

Screening 현상 및 broadening 현상이 p형 Si과 Ge의 이동도에 미치는 효과

논문
10-6-10

Screening and broadening effects on the mobilities for p-type Si and Ge

전상국*

(Sang-Kook Chun)

Abstract

The ionization energy and degree of ionization for Si and Ge with boron doping are calculated. The hole mobilities are then calculated as a function of doping concentration using the relaxation time approximation. When the screening effect is taken into account, the reduction of ionization energy results in the increase of degree of ionization. As a result, the calculated Si mobility becomes closer to the experimental data, whereas the calculated Ge mobility is almost independent of the screening effect. The inclusion of the broadening effect in the mobility calculation overestimates the ionized impurity scattering. As compared with the experiment, the screening effect is not avoidable to calculate Si and Ge mobilities, and the broadening effect must accompany with the hopping process.

Key words (중요용어) : Degree of ionization(이온화율), Screening effect(차단효과), Broadening effect(확장효과), Mobility(이동도)

1. 서 론

Si과 Ge의 정공의 전기적 특성은 많은 사람들이 연구하여 왔다. Si과 Ge의 에너지 구조를 완전히 이해하기 전부터 정공의 이동도를 실험적으로 측정하였고, 온도와 불순물 농도에 따른 이동도의 변화를 effective mass를 이용하여 설명하였다.^{1,2,3)} Effective mass를 이용하는 것은 일정한 에너지를 갖는 표면이 구 형태라고 가정을 하는 것이다. 실제, Si 또는 Ge의 valence band는 여러 개의 band로 구성되어 있으며 anisotropic하고 nonparabolic한 특성 때문에 정공의 흐름을 실험식으로 이해하기에는 부족하다. 온도가 높아지거나 불순물 농도가 높아지면 정공은 valence band의 굴곡으로 인한 영향을 더욱 심하게 받기 때문이다.

Nakagawa 와 Zukotynski⁴⁾는 불순물이 거의 없는 Si에서 정공의 이동도를 이론적으로 계산하였

다. 그들은 heavy hole(HH)과 light hole band(LH)의 nonparabolicity와 anisotropy를 고려하였으며 acoustic phonon(AP)과 optical phonon(OP)에 의한 산란을 고려하여 온도 변화에 따른 이동도를 잘 설명하였다. Spin-orbit band(SO)는 에너지 구조를 계산할 때에는 고려하였지만 이동도 계산에는 고려하지 않았다. SO는 Γ 지점에서 붙어있는 HH와 LH로부터 0.044 eV 아래 위치하고 있기 때문에 정공의 숫자가 상대적으로 매우 작아 이동도에 큰 영향을 주지는 않는다. 하지만 온도가 아주 높은 경우나 불순물 농도가 높아질 경우에는 SO에 정공의 숫자가 크게 증가하게 되어 이를 무시 할 수가 없다.

Chun과 Wang⁵⁾은 3개의 valence band를 모두 포함시켜 Si과 Ge의 에너지 구조를 얻었고 이동도를 온도와 불순물 농도의 함수로서 계산하였다. 불순물 농도에 따른 이동도의 변화를 연구하기 위하여 ionized impurity(IO)와 neutral impurity(NU)에 의한 산란을 첨가하였다. 그들의 계산 결과는 광범위한 온도 영역에서 Si과 Ge의 실험 값과 훌륭히 설명하였지만, 불순물 농도에 따른 Si과 Ge의

* : 인하대학교 전자전기컴퓨터공학부

접수일자 : 1997년 4월 18일

심사완료 : 1997년 6월 28일

이동도의 설명은 완벽하지 못하였다. 불순물이 증가함에 따라 실험 값과의 오차는 심해졌다. 특히, 불순물 농도가 10^{19} cm^{-3} 이상일 때, 이동도 값은 계속 감소하여 실험 값처럼 수렴하지 않았다. 이와 같은 문제점은 NU가 과대 평가되었거나 불순물 에너지 띠를 고려하지 않았기 때문이라 설명하였다. 이러한 문제점을 해결하기 위해서는 불순물에 의한 물리적인 변화를 이해할 필요가 있다.

이 논문에서는 $6 \times 6 k \cdot p$ Hamiltonian을 이용하여 Si과 Ge의 valence band를 얻은 후, density of states(DOS)와 이온화 에너지를 계산하였다. 불순물의 농도가 높아지면서 생기는 불순물 에너지 띠가 DOS와 정공의 분포에 미치는 효과를 연구하였고 불순물의 농도에 따라 변하는 이온화 에너지를 screening 현상을 이용하여 설명하였다. 여러 가지 산란에 의한 relaxation time을 에너지의 함수로 얻은 후, 전계 하에서 정공의 이동도를 계산하기 위하여 Boltzmann transport equation과 relaxation time approximation을 이용하였다. Si과 Ge의 이동도에 대한 이해는 최근에 관심이 집중되고 있는 strained SiGe의 전기적 특성을 이해하는데 바탕이 되며, 특히, 첨가되는 alloy 산란을 분석하는데 도움이 된다.

2. Screening 현상

Si(또는 Ge)에 boron을 넣는다면 boron은 한 개의 정공을 만들어내는 역할을 하며, boron의 핵과 정공은 Coulomb 힘에 의해 결합된다. 이 결합에너지는 Si인 경우에 45 meV이며 Ge인 경우에 10 meV이다.^{1,2)} 외부로부터 에너지가 공급되면 이 결합은 쉽게 깨지고, 정공은 valence band로 이동하게 되어 자유롭게 움직일 수 있다. 이것은 수소 원자의 경우와 유사하기 때문에, Bohr 모델을 이용하여 불순물 에너지 준위와 궤도 반경을 얻을 수 있다. 이 때, 불순물 에너지 준위는 boron으로부터 정공을 valence band에 공급하기 위한 이온화 에너지로 이해할 수 있다. Bohr 모델을 이용하여 얻어진 이온화 에너지와 궤도 반경은 다음과 같다.⁶⁾

$$E_1 = \frac{e^4}{32\pi^2\hbar^2} \frac{m_H}{\epsilon^2} \quad (1)$$

$$r_1 = \frac{4\pi\hbar^2}{e^2} \frac{\epsilon}{m_H} \quad (2)$$

m_H 은 hydrogenic effective mass이며 ϵ 은 유전율이다. 실험적으로 얻은 Si과 Ge의 이온화 에너지를 이용하여, m_H 와 r_1 을 식 (1)과 (2)로부터 얻을 수 있다. 하지만, 실험적으로 얻어진 Si과 Ge의 이온화 에너지는 불순물 농도가 작을 때 얻어진 값이다. Morin과 Maita²⁾에 의하여 얻어진 Si의 실험 값을 보면, 정공의 이온화 에너지가 불순물 농도에 따라 변한다. 불순물 농도가 10^{15} cm^{-3} 보다 작을 때에는 이온화 에너지가 거의 변하지 않으나, 불순물 농도가 증가할수록 이온화 에너지는 작아진다. 각 불순물로부터 이온화된 정공은 반도체 내부에 널리 퍼져서 불순물의 원자핵이 정공을 구속하는데 필요한 Coulomb 힘을 차단시키는 역할을 한다. 이 때, 원자핵에 구속되어 있던 정공은 더욱 쉽게 탈출할 수가 있어 정공의 이온화 에너지가 감소하게 되는 셈이다. 따라서, 불순물 농도 중 이온화된 불순물의 양인 degree of ionization(DOI)이 증가되어 IO 산란을 변화시킨다. 결과적으로, 이동도를 계산할 때에 screening 현상을 고려하지 않는다면, 불순물의 농도가 높아짐에 따라 잘못된 결과를 얻을 수 있다.

Dingle⁷⁾과 Mansfield⁸⁾는 screening 현상을 고려한 electrostatic potential energy를 구하였다. Electrostatic potential energy를 미분하면 screening 현상을 고려한 Coulomb 힘을 얻을 수 있다. 이렇게 얻은 Coulomb 힘을 Bohr 모델에 이용한다면 screening 현상에 의해 변하는 불순물 에너지 준위와 궤도 반경을 얻을 수 있게 되며 결과 식은 아래와 같다.

$$E_{im} = E_1 \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \exp \left(-\frac{2r}{R} \right) \quad (3)$$

$$r = r_1 \frac{R}{r+R} \exp \left(\frac{r}{R} \right) \quad (4)$$

R 은 Dingle⁷⁾에 의해서 정의된 screening distance이며, 식 (3)과 (4)에서 정의된 불순물 에너지 준위와 궤도 반경은 반복된 계산에 의하여 얻어질 수 있다. 불순물 농도가 낮을 경우, R 은 커지게 되어 식 (3)과 (4)는 각각 식 (1)과 (2)로 된다. 이 후로, 식 (3)과 (4)와 같이 screening 현상에 의해 불순물 에너지 준위(또는 이온화 에너지)와 궤도 반경이 변하는 것을 'screening 현상'이라고 한다.

3. 이동도 계산

이온화된 정공의 숫자와 relaxation time을 얻기 위해 필요한 density of states(DOS)는 $6 \times 6 k \cdot p$ Hamiltonian을 이용하여 계산한다. Unitary transformation matrix를 이용한다면 $6 \times 6 k \cdot p$ Hamiltonian은 두 개의 $3 \times 3 k \cdot p$ Hamiltonian으로 나눌 수 있어 계산시간을 크게 줄일 수 있다. 이 때, 두 개의 $3 \times 3 k \cdot p$ Hamiltonian은 $\langle 001 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, 그리고 $\langle 111 \rangle$ 방향으로는 완전히 독립적 이지만 그 외의 방향으로는 k^2 에 비례하게 상호작용을 한다. 불순물 농도가 낮을 경우에는 대부분의 정공은 I 지점에 머무르게 되어 상호작용은 무시할 수 있다. 하지만 불순물 농도가 높아지면서 정공은 큰 에너지(또는 k)를 가질 확률이 증가하여 두 개의 $3 \times 3 k \cdot p$ Hamiltonian이 독립적이라고 가정할 수 없다. 따라서, 불순물 농도가 높은 경우에는 $6 \times 6 k \cdot p$ Hamiltonian을 이용하여 에너지 구조를 계산하여야 한다. 에너지 구조로부터 valence band의 DOS는 아래와 같이 구한다.

$$g_v(E) = \frac{2V}{(2\pi)^3} k^2 \frac{dk}{dE} d\Omega \quad (5)$$

Ω 는 solid angle이며 k 는 Ω 의 함수인 wave-vector이다.

불순물의 농도가 높을 경우, 불순물함수의 중첩에 의한 에너지 띠가 형성된다. 정공은 에너지 띠를 통해 이동할 수 있으므로 에너지 띠에 속한 정공은 이온화된 상태로 볼 수 있다. 따라서, 불순물 에너지 띠는 DOS의 역할을 하며 아래와 같이 구 할 수 있다.⁹⁾

$$g_{im}(E) = \frac{2N_A}{\sqrt{\pi} \sigma_A} \exp\left(-\frac{(E - E_A)^2}{\sigma_A^2}\right) \quad (6)$$

N_A 는 이온화된 불순물 농도이며 E_A 는 불순물의 에너지 준위 또는 정공의 이온화 에너지이다. σ_A 은 불순물 농도에 따른 에너지 띠의 폭을 결정하는 요소이다.⁹⁾ 이와 같이, 불순물 에너지 띠의 DOS를 첨가하게 되는 것을 'broadening 현상'이라고 지칭한다.

Si과 Ge의 이동도를 온도와 불순물의 함수로서 계산할 때, 고려하여야 할 산란현상으로서는 AP, OP, IO, 그리고 NU 산란 등이 있다. 네 가지 산란

현상 중, 이 논문에서는 NU 산란을 다음과 같은 이유로 고려하지 않는다. NU는 이온화되지 않은 불순물에 의한 산란이다. 이온화율이 증가한다는 것은 NU 산란이 줄어든다는 것이다. 불순물의 농도가 낮으며 온도가 높을 경우에는 거의 대부분의 불순물이 이온화되어 NU 산란은 무시할 수 있다. 불순물의 농도가 증가하면서 이온화된 정공은 valence band로 천이 하는 비율은 감소하여 NU 산란은 중요하게 된다. 하지만, 불순물간의 거리가 가까워져 에너지 띠가 형성되며 정공은 불순물에 구속되지 않고 에너지 띠를 통하여 이동하게 되므로 이온화되지 않은 정공의 숫자는 매우 적다. 따라서, 상온에서는 불순물의 농도와 상관없이 NU 산란은 무시해도 좋다. 또한, broadening 현상을 고려하여 이동도를 계산할 때, 상온에서 모든 불순물이 이온화된다고 가정할 수 있다.

Si과 Ge에서 phonon에 의한 산란은 AP와 OP가 대표적이다. 대부분의 정공은 valence band의 I 지점에 있으므로 장파장을 갖는 phonon에 의해 산란된다. 장파장지역의 OP는 큰 에너지를 갖지만 운동량은 작다. 한편, 장파장지역의 AP의 에너지는 OP에 비해 매우 작으며 운동량의 크기가 상대적으로 중시된다. 그러므로, OP 산란은 정공의 에너지만 변화시킨다고 가정하며 AP 산란은 완전탄성충돌처럼 정공의 운동량변화만 초래한다고 가정 한다.^{10,11)} 이러한 가정 하에서, AP와 OP 산란은 원자가 열 에너지에 의해서 진동하는 현상 때문에 발생하는 것으로 deformation potential을 이용하여 설명을 할 수가 있다. Deformation potential을 이용하여 AP에 의한 relaxation time, τ_{ap} ,은 다음과 같다.⁴⁾

$$\frac{1}{\tau_{ap}(E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_i \frac{k_B T \Xi_{eff}^2}{2\rho u_i^2} g_i(E) \quad (7)$$

k_B 는 Boltzmann 상수이고, ρ 는 무게밀도이며, u_i 는 소리의 속도이다. Ξ_{eff} 는 effective deformation potential이며 valence band의 이방성을 감안한 값이다.¹¹⁾ 산란 횟수는 정공이 움직일 수 있는 공간이 많을수록 증가하게 되어 DOS에 비례하게 된다. 따라서, 산란 횟수에 반비례하는 relaxation time은 DOS의 역수에 비례하게 된다.

OP 산란은 optical phonon이 방출되거나 흡수되면서 정공의 에너지를 변화시킨다. 그 결과, OP에 의

한 산란 횟수는 OP이 갖고 있는 에너지의 증감에 해당하는 곳의 DOS에 비례하게 된다. Deformation potential을 이용한 OP에 의한 relaxation time은 다음과 같다.⁴⁾

$$\frac{1}{\tau_{op}(E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_j \frac{3\hbar d_o^2}{2\rho\omega_o a_o^2} \left[(N_q + 1) \frac{1}{2} g_j(E - \hbar\omega_o) + N_q \frac{1}{2} g_j(E + \hbar\omega_o) \right] \quad (8)$$

d_o 는 OP에 의한 deformation potential이고, a_o 는 격자상수이며, N_q 는 $\hbar\omega_o$ 의 에너지를 지닌 OP의 개수이다. 식 (8)에서, 앞부분은 OP가 방출됨을 의미하며 뒷부분은 흡수됨을 의미한다. 불순물 농도가 낮고 온도가 높을 경우, 이동도는 주로 AP와 OP에 의해서 결정된다. 상온에서 불순물이 낮은 Si과 Ge의 이동도는 각각 450과 1900 cm^2/Vs 이며, 이 실험 값을 이용하여 deformation potential을 결정한다. 계산에 사용된 E_{eff} 는 Si인 경우에 5.3 eV이고 Ge인 경우에 4.7 eV이다. d_o 는 Si인 경우에 26 eVcm^{-1} 이고 Ge인 경우에 31 eVcm^{-1} 이다.

IO 산란에 의한 relaxation time은 Brooks-Herring 방식에 의하여 얻어질 수 있다.¹²⁾ Effective mass를 이용한 기존의 Brooks-Herring 방식은 band가 isotropic하며 parabolic하다고 가정한다. 하지만, valence band는 3개의 band가 anisotropic하고 nonparabolic하기 때문에 기존의 표현식은 정공의 이동도를 예측하기에는 적당하지 않다. Effective mass 대신에 에너지의 함수인 DOS를 이용하면 band의 nonparabolicity를 고려할 수 있다. 그러나, band의 이방성을 고려하려면 엄청난 계산시간이 필요하다. 동일 에너지 표면상에서 wavevector를 각 방향으로의 DOS를 가중하면 어느 정도 band의 이방성을 고려할 수 있다. 이와 같이, valence band의 특성을 고려하여 IO에 의한 relaxation time을 구하면 아래와 같다.

$$\frac{1}{\tau_{io}(E)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_I N_I \frac{e^4}{\epsilon^2} \frac{1}{2B^2} \left[\ln\left(\frac{A+B}{A-B}\right) - \frac{2B}{A+B} \right] g_I(E) \quad (9)$$

$$A = 2k_j^2 + R^{-2} \quad (10)$$

$$B = 2k_j^2 \quad (11)$$

N_I 는 이온화된 불순물 농도이고, R 은 Dingle^[7]이 정의한 screening length이다. k_j 는 정공의 wavevector이다.

Valence band 안에서 정공의 흐름은 위의 산란 현상에 대해 독립적이다. 각각의 산란현상으로 인하여 정공의 흐름은 방해를 받게 되므로 산란 횟수. 반비례하는 relaxation time은 Mattiessen 방식에 의해 아래와 같이 얻어질 수 있다.

$$\frac{1}{\tau_T} = \frac{1}{\tau_{op}(E)} + \frac{1}{\tau_{io}(E)} + \frac{1}{\tau_{drift}(E)} \quad (12)$$

위의 relaxation time을 이용하여 Boltzmann transport equation을 풀면 이동도를 구할 수가 있으며 아래와 같다.

$$\mu_{Dj}^a = \frac{-e \int \tau_T \frac{\partial f}{\partial E} v_j^a v_j^a g_j(E) dE}{\int f g_j(E) dE} \quad (13)$$

j 는 valence band의 종류를 나타내며, a 는 정공이 움직이는 방향을 의미하며, j 는 Fermi-Dirac 분포 함수이다. v_j^a 는 j band의 Ω 지점에 있는 정공의 a 방향으로 움직이는 속도이다. 분포함수를 에너지로 미분하게 되면, 그 크기가 Fermi 에너지 근처에서만 큰 값을 갖게 된다. 이는 이동도의 크기가 Fermi 에너지 근처에 있는 정공에 의해서 결정되는 것을 의미한다. Band가 isotropic하고 parabolic하다면, 속도는 band의 어느 곳에서나 일정하게 되어 위의 식은 일반적으로 알려진 이동도의 표현식인 $et(E_f)/m_c$ 로 된다. 식 (13)을 이용하여 각각의 band에 대한 drift 이동도를 구할 수 있으며, 총 drift 이동도(μ_{DT})는 아래와 같다.

$$\mu_{DT} = \frac{p_h \mu_{Dh} + p_l \mu_{Dl} + p_s \mu_{Ds}}{p_h + p_l + p_s} \quad (14)$$

p_j 는 각 valence band의 정공의 농도이다. 정공의 이동도를 구하기 위하여 valence band의 구조를 알아야 하며, 불순물의 농도에 따른 Fermi-energy 준위를 결정하여야 한다. Fermi-energy 준위는 screening 현상과 broadening 현상

을 고려할 때 달라지므로 복잡한 시뮬레이션이 필요하다. 계산과정의 이해를 돋기 위해 그 과정을 그림 1에 도시하였다.

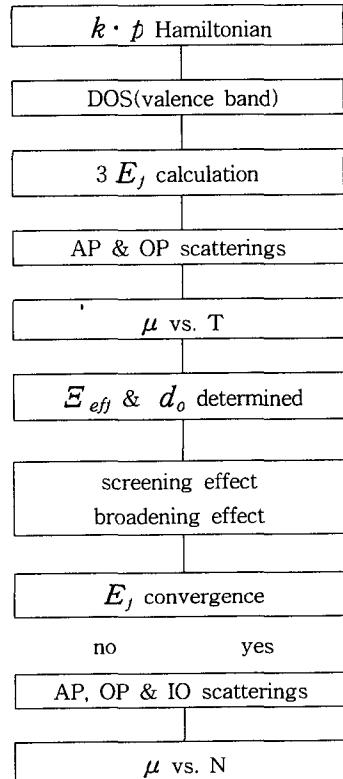


그림 1. 이동도 계산 과정도.

Fig. 1. Flow chart for mobility calculation.

4. 결 과

그림 2는, Si과 Ge에 boron을 넣었을 때, 온도에 따른 DOI의 변화를 보여준다. 일반적으로, 불순물의 에너지 준위가 valence band에 가까울수록 그리고 DOS가 클수록 DOI는 크다. Ge의 에너지 준위는 Si에 비하여 valence band에 가깝게 접근되어 있으므로 불순물에 있는 정공은 쉽게 이온화된다. 그러나, 불순물의 농도가 높고 온도가 높으면 이온화된 정공들이 아주 넓게 퍼져 있어야 하므로 DOI는 DOS의 크기에 더 의존하게 되며, 큰 DOS를 갖는 Si의 DOI가 Ge의 그것보다 커지게 된다. Screening 현상의 고려는 DOI의 증가를 초래한다. 불순물의 농도가 낮으면 정공의 숫자는 온도에 관계없이 아주 작으므로 이들에 의한 Coulomb 힘의 screening 현상은 무시할 정도로 작다. 그러므로,

불순물의 에너지 준위는 크게 달라지지 않으면 DOI 또한 크게 증가하지 않는다. 반면, 불순물의 농도가 높을 경우, 정공에 의한 screening 현상은 불순물의 에너지 준위를 valence band에 가까이 접근시켜 DOI를 크게 증가시킨다. Screening 현상에 의해 에너지 준위의 변화가 심한 Si은 Ge보다 DOI의 증가율이 높다.

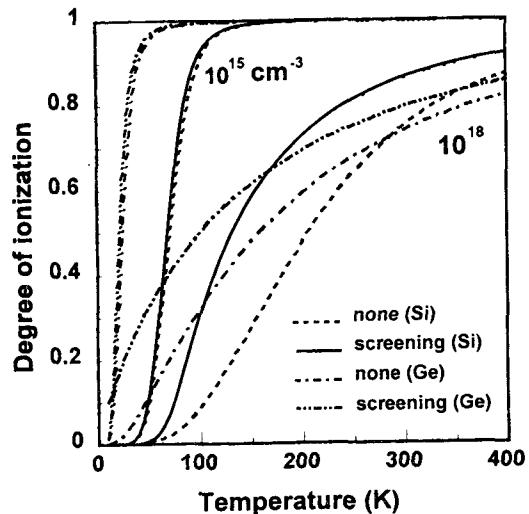


그림 2. 온도에 따른 Si과 Ge의 이온화율의 변화.
Fig. 2. Dependence of the degree of ionization for Si and Ge on the temperature.

그림 3은 상온에서 불순물의 함수로서 계산된 Si의 이동도를 보여준다. 점선은 screening 현상과 broadening 현상을 고려하지 않은 것이며, 실선은 screening 현상만을 고려한 것이며, 단일 점선은 broadening 현상만 고려한 것이고, 이중 점선은 screening 현상과 broadening 현상을 모두 고려한 것이다. Chun과 Wang⁵⁾의 결과 중에서 NU를 고려하지 않고 계산된 이동도 값은, 실험 값과 비교할 때, 10^{16} cm^{-3} 이상에서부터 커지며 불순물의 증가에 따른 이동도의 기울기는 완만하다. 이 논문에서 계산된 점선은 불순물 농도가 10^{17} cm^{-3} 이상에서 실험 값보다 커지고 이동도의 기울기는 실험 값에 더욱 접근한다. 이와 같은 개선은 $3 \times 3 k \cdot p$ Hamiltonian 대신 $6 \times 6 k \cdot p$ Hamiltonian을 이용하여 valence band의 구조와 DOS를 얻었기 때문이다. $6 \times 6 k \cdot p$ Hamiltonian을 이용하여 얻은 DOS는 $3 \times 3 k \cdot p$ Hamiltonian을 이용하여 얻은 DOS보다 크다. 농도가 증가함에

따라 발생하는 오차는 이온화된 정공의 숫자를 정확히 고려하지 못했기 때문이라 여겨진다. 그림 1에서 보듯이, screening 현상을 고려하면 이온화율이 증가한다. 불순물의 농도가 높을 경우, 불순물로부터 이온화된 정공은 Coulomb 힘을 약화시켜 이온화 에너지를 감소시킨다. 그 결과, 불순물 에너지 준위는 valence band에 더욱 근접하게 되고 정공의 농도는 screening 현상을 고려하지 않을 경우보다 증가한다. Screening 현상에 의해 약화된 Coulomb 힘은 IO의 감소 원인이 된다. 그러나, 약화된 Coulomb 힘에 의해 파생하는 이온화의 증가는 IO의 증가 원인이 되며, 전 불순물 농도에서 이동도를 감소시킨다. 불순물 농도가 10^{18} cm^{-3} 에서 IO 산란이 12 % 정도 증가되어 이동도는 감소한다. 그 결과, 실선은 실험 값에 더욱 접근한다. Broadening 현상만 고려할 경우에는, 불순물 농도가 10^{19} cm^{-3} 까지 실험 값과 일치하지만 불순물의 농도가 더욱 높아지면 이동도는 수렴하지 않고 계속 감소한다. 이것은 모든 불순물이 이온화 됐다고 가정했고 불순물 에너지 띠를 통하여 움직이는 정공에 의한 이동도는 고려하지 않았기 때문이다. 정공이 에너지 띠를 통하여 이동하는 방법은 hopping process라고 알려져 있으며 이동도가 온도에 관계없이 일정한 값을 갖는 원인이 된다.^[6] Hopping process에 의한 이동도는 아직 명확히 이론화되어 있지가 않다. Effective mass를 추론하여 이동도를 계산할 수는 있지만 effective mass는 불순물 농도에 따라 변하므로 그 신뢰성에 대해서는 의문이다. Screening 현상과 broadening 현상을 모두 고려할 경우, broadening 현상만 고려할 경우보다 이동도가 다소 완만히 감소한다. Screening 현상으로 인하여 valence band로 올라간 정공의 숫자는 증가하게 되고 정공의 분포변화에 따른 이동도의 변화가 생긴 것이다.

그림 4는 상온에서 불순물 농도의 함수로서 계산된 Ge의 이동도를 실험 값과 비교한 것을 보여준다. 점선은 screening 현상과 broadening 현상을 고려하지 않은 것이며, 실선은 screening 현상만을 고려한 것이며, 단일 점선은 broadening 현상만 고려한 것이고, 이중 점선은 screening 현상과 broadening 현상을 모두 고려한 것이다. Si의 경우와는 달리, screening 현상을 고려하더라도 이동도의 크기는 크게 달라지지 않는다. 감소하는 정도가 다른 이유는 Ge의 불순물 에너지 준위의 변화로 설명할 수 있다. Si의 불순물 에너지 준위는

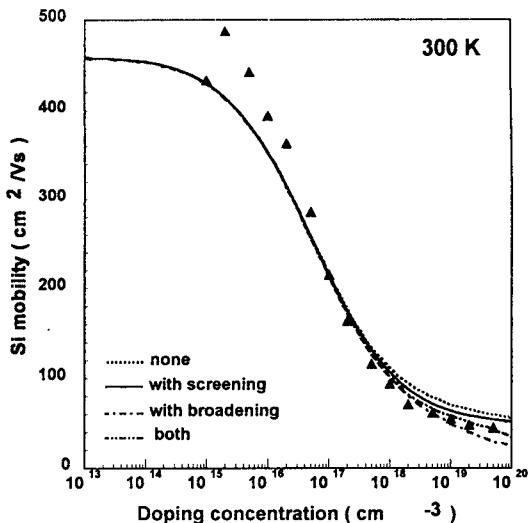


그림 3. 상온에서 불순물 농도에 따른 Si의 drift 이동도 변화, 실험 값: 삼각형[15].

Fig. 3. Dependence of Si drift mobility on the doping concentration at room temperature. The symbols are the experimental data, triangle:[1]

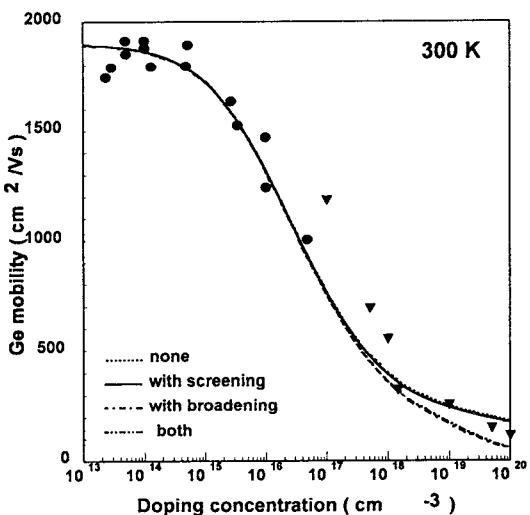


그림 4. 상온에서 불순물 농도에 따른 Ge의 drift 이동도 변화, 실험 값: 원[16], 역 삼각형[17].

Fig. 4. Dependence of Ge drift mobility on the doping concentration at room temperature. The symbols are the experimental data, circle:[16]; triangle:[17].

0.044eV이지만 Ge의 그것은 0.01eV이다. 그러므로, screening 현상에 의한 Ge의 불순물 에너지 준위의 변화는 Si보다 작아 정공의 증가가 심하지 않으며 IO 산란의 증가도 작게 된다. 불순물 농도가 10^{19} cm^{-3} 에서, screening 현상을 고려하면, Si 이동도는 10 % 정도 감소하지만 Ge 이동도는 4 % 정도만 감소한다.

그림 1에서 보듯이, 높은 불순물 농도 및 상온에서 Ge의 DOI는 Si보다 작기 때문에 모든 불순물이 이온화된다는 가정은 IO 산란을 더욱 과대 평가하게 한다. 그 결과, screening 현상과는 달리, broadening 현상을 고려하면 Ge의 이동도는 Si의 경우보다 오히려 심하게 감소한다. 또한, 불순물이 증가함에 따라 Ge 이동도는 수렴하지 않고 계속 감소한다. Screening 현상과 broadening 현상을 모두 고려하여 계산한 이중 점선은 broadening 현상만 고려하여 얻은 단일 점선과 거의 일치한다. 앞서 설명하였듯이, Ge의 불순물 에너지 준위는 매우 작으므로 screening 현상을 첨가하여도 IO 산란의 변화는 크지 않다. 위의 결과를 볼 때, broadening 현상을 고려하여 Ge의 이동도를 계산할 때에는 hopping process가 동반되어야 한다.

그림 3과 4에서 보듯이, screening 현상을 고려하지 않더라도 불순물 농도에 따른 Si과 Ge의 변화는 어느 정도 설명이 된다. Screening 현상과 broadening 현상을 고려할 때 발생하는 수치적인 변화는 큰 문제가 되지 않을 수도 있다. 하지만, 이 논문에서 이용한 Si과 Ge의 이동도 계산방식을 SiGe의 전기적 특성 연구에 적용하려면 불순물 농도가 높은 지역에서의 이동도 변화를 이해하여야 한다. 얇은 SiGe 층을 Si 기판 위에 기를 경우, 불순물의 농도가 높아야 depletion을 방지할 수 있다. 불순물의 농도가 높은 지역에서는 IO 산란은 alloy 산란에 비해 매우 크기 때문에 SiGe의 이동도를 이용하여 alloy 산란을 이해하는 데 어려움이 있다. 그러므로, 불순물이 높은 지역에서 Si과 Ge의 이동도를 정확히 이해하여야 SiGe의 전기적 특성을 이해할 수 있다.

5. 결 론

Screening 현상과 broadening 현상을 고려하여 Si과 Ge의 이동도를 불순물의 함수로서 계산하였다. Si의 경우, 불순물 농도가 높아지면서 생기는 실험 값과의 오차는 이온화된 정공이 Coulomb 힘을 약화시켜 이온화 에너지를 감소시키는

screening 현상을 고려함으로써 어느 정도 해결할 수 있다. Broadening 현상을 첨가할 경우에는, Si의 이동도는 실험 값에 더욱 접근하였다. Ge의 이동도는 screening 현상을 고려하더라도 큰 변화는 없다. 그러나, broadening 현상을 고려하면 불순물의 농도가 증가하면서 Ge 이동도는 수렴하지 않고 계속 감소한다. 결론적으로, Si 또는 SiGe을 이용한 소자의 전기적 특성을 연구하기 위해서는 screening 현상의 고려는 필수적이고, broadening 현상을 첨가할 경우에는 hopping process에 의한 이동도의 고려가 필요하다.

※ 본 연구는 96년도 교육부 반도체분야 학술연구조성비와 96년도 인하대학교의 학술연구조성비에 의해 수행되었습니다.

참 고 문 헌

1. F. J. Morin and J. P. Maita, "Conductivity and hall effect in the intrinsic range of germanium", Phys. Rev., vol. 94, no. 6, pp. 1525-1529, 1954.
2. F. J. Morin and J. P. Maita, "Electrical properties of silicon containing Arsenic and Boron", Phys. Rev., vol. 96, no. 1, pp. 28-35, 1954.
3. R. A. Logan and A. J. Peters, "Impurity effects upon mobility in silicon", J. Appl. Phys., vol. 31, no. 1, pp. 122-124, 1960.
4. H. Nakagawa and S. Zukotynski, "The valence bandstructure and the hole mobility in silicon", Can. J. Phys., vol. 55, pp. 1485-1491, 1977.
5. S. K. Chun and K. L. Wang, "Effective mass and mobility of holes in strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ layers on $\langle 0010 \rangle \text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ substrate", IEEE Trans. Electron Devices, vol. 39, no. 9, pp. 2153-2164, 1992.
6. J. P. McKelvey, Solid state and semiconductor physics, Harper and Row, New York, p. 268, 1966.
7. R. B. Dingle, "Scattering of electrons and holes by charged donors and acceptors in semiconductors", Philos. Mag., vol. 46, pp. 831-840, 1955.

논문 : Screening 현상 및 broadening 현상이 ----- 전상 국

8. R. Mansfield, "Impurity scattering in semiconductors", Proc. Phys. Soc. B, vol. 69, pp. 76-82, 1956.
9. A. Schenk, "Unified bulk mobility model for low- and high-field transport in silicon", J. Appl. Phys., vol. 79, no. 2, pp. 814-831, 1996.
10. M. Costato and L. Reggiani, "Scattering probabilities for holes", Phys. Status Solidi (b), vol. 58, pp. 471-482, 1973.
11. P. Lawaetz, "Low-field mobility and galvanomagnetic properties of holes in germanium with phonon scattering", Phys. Rev., vol. 174, no. 3, pp. 867-880, 1968.
12. B. K. Ridley, Quantum processes in semiconductors, Clarendon, Oxford, p. 143, 1993.
13. G. Ottaviani, L. Reggiani, C. Canali, F. Nave, and A. Alberigi-Quaranta, "Hole drift velocity in silicon", Phys. Rev. B, vol. 12, no. 8, pp. 3318-3329, 1975
14. D. M. Brown and R. Bray, "Analysis of Germanium", Phys. Rev., vol. 127, no. 5, p1593, 1962.
15. C. Jacoboni, C. Canali, G. Ottaviani, and A. Alberigi Quaranta, "A review of some charge transport properties of silicon", Solid-State Electronics, vol. 20, pp. 77-89, 1977.
16. M. B. Prince, "Drift mobilities in semiconductors. I. Germanium", Phys. Rev., vol. 92, no. 3, pp. 681-687, 1953.
17. F. A. Trumbore and A. A. Tartaglia, "Resistivities and hole mobilities in very heavily doped germanium", J. Appl. Phys., vol. 29, no. 10, pp. 1511-1511, 1958.

저자 소개



천상국

1979년 3월-1983년 2월 서울대학교 전자공학과(학사). 1983년 9월-1985년 5월 UCLA 전자공학과(석사). 1987년 9월-1992년 10월 UCLA 전자공학과(박사). 1992년 10월-1993년 3월 HUGES 연구원. 1993년 3월-1995년 2월 선문대학교 전임강사 1995년 3월-현재 인하대학교 조교수