equation)을 적용할 수 없고 볼츠만 수송방정식(Boltzmann transport equation, BTE)과 같 은 통계적 전달 방정식을 적용하여야 한다⁽⁶⁾. 실리 콘 내 에너지 전달의 좀더 정교한 예측을 위해서 BTE 에 포논과 포논 사이의 열적 상호작용인 분 산(dispersion)과 분극(polarization) 효과를 고려한 full phonon dispersion 모델이 제시되었으며⁽⁷⁾, 이 모 델을 적용하여 박막 실리콘과 도핑 된 실리콘의 열전도율을 구하였고⁽⁷⁾, 박막 트랜지스터 내의 Joule 가열에 의한 온도장을 해석했다⁽⁸⁾. 최근에는 full phonon dispersion 모델을 보완하여, 포논과 전 자의 에너지 전달을 고려한 전자-포논 상호작용 모델(electron-phonon interaction model)이 소개됐다⁽⁹⁾. 이 모델의 특징은 실리콘 내 전자와 포논, 포논과 포논의 산란에 의한 에너지 전달을 동시에 고려했 다는 점이다.

박막 실리콘의 중요한 응용중의 하나인 박막 트 랜지스터의 경우, 채널(channel) 길이가 현재 약 45 nm 에서 더욱 짧아지고 있는 추세이고, 향후 몇 년 내 30 nm 이하로 줄어들 것으로 예상된다. 이 에 따라 전계(electric field)에 의해 에너지화 된 전 자들의 에너지가 도핑 된 드레인 영역에서 포논과 산란하여 소산되는 Joule 가열 현상이 두드러지게 증가하게 된다. 이 때 포논의 평균자유행로보다 휠씬 작은 스케일(~10 nm)의 국부적인 고온 영역 이 발생된다. 이런 국부적인 가열에 의한 열적 전 달에 대한 정확한 예측을 위해서는 도핑 된 드레 인 영역에서 에너지 전달자(포논과 전자)들의 열 전도율 기여도(contribution)에 대한 예측이 필요하 다. 본 연구에서는 전자-포논 상호작용 모델을 적 용하여, n-타입 도핑의 대표적인 5 족 원소인 인 (phosphorous)의 도핑 농도의 변화에 따른 포논과 전자의 열전도율 기여도에 대한 수치해석 결과를 제시했다.

2. 수정된 전자-포논 상호작용 모델

2.1 BTE 와 수정된 전자-포논 상호작용 모델 마이크로/나노스케일의 에너지 전달 해석에서 에너지 전달자는 이완 시간 근사(relaxation time approximation)를 적용한 Boltzmannn 수송방정식인 식(1)을 적용할 수 있다⁽⁶⁾.

$$\frac{\partial f_{\omega}}{\partial t} + \stackrel{\rightarrow}{v}_{\omega} \cdot \nabla f_{\omega} + \vec{F} \frac{\partial f_{\omega}}{\partial \vec{P}} = -\frac{f_{\omega} - f_{\omega}^{o}}{\tau_{\omega}}$$
(1)

이런 길이스케일에서는 포논의 평균자유행로 보다 훨씬 작은 특성 길이로 인하여 열역학적 온도 (thermodynamic temperature)를 정의할 수 없으나⁽⁶⁾, 포논의 분산관계(dispersion relation)의 진동수에 따 른 분류를 통해서 i 번째 띠(band)의 에너지 밀도 (energy density) $e''_i = e''_i(\bar{r}, \hat{s}, \omega) = \hbar \omega f_o D(\omega)$ 로 정의하 고, 이를 주어진 띠의 진동수에 대해 적분하여 포 논의 단위 부피당, 단위 입체각 당 에너지 e''_i 를 정의할 수 있다⁽⁷⁾. 본 연구에서는 Narumanchi 등⁽⁸⁾ 과 같이 음향포논(acoustic phonon)에 대해서는 6 개 의 띠로, 광포논(optical phonon)에 대해서는 1 개의 띠로 세분화하였다.

전자-포논 상호작용 모델을 본 연구에 적용하기 위해서, Jin 등⁽⁹⁾이 제시한 원래 전자-포논 상호작 용 모델 중에서 포논-포논 상호작용에 의한 에너 지 변화에 대한 모델을 계산영역 내에서 포논-포 논의 산란과 전자-포논의 산란에 의한 에너지 전 달을 동시에 고려하여야 하므로 수정이 필요하다. 따라서 다음과 같이 음향포논과 광포논 BTE 에 대해서 각각 산란항(scattering term)인 우변 항에 에너지 전달자(포논과 전자) 사이의 산란항을 동 시에 고려하였다.

$$\frac{\partial e_i''}{\partial t} + \nabla \cdot (v_i \hat{s} e_i'')$$

$$= (e_i^o - e_i'') (\gamma_{ii} + \gamma_i) + \sum_{\substack{j=1\\j \neq i}}^{N_{bunds}} \left\{ \left(\frac{1}{4\pi} \int_{T_{ref}}^{T_{ij}} C_i dT - e_i'' \right) \gamma_{ij} \right\} \quad (2)$$

$$+ \sum_{a=1}^{5} \left(\int_{T_{ref}}^{T_{ea}} C_e dT - e_e \right) \gamma + \sum_{a=6}^{9} \left(\int_{T_{ref}}^{T_{ea}} C_e dT - e_e \right) \gamma_{fg}$$

$$\frac{\partial e_o}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N_{bonds}-1} \left(\int_{T_{ref}}^{T_{oj}} C_o dT - e_o \right) \gamma_{oj} + \left(\int_{T_{ref}}^{T_{eo}} C_e dT - e_e \right) \gamma_g + \sum_{f=1}^{2} \left(\int_{T_{ref}}^{T_{eo}} C_e dT - e_e \right) \gamma_f$$
(3)

여기서, C 는 비열이며, 포논과 전자의 비열은 기 존의 연구결과^(7,6)를 사용했고, T_{ij}는 하첨자인 i 번 째 띠의 포논 모드와 j 번째 띠의 포논모드가 서 로 상호작용을 하여 결정되는 상호작용 온도이다 ⁽⁷⁾. 식(2)의 우변 첫 번째 항은 포논의 분산효과와 포논과 불순물과의 산란을, 두 번째 항은 음향포 논의 분극효과를, 세 번째와 네 번째 항은 각각 intravalley 와 intervalley 과정을 통한 음향포논과 전자 사이의 에너지 전달을 나타내며, 식(3)의 우 변 첫 번째 항은 광포논의 분극효과를, 두 번째와 세 번째 항은 intervalley 과정을 통한 전자와 광포 논 사이의 에너지 전달을 의미한다.

또한, 열적 기울기만 고려한 전자의 에너지 변 화는 식(1)에서 좌변의 세 번째 항인 전기장에 의 한 외부력(external force) 항을 무시할 수 있으므로 Jin 등⁽⁹⁾이 제시한 원래 모델의 외부력 항을 무시 하여 다음과 같이 수정된 모델을 적용했다.

$$\frac{\partial e_e}{\partial t} \stackrel{\rightarrow}{\to} \stackrel{\rightarrow}{v_e} \cdot \nabla e_e$$

$$= \sum_{a=1}^{5} \left(\int_{T_{ref}}^{T_{ea}} C_e dT - e_e \right) \gamma + \sum_{a=6}^{9} \left(\int_{T_{ref}}^{T_{ea}} C_e dT - e_e \right) \gamma_{fg} \qquad (4)$$

$$+ \left(\int_{T_{ref}}^{T_{ea}} C_e dT - e_e \right) \gamma_g + \sum_{f=1}^{2} \left(\int_{T_{ref}}^{T_{ea}} C_e dT - e_e \right) \gamma_f$$

위 식에서 전자와 음향포논 또는 광포논과의 에너 지 전달이 우변의 산란항들에 포함되어 있으며, 전자와 전자 사이의 산란은 본 연구에서 무시했다.

2.2 에너지 전달자들의 산란률

실리콘 내 전자와 포논의 에너지 전달은 intravalley 와 intervalley 과정으로 해석할 수 있다 ⁽⁹⁾. 이를 이용하여 열적 기울기(thermal gradient)가 존재하는 조건에서 5 족 원소인 인(phosphorous)으 로 n-타입 도핑에 의해 생성된 자유 전자(free electron)와 포논의 산란률(scattering rate)을 구하였 다. 이때 사용된 평균 전자 에너지는 $\langle E_{e} \rangle = 3k_{B}(T_{b} - T_{c})/4$ 관계를 이용했다. 전자-포논의 산란률과 포논-포논의 산란률은 기존의 연구결과 (8,10,11)를 적용했고, 도핑에 의한 불순물과 포논의 산란률(%)은 Mazumder 등(12)이 제시한 다음 모델 을 사용했다.

$$\gamma_i = \frac{1}{\tau_i} = \alpha \sigma \rho \left| \vec{v} \right| \tag{5}$$

여기서, α 는 실험 결과와 적합하도록 조정되는 상수이며, σ 는 산란 단면(scattering cross-section)이 며 다음과 같이 표현된다⁽¹²⁾.

$$\sigma = \pi r^2 \left[\frac{\left(r \left| K_{ph} \right| \right)^4}{\left(r \left| K_{ph} \right| \right)^4 + 1} \right]$$
(6)

여기서 r은 불순물의 원자 반경(atomic radius)이다.

3. 수치해석 결과

3.1 순수 실리콘의 열전도율

Figure 1(a)와 같이 양 끝 단은 일정온도로 유지 하고 나머지 경계는 단열이라고 가정한 1 차원 열 전도 문제를 유한체적법(Finter Volume Method)으로 해석했다. 포논의 군속도(group velocity) v_i 는 상온 에서 실리콘의 [001]방향의 분산관계를 이용했다.



Fig. 1. (a) Schematic of calculation domain; (b) Temperature distribution inside a silicon layer.

음향포논과 광포논, 전자의 에너지 변화에 대해서 식(2)~(4)을 계산영역에 대해 풀고 포논과 전자 각 각에 대한 열유속(heat flux)을 다음과 같이 구했다.

$$q_{ph}'' = \int_{4\pi} v_{ph} e_{ph}'' d\Omega$$
⁽⁷⁾

$$q_e'' = v_e e_e \tag{8}$$

여기서 v_e 는 열에너지에 의해 발생되는 전자의 속 도이며, 전자의 열에너지와 운동에너지와의 관계 인 $3k_BT_e/2=m^*/\bar{v}_e/^2/2$ 로부터 얻을 수 있다. 이로부 터 포논과 전자의 열전도율 k_{ph} , 와 k_e 는 퓨리에 법칙(Fourier's law)인

$$q_{ph(e)}'' = k_{ph(e)} \frac{dT}{dx}$$
(9)

로부터 각각 구했고, 따라서 박막 실리콘의 열전 도율 $k_{si} = k_{ph} + k_e$ 가 된다.

앞서 설명한 바와 같이 시스템의 특성길이가 에 너지 전달자의 평균자유행로보다 작은 박막의 경 우, 벌리스틱(ballistic) 에너지 전달 특성으로 인하 여 Figure 1(b)와 같이 양쪽 경계에서 온도 점프(*T_h* -*T'_h*, *T'_c* - *T_c*)가 발생한다. Escobar 등⁽¹³⁾은 벌리스 틱 전달 특성이 존재하는 경우, 이 온도 점프를 고려하여 온도 기울기 *dT/dx* 를 구하였고, 이를 식 (9)의 온도 기울기에 적용했다.

Figure 2 에 실리콘 두께 20 nm 에서 500 nm 에 대해서 여러 실험 결과들과 비교하여 나타냈다. 제시한 실험 결과의 오차를 고려하면 수치해석 결 과가 실제 박막 실리콘의 열전도율을 잘 예측함을 알 수 있다. 여기서 순수 실리콘의 도핑 농도는 진성(intrinsic) 반도체의 상온에서 값인 10¹⁰ cm⁻³을 사용했다. 또한, 초 박막 실리콘(*dx* = 20 nm)에 대 해서는 경계면에 대한 저항이 굉장히 클 것으로



Fig. 2. Thermal conductivity for silicon film layer as function of thickness at 300 K.





예상되므로, 단열면에서 경계조건을 완전확산면 (fully diffuse surface)이라고 가정하였고, *dx* = 50 nm 에 대해서는 정반사면(specular surface)로 가정하여 정반사도(specularity) *d* = 0.6 을 사용했고, 나머지 경우에 대해서는 실리콘의 두께(*dx*)가 증가할수록 단열면의 저항이 감소하므로 *d* = 0.7 을 사용했다. Narumanchi 등⁽⁷⁾과 Mazumder 등⁽¹²⁾이 수치해석 결 과와 실험 결과의 비교를 위해 *d* = 0.4 ~ 0.6 을 사 용한 것을 고려하면 본 연구에서 사용된 정반사도 값은 타당하다고 할 수 있다.

3.2 불순물을 첨가한 실리콘의 열전도율

순수 실리콘에 5 족 원소 인(phosphorus)을 1.0 × $10^{18} \sim 5.0 \times 10^{20}$ cm⁻³으로 도핑 한 경우에 대해서 열전도율을 구하여, Liu 등⁽⁵⁾이 Kinetic 모델로부터 유도한 모델과 비교하여 Figure 3 에 나타냈다. 이 때 도핑 농도는 전체 계산 영역에 균일하게 분포 한다고 가정하였고, 식(5)의 α 값을, 도핑 농도의 크기가 10^{19} cm⁻³ 이하인 경우, Narumanchi 등⁽⁷⁾이 제시한 $\alpha = 50$ 를, 10^{20} cm⁻³ 이상일 경우는 Mazumder 등⁽¹²⁾이 제시한 크기가 1 정도의 값(1~6) 을 취하였고, Liu 등⁽⁵⁾의 결과와 잘 일치함을 알 수 있다.

3.3 포논과 전자의 열전도율 기여도

앞서 구한 도핑 변화에 따른 열전도율에 대한 수치해석 결과로부터 식(8)을 이용하여, 전자와 포논의 열전도율을 각각 구하여 Figure 4 에 나타 냈다. 포논과 전자의 열전도율은 모두 박막 실리 콘의 두께가 증가할수록 증가함을 보인다. 이는 포논의 경우 두께가 증가할수록 경계면과의 산란 효과가 감소하기 때문이며, 전자의 경우는 온도 기울기(∇T)만 존재할 때 전자의 파수(wave number) K_e 의 평형상태로부터 이탈 정도는 $\delta K_e \sim \nabla T$ 이 므로⁽¹⁴⁾, 실리콘 두께가 증가하면 실리콘 내 전자 는 평형에너지에 좀더 가까워지기 때문에 열적 저 항의 감소로 인하여 전자의 열전도율이 증가하게 된다.

포논의 열전도율은 도핑 농도가 증가할수록 불 순물과의 산란으로 감소하며, 전자의 열전도율은 10¹⁸ cm⁻³범위까지는 열에너지 전달에 전혀 기여를 하지 못 함을 알 수 있다. 그러나 도핑 농도가 증 가하여 10¹⁹ cm⁻³범위부터는 전자의 열전도율이 증 가하며, 10²⁰ cm⁻³ 이상에서 전자의 열전도율에 대 한 기여도가 현저히 나타난다. 100 nm 의 박막 실 리콘에서는 오히려 실리콘의 주요 에너지 전달자 인 포논의 열전도율보다 커져서 약 57.2%의 열전 도율 기여도를 보임을 알 수 있다(Figure 4(b)).

상온의 n-타입으로 10¹⁹ cm⁻³ 도핑 된 실리콘에 대해서 비저항은 5 × 10⁻³ ohm-cm 값을 갖는다⁽¹⁵⁾. 일반적으로 반도체의 비저항 범위가 10⁻² ~ 10⁹ ohm-cm 임을 고려하면, 도핑농도가 10¹⁹ cm⁻³ 이상 에서 실리콘은 금속의 성질을 갖게 되어, 주요 에 너지 전달자는 전자가 될 것이 예상되며, 본 연구 결과와 일치한다고 할 수 있다.

4. 결론

전자와 포논, 포논과 포논의 에너지 전달을 고



Fig. 4. (a) Thermal conductivity contribution of phonon and electron with doping concentration and silicon layer thickness at 300 K; (b) Fraction of thermal conductivity contribution of (a).

려한 전자-포논 상호작용 모델을 적용하여 실리콘 의 마이크로/나노스케일의 열전도율을 구하여 기 존 실험결과들과 비교했고, 이 결과를 확장하여 대표적인 5 족 원소인 인(phosphorous)의 도핑 농도 증가에 따른 열전도율 감소 정도를 예측했다. 이 로부터 전자와 포논의 열전도율 기여도를 구했고, 도핑 농도 10²⁰ cm⁻³ 이상에서 전자의 열전도율은 무시할 수 없으며, 도핑 농도가 5.0 × 10²⁰ cm⁻³ 일 때 실리콘 두께가 100 nm 에서 전자는 약 57.2%의 열전도율 기여도를 보였다.

후 기

본 연구는 마이크로열시스템연구센터(ERC)의 지원으로 수행되었습니다.

참고문헌

- Asheghi, M., Leung, Y. K., Wong, S. S. and Goodson, K. E., 1997, "Phonon-boundary scattering in thin silicon layers," *Applied Physics Letters*, Vol. 71, No. 13, pp. 1798~1800.
- (2) Asheghi, M., Touzelbaev, M. N., Goodson, K. E., Leung, Y. K. and Wong, S. S., 1998, "Temperature dependent thermal conductivity of single-crystal silicon layers in SOI substrates," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 120, No. 1, pp. 30~36.
- (3) Ju, Y. S. and Goodson, K. E., 1999, "Phonon scattering in silicon films with thickness of order 100 nm," *Applied Physics Letters*, Vol. 74, No. 20, pp. 3005~3007.
- (4) Liu, W. and Asheghi, M., 2006, "Thermal conductivity of measurements of ultra-thin single crystal silicon layers," ASME Journal of Heat Transfer, Vol. 128, No. 1, pp. 75~83.
- (5) Liu, W., Etessam-Yazdani, K., Hussin, R. and Asheghi, M., 2006, "Modeling and Data for Thermal Conductivity of Ultrathin Single-Crystal SOI Layers," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 53, No. 8, pp. 1868~1876.
- (6) Tien, C. L., Majumdar, A. and Gerner, F. M., 1998, *MICROSCALE ENERGY TRANSPORT*, Taylor & Francis, Washington D. C., pp 3~94.
- (7) Narumanchi, S. V. J., Murthy, J. Y. and Amon, C. H., 2004, "Submicron Heat Transport Model in Silicon Accounting for Phonon Dispersion and Polarization," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 126, No. 6, pp. 945 ~ 955.

- (8) Narumanchi, S. V. J., Murthy, J. Y. and Amon, C. H., 2005, "Comparison of Different Phonon Transport Models for Predicting Heat Conduction in Silicon-on-Insulator Transistors," *ASME Journal* of Heat Transfer, Vol. 127, No. 7, pp. 713 ~ 723.
- (9) Jin, J. S. and Lee, J. S., 2006, "Electron-Phonon Interaction Model and Prediction of Thermal Energy Transport in SOI Transistor," 2006 Int. Conf. on Nano Science and Nano Technology, Gwangju, Korea, OE1-005.
- (10) Lundstrom, M., 2000, Fundamentals of carrier transport, Cambridge University Press, Cambridge, pp. 54~118.
- (11) Pop, E., Dutton, R. W. and Goodson, K. E., 2004, "Analytic band Monte Carlo model for electron transport in Si including acoustic and optical phonon dispersion". *Journal of Applied Physics*, Vol. 96, No. 9, pp. 4998~5005.
- (12) Mazumder, S. and Majundar, A., 2001, "Monte Carlo Study of Phonon Transport in Solid Thin Films Including Dispersion and Polarization," ASME Journal of Heat Transfer, Vol. 123, No. 4, pp. 749~759.
- (13) Escobar, R. A. and Amon, C. H., 2004, "Lattice-Boltzmann Modeling of Sub-continnum Energy Transport in Silicon-on-Insulator Microelectronics Including Phonon Dispersion Effects," 2004 Inter Society Conference on Thermal Phenomena, pp. 584~591.
- (14) Bube, R. H., 1974, Electronic Properties of Crystalline Solids, Academic Press, New York, pp. 220~229.
- (15) Pierret, R. F., 2003, Advanced Semiconductor Fundamentals, 2ed, Pearson Education Inc., New Jersey, pp.191.