

에너지 밴드와 반도체 캐리어

Energy Band and Semiconductor Carriers

고체의 결합력과 에너지 밴드 _2.1

반도체 캐리어 _2.2

페르미 준위와 반도체 캐리어 농도 _2.3

전계와 자계에서의 캐리어 거동 _2.4

연습문제

학습목표

- 고립원자가 고체를 형성할 때 발생하는 결합의 종류와 그 특성을 알 수 있다.
- 파울리 배타율에 따른 에너지 준위의 변화와 에너지 밴드 형성에 대하여 이해할 수 있다.
- 반도체의 에너지 밴드와 전자전이를 알 수 있다.
- 반도체 캐리어의 유효질량과 결합에너지를 알 수 있다.
- 열적평형상태에서의 캐리어 농도와 페르미 준위의 상관관계를 알 수 있다.
- 캐리어 농도, 이동도 및 전도도의 개념과 의존성을 이해할 수 있다.
- 전계와 자계가 인가될 때의 캐리어 거동을 이해할 수 있다.
- 화합물 반도체에 대한 건효과와 홀효과를 알 수 있다.



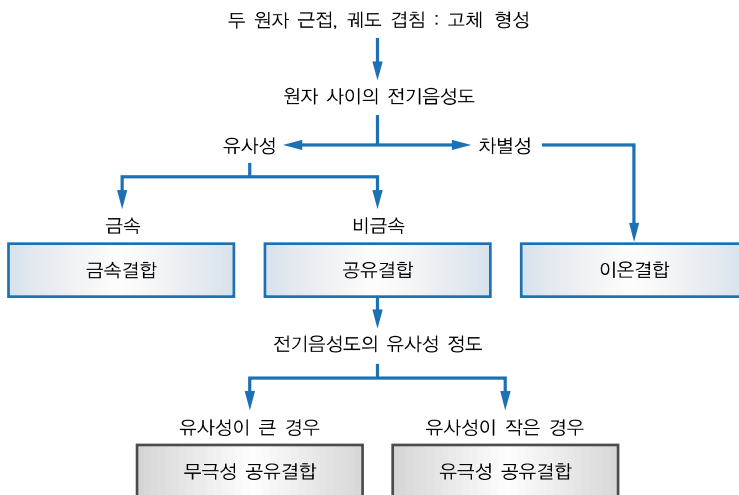
이 장에서는 고체를 형성하는 결합력^{bonding force}과 에너지 밴드^{energy band}의 기초에 대하여 살펴보고, 이를 통해 반도체에서의 전자천이^{transition}를 이해한다. 또한, 페르미-디랙 분포함수^{Fermi-Dirac distribution function}를 이용하여 캐리어 농도를 계산하고, 열적평형상태^{thermal equilibrium state}에서의 반도체 캐리어 농도와 페르미 준위^{Fermi level} 사이의 상관관계를 살펴본다. 그리고 전도도^{conductivity}, 이동도^{mobility}의 개념을 정성적, 정량적으로 고찰하고 이들의 의존성을 이해한다. 마지막으로 전기장^{electric field} 및 자기장^{magnetic field}가 인가된 반도체에서의 캐리어 거동과 강전계 및 강자계가 인가될 때 발생할 수 있는 건효과^{Gunn effect}와 홀효과^{Hall effect}를 살펴본다.

2.1 고체의 결합력과 에너지 밴드

이 절에서는 고립원자(isolated atoms)가 고체를 형성할 때 발생하는 결합의 종류와 그 결합 고유의 특성을 알아보고, 파울리 배타율이 적용되는 고체에서의 에너지 준위 변화와 밴드 형성에 대하여 살펴본다. 또한, 반도체 공간 내의 전자에너지를 설명하는 $E-x$ 밴드 다이어그램 및 전파상수(propagation number)와 전자에너지 사이의 관계를 나타내는 $E-k$ 밴드 다이어그램과 전자전이를 이해한다.

2.1.1 고체의 결합

두 원자가 각각의 궤도가 겹칠 정도로 충분히 가까워지면서 고체를 형성할 때, 원자 사이의 전기음성도 차이에 따라 고체의 결합은 [그림 2-1]과 같이 분류된다. 일반적으로 두 원자의 전기음성도 값이 매우 다르면 이온결합(ionic bonding), 전기음성도 값이 유사하면 금속결합(metallic bonding)과 공유결합(covalent bonding)으로 나눈다.



[그림 2-1] 전기음성도에 따른 고체 결합의 종류

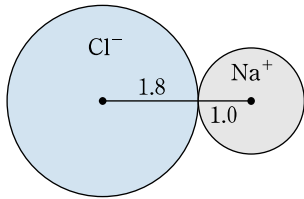
[그림 2-1]에서 두 원자 사이의 전기음성도가 유사할 때, 비금속은 공유결합을 통해 고체를 형성한다. 공유결합 중에서 특히 전기음성도가 동일한 두 원자(예 Si-Si, Ge-Ge)와 같이 유사성이 매우 큰 경우는 각 원자가 전자를 내어 놓고, 그 전자쌍을 공유하여 결합을 이룬다. 이 때문에 전하 분리가

원자나 분자는 다양하게 결합하여 고체, 액체, 기체와 같은 집단을 형성하는데, 이러한 결합 종류에는 이온결합, 금속결합, 공유결합, 수소결합 및 반데르발스 결합 등이 있다.

이온결합

이온결합 ionic bonding은 양이온과 음이온이 정전기적 인력으로 결합하여 생기는 화학 결합으로, 원자 사이의 전기음성도 차이가 큰 주기율표상의 1족 원소인 알칼리 금속과 7족의 할로젠 원소의 결합이다. 이때 생성물을 알칼리 할라이드(alkali halide)라 한다.

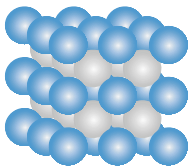
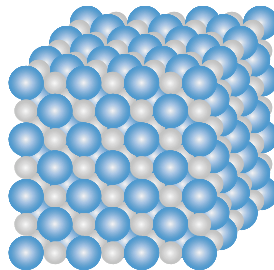
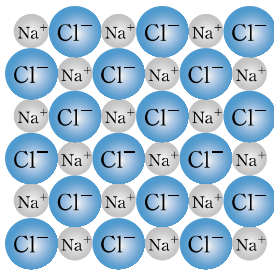
대표적 이온결합의 예인 NaCl은 다음 그림과 같이 Na^+ 와 Cl^- 로 안정화를 이루며, 강체구모델(rigid sphere model)에서 얻는 NaCl의 격자상수는 약 $2.8[\text{\AA}]$ 이 된다.



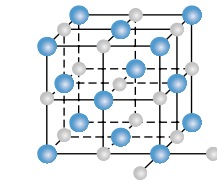
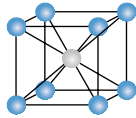
전자 배열 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 \rightarrow \text{Ne}$ 구조로 안정화 (Na^+)

전자 배열 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 \rightarrow \text{Ar}$ 구조로 안정화(이온화) (Cl^-)

[그림 2-2]와 같이 하나의 Na^+ 이온은 6개의 Cl^- 이온과 전기적(coulomb) 힘에 의해 결합한다. 이때 전체 사슬은 모두 강하게 구속되므로 NaCl은 결합력이 강해 절연체(insulator) 역할을 한다.



CsCl 결정구조 : 한 개의 Cs^+
주위에 Cl^- 이 8개 존재함



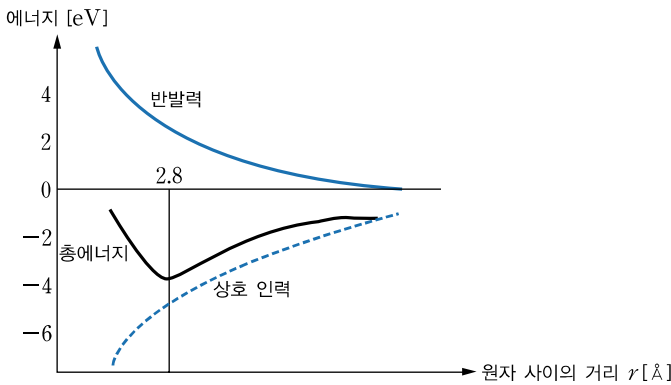
NaCl 결정구조 : 한 개의 Na^+
주위에 Cl^- 이 6개 존재함

[그림 2-2] NaCl과 CsCl의 3차원 단위셀 결합구조

1원자에 대해 NaCl(SC)은 6원자, CsCl(BCC)은 8원자가 존재(결합)한다.

1 강체구모델(형)은 분자 사이의 상호작용에서 반데르발스 반지름 이하는 무한대, 그 이상은 0인 우물형 퍼텐셜로 대치한 형태이다.

이온결합에서 각 원자의 전자에는 겹침 현상이 발생하는데, 이는 파울리의 배타율(“상호작용계에서 전자는 동일한 양자수의 묶음을 갖는 에너지 준위를 가질 수 없다.”)에 위배되므로 고립원자의 에너지 상태energy state는 변화해야 한다. 또한, 고체의 형성(원자 사이의 간격 감소)은 [그림 2-3]과 같이 핵과 전자 사이의 반발력repulsive force과 상호 인력attractive force이 작용하므로 원자 사이의 거리는 이 두 힘의 합이 가장 안정한 평형equilibrium 조건 하에서 결정된다. 모든 결합에서도 이와 같은 평형 조건으로부터 결합 간격을 정의한다.



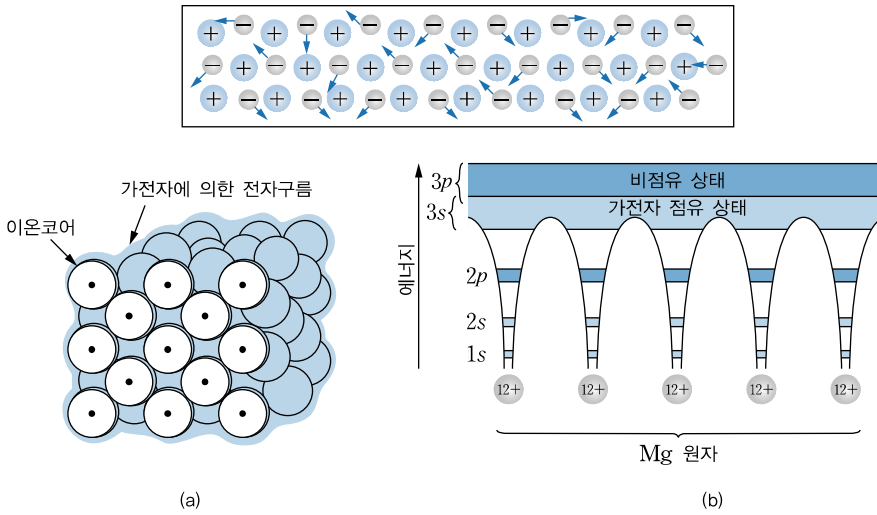
[그림 2-3] NaCl에 대한 원자 사이의 거리에 따른 반발력과 상호 인력의 관계

금속결합

금속결합metallic bonding은 대부분 금속(Fe, Cu, Al, Au, Na, Li, ... : 최외각전자 ≤ 2)의 결합으로, 각 핵의 최외각전자에 대한 구속력이 약하여 이온을 형성($\text{Li} \rightarrow \text{Li} + e$)한다. 금속의 양이온과 그 주위의 전자구름의 상호작용에 의한 결합으로 최외각전자 즉, 가전자들은 겹침 현상이 발생한다. 파울리 배타율에 따라 준위가 갈라지게 되어 매우 작은 에너지 영역 내에 수많은 전자 상태가 다른 양자 상태의 조합으로 존재한다. 또한 양의 금속이온(코어)과 전자바다sea of free electrons 또는 전자구름 사이의 인력에 의한 결합으로 최외각전자의 수에 비례하는 다양한 결합력을 갖는다. 이를 알칼리 금속alkali metals이라 하며, 3Li은 체심입방체(bcc) 구조로 단위셀 구조에서 1개의 Li 원자에 대해 8개의 원자들이 인접한 형태를 갖는다(용점 $T_m = 453\text{K}$). 원자 사이의 거리 R 의 결정은 이온결합과 유사하다.

금속결합의 특징은 금속 종류마다 결합력의 차이가 크기 때문에 광범위한 용점을 갖는다는 것이다. 예를 들어, Hg $\sim 234\text{K}$, W $\sim 3643\text{K}$ 이다. 이와 같이 금속은 전자바다를 금속 이온이 공유하는 형태의 결합을 보이므로 외부의 작은 전계에 의해 금속 내의 전자는 전계의 반대 방향으로 이동하는 도체로 작용한다. [그림 2-4(a)]는 금속결합의 예로, 가전자로 이루어진 전자구름과 이온코어ion core의 상호작용에 의한 결합을 나타낸다. 이때, 이온코어는 가전자를 제외한 핵과 구속전자를 말한다. [그림 2-4(b)]는 원자번호가 12인 Mg 금속에 대한 거리의 퍼텐셜에너지 분포 및 전자 상태이다. Mg이 고립원자일 때, 2개의 최외각전자 역시 퍼텐셜 장벽에 갇혀서 핵에 구속되는 반면, 고체를

형성하면서 퍼텐셜은 중첩되어 감소되므로 최외각전자는 더 이상 하나의 핵에 구속되지 않는다.

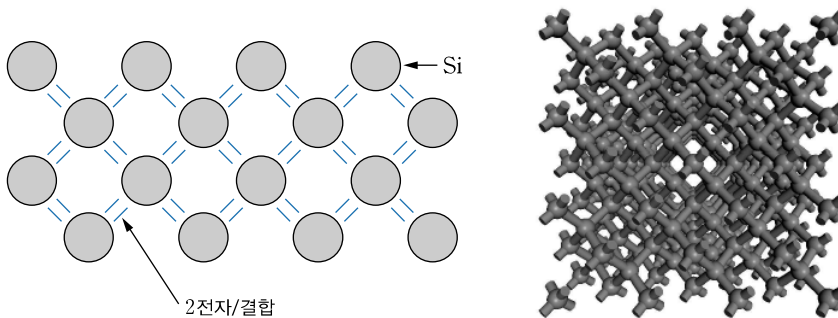


[그림 2-4] 금속결합의 예와 거리의 퍼텐셜에너지
(a) 금속결합의 예 (b) Mg 금속에 대한 거리의 퍼텐셜에너지

공유결합

공유결합 covalent bonding은 대부분 IV족 고체(Ge, Si, C, ...) 및 화합물 반도체가 갖는 결합이다. [그림 2-5]와 같이 Si는 4개의 가전자를 서로 공유하는 형태로 양자역학적 상호작용의 결합력을 갖는다. 다이아몬드의 원시셀 구조가 하나의 단위셀의 대각선 원자가 4개의 원자(1꼭짓점원자 + 3면심원자)와 결합하는 것을 생각해보자. 하나의 전자쌍 electron pair이 결합손 bond 1개를 형성한다.

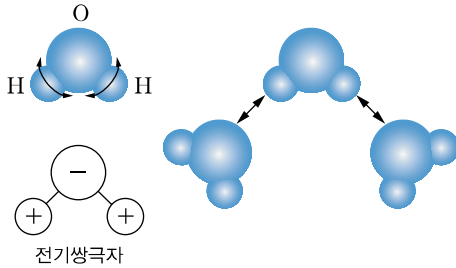
공유결합 고체는 양자역학적 상호작용에 의해 결합력이 크므로 단단하고 융점이 높다. 특히, 대부분 반도체의 특성을 나타내고, 저온에서 낮은 전도도(0K에서 전도전자가 없음)를 보인다. 섬아연광 격자 구조의 화합물 반도체(예 GaAs)는 이러한 공유결합과 이온결합이 공존하는 것으로 생각할 수 있다.



[그림 2-5] Si의 2차원 및 3차원 결합구조(다이아몬드 격자구조)
각 원자는 서로 1개의 전자를 공유하여 결합한다. 즉, 각 결합손은 서로 다른 방향(위/아래)의 스핀을 갖는 2개의 전자에 의해 주어진다.

수소결합

수소결합(hydrogenic bonding)은 O, N, F 등 전기음성도가 강한 원자 사이에 수소 원자가 들어갈 때 생기는 결합으로, 양으로 대전된 H^+ 이온이 이온반경이 큰 음이온 사이에 끼어 음이온 사이의 거리에 영향을 주지 않고 안정화를 유지하면서 정전기적 퍼텐셜을 이루면서 결합한다. [그림 2-6]은 대표적인 수소결합의 예인 H_2O 이다.



[그림 2-6] 수소결합의 예 : H_2O

반데르발스 결합

많은 기체성 분자는 열적 진동 등에 의해 순간적으로 전자 위치가 변동하여 분극(polarization)이 발생한다. 또한 음-양전하가 미소거리 내에서 균형을 이루는 형태인 전기쌍극자(electric dipoles)를 형성하며, 음에서 양방향으로 쌍극자모멘트(dipole moment)를 갖는다. 이들 쌍극자 사이의 인력 작용에 의해 결합하는 것을 반데르발스(힘) 결합(Van der Waals bonding)이라 한다. 예를 들면, He, Ne, Ar 등의 비활성 기체(inert gas)는 매우 작은 결합력에 의해 융점(T_m)과 비등점(boiling point T_b)이 매우 낮다([표 2-1] 참고).

[표 2-1] 비활성 기체의 융점과 비등점

비활성 기체	융점	비등점	비활성 기체	융점	비등점
He	8 K	4 K	Ar	83 K	87 K
Ne	24 K	27 K	N ₂	63 K	77 K

2.1.2 에너지 밴드에 대한 정성적 고찰 : $E-x$ 다이어그램

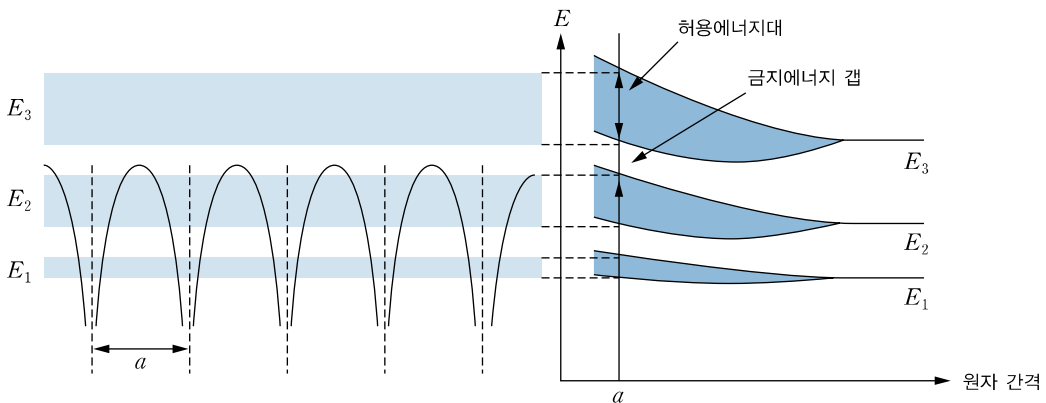
고립원자들의 에너지 준위(energy levels)는 불연속적이며, 준위 간 에너지 밴드갭이 크다. 이러한 고립원자들은 동일한 전자 구조를 갖는다. 고립원자들이 근접하여 고체를 형성할 때, 파울리 배타율에 따라 기존 에너지 준위는 변해야 하며, 좁은 에너지 대역 내에 무수히 많은 에너지 준위를 가지는 에너지 밴드(energy band)가 존재한다. 이 에너지 밴드는 밴드 간 갭(에너지 밴드갭)이라는 전자 금지대(forbidden band)에 의해 분리된다. 에너지 밴드 형성에 대한 정성적 고찰(quantitative consideration)을 살펴보자. 고체

내의 최외각전자 상태(에너지)를 공간에 대해 나타낸 그래프를 $E-x$ 다이어그램이라 하며, 반도체의 물성을 이해하는 데 기초 자료가 된다.

에너지 밴드 형성에 대한 정성적 고찰

- ① 고립원자들을 근접시키면, 최외각전자들의 파동함수부터 변화(겹침)가 발생한다. 이는 슈뢰딩거 파동방정식의 경계조건이 변화하고, 퍼텐셜에너지 V 가 변화하기 때문이다.
- ② 에너지 준위의 변화가 발생하는데, 이는 파울리 배타율에 따라 에너지 준위가 쪼개지기(splitting) 때문이다.
- ③ 외각(높은) 준위의 전자들의 상호작용(파동함수의 겹침)이 커짐에 따라 준위들은 갈라지고 폭이 넓어진다. 이때 갈라진 에너지 준위 폭(에너지 차)이 대단히 작기 때문에($1[eV]$ 사이 $\sim 10^{11}$ 개 준위) 준위들은 연속적으로 분포한 것으로 간주되며, 띠(band)를 형성한다.

[그림 2-7]과 같이 N 개의 고립 Si(C, Ge) 원자로 구성된 다이아몬드 격자구조 결정의 형성 과정을 생각해 보자. 원자 간격이 매우 클 때(고립원자), N 개의 원자는 각각 고유의 에너지 준위를 가지며, 원자 간격이 근접됨(상호작용계)에 따라 가장 높은 에너지 준위부터 갈라지기 시작한다. 이는 원자 간격의 감소에 따라 밴드 폭이 증가하고 전자들의 상호작용이 발생하기 때문이다. 고체의 원자 간격 a_0 로 근접할 때 허용에너지대(permitted energy band)와 금지에너지 갭(forbidden energy gap)이 존재한다. 이것은 고체 형성 과정 동안 s-p 혼용밴드(hybrid band)가 존재하지 않는 경우이다.

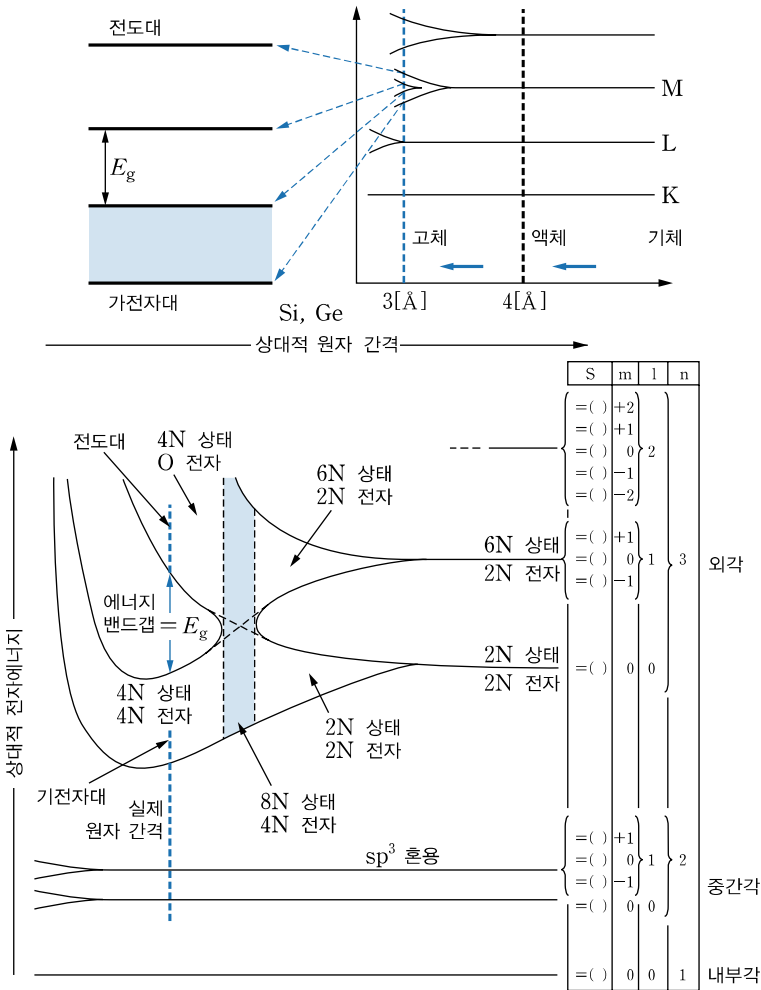


[그림 2-7] N 개의 고립원자로 구성된 고체

[그림 2-8]은 원자 간격에 따른 Si에서의 에너지 준위 변화를 나타낸다. 고립 Si 원자의 전자는 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ 의 준위를 채운다(안정상태). 따라서 $n=3(M)$ 인 p 궤도의 4개의 준위는 빈 상태를 유지한다. Si 원자의 최외각 4개의 전자($3s^2 3p^2$)가 공유결합에 참여하여, 고체화(R 감소)가 이루어지는 과정에서 s-p 궤도는 혼용되어 $8N$ 의 상태를 갖는 혼용밴드를 형성한다. 결정의 원자 간격으로

근접되면서 혼용밴드 내의 낮은 상태(4N)로부터 전자들이 채워지고 나머지 상태(4N)는 빈 상태로 남게 되는데, 이때 전자점유 상태와 비점유 상태 간에 상호작용 에너지 차에 의한 에너지 밴드갭이 형성된다.

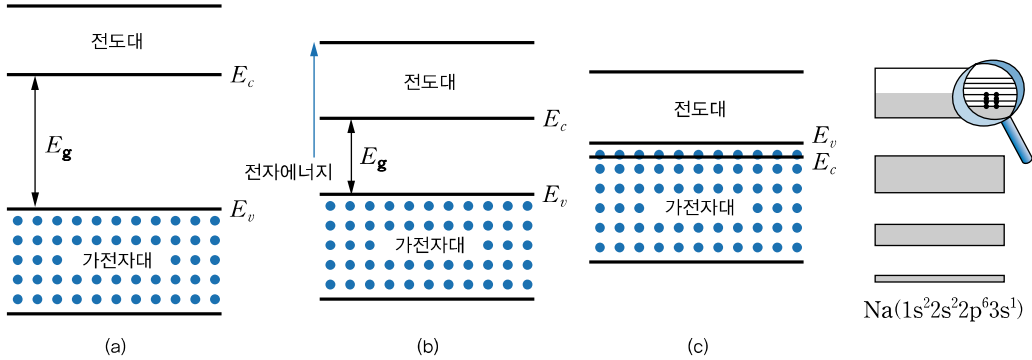
Si에서 코어 준위들($n = 1, 2$ 즉, K, L)은 전자들로 완전히 채워진 상태이고, 고립원자의 경우 $3s^2, 3p^2$ 역시 전자들로 채워진 반면, $3p^4$ 는 전자에 의해 점유되지 못한다. 원자 간격이 근접되면서 3s의 전자 2N개와 3p의 전자 2N개는 sp^3 혼용밴드(8N)를 형성하고, 전자 4N개는 낮은 에너지 상태부터 채워질 때 가전자대 valence band를 이룬다. 그리고 나머지 4N개의 에너지 상태는 비어있는 상태로 전도대 conduction band를 형성한다. 가전자대와 전도대 사이의 전자가 금지되는 영역을 에너지 밴드갭이라 한다. 밴드가 완전히 채워질 때 전기전도는 발생할 수 없으며, 밴드가 부분적으로 채워진 경우에만 전기전도가 가능하다.



[그림 2-8] 원자 간격에 따른 Si에서의 에너지 준위 변화 (혼용밴드 존재)

금속 · 반도체 · 절연체의 에너지 밴드 구조

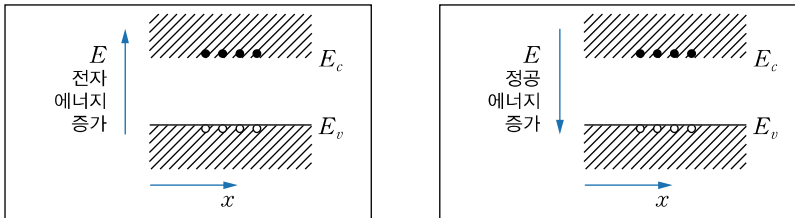
[그림 2-9]는 절대온도 0K에서의 금속, 반도체, 절연체의 에너지 밴드 구조이다. 절연체는 에너지 밴드갭이 커서(예 다이아몬드의 $E_g \sim 5$ [eV], SiO_2 의 $E_g \sim 8$ [eV]) 실온(300K)에서조차 전도전자는 거의 존재하지 못하므로 비저항 값이 매우 높다.



[그림 2-9] 0K에서의 에너지 밴드 구조

(a) 절연체 (b) 반도체 (c) 금속

[그림 2-9]의 에너지 밴드 다이어그램은 길이 성분에 대한 전자에너지를 표시한 $E-x$ 다이어그램으로, E_c 와 E_v 는 각각 전도대의 끝단^{edge}과 가전자대의 끝단을 표시한다. 따라서 $E_g = E_c - E_v$ 이다. [그림 2-10]은 임의의 온도에서 반도체의 에너지 밴드 구조이다.



[그림 2-10] 반도체의 에너지 밴드 구조

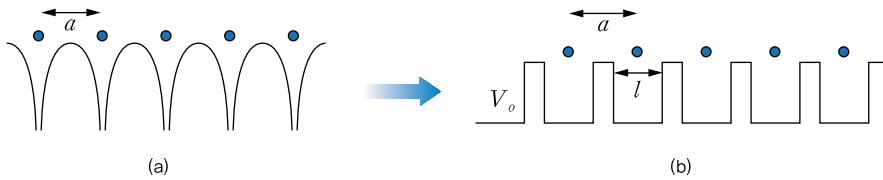
반도체의 에너지 밴드갭은 중간 정도의 값을 가지며(실온에서 Si의 $E_g \sim 1.1$ [eV], Ge의 $E_g \sim 0.72$ [eV]), 비저항 값은 온도에 따라 변화가 크다. 0K에서 가전자대는 가전자들로 완전히 채워진다. 전도대는 모두 빈 에너지 상태를 갖는 완전 절연체지만, 실온에서는 순수 Si에 대해 전도대 전자 및 정공의 농도가 1.5×10^{10} [carriers/cm³] 정도이므로 어느 정도의 전기전도를 기대할 수 있다. 특히, 에너지 밴드갭은 온도 증가에 따라 감소하는데, 예를 들어 Si 및 Ge에 대한 에너지 밴드갭 E_g 의 온도 의존도는 다음과 같다.

- Si : $E_g = 1.21 - 3.6 \times 10^{-4} \cdot T [\text{eV}]$ 로 실온($T = 300 \text{K}$)에서 $E_g \approx 1.1 [\text{eV}]$ 이다.
- Ge : $E_g = 0.785 - 2.23 \times 10^{-4} \cdot T [\text{eV}]$ 로 실온에서 $E_g \approx 0.72 [\text{eV}]$ 이다.

금속은 [그림 2-9(c)]에서 보는 바와 같이 두 종류의 밴드 구조가 있다. Sn, Al, Cu 등처럼 가전자대의 윗부분과 전도대의 아랫부분이 서로 겹쳐지는 **밴드겹침** band overlapping 영역이 존재하여 $E_v > E_c$ 로 되는 경우가 있다. 또한, Na 금속과 같이 0K 에서도 최외각전자들이 부분적으로 채워지는 경우로, 이 상태에서는 낮은 온도에서도 큰 전자 농도로 인해 외부의 미세 전계에 대해서도 전기전도가 쉽게 발생하여 비저항이 매우 낮게 된다.

2.1.3 에너지 밴드에 대한 정량적 고찰 : $E-k$ 다이어그램

단일 전자가 완전 주기적인 격자(즉, 주기 퍼텐셜) 사이를 이동하는 것을 생각해보자. 주기적인 격자는 [그림 2-11(a)]와 같은 구조($V \propto \frac{1}{r}$)를 갖지만, [그림 2-11(b)]와 같은 퍼텐셜로 단순화시킬 수 있다. 즉, 크로니히-페니 Kronig-Penney 퍼텐셜로 가정할 수 있다.



[그림 2-11] 주기적인 격자와 크로니히-페니 퍼텐셜
(a) 주기적인 격자 퍼텐셜 (b) 크로니히-페니 퍼텐셜

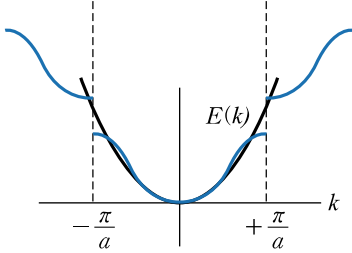
크로니히-페니 퍼텐셜에 대해 얻어지는 슈뢰딩거 파동방정식의 해는 식 (2.1)과 같은 블록함수 block function가 된다.

$$\psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad \text{단, } U_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r} + \vec{T}) \quad (2.1)$$

여기서 k 의 크기가 $\frac{2\pi}{\lambda}$ 이고, 파두면 wavefront에 수직 방향 단위벡터를 갖는 전파벡터 propagation vector이다. 파동함수의 진폭 $U_k(r)$ 은 더 이상 상수가 아닌 퍼텐셜의 주기에 따라 변하는 주기함수 periodic function이다. 만약 파동함수가 x 방향으로 k 만큼 이동한다면 식 (2.1)은 식 (2.2)로 표현될 수 있다.

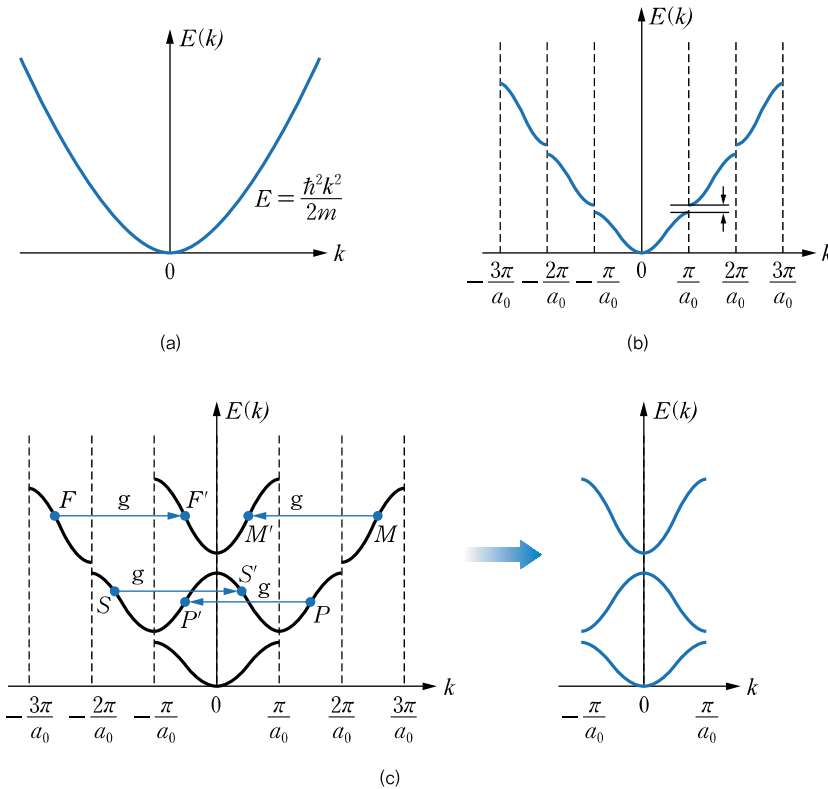
$$\psi_k(x) = U_k(x) e^{ik_x x} \quad (2.2)$$

이때 k 에 대한 허용 전자에너지 E 의 관계는 격자 주기에 따라 차이가 생기므로 간단히 얻을 수 없다. E 와 k 의 관계를 나타내는 $E-k$ 다이어그램은 포물선으로 나타난다. 이에 대한 유도 과정은 생략하고, [그림 2-12]에 그 결과를 나타내었다. 이때 점선은 1차 브릴리앙^{1st Brillouin} 경계를 나타낸다. 즉, $k = \pm \frac{\pi}{a}$ 에서 에너지 밴드갭을 갖는다.



[그림 2-12] 퍼텐셜 주기 내의 k 에 대한 허용 전자에너지(E)의 관계

연속 포물선은 자유전자에 대한 $E-k$ 관계이고, k 는 $\frac{2\pi}{a}$ 의 주기성을 가지므로 $\frac{2\pi}{a}$ 만큼 평행이동 할 때 [그림 2-13]과 같은 $E-k$ 다이어그램을 얻는다.



[그림 2-13] $E-k$ 다이어그램

(a) 자유전자에 대한 $E-k$ 관계 (b) 결정 내의 $E-k$ 관계 (c) 축소 영역 표현

■ 전자천이

전자천이^{electronic transition}는 전자가 전도대에서부터 가전자대로 천이할 때, k 의 변화 유무에 따라서 간접천이^{indirect transition}와 직접천이^{direct transition}로 분류한다. [표 2-2]는 직접천이와 간접천이의 특성과 종류, 그래프를 보여준다. 직접천이 반도체는 LED, LD 등에 이용되는데, 발생하는 파장은 밴드와 밴드 사이의 천이에 의해서 에너지 밴드갭에 해당하는 광자에너지를 방출한다. 또한, 에너지 밴드갭 내에 인위적인 결함 준위를 만들어서 에너지 밴드갭보다 작은 에너지의 광자를 방출시킬 수 있다.

[표 2-2] 전자천이의 종류에 따른 특성, 종류, 그래프

	직접천이	간접천이
특성	k 의 변화가 없는($k=0$) 천이, 즉 운동량 p 의 변화가 없는 최소 에너지 천이이다. 일반적으로 에너지 밴드갭에 해당하는 광자를 방출한다.	전도대에서 가전자대로 직접천이하지 못하고 결함 준위를 거친다. 천이할 때 k 의 변화, 즉 운동량 p 의 변화가 발생하는 천이이다. 운동량의 감소는 열에너지(포논)를 생성한다.
종류	GaAs, InP 등	Si, Ge, GaP 등
그래프		

■ 운동량 $p = \hbar k$

드 브로이^{De Broglie}의 물질파 개념에 의해 $\lambda = \frac{h}{p}$ 이므로 $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$ 이다.

$\psi_k(x) = Ue^{ik_x x}$ 에 대해 U 가 일정하다고 할 때, $\langle p_x \rangle = \hbar k_x$ 임을 증명해보자.

$$\begin{aligned}
 \langle p_x \rangle &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p_{op} \Psi dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx} \\
 &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} U^2 e^{-ik_x x} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} (e^{ik_x x}) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} U^2 e^{-ik_x x} e^{k_x x} dx} = \frac{\hbar k_x \int_{-\infty}^{\infty} U^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} U^2 dx} = \hbar k_x
 \end{aligned}$$

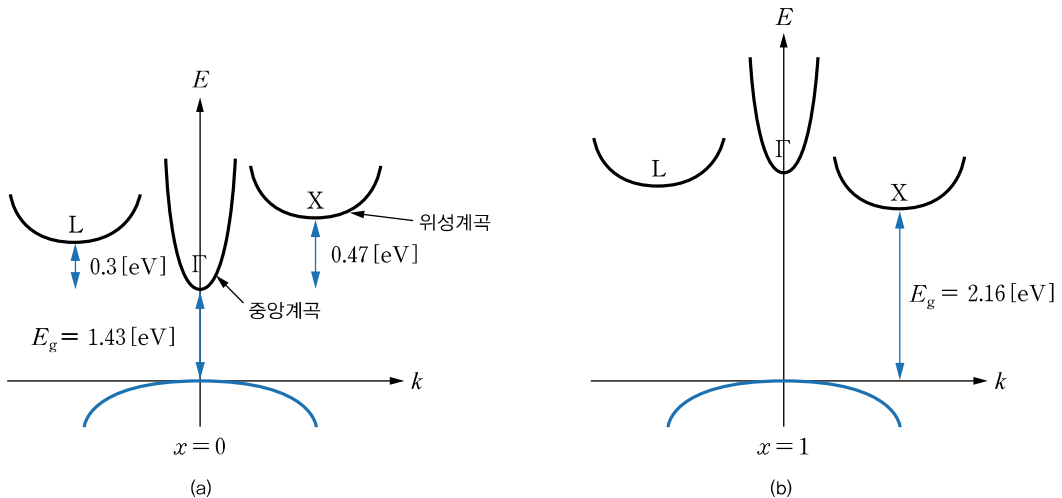
따라서 $E - k$ 다이어그램은 자유전자의 k 와 에너지 E 의 상관관계인 식 (2.3)으로 유추할 수 있다.

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (2.3)$$

어떠한 구속력도 없는 자유전자의 전자에너지와 전파상수 사이의 $E - k$ 의 상관관계인 식 (2.3)으로부터 주기적인 퍼텐셜을 갖는 반도체 내에서의 $E - k$ 관계를 유추할 수 있으며, 이를 통해 반도체 전자전이 등을 설명하는 데 이용되는 $E - k$ 밴드 다이어그램을 이해할 수 있다. $E - k$ 다이어그램은 전자에 대한 것이며, k^2 의 계수 항은 질량 m 의 함수이므로 가전자대의 가전자에 대한 m 은 음의 값, 전도대 전자의 m 은 양의 값을 가져야 함을 알 수 있다.

■ 조성 변화에 따른 에너지 밴드 구조 변화

GaAs의 $E - k$ 다이어그램은 [그림 2-14]와 같다. 그림에서 보는 바와 같이 전도대에는 3개의 밴드가 있다. 전파상수 $k = 0$ 에서 가장 낮은 값을 갖는 전도대인 중앙계곡을 Γ -계곡(valley)이라 하며, 극한점이 기준점(reference point) 역할을 한다. 그밖에 Γ -극한점으로부터 각각 0.3[eV], 0.47[eV] 위에 극한점을 갖는 위성계곡인 L-valley와 X-valley가 존재한다. $k = 0$ 인 Γ -valley의 에너지가 가장 낮으므로 가전자대와 Γ -극한점 사이의 에너지 차가 E_g 에 해당하며 직접전이 반도체가 된다. 대부분의 전도전자는 Γ -valley에 존재하지만 강전계에서 전자는 L/X-valley에 존재할 수 있다.

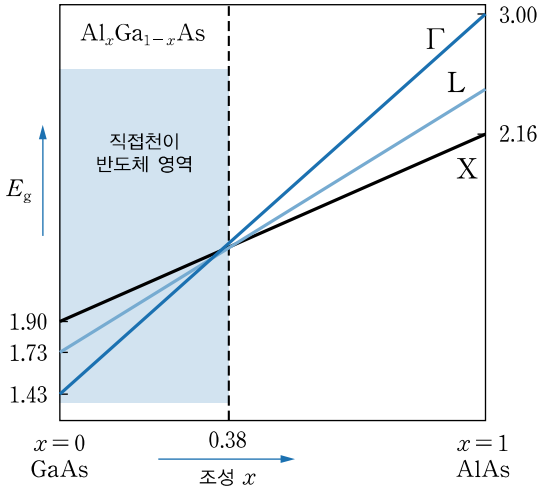


[그림 2-14] GaAs와 AlAs의 $E - k$ 다이어그램

(a) GaAs(직접전이 반도체) (b) AlAs(간접전이 반도체)

GaAs의 Ga 부격자에 Al이 채워지는 3원계 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 의 경우, Al의 양을 증가시키면 각 Γ , L, X-valley는 점차 위로 이동한다. 이때 이동률은 [그림 2-15]에서 그래프의 기울기에 해당하는데, $\Gamma > L > X$ 이 된다. Ga 부격자가 모두 Al으로 채워지는 AlAs의 경우, X-valley가 가장 낮은 전도

대이므로 가전자대와 X 극한점 사이의 에너지 차($2.16[\text{eV}]$)가 E_g 에 해당하는 간접천이 반도체가 된다. 3원계 $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 도 AlGaAs 와 특성이 유사하다. 3원계 $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ 는 $0 \leq x \leq 0.45$ 의 조성 범위에서 직접천이 반도체 특성을 보이며 가시광 LED에 이용된다. 일반적으로 $\text{GaAs}_{0.6}\text{P}_{0.4}$ 조성의 경우 $E_g = 1.9[\text{eV}]$ 로 적색 LED에 이용된다.



[그림 2-15] $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 조성비에 따른 에너지 밴드 변화

Γ -극한점이 가장 낮은 밴드일 때 직접천이 반도체가 되므로 발광소자로 이용 시 x 범위는 0 ~ 38% (직접형) 이내의 것을 이용한다.

핵심포인트

- ④ 고립원자가 고체를 형성할 때 발생하는 결합에는 이온결합, 금속결합, 공유결합이 있으며, 이들 결합은 전기음성도의 크기 및 유사성에 따라 분류된다.
- ④ 고립원자들이 근접하여 고체를 형성할 때, 파울리 배타율에 따라 기존 에너지 준위는 변해야 하며, 좁은 에너지 대역 내에 무수히 많은 에너지 준위를 가지는 에너지 밴드가 존재한다.
- ④ 고체 내의 최외각전자 상태(에너지)를 공간에 대해 나타낸 그래프를 $E-x$ 다이어그램이라 하며, 반도체의 물성을 이해하는 데 기초 자료가 된다.
- ④ 전자천이는 전자가 전도대에서부터 가전자대로 천이할 때, k 의 변화 유무에 따라 간접천이와 직접천이 반도체로 분류한다. 직접천이의 예는 GaAs , InP , 간접천이의 예는 Si , Ge 등이다.
- ④ 어떠한 구속력도 없는 자유전자의 전자에너지와 전파상수 사이의 $E-k$ 의 상관관계인 $E = (\hbar^2/2m)k^2$ 으로부터 주기적인 퍼텐셜을 갖는 반도체 내에서의 $E-k$ 관계를 유추할 수 있으며, 이를 통해 반도체 전자천이 등을 설명하는 데 이용되는 $E-k$ 다이어그램을 이해할 수 있다.

2.2 반도체 캐리어

반도체의 전류전도에 기여하는 캐리어는 전도대의 전자와 가전자대의 정공으로 구성된다. 이 절에서는 전류전도 성분과 이들 캐리어의 유효질량에 대한 개념을 이해하고, 진성 및 외인성 반도체의 캐리어 농도 특성을 공부한다. 또한, 외인성 반도체에 존재하는 도너와 억셉터 준위에 대한 결합에너지를 근사적으로 얻는 방법을 알아본다.

2.2.1 전류전도 성분

금속의 전류전도는 전자바다 모형으로 간단히 설명할 수 있다. 즉, 핵으로부터 구속력이 약한 최외각 전자들이 외부전계에 의해 집단적으로 움직이는 것으로 설명할 수 있다. 반면에, 반도체의 전류전도를 간단히 설명하기는 어렵다. 0K에서 반도체는 가전자대가 완전히 채워지고, 전도대가 완전히 비어진 상태인 절연체 특성을 보인다. 온도 상승으로 가전자의 열적 여기에 의한 전도전자^{conduction electrons}가 발생하며, 이 전도전자 이외에 가전자대의 빈 에너지 상태인 정공이 전도에 기여한다. 불순물 첨가^{impurity doping}는 에너지 밴드 구조와 전하운반자인 캐리어에 중요한 영향을 미친다. 즉, 도핑에 의해 반도체의 전기적 특성을 조절할 수 있다. 가전자대 전자가 전도대로 여기되어 생기는 전자-정공쌍을 EHP^{Electron-Hole Pair}라고 한다.

반도체의 전도 성분

■ 전도대로 여기된 전자에 의한 전도

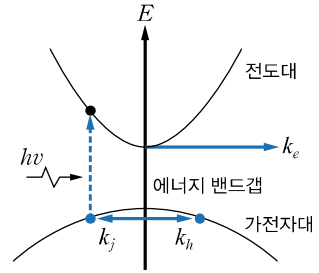
전도대의 빈 에너지 상태를 자유로이 움직인다. 예를 들어, 순수 Si 반도체의 원자 밀도는 약 $5 \times 10^{22} [\text{atoms}/\text{cm}^3]$ 으로, [그림 2-8]에서 설명한 바와 같이 원자당 4개의 전도대 에너지 상태를 갖는다. 반면에 300K에서 캐리어 농도는 $\sim 10^{10} [\text{EHP}/\text{cm}^3]$ 으로 전도대에 빈 에너지 상태가 많이 존재하게 된다.

■ 가전자대의 정공에 의한 전도

전도대의 전자와 마찬가지로 순수 Si 반도체는 300K에서 약 $10^{10} [\text{EHP}/\text{cm}^3]$ 정도의 정공을 생성하며, 가전자대에 빈 에너지 상태들이 많이 존재하게 된다. 그러나 0K에서 전도대는 완전히 빈 상태, 가전자대는 완전히 채워진 상태가 되는데, 이러한 경우에는 완벽한 절연체(전류 흐름이 0)가 된

다. 즉, 완전히 채워진 밴드 내의 실제 전류는 0이다. 이제 이를 증명해보자.

전자로 완전히 채워진 밴드 내에서 어떤 속도의 전자 움직임이 존재한다면, 이를 보상하는 반대의 전자 운동이 존재한다. 다시 말해, 전자 j 가 속도 v_j 로 밴드 내를 움직인다면, 이에 대응하는 전자 h 가 $-v_j$ 로 움직임으로써 전체 전류 net current는 0이 된다. 즉, 가전자대에 전자 농도 $N[\text{elns}/\text{cm}^3]$ 이 존재할 때 전류 밀도는 다음과 같이 표현되며, 그 합은 0이 된다.



$$J = (-q) \sum_i^N v_i = 0$$

$$\left[\frac{\text{C}}{\text{eln}} \right] \left[\frac{\text{cm}}{\text{s}} \right] \left[\frac{\text{elns}}{\text{cm}^3} \right] = \left[\frac{1}{\text{cm}^2} \right] \left[\frac{\text{C}}{\text{s}} \right] = \left[\frac{\text{A}}{\text{cm}^2} \right]$$

전자 j 가 여기되어 정공을 생성할 때를 생각해보자. 가전자대에서 전자가 유실되는 경우로 $J = (-q) \sum_i^N v_i - (-q)v_j$ (가전자 j 유실)이 되며, 전체 전류 밀도는 $J = +qv_j$ 가 된다. 이때 $+qv_j$ 는 정공 전류로, 실제로는 없어진 전자 j 에 대응하는 전자 h (보상되지 못한 가전자)의 $-v_j$ 로의 움직임에 의한 결과이다. 즉, 전체 $J = (-q)(-v_j) = +qv_j$ 로 마치 양의 전하입자(정공)가 $+v_j$ 로의 움직임에 의한 것처럼 볼 수 있다.

캐리어의 질량과 전하

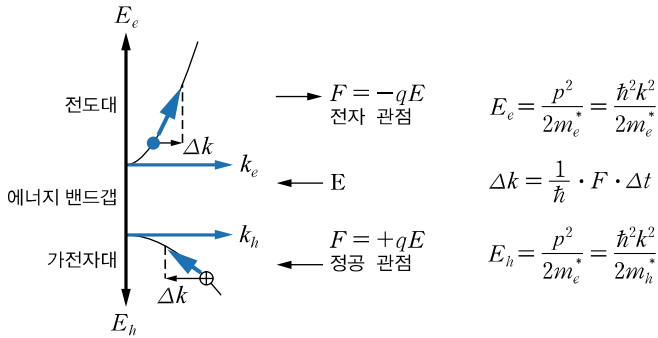
앞에서 살펴본 바와 같이 반도체 내의 전류전도에 관여하는 캐리어인 전도대의 전자는 음의 전하를 띠며, 가전자대의 정공은 양의 전하를 갖는다. 가전자대의 전자는 핵에 구속된 가전자로 운반자인 캐리어라고는 할 수 없지만, 가전자대를 떠난 전자의 빈자리가 정공이므로 가전자대의 전자는 음의 전하를 갖는다. 앞서 살펴본 [그림 2-14]의 $E-k$ 다이어그램은 전자에너지 관점에서 그려진 것이며, 전자에너지와 전파상수 사이의 관계는 다음과 같다.

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}k^2, \quad \text{단, } \hbar^2 \text{은 양수}$$

전도대는 위로 향하는 포물선이므로 전도대 전자의 질량은 양의 값이다. 반대로 가전자대는 아래로 향하는 포물선이므로 가전자대 전자의 질량은 음의 값을 갖는다. 이를 요약하면 다음과 같다.

- 가전자대 내의 정공 : 양의 전하, 양의 질량
- 전도대 내의 전자 : 음의 전하, 양의 질량

참고로, 가전자대 내의 전자(가전자로 캐리어는 아님)는 음의 전하, 음의 질량을 갖는다. [그림 2-16]은 외부전계 E를 인가할 때의 전도대 전자와 가전자대 정공의 움직임(전자는 음의 전하, 정공은 양의 전하)과 전자에너지(E_e), 정공에너지(E_h)와 전파상수와 관계 보여준다. 여기서 정공에너지는 아래로 갈수록 증가한다.



[그림 2-16] 외부전계를 인가할 때의 캐리어의 움직임과 캐리어의 E-k 관계식으로 얻은 다이어그램

2.2.2 유효질량

격자의 주기적 퍼텐셜을 가지는 결정 내를 움직이는 전자의 파동-입자 운동은 자유공간의 전자와는 다르므로 입자의 질량 역시 바뀌어야 한다. 이를 고려한 유효질량 effective mass을 도입하여 결정 내의 전자 움직임을 자유전자와 유사하게 생각할 수 있다. 자유전자에 대한 E-k 관계식으로부터 유효 질량이 E-k 곡선의 곡률 curvature과 관계됨을 알 수 있다. 곡선의 곡률은 운동방정식의 2차 미분으로 주어진다.

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (2.4)$$

$$\frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m}$$

대부분의 반도체 캐리어는 대역극한점 부근(전도대의 최소, 가전자대의 최대)에 존재한다. 따라서 포물선의 곡률로부터 다음과 같이 대략의 유효질량(m^*)을 얻을 수 있다.

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2} \quad (2.5)$$

이때 유효질량은 밴드 극점의 곡률에 반비례(곡률 반경에 비례)한다. 참고로, 대역극한점 부근의 상태 밀도 DOS : Density Of States를 유효상태 밀도 effective DOS라 하며 $\sim 10^{19} [\text{cm}^{-3}]$ 의 값을 갖는다.

예제 2-1 $E-k$ 다이어그램의 밴드 극점에서의 곡률로부터 유효질량 비교

[그림 2-14]를 고려하여 GaAs에서의 전자 유효질량을 비교하라.

풀이

유효질량은 $E-k$ 다이어그램의 곡률에 반비례한다. [그림 2-14]에서 Γ -밴드 극점은 상대적으로 강한 곡률을 가지므로 Γ -밴드 극점에 전도전자가 존재할 때 전도전자의 유효질량 m^* 는 상대적으로 작게 된다.

반면에, X, L-밴드 극점은 상대적으로 약한 곡률이므로 이 극점에 존재하는 전자의 유효질량 m^* 은 상대적으로 클 것(속도 감소)으로 예상할 수 있다. 따라서 Γ -극점에 존재하는 GaAs의 전도전자가 어떠한 외부에너지(특히, 강전계)에 의해 X, L-밴드 극점으로 이동하면 전자 속도가 감소할 것을 예측할 수 있다.

직접전이 반도체에서 $k=0$ 인 Γ -밴드 극점 부근의 $E-k$ 관계식은 다음과 같다.

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + E_g \tag{2.6}$$

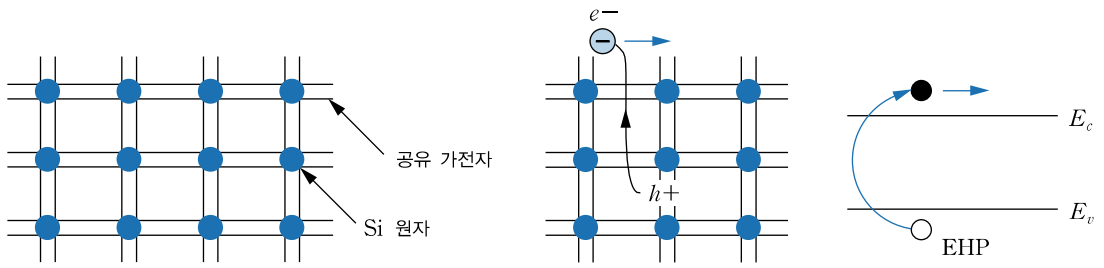
곡률 $\frac{d^2E}{dk^2}$ 이 전도대역 극한점에서 양(+)이고 가전자대역 극한점에서 음(-)이므로 가전자대 상부의 전자는 음의 유효질량, 음의 전하를 갖는다. 정공이 양의 유효질량, 양의 전하를 가지므로 운동 방향 $\vec{p} (= m^* \vec{v})$ 는 같은 방향이 된다. 따라서 가전자의 움직임은 정공의 움직임과 같게 할 수 있다. 전도대역의 등가 계곡 수는 Ge(4), Si(6), GaAs(3)이며 전자의 유효질량 값들은 이들 계곡의 전하 포획 확률과 유효질량 값을 고려한 평균값으로 주어진다. 자유전자 정지질량 $m_0 = 9.1 \times 10^{-31}$ [kg]이다. [표 2-3]의 유효질량 값들에서 InAs의 전도전자와 Ge의 정공 유효질량이 가장 작음을 알 수 있다(곡률은 상대적으로 클 것으로 예상).

[표 2-3] 반도체의 유효질량 값

	Ge	Si	GaAs	InAs	InP
m_n^*	$0.12 m_0$	$0.19 m_0$	$0.067 m_0$	$0.023 m_0$	$0.077 m_0$
m_p^*	$0.28 m_0$	$0.49 m_0$	$0.48 m_0$	$0.41 m_0$	$0.85 m_0$

2.2.3 진성 반도체에서의 캐리어

불순물이나 격자 결함(lattice defect)이 없는 완전한 결정의 반도체를 진성 반도체(intrinsic semiconductor)라 한다. 따라서 [그림 2-17]에 있는 전자-정공쌍(EHP)들은 단지 순수한 고체 구성(예 Si) 캐리어들이므로 가전자대 정공과 전도대의 전자 농도는 같게 된다.



[그림 2-17] Si 결정의 공유결합과 진성 반도체에서의 전자-정공쌍의 생성

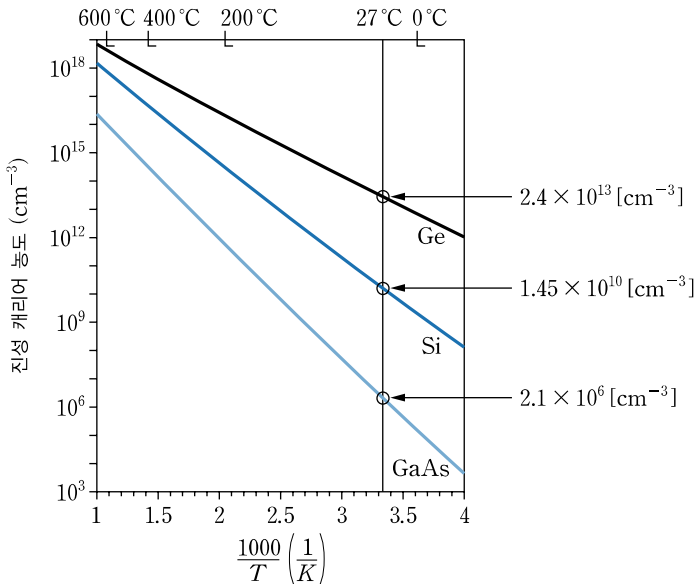
즉, 온도함수로 주어지는 진성 반도체의 캐리어 농도를 $n_i(T)$ 라 하면, 전자정공 농도는 다음과 같다.

$$n = p = n_i(T) [\text{carriers}/\text{cm}^3]$$

[그림 2-18]과 같이 진성 반도체의 캐리어 농도, 즉 진성 캐리어 농도는 온도에 비례하는 함수이며, 정공과 전자의 농도는 주어진 온도에 대해 일정한 값을 보인다. 즉, 정상상태를 유지하기 위해서는 전자-정공쌍의 생성률 generation rate과 재결합률 recombination rate이 같아야 한다. 또한, [그림 2-18]과 같이 진성 캐리어 농도 $n_i(T)$ 는 에너지 밴드갭에 반비례하는 특성을 갖는다. 그림을 통해 에너지 밴드갭의 크기와 진성 캐리어의 농도의 크기를 정리하면 다음과 같다.

$$E_g : \text{GaAs} > \text{Si} > \text{Ge}$$

$$n_i(T) : \text{GaAs} < \text{Si} < \text{Ge}$$



[그림 2-18] 온도에 따른 진성 캐리어 농도 변화

진성 반도체는 열적평형상태에서 다음 두 조건을 만족해야 한다.

■ $g_i(T) = r_i(T)$

열적생성률 $g_i(T)$ 는 시간당 생성 전자-정공쌍들의 농도로, 단위는 $[EHPs/cm^3 \cdot s]$ 이다. 진성 반도체는 T 의 열적평형상태에서 일정 n_i 를 유지해야 하므로 $g_i(T)$ 만큼 생성되고, 재결합률 $r_i(T)$ 만큼 소멸해야 한다. $g_i(T)$ 가 온도에 비례 관계에 있으므로 $r_i(T)$ 역시 온도에 비례 관계이다.

■ $r_i(T) \propto n_o p_o$

재결합률은 가전자대의 정공이 많을수록, 전도대의 전자가 많을수록 증가한다. 따라서 비례상수 $\alpha(T)$ 를 이용하여 $r_i(T) = \alpha(T)n_o p_o$ 로 표시한다. $\alpha(T)$ 는 온도함수로 주어지는 재결합 비례 값으로, 단위는 $[cm^3/EHP \cdot s]$ 이어야 한다. 이때 첨자 o 는 열적평형상태를 나타낸다.

위의 두 조건으로부터 진성 반도체는 열적평형상태에서 다음 관계식을 만족해야 한다.

$$r_i(T) = \alpha(T)n_o p_o = g_i(T) \tag{2.7}$$

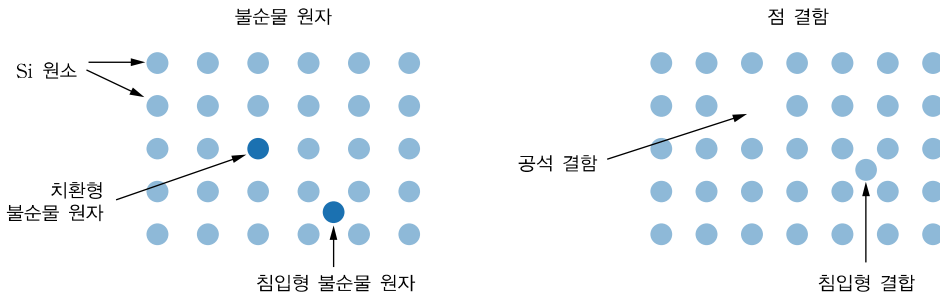
2.2.4 외인성 반도체에서의 캐리어

불순물 첨가에 따른 $n_o \ll n_i$, $p_o \ll n_i$ 의 조건을 갖는 반도체를 외인성 반도체(extrinsic semiconductor)라고 한다. 즉, 실온에서 $n_o \gg (n_i, p_o)$ 또는 $p_o \gg (n_i, n_o)$ 의 농도 조건을 갖는다. $n_o \gg (n_i, p_o)$ 인 반도체에서 n_o 를 다수캐리어(majority carrier), p_o 를 소수캐리어(minority carrier)라고 하며, 이 조건의 반도체가 n 형 반도체이다.

반대로, $p_o \gg (n_i, n_o)$ 인 반도체에서는 p_o 가 다수캐리어, n_o 이 소수캐리어이므로 p 형 반도체이다. 즉, 도핑에 의해 두 종류의 반도체를 만들 수 있으며, 도핑은 에너지 밴드갭 내에 부가적인 에너지 준위들을 형성한다. Ge, Si에 대해, n 형 반도체의 도핑 재료는 P, As, Sb이고, p 형 반도체의 도핑 재료는 B, Al, Ga, In이다.

III	IV	V
B	C	N
Al	Si	P
Ga	Ge	As
In	Sn	Sb

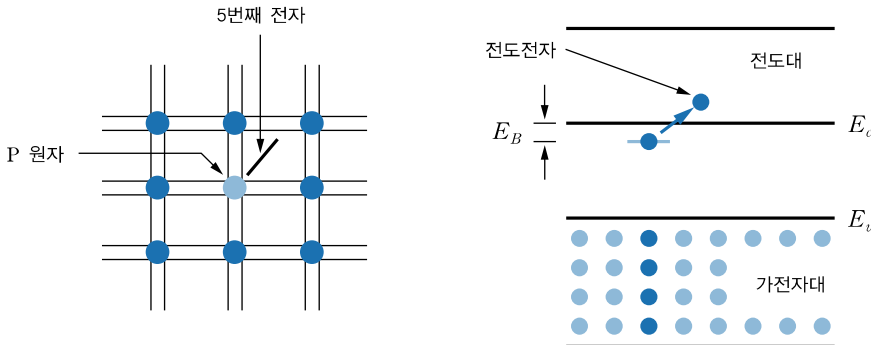
첨가 불순물은 격자구성 원자를 대신하는 치환형(substitutional) 불순물 또는 격자 사이를 점유하는 침입형(interstitial) 불순물로 도핑된다. 또한, 외인성 반도체 내의 점, 선과 같은 결함도 일종의 불순물처럼 작용할 수 있는데, [그림 2-19]와 같이 점 결함은 격자점의 원자가 없어진 형태의 공석(vacancy) 결함과 격자구성 원자가 침입한 형태의 결함이 대표적이다.



[그림 2-19] 외인성 반도체의 불순물과 점 결함

■ 도너와 n 형 반도체

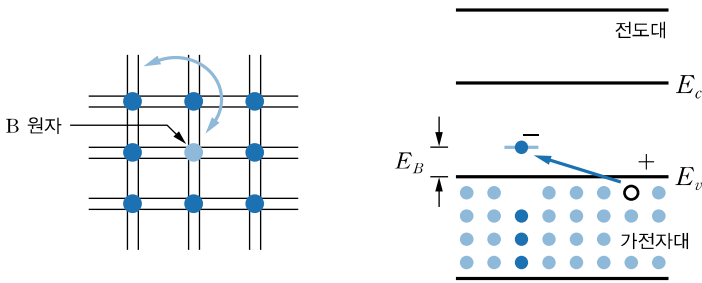
P, Sb 등의 V족 불순물이 Si에 첨가된 경우, P에서 여분의 전자(5번째 전자)는 P^+ 이온에 약 0.05 [eV]의 결합에너지(binding energy) E_D 를 가지고 약하게 구속된다. 0K에서 이 여분의 전자는 에너지 밴드갭 내의 E_C 바로 아래 준위를 점유하며, 이 전자는 약한 열에너지를 받아 쿨롱(coulomb) 구속력을 극복하고 전도대로 올라가서 전도전자로 작용하게 된다. 이때 P 원자는 (+)로 이온화된다. 이러한 전도대에 전자를 공급하는 불순물 원자를 도너(donor)라 하며 (+)로 이온화된다. 도너 준위는 E_D 로 나타낸다.



[그림 2-20] V족 불순물이 Si에 첨가된 경우

■ 억셉터와 p 형 반도체

B, Al 등의 III족 원소가 Si에 불순물로 첨가된 경우, 이러한 불순물은 정상적 결합이 되기에는 전자 1개가 모자란다. 이 모자라는 전자 상태는 0K에서 E_V 바로 위의 준위(억셉터 준위 E_A)를 점유하며, 약한 열에너지에 의해 결합에너지 E_B 를 극복한 Si의 가전자를 받아 채워지므로 가전자대에 전도정공을 남긴다. 이때 B 원자는 (-)로 이온화된다. 이러한 가전자대로부터 전자를 공급받는 불순물 원자를 억셉터(acceptor)라 하며, (-)로 이온화된다.



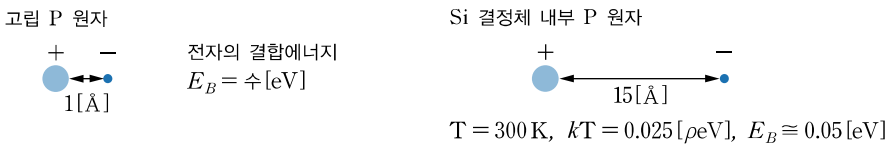
[그림 2-21] III족 원소가 Si에 불순물로 첨가된 경우

도핑으로 인한 전자 농도의 변화에 대한 예를 살펴보면 다음과 같다.

- 진성 Si 반도체 : 비저항 $\sim 2 \times 10^5 [\Omega \cdot \text{cm}]$, $n_i \approx \sim 10^{10} [\text{cm}^3]$ (실온)
- 외인성 Si 반도체 : Sb ($\sim 10^{15} [\text{atoms}/\text{cm}^3]$) 도핑 \rightarrow 비저항 $\sim 5 [\Omega \cdot \text{cm}]$, $n_o \approx \sim 10^{15} [\text{cm}^3]$

2.2.5 결합에너지 근사

도핑은 에너지 밴드 내에 도너 준위 및 억셉터 준위를 형성시킨다. 이러한 도핑 준위와 전도대 끝단, 가전자대 끝단과의 에너지 차이가 결합에너지이다. 고립원자의 경우, 외각의 전자는 수 [eV] 이상의 결합(구속)에너지를 갖는 반면, 이 원자가 반도체 내의 불순물로 작용하는 경우에는 외각전자의 결합에너지가 매우 작아진다. 또한, 보어모델처럼 핵과 외각전자 사이의 거리는 수 [\AA] 이내지만, 불순물로 작용할 경우에는 상당히 증가한다. 즉, 전자가 자기 불순물에 국한된 것이 아님을 알 수 있다. [그림 2-22]는 고립원자와 Si 내 불순물로 작용하는 P에 대한 결합에너지 및 외각전자와 핵 사이의 거리를 비교하여 나타낸다.



[그림 2-22] P에 대한 결합에너지 및 외각전자와 핵 사이의 거리 비교

V족 원소인 P에 대해 Si과 공유결합에 참여하는 전자 4개를 제외한 여분의 전자 1개의 결합에너지와 핵으로부터의 거리를 나타낸다.

반도체에 첨가된 불순물의 외각전자의 결합에너지를 구할 때는 수소에 대한 보어모델을 수정한 하이드로젠 궤도(Hydrogen-like orbit) 모델을 이용한다. 즉, 이것은 수소 코어(core) 대신에 불순물 원자(예 V족 원소)의 핵과 전자들(단, 여분의 5번째 전자 제외)을 코어로 가정하므로 코어와 하나의 전자만 모형을 만든다. 그리고 보어모델의 결과식에 자유공간 대신에 반도체 공간($\epsilon_o \Rightarrow \epsilon = \epsilon_r \epsilon_o$)을 적용하고, 전자질량 대신에 유효질량($m_o \Rightarrow m_n^*$)을 도입한다.

임의의 반도체 공간(유전율 $\epsilon_r \epsilon_o$, 유효질량 $m^* = m_r m_o$)에 V족 도너 불순물이 도너로 첨가된 경우를 고려해보자. 보어모델의 결과로부터 $K(n=1)$ 궤도반경 및 전자의 구속에너지 r_1, E_1 은 각각 다음과 같다.

$$r_1 = \frac{K\hbar^2}{mq^4} (K = 4\pi\epsilon_o) = 0.529 [\text{\AA}] \quad (2.8)$$

$$E_1 = -\frac{mq^4}{2K^2\hbar^2} = -13.6 [\text{eV}] \quad (2.9)$$

도너 불순물의 가전자 중에서 공유결합에 참여하지 못한 여분의 5번째 전자의 궤도반경 및 도너의 결합에너지 r, E_B 는 다음과 같이 단순화할 수 있다.

$$r = \frac{\epsilon_r}{m_r} \frac{Kn^2\hbar^2}{m_o q^4} = \frac{\epsilon_r}{m_r} \times 0.529 [\text{\AA}]$$

$$E_B = \frac{m_r}{\epsilon_r^2} \left(-\frac{mq^4}{2K^2\hbar^2} \right) = -13.6 \times \frac{m_r}{\epsilon_r^2} [\text{eV}]$$

일반적으로 Ge에 대한 도너/억셉터의 결합에너지는 0.01 [eV] 이내이며, Si은 0.03 ~ 0.06 [eV] 내에 있다. 이는 Ge에 비하여 Si의 비유전율은 작고, 상대적으로 유효질량은 크기 때문이다.

예제 2-2 하이드로겐 궤도 모델을 이용한 반도체 결합에너지의 근사

Ge 결정($\epsilon_r = 16, m_n^* = 0.12m_o$)에 대해 도너 결합에너지를 하이드로겐 궤도 모델을 이용하여 근사적으로 구하라.

풀이

보어모델에서 전자가 안정상태($n=1$)에 존재할 때의 에너지는 다음과 같이 표현된다.

$$E_1 = -\frac{mq^4}{2K^2\hbar^2}$$

이때, 전자질량은 자유전자의 값을 가지며 자유공간으로 가정하였다. 임의의 비유전율을 갖는 결정이므로 $K = 4\pi\epsilon_o$ 을 $4\pi\epsilon = 4\pi\epsilon_o\epsilon_r$ 로, 전자질량 m_o 은 유효질량 m_n^* 으로 대입해야 한다. 이를 대입하여 풀면

$$\begin{aligned} E &= -\frac{m_n^* q^4}{2(4\pi\epsilon_o\epsilon_r)^2 \frac{\hbar^2}{4\pi}} = -\frac{m_n^* q^4}{8(\epsilon_o\epsilon_r)^2 \hbar^2} \\ &= -\frac{0.12(9.11 \times 10^{-31})(1.6 \times 10^{19})^4}{8(8.85 \times 10^{-12} \times 16)^2 (6.63 \times 10^{-34})^2} \end{aligned}$$

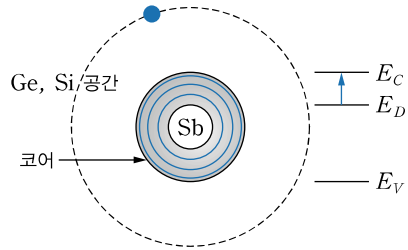
$$\begin{aligned}
 &= -1.02 \times 1.6^{-21} [\text{J}] \\
 &= -1.02 \times 1.6^{-21} (6.3 \times 10^{18}) = -6.4 [\text{meV}]
 \end{aligned}$$

가 된다. 결합에너지 E_B 는 전도대 끝단과 에너지 E 의 차로 주어지므로

$$E_B = E_C - E = 0 - (-6.4) = 6.4 [\text{meV}]$$

이다. 이때의 도너 주위의 전자 궤도반경을 계산해보자. 보어 모델에서 $n-1$ 에 대한 궤도반경은 다음 식으로 구한다.

$$r_1 = \frac{K\hbar^2}{mq^2}$$



마찬가지로 수정된 K 와 유효질량을 대입하여 전자 궤도반경을 계산하면

$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r \times \hbar^2}{m^*q^2 4\pi^2} = \frac{(8.85 \times 10^{-12} \times 16)(6.63 \times 10^{-34})^2}{\pi(0.12 \times 9.1 \times 10^{-31})(1.6 \times 10^{-19})^2} = 7.079 \times 10^{-9} [\text{m}]$$

이다. 즉, 전자 궤도반경은 $70.79 [\text{\AA}]$ 으로 Ge의 격자상수 $a = 5.66 [\text{\AA}]$ 임을 고려하면, 전자가 자기 불순물에 국한된 것이 아님을 알 수 있다.



2.2.6 화합물 반도체의 도핑과 양자우물에서의 캐리어

불순물이나 결함이 없는 완전한 결정인 진성 반도체는 전자소자로 활용하는 것이 극히 제한적이다. 진성 반도체에 불순물이 첨가되어 형type을 가질 때 비로소 전자소자로 활용할 수 있다. III-V족, II-VI족 화합물 반도체에 대한 불순물 도핑은 IV족 반도체의 불순물 도핑과는 약간의 차이가 있다.

화합물 반도체의 도핑

■ III-V족 화합물 반도체의 도핑

일반적으로 III-V족 화합물 반도체는 전기음성도가 유사한 원자 사이의 치환으로 도핑된다.

- VI족 불순물 : V족 원자와 치환되어 여분의 전자를 가지므로 도너 역할을 한다.
(예 GaAs에서 Te, Se, S는 As과 치환)
- II족 불순물 : III족 원소와 치환되어 결합 전자의 결합손으로 억셉터 역할을 한다.
(예 GaAs에서 Be, Zn, Cd이 Ga과 치환)
- IV족 불순물 : 양성불순물 amphoteric impurity로 III족과 V족 모두와 치환될 수 있다. 일반적으로는 GaAs에 첨가된 Si 불순물은 Ga과 치환되어 도너 역할을 하지만, GaAs 성장 시 높은 증기압으로 발생하는 As의 공석 결함이 많으면 As 위치를 Si이 점유하므로 억셉터로 작용할 수 있다.

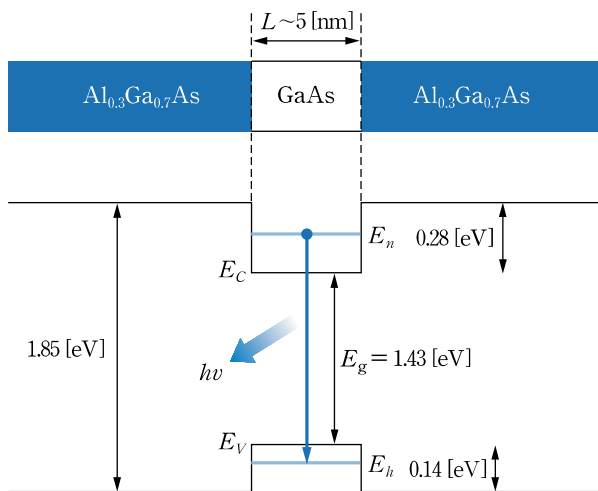
■ II-VI 족 화합물 반도체의 도핑

II-VI족 화합물 반도체의 도핑은 매우 어렵다. 왜냐하면 격자 결함이 많아 도펀트와 상쇄되기 때문이다. 전자, 광학소자로 응용하기 위해서는 결함이 없는 반도체 성장 기술이 필요하다.

양자우물에서의 캐리어

앞에서 살펴본 도너 및 억셉터 불순물은 일반적으로 전도대 끝단(E_C) 아래와 가전자대 끝단(E_V) 위에 근접한 준위^{shallow levels}를 갖는다. 또한, 기타 재결합 촉진 등을 위해 도핑되는 불순물 준위는 에너지 밴드갭 중앙 부근의 준위^{deep levels}를 점유한다. 이와 같이 도너 및 억셉터 불순물 준위 (E_D, E_A)는 에너지 밴드갭 내의 불연속 준위를 형성한다.

전도대와 가전자대의 전자, 정공들은 에너지 밴드갭에 연속 준위를 형성함을 설명하였다. 이와 달리 무한전위 양자우물^{quantum well} 구조에 대한 슈뢰딩거 파동방정식의 해의 결과에서 보듯이, 좁은 영역의 양자우물 내의 전자, 정공은 양자역학적 구속^{quantum-mechanical confinement}에 의한 양자화로 가전자대 및 전도대에 불연속적인 양자 준위를 형성시킨다.



[그림 2-23] AlGaAs-GaAs-AlGaAs의 이종접합 양자우물 구조와 에너지 밴드 다이어그램

양쪽 AlGaAs의 에너지 장벽에 둘러싸인 약 5[nm] 폭의 GaAs는 양자역학적으로 구속된다. 그리하여 전도대와 가전자대의 전자, 정공은 연속에너지 준위에 분포하지 않고 E_n 및 E_h 와 같은 불연속 준위에 존재(양자화)한다.

[그림 2-23]은 AlGaAs-GaAs-AlGaAs의 이종접합^{heterojunction} 양자우물 구조에 대한 에너지 밴드 다이어그램이다. GaAs 영역은 양자역학적 구속이 발생할 정도로 충분히 얇아서($L \sim 5$ [nm]) 전도대와 가전자대에서 불연속적인 양자 준위 E_n, E_h 등을 형성하고, 전도전자들은 E_n 에, 가전자대의 정공은 E_h 에 존재하려고 한다. 따라서 GaAs 반도체의 에너지 밴드갭 $E_g (= E_C - E_V)$ 보다 큰 에

너지의 광($E_h + E_g + E_n$)을 방출한다. 즉, 순수 GaAs은 거의 적외선에 가까운 빛을 내지만, 양자 우물의 GaAs는 붉은 가시광선을 발생시킬 수 있다.

핵심포인트

- 반도체의 전류전도에 기여하는 캐리어는 전도대의 전자와 가전자대의 정공으로 구성되며, 가전자대 내의 정공은 양의 전하와 양의 질량, 전도대 내의 전자는 음의 전하와 양의 질량을 갖는다.
- 격자의 주기적 퍼텐셜을 가지는 결정 내의 전자 움직임을 유효질량을 도입하여 자유전자와 유사하게 생각할 수 있다.
- $E-k$ 다이어그램에서 유효질량은 밴드 극점의 곡률에 반비례한다.
- 진성 반도체의 캐리어 농도 $n_i(T)$ 는 온도에 비례하여 증가하며 에너지 밴드갭에 반비례하는 특성을 갖는다.
- 진성 반도체에 불순물(도너, 억셉터)을 도핑하여 n 형, p 형의 외인성 반도체를 만들 수 있다. Si, Ge 반도체는 V족 불순물을 도너로, III족 불순물은 억셉터로 도핑한다.
- GaAs와 같은 III-V족 화합물 반도체는 일반적으로 전기음성도가 유사한 원자 간의 치환으로 도핑된다. 즉, VI족 불순물은 V족과 치환되어 도너로, II족 불순물은 III족과 치환되어 억셉터 역할을 한다.
- 도핑은 에너지 밴드 내에 도너 준위 및 억셉터 준위를 형성시킨다. 이러한 도핑 준위와 전도대 끝단, 가전자대 끝단과의 에너지 차이가 결합에너지이다. 이 결합에너지는 하이드로젠 궤도 모델을 이용하여 근사적으로 구할 수 있다.

2.3 페르미 준위와 반도체 캐리어 농도

반도체 캐리어 농도는 반도체의 특성을 분석할 때 필요한 주요 물성 중 하나로, 통계학적 방법(statistical methods)에 기초하여 구할 수 있다. 특히, 고농도 도핑(high doping) 시에는 다수캐리어 1개는 불순물 원자 1개와 같다. 즉, 다수캐리어 농도는 불순물 농도에 의해 결정되지만(도너 농도 N_D 가 첨가된 n 형 반도체의 경우 $n_o \sim N_D$), 소수캐리어 농도는 온도 의존성 등을 고려해야 한다.

2.3.1 통계학적 입자 분포

통계학적으로 입자의 분포를 알 수 있는 맥스웰-볼츠만 분포, 보스-아인슈타인 분포, 페르미-디랙 분포를 살펴보자.

■ 맥스웰-볼츠만 분포

맥스웰-볼츠만 분포(Maxwell-Boltzmann distribution)는 임의의 온도 T 에서 미소에너지($\Delta E \sim E - E_f$) 범위에 입자가 존재할 확률을 나타낸다. 이때 볼츠만인자(Boltzmann factor)는 다음과 같다.

$$e^{-\Delta E/kT} = e^{-(E - E_f)/kT} \quad (2.10)$$

볼츠만상수(Boltzmann constant) k (또는 k_B) = 1.38×10^{-23} [J/K] = 8.616×10^{-5} [eV/K]으로, $T = 300$ K에서 열에너지 $kT = 0.0259$ [eV]이다. 비례식에 의해 임의의 온도에서 에너지 kT 를 구할 수 있다. 맥스웰-볼츠만 분포는 고전입자(classical particles) 또는 이상기체(ideal gas) 등의 분포를 설명하는데 적용할 수 있다.

■ 보스-아인슈타인 분포

보스-아인슈타인 분포(Bose-Einstein distribution)는 임의의 온도 T 에서 에너지 준위 E 가 입자에 의해 채워질 확률을 나타낸다. 보스-아인슈타인^{BE} 분포함수를 나타내면 다음과 같다.

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E - E_f)/kT} - 1} \quad (2.11)$$

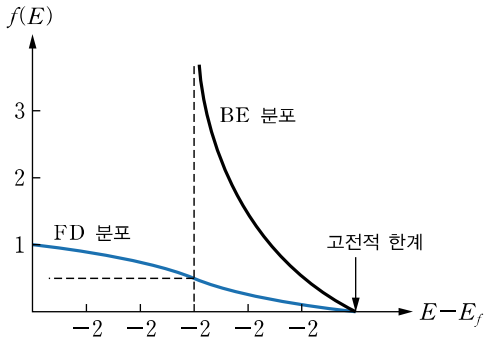
[그림 2-24]에서 보는 바와 같이 입자가 E_f 의 에너지 준위를 점유한다면 ($E \sim E_f$), $f(E_f)$ 는 무한대, 즉 에너지 상태가 입자에 의해 채워질 확률이 무한대가 된다. 이는 파울리 배타율이 적용되지 않는 시스템을 알 수 있다. 동일 에너지, 동일 위상, 동일 편광 등의 특성을 갖는 코히런스^{coherence} 광원이 이에 속한다. 보스-아이슈타인 분포함수를 따르는 입자를 보존^{boson}이라 하며, 광자^{photon}가 대표적인 예이다.

■ 페르미-디랙 분포

페르미-디랙 분포^{Fermi-Dirac distribution}는 임의의 온도 T 에서 에너지 준위 E 가 입자에 의해 채워질 확률을 나타낸다(뒷부분에서 자세히 설명하기로 한다). 페르미-디랙^{FD} 분포함수를 나타내면 다음과 같다.

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E - E_f)/kT} + 1} \quad (2.12)$$

[그림 2-24]와 같이 분포함수는 $0 < f(E) < 1$ 로 파울리 배타율이 적용되는 시스템의 입자 분포를 설명한다. 페르미-디랙 분포함수를 따르는 입자를 페르미온^{fermion}이라 하며, 고체 내의 전자가 대표적인 예이다.



[그림 2-24] 페르미-디랙 입자 분포와 보스-아이슈타인 입자 분포
 E_f 를 기준으로 임의의 온도에서 에너지 준위 E 가 입자에 의해 채워질 확률을 나타낸다.

2.3.2 페르미 준위

파울리의 배타율을 만족하는 고체에서 바닥상태^{ground state}란 0K에서 N 개 입자(전자)가 밑바닥부터 채워진 상태를 말하며, 온도 변화에 따른 전자의 점유상태 변화는 페르미-디랙 분포함수 $f(E)$ 를 따른다. 임의의 온도 T 의 열적평형상태에서 에너지 준위 E 가 전자에 의해 점유될 확률이다. 이때 E_f 는 반도체 내의 캐리어 거동을 설명하는 가상 준위로, 이를 페르미 준위^{Fermi level}라 한다. 페르미 준위의 정의와 그에 대한 증명을 살펴보자.

페르미 준위 E_f 의 정의

- (1) 0K에서 전자가 가질 수 있는 최대 에너지 준위
- (2) 임의의 온도 T 에서 전자가 채워질 확률 $f(E = E_f) = \frac{1}{2}$ 인 에너지 준위

증명

- (1) $T \rightarrow 0$ 에 대해 $E < E_f$ 일 때

$$f(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{\infty}} = 1$$

이다. 즉, $E < E_f$ 인 전자 상태는 전자 1개에 의해 채워진다. 그리고 $E > E_f$ 일 때

$$f(E) = \frac{1}{1 + \infty} = 0$$

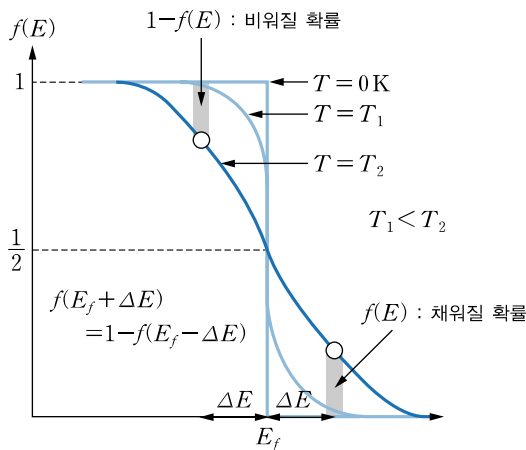
이므로, $E > E_f$ 인 전자 상태는 완전히 비워져 있다.

- (2) 임의의 온도 T 에 대해 $E = E_f$ 이면

$$f(E) = \frac{1}{1 + 1} = \frac{1}{2}$$

이므로, 전자 상태 E 가 채워질 확률은 $\frac{1}{2}$ 이다. ■

또한, $E > E_f$ 일 때 $f(E) > 0$ 이고, $E < E_f$ 일 때 $f(E) < 1$ 임을 알 수 있다. (1), (2)로부터 온도에 따른 페르미-디랙 분포함수와 페르미 준위의 관계를 [그림 2-25]에 나타내었다.



[그림 2-25] 온도에 따른 $f(E)$ 와 E_f 의 관계

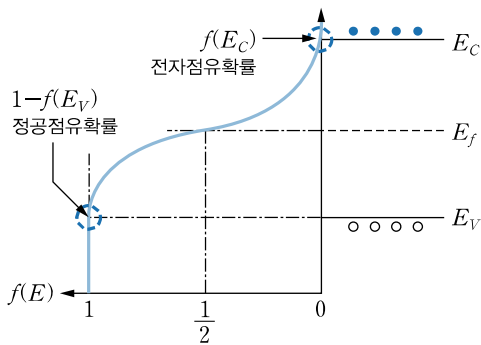
[그림 2-25]에서 보는 바와 같이 임의의 온도(T_2)에서 0K과는 달리 E_f 이상의 에너지 상태가 전자로 채워질 확률 $f(E)$ 가 존재(0이 아님)하고, E_f 이하의 에너지 상태가 비어질 확률 $1 - f(E)$ 가 존재한다. 특히, $E = E_f$ 에서는 온도에 무관하게 전자로 채워질 확률은 항상 $\frac{1}{2}$ 이다. 또한, $f(E)$ 는 E_f 에 관하여 대칭성을 갖는다.

$$f(E_f + \Delta E) = 1 - f(E_f - \Delta E) \quad (2.13)$$

■ 진성 반도체의 페르미 준위

진성 반도체에 대한 캐리어 농도는 $n = p = n_i$ 를 만족한다. 따라서 E_f 는 에너지 밴드갭 중앙에 위치한다. 이러한 페르미 준위를 진성 페르미 준위^{intrinsic Fermi level} E_i 라고 한다. Si은 300K에서 캐리어 농도는 $n_i \approx 1.5 \times 10^{10}$ [carriers/cm³]이고, 유효상태 밀도가 $N(E_C, E_V) \approx 10^{19}$ [states/cm³]이므로 E_C 에서의 전자점유확률과 E_V 에서의 정공점유확률은 극히 작다.

$$f(E_C) = 1 - f(E_V) \sim 0$$

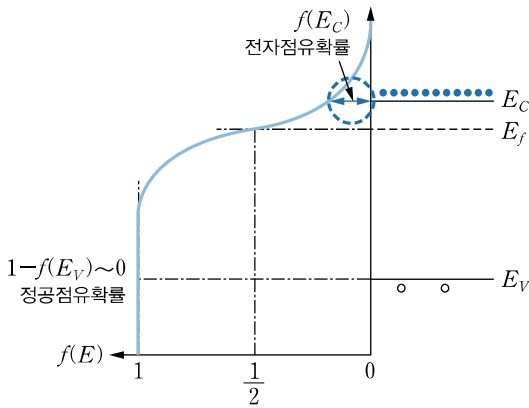


[그림 2-26] 진성 반도체에 대한 페르미-디랙 분포함수와 페르미 준위

■ 외인성 반도체의 페르미 준위

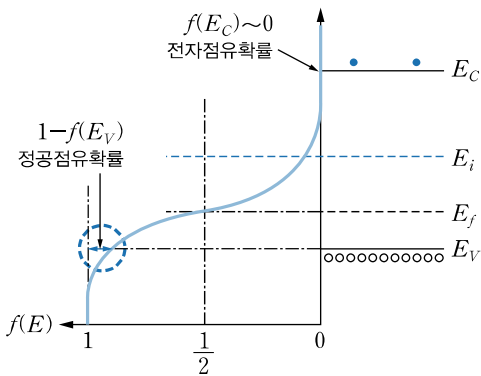
n 형 반도체의 경우, $E_C - E_f$ 는 전도대의 전자 농도에 대한 척도로 $E_C - E_f$ 가 증가하면 전자의 농도는 감소한다. 즉, $n_o = N_C e^{-(E_C - E_f)/kT}$ 이다(2.4절에서 자세히 증명). 페르미-디랙 분포함수 개념을 이용하여 이를 유추해보자. E_C 준위가 전자에 의해 점유될 확률은 n_o/N_C 로, 이는 $f(E_C)$ 와 같으므로 다음 식이 성립된다.

$$\frac{n_o}{N_C} = f(E_C) = \frac{1}{1 + e^{(E_C - E_f)/kT}} \sim e^{-(E_C - E_f)/kT}$$



[그림 2-27] n형 반도체에 대한 페르미-디랙 분포함수와 페르미 준위

p형 반도체의 경우, 마찬가지로 $E_f - E_V$ 는 가전자대의 정공 농도에 대한 척도로 $E_f - E_V$ 가 증가하면 정공의 농도는 감소한다. 즉, $p_o = N_V e^{-(E_f - E_V)/kT}$ 이 성립한다.



[그림 2-28] p형 반도체에 대한 페르미-디랙 분포함수와 페르미 준위

2.3.3 열적평형상태에서의 캐리어 농도

열적평형상태에서 전도대의 전자 농도 n_o [electrons/cm³]는 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$n_o = \text{체적당 에너지 상태의 수 [states/cm}^3] \times \text{그 상태가 채워질 확률 } f(E)$$

따라서 전자 농도가 연속 분포를 보이므로 다음과 같은 적분식으로도 구할 수 있다.

$$n_o = \int_{E_C}^{\infty} f(E)N(E)dE \tag{2.14}$$

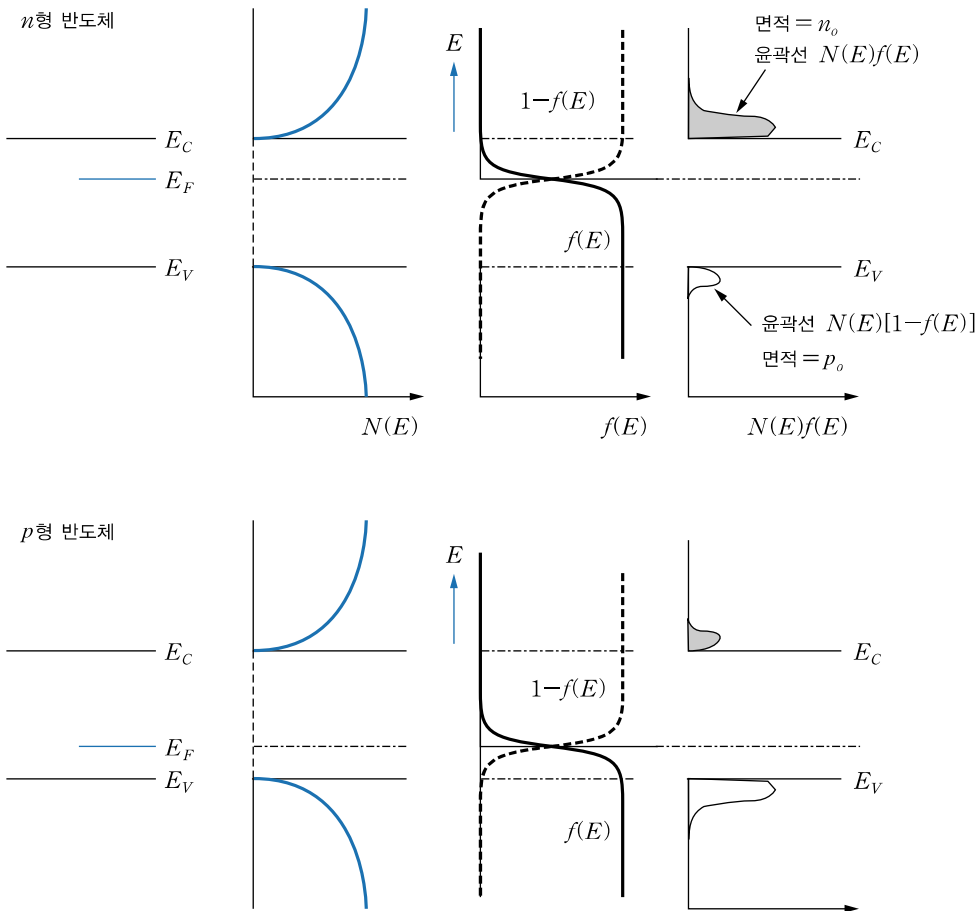
여기서 $N(E)$ 는 에너지 상태 밀도이며, 단위에너지, 체적당 상태의 수 [상태의 수/(단위부피, 에너지)] 인 $\left[\frac{\text{states}}{\text{cm}^3 \cdot \text{eV}} \right]$ 의 단위를 갖는다. 따라서 $N(E)dE$ 는 미소에너지 dE 내 체적당 에너지 상태의 수[states/cm³]이므로 E_C 의 적분으로 농도를 구할 수 있다. $N(E)$ 는 많은 책에서 다루고 있으므로 여기서는 증명을 생략하기로 한다. 다만 $N(E) \propto \sqrt{E}$ 의 관계임을 기억하자.

$$N(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} \quad (2.15)$$

마찬가지로 열적평형상태에서 가전자대의 정공 농도 p_o 는 다음과 같이 된다.

$$p_o = \int_{-\infty}^{E_V} [1 - f(E)] N(E) dE \quad (2.16)$$

[그림 2-29]를 이용하여 열적평형상태에서의 캐리어 농도 n_o, p_o 를 계산해보자.



[그림 2-29] 열적평형상태에서 n형, p형 반도체의 에너지 밴드 다이어그램, 상태 밀도, 분포함수 및 캐리어 농도의 관계

■ 열적평형상태에서의 전자 농도 n_o 의 계산

캐리어 농도는 [그림 2-29]에서 보는 바와 같이 에너지 상태 밀도와 그 상태가 캐리어에 의해 채워질 확률인 분포함수의 곱에 대한 적분으로 얻을 수 있다. 전도대의 전자 농도는 전도대 끝단이 기준이므로 에너지 상태 밀도는 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$N(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{(E - E_C)} \quad (2.17)$$

여기서 $N(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}$ 이다. 페르미-디랙 분포함수인 다음 식을 변형해보자.

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_f)/kT}}$$

임의의 온도에서 $E - E_f \gg kT$ 이라 가정하면, 300 K에서 $kT \approx 0.0259$ [eV]이므로

$$f(E) \approx e^{(E_f - E)/kT} \quad (2.18)$$

으로 나타낼 수 있으며, 식 (2.19)와 같은 열적평형상태에서의 전자 농도를 구할 수 있다.

$$\begin{aligned} n_o &= \int_{E_C}^{\infty} f(E)N(E)dE = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_C}^{\infty} e^{(E_f - E)/kT} (E - E_C)^{1/2} dE \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{E_f/kT} \int_{E_C}^{\infty} e^{-E/kT} \cdot (E - E_C)^{1/2} dE \end{aligned} \quad (2.19)$$

식 (2.19)의 적분항은 감마함수를 이용하여 쉽게 구할 수 있다.

Tip & Note

✓ 감마함수

감마(gamma)함수 $\Gamma(n)$ 의 정의는 다음과 같다.

$$\Gamma(n) = \int_0^{\infty} e^{-X} X^{n-1} dX$$

정수 n 을 대입하여 정리하면 다음과 같은 점화식과 팩토리얼 함수(!-함수)를 얻을 수 있다.

$$\Gamma(n+1) = n\Gamma(n) = n!$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \Gamma(1) = \Gamma(2) = 1, \Gamma(3) = \Gamma(2+1) = 2\Gamma(2) = 2!, \Gamma(4) = 3!$$

감마함수의 정의로부터 다음과 같은 적분 공식이 성립한다.

$$\int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-ax} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a\sqrt{a}} \quad (2.20)$$

식 (2.20)을 증명하기 위해 $ax = X$ 라 두면 $x = \frac{X}{a}$, $dx = \frac{dX}{a}$ 이므로 다음과 같이 구한다.

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \left(\frac{X}{a}\right)^{1/2} e^{-X} \frac{dX}{a} &= \frac{1}{a^{3/2}} \int_0^{\infty} e^{-X} X^{1/2} dX = \frac{1}{2a^{3/2}} \sqrt{\pi} \\ &= \frac{1}{a^{3/2}} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{a^{3/2}} \cdot \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

식 (2.19)의 적분항 $\int_{E_C}^{\infty} (E - E_C)^{1/2} e^{-E/kT} dE$ 을 실제 계산해보자. $E - E_C = x$, $dE = dx$ 라고 하면 $E = x + E_C$ 이 된다. $E \rightarrow E_C$, $x \rightarrow 0$ 이고, $a = \frac{1}{kT}$ 이라면

$$\begin{aligned} \text{원식} &= \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-(x+E_C)/kT} dx = \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-E_C/kT} e^{-x/kT} dx \\ &= e^{-E_C/kT} \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x/kT} dx \\ &= e^{-E_C/kT} \frac{\sqrt{\pi}}{2 \frac{1}{kT} \frac{1}{\sqrt{kT}}} = \frac{1}{2} (kT)^{3/2} \sqrt{\pi} \cdot e^{-E_C/kT} \end{aligned}$$

가 된다. 따라서 식 (2.19)의 열적평형상태에서의 전도대 전자 농도는 다음 식으로 정리된다.

$$n_o = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{(E_f - E_C)/kT} \cdot \frac{(kT)^{3/2} \cdot \pi^{1/2}}{2} \doteq 2 \left(\frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{(E_f - E_C)/kT} \quad (2.21)$$

여기서 $2 \left(\frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$ 가 E_C 에서의 유효상태 밀도 N_C 이다. 또한

$$f(E_C) = \frac{1}{1 + e^{(E_C - E_f)/kT}} \sim e^{-(E_C - E_f)/kT}, \quad \text{단, } E_C - E_f \gg kT$$

이므로 n_o 는 식 (2.22)로 근사될 수 있다.

$$n_o = N_C e^{-(E_C - E_f)/kT} = N_C f(E_C) \quad (2.22)$$

이다. 열적평형상태에서 전도대의 전자 농도는 전도대 밴드단에 대한 확률밀도함수와 유효상태 밀도

의 곱과 같다고 할 수 있으며, 대부분의 전도전자는 전도대 밴드단인 E_C 에 존재함을 알 수 있다.

■ 열적평형상태에서의 정공 농도 p_o 의 계산

임의의 온도에서 $E_f - E \gg kT$ 일 때, 가전자대의 정공 농도는 다음과 같다.

$$p_o = N_V [1 - f(E_V)] = N_V e^{-(E_f - E_V)/kT} \quad (2.23)$$

여기서 $1 - f(E_V)$ 는 다음과 같음을 알 수 있다.

$$1 - f(E_V) = 1 - \frac{1}{1 + e^{(E_V - E_f)/kT}} = \frac{e^{(E_V - E_f)/kT}}{1 + e^{(E_V - E_f)/kT}} = \frac{1}{e^{(E_V - E_f)/kT} + 1} \approx e^{-(E_f - E_V)/kT}$$

진성 반도체, 외인성 반도체와 상관 없이 열적평형상태에서의 캐리어 농도를 정리하면 다음과 같다.

$$n_o = N_C e^{-(E_C - E_f)/kT} \quad (2.24)$$

$$p_o = N_V e^{-(E_f - E_V)/kT} \quad (2.25)$$

■ 열적평형상태에서의 n_o , p_o 와 진성 캐리어 농도 n_i 사이의 관계

진성 페르미 준위 E_i 를 식 (2.24)와 식 (2.25)에 대입하여 정리하면, 진성 반도체의 캐리어 농도 n_i , p_i 의 관계식(열적평형상태)인 식 (2.26)과 식 (2.27)을 얻을 수 있다.

$$n_i = N_C e^{-(E_C - E_i)/kT} \quad (2.26)$$

$$p_i = N_V e^{-(E_i - E_V)/kT} \quad (2.27)$$

식 (2.24)와 식 (2.25)를 곱하고, 식 (2.26)과 식 (2.27)를 곱하면 다음과 같은 $n_o p_o$ 와 $n_i p_i$ 의 관계식을 얻을 수 있다.

$$n_o p_o = N_C N_V e^{-(E_C - E_V)/kT} = N_C N_V e^{-E_g/kT}$$

$$n_i p_i = N_C e^{-(E_C - E_i)/kT} N_V e^{-(E_i - E_V)/kT} = N_C N_V e^{-E_g/kT} = n_i^2 \quad (n_i = p_i)$$

이를 정리하면, 열적평형상태에서 전자, 정공 농도의 곱은 식 (2.28)과 같이 진성 캐리어 농도의 제곱과 같다. 또한, 진성 캐리어 농도 n_i 는 온도에 비례하며 임의의 온도에 대해 일대일 대응한다.

$$n_o p_o = n_i^2 \quad (2.28)$$

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_g/2kT} \quad (2.29)$$

또한, 식 (2.26)과 식 (2.27)을 식 (2.25)와 식 (2.26)에 대입하면 가장 자주 이용되는 관계식인 식 (2.30)을 얻을 수 있다($n_o = N_C e^{-(E_C - E_i + E_i - E_f)/kT} = N_C e^{-(E_C - E_i)/kT} e^{(E_f - E_i)/kT}$).

$$\begin{aligned} n_o &= n_i e^{(E_f - E_i)/kT} \\ p_o &= n_i e^{(E_i - E_f)/kT} \end{aligned} \tag{2.30}$$

식 (2.30)으로부터 $E_i = E_f$ 이면 $n_o = n_i$, $p_o = n_i$ 이고, $|E_f - E_i|$ 이 증가하면, 캐리어 농도는 지수함수적으로 변동한다. 즉, E_f 가 전도대쪽으로 증가하면 n_o 이 지수함수적으로 증가하고, E_f 가 가 전자대쪽으로 증가하면 p_o 이 지수함수적으로 증가한다.

■ 진성 페르미 준위의 위치

전자정공의 유효질량이 동일($m_n^* = m_p^*$)할 경우, 식 (2.21)의 유효상태 밀도는 $N_C = N_V$ 가 된다. 따라서 식 (2.26)과 식 (2.29)는 같게 된다. 즉, $N_C e^{-(E_C - E_i)/kT} = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_g/2kT}$ 이므로 $E_C - E_i = E_g/2$ 이 성립된다. 즉, 진성 페르미 준위가 에너지 대역 중앙에 존재하게 된다.

예제 2-3 도핑 농도를 이용한 에너지 밴드 다이어그램의 작도

Si이 As로 도핑($N_D = 10^{17}$ [atoms/cm³])된 n 형 반도체가 있다. 실온에서의 열적평형상태 농도와 E_f 와 E_i 사이의 관계를 에너지 밴드 다이어그램으로 그려라.

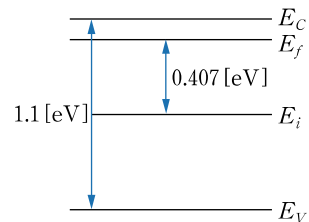
풀이

Si(300K)에서 $n_i = 1.5 \times 10^{10}$ [electrons/cm³], $E_g = 1.1$ [eV]이다. 앞서 정의한 열적평형상태에서의 전자와 정공 농도 관계식을 이용하면

$$\begin{aligned} n_i^2 &= n_o p_o, \quad n_o \approx N_D \\ p_o &= \frac{n_i^2}{n_o} \approx \frac{n_i^2}{N_D} \approx \frac{2.25 \times 10^{20}}{10^{17}} = 2.25 \times 10^3 \text{ [holes/cm}^3\text{]} \\ n_o &= n_i e^{(E_f - E_i)/kT} \end{aligned}$$

이다. 따라서 $\ln \frac{n_o}{n_i} = (E_f - E_i)/kT$ 이므로, 다음과 같이 $E_f - E_i$ 를 얻을 수 있다.

$$E_f - E_i = kT \ln \frac{n_o}{n_i} = 0.0259 \ln \frac{10^{17}}{1.5 \times 10^{10}} = 0.407 \text{ [eV]}$$



2.3.4 캐리어 농도의 온도 의존성

대표적인 캐리어 농도인 식 (2.30)을 생각해보자. 열적평형상태에서 $n_o = n_i e^{(E_f - E_i)/kT}$, $p_o = n_i e^{(E_i - E_f)/kT}$ 로 캐리어 농도의 온도 의존성은 지수함수에 포함된 $1/T$ 의 온도 의존성, 진성 캐리어 농도의 온도 의존성 $n_i(T)$ 및 페르미 준위의 온도 의존성 $E_f(T)$ 이 함께 존재한다. 각각에 대해 자세히 알아보자.

■ n_i 의 온도 의존성

식 (2.29)와 식 (2.21)은 다음과 같다.

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_g/2kT}, \quad N_C = 2 \left(\frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}, \quad N_V = 2 \left(\frac{m_h^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}$$

따라서 진성 캐리어 농도의 온도 의존성은 식 (2.31)로 나타낼 수 있다.

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_g/2kT} = 2 \left(\frac{kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-E_g/2kT} \quad (2.31)$$

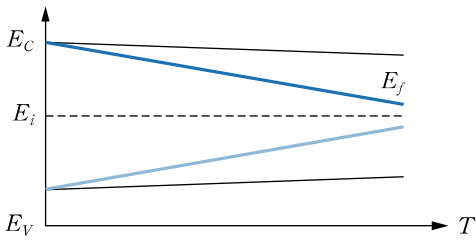
즉, $n_i(T)$ 는 상태 밀도($\sim T^{3/2}$), E_g 의 온도 의존성, 지수함수의 kT 성분을 모두 고려해야 한다. 식 (2.31)의 양변에 \ln 을 취한 후 정리하면 다음과 같다.

$$\ln n_i = \frac{1}{2} \ln(N_C N_V) - \frac{E_g}{2kT}$$

여기서 상태 밀도에 대한 온도 의존성($\propto T^{3/2}$)과 E_g 에 대한 온도 의존성($E_g \propto 1/T$)을 무시하면, $\ln n_i(T)$ 과 $1/T$ 의 그래프는 완전 선형이 된다([그림 2-18]의 실선과 [그림 2-31]의 점선). 앞에서 살펴본 진성 캐리어 농도와 온도 역수 간의 관계 그림인 [그림 2-18]에서 기울기는 $E_g/2000k$ 이므로 E_g 가 큰 재료가 더 큰 기울기를 가진다는 것을 알 수 있다. 즉, 임의의 T 에 대해 n_i 가 일대일 대응하여 주어진다. 따라서 주어진 온도 T 에서 캐리어 농도를 구하기 위해 $E_i - E_f$ 값을 알면 된다.

■ E_f 의 온도 의존성

n 형 고농도 도핑된 반도체의 경우, 식 (2.24)의 $n_o = N_C e^{-(E_C - E_f)/kT}$ 으로부터 $E_C - E_f$ 의 온도 의존성을 구할 수 있다. 즉, $kT \ln(n_o/N_C) = (E_f - E_C)$ 이다. 특히, 저온 영역에서 $E_f - E_C \sim 0$ 이므로 $E_f \sim E_C$ 이고 T 증가에 따라 $E_f \sim E_C$ 가 증가함을 알 수 있다. [그림 2-30]은 페르미 준위의 온도 의존성을 나타낸다.

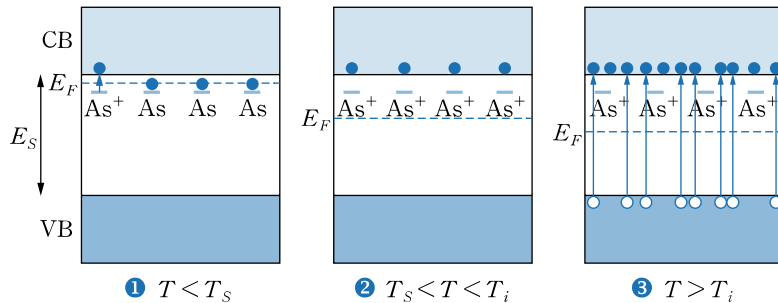
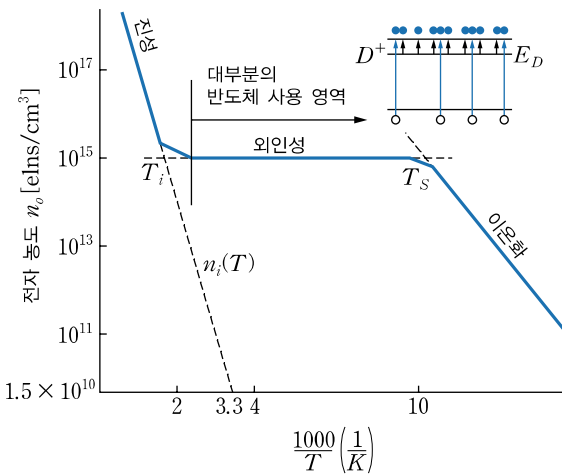


[그림 2-30] 고농도 도핑된 외인성 반도체에 대한 페르미 준위의 온도 의존성

온도가 낮은 영역에서 페르미 준위는 전도대 및 가전자대의 끝단에 위치하며, 고온에서는 진성 페르미 준위에 위치한다.

■ n_o, p_o 의 온도 의존성

[그림 2-31]은 $N_D = 10^{15}$ [atoms/cm³]의 As이 도핑된 n 형 Si 반도체에 대한 다수캐리어 농도의 온도 의존성을 보여준다. 절대온도 100 K 부근($kT \sim 8.6$ [meV])에 대응하는 에너지에서 대부분의 도너 불순물은 전도대로 전자를 공급하고, 자신은 양으로 이온화(D^+)된다. 따라서 다수캐리어 농도 $n_o \sim N_D = 10^{15}$ [e/lns/cm³]이며, 이 영역을 **이온화 영역** (ionization region)이라 한다.



[그림 2-31] $N_D = 10^{15}$ [As/cm³]으로 도핑된 Si의 다수캐리어 농도($\ln n_o$) 대 온도 역수 관계

아래 밴드 그림은 각 온도별 캐리어 생성 과정을 나타낸다. ①은 도너의 이온화 과정, ②는 완전한 이온화(외인성 특성)와 일부 가전자 전자의 여기, ③은 캐리어의 열적생성(진성 특성)을 보여준다.

100 K 이상의 온도에서 가전자대 전자는 열에너지를 받아 전도대로 여기하기 시작한다. 하지만 약 500 K의 온도까지 그 농도는 N_D 에 비하여 매우 적으므로 전체적인 전자 농도에 영향을 미치지 못한다. [그림 2-18]에서 보듯이 Si의 진성 캐리어 농도가 300 K에서는 약 $1.5 \times 10^{10} [\text{e}/\text{cm}^3]$, 500 K에서 약 $2 \times 10^{14} [\text{e}/\text{cm}^3]$ 이므로 $10^{15} [\text{e}/\text{cm}^3]$ 의 전자 농도를 발생시킨 N_D 보다 매우 작음을 알 수 있다. 이 영역을 **외인성 영역**(extrinsic region)이라 하며, 대부분 반도체의 동작 온도이다.

약 500 K 이상의 고온을 **진성 영역**(intrinsic region)이라 하며, 이 영역에서 $n_i > N_D$ 로 다수캐리어는 진성 캐리어 농도에 의해 좌우된다. 특히 온도 증가와 더불어 페르미 준위가 점차 에너지 밴드갭 중앙 부근인 진성 페르미 준위로 이동되고 있음에 주목하자.

2.3.5 보상과 공간전하중성

도너 불순물 농도 N_D , 억셉터 불순물 농도를 N_A 에 대해 n 형 반도체의 경우 $n_o = N_D$, p 형 반도체의 경우 $p_o = N_A$ 로 표현하는 것이 가능하다.

보상

도너와 억셉터가 동시에 존재(단, $N_D > N_A$)하는 반도체에 대해 다음과 같은 과정을 생각할 수 있다.

- ① 가전자대 전자가 억셉터 준위 E_A 를 채운다(N_A^- 이온화).
- ② 가전자대에 정공을 생성한다.
- ③ 동시에 도너 준위 E_D 의 전자가 전도대를 채운다(N_D^+ 이온화).
- ④ 전도대에 전자를 생성한다.
- ⑤ 가전자대 정공은 전도대 전자와 재결합으로 소멸된다.
- ⑥ 전도대 전자 농도 즉, 다수캐리어 농도 $n_o = N_D - N_A$ 로 표현된다.

이와 같이 억셉터(가전자대 정공 생성)는 더 많은 농도의 도너(전도대 전자 생성) 성분에 의해 사라지게 되는데, 이 효과를 **보상**(compensation)이라 한다. 반대의 경우($N_D < N_A$)를 생각해보자. n 형 반도체에 N_A 를 지속적으로 첨가하여 $N_A = N_D$ 가 되면 $n_o = p_o = n_i$ 의 진성 반도체의 특성을 갖게 되고, N_A 를 더욱 첨가하여 $N_A > N_D$ 이면 p 형 반도체가 된다.

공간전하중성

전자, 정공, 이온화된 도너, 이온화된 억셉터의 농도 관계는 특정 하전 입자의 반도체 외부 유출이 없는 이상 공간상에서 중성을 유지해야 하는데, 이를 **공간전하중성**(space charge neutrality) 조건이라 한다. 즉, 진성 반도체(중성)와 불순물(중성)의 합은 전체적으로 중성이므로

$$\begin{aligned} \text{양전하} &= \text{음전하} \\ p_o + N_D^+ &= n_o + N_A^- \end{aligned}$$

가 된다. 공간전하중성 조건에 따라서 n 형 반도체에 대한 다수캐리어인 전자 농도는 $n_o = p_o + (N_D^+ - N_A^-)$ 이고, 소수캐리어인 정공 농도 p_o 는 일반적으로 상대적으로 적은 농도의 값이므로 다수 캐리어의 농도는 다음과 같이 불순물 농도의 차로 근사될 수 있다.

$$n_o \approx (N_D^+ - N_A^-)$$

핵심포인트

- ➡ 페르미-디랙 분포는 임의의 온도에서 에너지 준위가 입자에 의해 채워질 확률을 나타낸다. 반도체에서의 온도 변화에 따른 전자의 점유상태 변화는 페르미-디랙 분포함수를 따른다.
- ➡ 페르미 준위는 열적평형상태에서 정의되는 가상 준위로, 0K에서 전자가 가질 수 있는 최대 에너지 준위 또는 임의의 온도에서 전자가 채워질 확률이 $\frac{1}{2}$ 인 에너지 준위로 정의된다.
- ➡ 열평형상태에서 캐리어 농도는 다음과 같이 에너지 상태 밀도와 분포함수의 곱에 대한 적분으로부터 얻어지며 다음과 같은 관계를 갖는다.

$$n_o = n_i e^{(E_f - E_i)/kT}, \quad p_o = n_i e^{(E_i - E_f)/kT}$$

- ➡ 열적평형상태에서 전자, 정공 농도의 곱은 진성 캐리어 농도의 제곱과 같다. 또한, 진성 캐리어 농도 n_i 는 온도에 비례하며 임의의 온도에 대해 일대일 대응한다.

$$n_o p_o = n_i^2, \quad n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_g/2kT}$$

- ➡ 온도가 낮은 영역에서 페르미 준위는 전도대 및 가전자대의 끝단에 위치하며, 고온에서는 진성 페르미 준위에 위치한다.
- ➡ 다수캐리어 농도의 온도 의존성을 살펴보면, 온도 증가에 따라 순차적으로 이온화, 외인성, 진성 영역으로 변화한다. 대부분의 반도체는 외인성 영역에서 동작한다.

2.4 전계와 자계에서의 캐리어 거동

전계^{electric field} E , 자계^{magnetic field} H 에 의한 캐리어의 거동을 표동^{drift}이라 한다. 외부전계와 자계가 없는 경우, 전자와 정공은 열적 불규칙 운동을 한다. 이때 속도 v 운동입자에 대해 $-v$ 운동입자가 존재하는 것으로 여기므로 입자의 실질적인 운동은 없다고 볼 수 있다. 그러나 전계와 자계에서 전자, 정공은 주어진 방향으로 힘을 받아 실질적인 운동을 한다. 반도체 격자, 불순물과의 충돌^{collision} 및 산란^{scattering}에 의해 흐름의 용이성인 이동도^{mobility} μ 와 전도도^{conductivity} σ 에 영향을 준다. 이러한 물리량의 개념과 그들의 의존성을 알아볼 것이다. 특히, 단위에 주목하자.

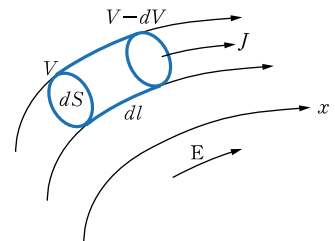
2.4.1 전자전류 밀도와 전도도

일반적으로 전류는 1초 당 1[C]의 전하가 흐를 경우 1[A](암페어)로 정의되는 스칼라양이다. 반면에, 전류 밀도는 단위면적당 전류로 $[A/cm^2]$ 의 단위를 갖는 벡터양이다. 전도도는 어떤 고체(특히, 반도체)가 가지는 고유 물리량으로 비저항의 역수로 정의된다. 이러한 반도체에 외부전계가 인가될 때 전자 성분으로 만들어지는 전자전류 밀도는 다음과 같이 전도도와 전계의 곱으로 주어진다.

$$\text{전자전류 밀도} = \text{전도도} \times \text{전계, 즉 } J = \sigma E$$

즉, 전계가 x 방향으로 인가(E_x)될 경우, 전류 밀도는 식 (2.32)인 $J_x = \sigma E_x$ 로 주어진다. 옴의 법칙의 미분형과 전계 관계를 통해 이를 증명해보자.

미소길이 dl , 미소면적 dS 의 원통을 생각해보자. 전위차는 dV 로 주어졌다. 저항 R 은 면적에 반비례, 길이에 비례한다. 전계 E 는 길이당의 전위차로 $R = \frac{dl}{\sigma dS}$, $E = \frac{dV}{dl}$ 이 된다. 미소전류는 저항에 대한 전위차이므로 다음과 같은 식이 성립된다.



$$dI = \frac{dV}{R} = \frac{dV}{\frac{dl}{\sigma dS}} = \sigma E dS = J dS \text{ [A]}$$

$$J = \sigma E \text{ [A/cm}^2\text{]}, \quad \vec{\sigma E} = \vec{J} \quad (2.32)$$

식 (2.32)로부터 전도도는 전계당 전류 밀도로 정의될 수 있다. 또한 전도도는 농도, 전하량, 이동도의 곱(2.4.2절에서 증명)과 같으며, 단위는 $[1/\Omega \text{ cm}]$ 을 갖는다.

$$\text{전도도} = \text{농도} \times \text{전하량} \times \text{이동도} (\sigma_n = nq\mu_n, \sigma_p = pq\mu_p)$$

따라서 전체 전도도는 $\sigma = nq\mu_n + pq\mu_p$ 이 된다.

2.4.2 전자의 표동과 이동도

전계에서 전자의 평균 표동 속도(drift velocity $\langle v_x \rangle$)는 열적 불규칙 속력(thermal random speed v_{th})에 비하여 매우 작다. 일반적으로 평균 $v_{th} \sim 10^7$ [cm/s] 정도로 매우 크다. 즉, 통상적인 경우 $\langle v_x \rangle \ll v_{th}$ 를 만족한다. 표동 속도에서 전류 밀도는 식 (2.33)으로 정의된다.

$$J_x = (-q)n\langle v_x \rangle \quad (2.33)$$

즉, $J_x = (\text{전자 전하량}) \times (\text{전자 농도}) \times (\text{속도})$ 로, 이는 다음과 같은 좌우 단위를 비교해 보면 타당하다는 것을 알 수 있다.

$$\left[\frac{\text{C}}{\text{eln}} \right] \left[\frac{\text{eln s}}{\text{cm}^3} \right] \left[\frac{\text{cm}}{\text{s}} \right] = \left[\frac{1}{\text{cm}^2} \right] \left[\frac{\text{C}}{\text{s}} \right] = \left[\frac{\text{A}}{\text{cm}^2} \right]$$

여기서 $(-q)n$ 은 체적전하(전자) 밀도 ρ_v [C/cm³]를 의미하며, $n\langle v_x \rangle$ 는 입자속 밀도(flux density)로 단위시간, 단위면적을 통과하는 전자수[eln s/cm² · s]에 대응한다. 전자의 표동 속도는 외부전계에 비례하며 방향은 반대가 된다. 즉, $\langle v_x \rangle \propto -E_x$ 이며, 이 비례식은 전계하의 표동의 용이성을 나타내는 비례상수 이동도를 도입하므로 다음 식을 완성할 수 있다.

$$\text{전자표동 속도} = - \text{이동도} \times \text{전계, 즉 } \langle v_x \rangle = -\mu_n E_x \quad (2.34)$$

식 (2.34)에서 보는 바와 같이 이동도의 단위는 v [cm/s]/ E [V/cm] = [cm²/Vs]로, 단위전계당 입자의 평균 표동 속도로 정의되며 입자의 유효질량(m^*)에 반비례한다. 따라서 큰 곡률을 갖는

GaAs의 Γ -극한점([그림 2-14] 참조)에 속하는 전자의 이동도는 상당히 클 것으로 생각할 수 있다. 식 (2.33)과 식 (2.34)로부터 전자전류 밀도는 식 (2.35)로 완성되며, 이 결과를 식 (2.32)와 비교하면 전자의 전도도 σ_n 을 식 (2.36)으로 정의할 수 있다.

$$J_x = nq\mu_n E_x \quad (2.35)$$

$$\sigma_n = nq\mu_n \quad (2.36)$$

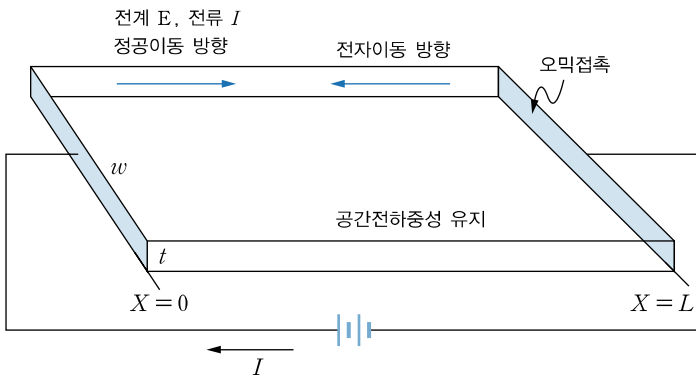
전자에 대한 결과를 정공에 적용하기 위해 $n \rightarrow p$, $\mu_n \rightarrow \mu_p$, $-q \rightarrow q$ 를 대입하면 식 (2.33)으로부터 $J_x = qp\langle v_x \rangle$, 식 (2.34)로부터 $\langle v_x \rangle = \mu_p E_x$ 이므로 전류 밀도는 $J_x = qp\mu_p E_x$ 이 된다.

$$\sigma_p = pq\mu_p \quad (2.37)$$

따라서 [그림 2-32]와 같이 길이 L , 폭 w , 두께 t 의 반도체 봉에 x 방향으로 전계가 인가된 경우의 전자, 정공의 표동에 의한 전류 밀도는 식 (2.38)로 표현된다. 또한, 이러한 반도체 봉에 대한 저항, 비저항, 전도도 간의 관계는 식 (2.39)로 주어진다. [그림 2-32]에서 오믹접촉^{Ohmic contact}은 양방향 흐름의 수월성을 위한 것이다.

$$J_x = (qn\mu_n + qp\mu_p)E_x = \sigma E_x \quad (2.38)$$

$$R = \frac{\rho L}{wt} = \frac{L}{wt} \frac{1}{\sigma} \quad (2.39)$$



[그림 2-32] 전계 인가된 반도체 봉에서의 캐리어 움직임

2.4.3 이동도의 온도 의존성과 도핑 의존성

캐리어 이동도는 열적으로 운동하는 캐리어에 전계를 인가한 경우에 대한 표동의 용이성으로 정의하였다. 이동도는 반도체의 주요 특성으로 소자 개발에 매우 중요하다. 이동도는 반도체 결정내의 산란에 의해 크게 영향을 받는다. 전자, 정공의 이동도에 영향을 주는 대표적인 산란기구^{scattering mechanism}에는 격자 산란과 불순물 산란이 있다.

■ 격자 산란

격자점을 차지하는 결정원자의 집단적 열진동^{collective thermal vibration}의 양자를 포논^{phonon}이라 하며 격자 산란^{lattice scattering}은 포논 산란이라고도 한다. 온도 증가는 포논의 주파수 증가를 야기하므로 캐리어의 산란 빈도가 증가하고, 따라서 이동도는 감소한다. 격자 산란에 대한 이동도의 온도 의존성은 다음 식으로 표현된다. 즉, 격자 산란은 온도 증가에 따라 이동도를 감소시킨다.

$$\mu_L \propto T^{-3/2} \quad (\text{고온에서 주된 산란기구}) \quad (2.40)$$

■ 불순물 산란

저온에서 격자 산란은 급격히 줄어들고 그만큼 캐리어의 열적 운동도 감소된다. 저속의 캐리어는 하전 입자와 강한 산란을 일으킨다. 즉, 저온에서 캐리어의 속도는 낮아지고 이온화된 불순물 (N_A^- , N_D^+)과의 산란이 증가하므로 이동도가 저하된다. 불순물 산란^{impurity scattering}에 대한 이동도의 온도 의존성은 다음 식으로 표현된다. 즉, 불순물 산란은 온도 감소에 따라 이동도를 감소시킨다.

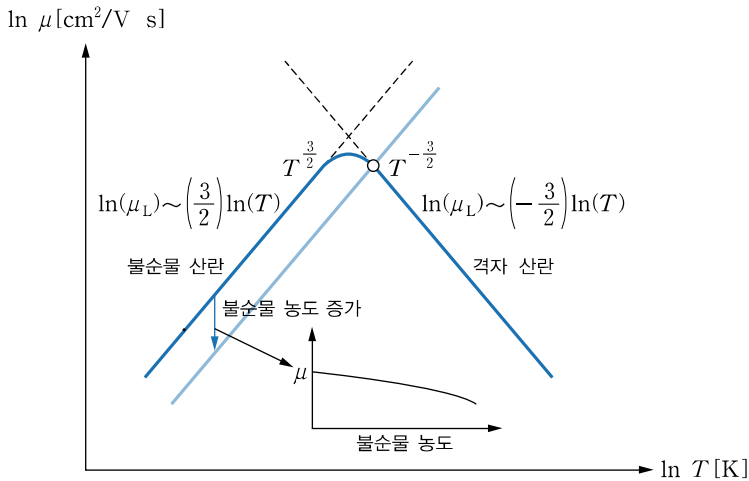
$$\mu_I \propto T^{3/2} \quad (\text{저온에서 주된 산란}) \quad (2.41)$$

■ 산란기구와 이동도

산란이 많아지면 그만큼 이동도는 감소된다. 즉, 산란 확률^{scattering probability}은 이동도에 반비례하므로 여러 종류의 산란이 가능하면, 주어진 온도에서 가장 낮은 이동도의 산란기구가 이동도를 결정한다.

$$\text{산란 확률} \propto \frac{1}{\mu} \left(\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} + \frac{1}{\mu_3} + \dots \right) \quad (2.42)$$

[그림 2-33]은 불순물 산란 및 격자 산란에 따른 이동도의 온도 의존성을 나타낸다. 불순물의 농도 증가는 μ 를 감소시키고, 상대적으로 높은 온도에서도 불순물 산란의 영향을 받는다. 예를 들어, 300K에서 Si 진성 반도체의 전자 이동도는 $\mu_n = 1350 \text{ [cm}^2/\text{V} \cdot \text{s]}$ 이고 $10^{17} \text{ [atoms/cm}^3]$ 의 도너 첨가 시 $\mu_n = 700 \text{ [cm}^2/\text{V} \cdot \text{s]}$ 인 약 $\frac{1}{2}$ 값으로 감소한다.



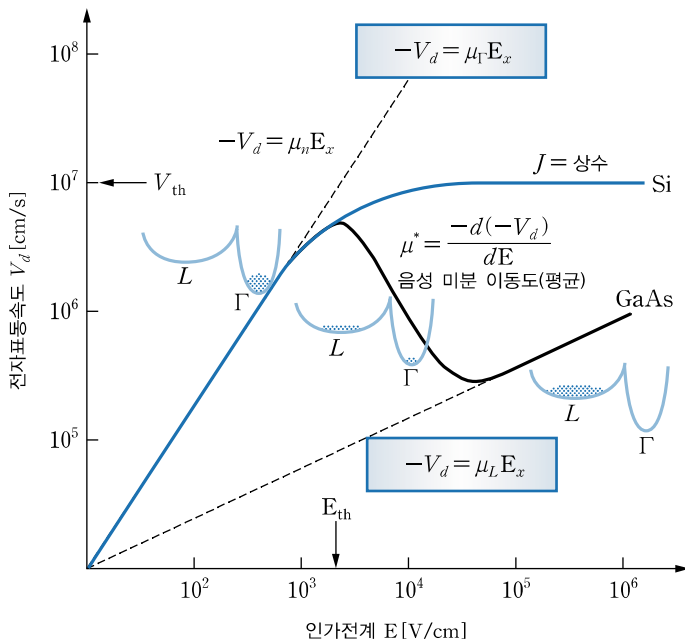
[그림 2-33] 이동도의 온도 의존성

낮은 이동도를 일으키는 산란기구가 이동도를 결정한다. 즉, 저온에서는 불순물 산란, 고온에서는 격자 산란이 이동도를 결정한다. 또한 불순물의 농도 증가는 저온에서는 더욱 이동도를 저하시키며, 더 높은 온도 범위에서도 불순물 산란의 영향을 받게 한다.

2.4.4 강전계 효과 및 전다이오드

[그림 2-34]는 인가전계의 변화에 따른 Si과 GaAs 반도체의 전자표동 속도 변화를 보여준다. Si(Ge 등)은 강전계에 대해 전자표동 속도(전계와 반대 방향의 속도 $-v_d$)는 포화되는 반면에, GaAs(InP 등)는 임계전계 이상에서 표동 속도가 감소하는 강전계 효과를 일으킨다. 속도 감소는 전자기파를 발생시킨다. 건효과의 메커니즘을 설명하기 위해 전계의 세기에 따른 GaAs의 밴드 구조를 함께 보였다. L-valley는 곡률이 상대적으로 작으므로 전자의 유효질량이 크다. 약한 전계에서 전도전자는 Γ -valley에 존재하는 반면 전계가 강해짐에 따라 L-valley로의 전이가 발생하므로 전계 증가에 따라 상대적인 이동도(또는 전도도)가 감소하는 음성 미분 이동도 구간이 존재하게 된다. 전계가 더욱 크게 인가되어 완전한 L-valley로의 전자전이가 이루어지고 일정한 값의 이동도 μ_L 을 보인다.

일반적인 크기의 전계(E_x 가 10^3 [V/cm] 이하)에서, 평균 표동 속도는 평균 열진동 속도에 비하여 현저히 낮다. 즉, $\langle v_x \rangle \ll v_{th}$ 이고 $J_x = \sigma E_x$ 가 만족된다. 여기서 전도도 σ 는 비저항의 역수($1/\rho$)로 온도 의존 물질 상수($\sigma_n = nq\mu_n$ 에서 μ_n 이 일정)이므로 E_x 에 독립한다. 또한 $v_d = -\mu_n E_x$ 로 표동 속도는 일정 온도에서 전계에 선형 비례, 즉 μ_n 은 일정하다. 그러나 강전계 ($> 10^3$ [V/cm])에서 v_d 는 지속적으로 증가하지 못하고 평균 열적 속도 $v_{th} \sim 10^7$ [cm/s] 부근의 상한선에 도달하여 포화($v_d \approx v_{th}$)된다. 즉, 더 이상의 속도 증가보다는 추가되는 전자에너지는 격자에 영향을 미친다(즉, 포논과의 충돌로 잃어버림). 이러한 현상은 대부분의 물질(Si, Ge 등)에서 성립한다. 반면에 GaAs 등의 일부 화합물 반도체는 임계전계 이상에서 표동 속도가 포화되지 않고 오히려 속도가 감소하는 효과를 보이는데, 이를 건효과라 한다.



[그림 2-34] Si 및 GaAs의 강전계 효과

건Gunn, 1963은 GaAs와 다른 III-V족 반도체에서의 열전자hot electron를 연구하던 중에 전기장을 증가시키면 표동 속도 v_d 가 증가하다가 임계전계 E_{th} 보다 커지면 진동하기 시작하고 전계의 세기에 반비례하여 감소되는 현상을 발견하였다. 이로 인해 $I-V$ 특성에는 음성저항이 나타나게 되어 발진이 일어난다. 이 발진주파수는 마이크로파에서 [GHz] 주파수의 [mm]파 영역에 이르며, 이 주파수 영역은 재래의 고체 전자소자로서는 이룩할 수 없었던 고주파 영역이다. 이와 같은 현상을 이용한 다이오드를 건다이오드Gunn diode라고 한다.

앞에서 설명한 바와 같이 대부분의 전도전자는 전도대 끝단에 존재한다. GaAs의 대부분 전도전자는 Γ -valley의 극한점에 존재한다. 그러나 높은 전계를 가하면, 전자들의 온도가 높아지고, 전도대의 Γ -valley에서 L -valley로의 전자전이 일어난다. 이때 L -극한점 전자의 유효질량은 Γ -극한점의 것보다 약 8배 이상 크고 전자기동도는 훨씬 낮다($m_L^* = 8m_\Gamma^*$, $\mu_L \ll \mu_\Gamma$). 따라서 표동 속도의 감소가 발생한다. 이것이 음성 미분 전도도BNDC : Bulk Negative Differential Conductivity가 생기는 주요 메커니즘으로 이해되고 있다.

다른 강전계 효과에는 애벌런치 증식작용avalanche multiplication이 있으며, 이것은 전자가 강전계하에서 가속되면서 원자와의 충돌로 전자-정공쌍들을 생성시키는 것이 반복되어 많은 캐리어를 생성시킨다.

2.4.5 홀효과

홀 E.H. Hall, 1879(미국의 물리학자)은 전류가 흐르는 금속이나 반도체에 전류와 수직방향으로 자계를 인가하면 전류와 자계의 수직 방향으로 전계가 나타나는 현상을 발견하였다. 이것을 홀기전력 V_H 이라 하는데, 전하를 띤 입자(☞ 전자)가 자계 속을 운동하면 로렌츠의 힘을 받아 운동 방향이 굽어진다. 따라서 고체 속의 전류 흐름이 한쪽으로 치우쳐 전하의 분포가 비평형이 되므로 전계가 나타나게 된다. 전류가 같은 방향이라도 음, 양전하에 따라 발생하는 전계의 방향이 달라진다. 또 입자의 농도에 따라서도 전계의 세기가 달라지는 성질이 있다. 즉, 전류가 흐르는 반도체에 전류와 수직 방향으로 자계를 인가하면 전류·자계의 수직 방향으로 전계가 나타나는 현상을 홀효과라 한다. 이 효과를 이용해서 반도체의 형 type뿐만 아니라 전류를 운반하는 전자(또는 정공) 농도, 이동도, 비저항, 전도도 등을 측정할 수 있다. 이것은 다수캐리어에 대한 것이다. 나중에 소수캐리어의 특성을 측정하는 기술을 언급할 것이다.

[그림 2-35]와 같은 p 형 반도체 봉에 대하여 다수캐리어인 정공의 흐름을 생각하자. x 방향으로 정공표동전류 hole drift current I_x , z 방향 자계 H 와 투자율의 곱의 물리량인 자속밀도 magnetic flux density B_z 를 인가할 경우, $-y$ 방향으로 힘 발생하여 캐리어가 휘려는 경향을 갖게 된다. 그러나 휘지 못하게 하는 AB 방향의 전계(홀전압)가 발생하여 정공은 정상적인 흐름 유지한다.

- 홀전압 Hall voltage V_{AB} 측정 : $V_{AB} = wE_y$
- 홀계수 Hall coefficient R_H 의 결정 : CD 방향의 전계에서, 이에 수직한 방향으로 자계가 인가되면

$$\text{로렌츠의 힘 방정식 : } \vec{F} = q(\vec{E}_y + \vec{v} \times \vec{B})$$

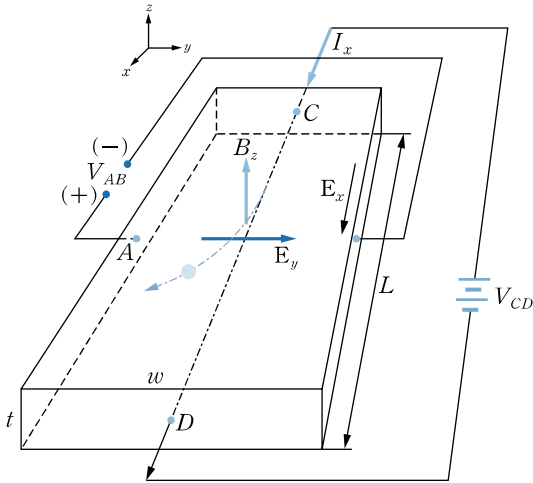
으로 알 수 있듯이 정공은 $-y$ 방향 힘을 받는다. 즉,

$$F_y = q(E_y - v_x B_z) \quad (2.43)$$

이다. 이에 대응하여 정공의 정상적 흐름(직선)을 유지하기 위해 즉, $F_y = 0$ 을 위해 $E_y = v_x B_z$ 가 생성되어야 한다. 물리적으로 E_y 의 생성은 정공이 약간 편향될 때 이를 제거하기 위해 발생하는 것으로 설명된다. 다음 식 전개를 통해 홀계수를 결정할 수 있다. 즉, 홀계수는 전하량과 (정공)농도 곱의 역수임을 알 수 있다.

$$E_y = v_x B_z, \quad J_x = p_o q v_x \rightarrow v_x = \frac{J_x}{p_o q} \quad (2.44)$$

$$E_y = \frac{1}{q p_o} J_x B_z = R_H J_x B_z, \quad R_H = \frac{1}{q p_o} \quad (2.45)$$



[그림 2-35] p형 반도체 봉에서의 홀효과

길이 방향으로 V_{CD} 를 인가하고 수직 방향으로 자속밀도 B_z 를 인가한 경우의 홀전압 V_{AB} 가 생성된다.

- 다수캐리어 농도 p_o 의 결정 : 홀계수 R_H 또는 측정된 기전력 V_{AB} 로부터 얻는다.

$$p_o = \frac{1}{q} \frac{1}{R_H} = \frac{1}{q} \frac{J_x B_z}{E_y} = \frac{(I_x / wt)(B_z)}{q(V_{AB} / w)} = \frac{I_x B_z}{qt V_{AB}} \quad (2.46)$$

- 비저항 ρ 의 결정

$$\rho = R \frac{wt}{L} = \left(\frac{V_{CD}}{I_x} \right) \left(\frac{wt}{L} \right) \quad (2.47)$$

- 이동도 μ_p 의 결정

$$\mu_p = \frac{1}{qp_o \rho} = \frac{R_H}{\rho} \quad (2.48)$$

- 온도 변화에 따른 홀효과 측정으로부터 [그림 2-31] 및 [그림 2-33]과 같은 온도함수로의 p_o, μ_p 관계를 얻을 수 있다.
- 반도체 형 결정 : n형 반도체의 경우 q 에 $-q$ 를 대입하면, 측정 기전력은 $-V_{AB}$, $-R_H$ 가 얻어진다. 따라서 홀효과 측정을 통해 반도체의 형을 결정할 수 있다.

P가 $10^{17} [\text{atom}/\text{cm}^3]$ 정도로 도핑된 n -Si의 비저항을 구하라. 이때, 이동도는 $\mu_n \approx 700 [\text{V} \cdot \text{s}]$ 이다. 또한, 홀실험에서 $I_x = 1 [\text{mA}]$, $B_z = 1 [\text{kG}] = 10^{-5} [\text{Wb}]$ 일 때, $t = 100 [\mu\text{m}]$ 시료에 대해 홀기전력 V_{AB} 를 구하라.

풀이

n 형 반도체($n_o \gg p_o$)이므로 전도도는 다음과 같이 근사될 수 있다.

$$\sigma \equiv qn_o\mu_n = (1.6 \times 10^{-19})(10^{17})(700) = 11.2 [1/\Omega \cdot \text{cm}]$$

다음과 같이 전도도의 단위는 $[1/\Omega\text{cm}]$ 임을 알 수 있다.

$$\left[\frac{\text{C}}{e \ln} \right] \left[\frac{e \ln}{\text{cm}^3} \right] \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{V s}} \right] = \left[\frac{\text{C}}{\text{s}} \times \frac{1}{\text{V}} \times \frac{1}{\text{cm}} \right] = \left[\frac{\text{A}}{\text{V}} \times \frac{1}{\text{cm}} \right]$$

홀효과 결과식들을 적용하면 비저항, 횡방향 발생 전계, 홀계수는 각각 다음과 같다.

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{11.2} = 0.089 [\Omega \text{cm}]$$

$$E_y = \frac{1}{q\mu_o} J_x B_z = R_H J_x B_z$$

$$R_H = -\frac{1}{qn_o} = -\frac{1}{(1.6 \times 10^{-19} [\text{C}]) \cdot 10^{17} [\text{cm}^3]} = -62.5 [\text{cm}^3/\text{C}]$$

홀기전력 $V_{AB} = w \times \frac{I_x}{wt} \times R_H \times B_z = \frac{R_H}{t} I_x B_z$ 이므로 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\begin{aligned} V_{AB} &= \frac{-62.5 \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{C}} \right]}{100 \times 10^{-4} [\text{cm}]} \cdot 10^{-3} [\text{A}] \cdot 10^{-5} \left[\frac{\text{Wb}}{\text{cm}^2} \right] \\ &= -62.5 \times 10^{-6} \left[\frac{\text{AWb}}{\text{C}} \right] = -62.5 \times 10^{-6} [\text{V}] \end{aligned}$$

참고로, 단위를 정리하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \left[\frac{\text{AWb}}{\text{C}} \right] &= \left[\frac{1}{\text{C}} \right] [\text{N m}] = \left[\frac{\text{N}}{\text{C}} \right] [\text{m}] = \left[\frac{\text{V}}{\text{m}} \right] [\text{m}] = [\text{V}] \\ [\text{H}] &= \left[\frac{\text{N}}{\text{Wb}} \right] = \left[\frac{\text{A}}{\text{m}} \right] \end{aligned}$$



✓ 자속밀도 B의 단위

- MKSA단위계 : $[\text{Wb}/\text{m}^2] = [\text{T}]$
- CGS, Gaussian 단위계 : $[\text{Mx}/\text{cm}^2] = [\text{G}]$
- $1[\text{T}] = 1[\text{Wb}/\text{m}^2] = 10^8[\text{Mx}]/10^4[\text{cm}^2] = 10^4[\text{G}]$
- 자속 단위 : $1[\text{Wb}](\text{MKSA}) = 10^8[\text{Mx}](\text{CGS, Gaussian})$

핵심포인트

- ➡ 반도체에서 전류 밀도는 $J = \sigma E$ 이며, 전도도는 $\sigma = nq\mu_n + pq\mu_p$ 가 된다.
- ➡ 이동도에 영향을 주는 대표적인 산란기구에는 격자 산란과 불순물 산란이 있다. 격자 산란은 고온에서, 불순물 산란은 저온에서의 주된 산란기구이다.
- ➡ 반도체에 전계를 인가하면 캐리어의 표동 속도는 선형으로 증가하다가 평균 열적 속도 부근에서 포화된다. 반면에 GaAs 등의 일부 화합물 반도체는 포화되지 않고 오히려 속도가 감소하는 영역이 존재하는데, 이를 건효과라 한다.
- ➡ 전류가 흐르는 반도체에 전류와 수직 방향으로 자계를 인가하면 전류·자계의 수직 방향으로 전계가 나타나는 현상을 홀효과라 한다. 이 효과를 이용해서 반도체의 형뿐만 아니라 전류를 운반하는 전자(또는 정공) 농도, 이동도, 비저항, 전도도 등을 측정할 수 있다.

Chapter 02 연습문제

2.1 Ge, Si 등의 IV족 원소 반도체와 III-V족, II-VI족 화합물 반도체가 첨가 불순물에 따라 n 형 또는 p 형이 되는 것을 설명하라.

2.2 Si 결정($\epsilon_r = 11.8$, $m_n^* = 0.19m_0$)의 도너 결합에너지를 하이드로젠 궤도 모델을 이용하여 근사적으로 구하라. 또한, 도너 주위의 전자 궤도반경을 구하라.

힌트 보어모델의 결과식을 이용한다.

2.3 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 반도체의 x 조성비에 따른 에너지 밴드의 변화를 $E-k$ 다이어그램을 이용하여 설명하라.

(a) $x = 0$ 인 경우, $x = 1$ 인 경우에 대한 각각의 $E-k$ 다이어그램을 전도대의 valley 3개를 포함하여 그려라.

(b) $x = 0 \sim 1$ 에 대한 valley의 변화를 보여라.

힌트 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 는 통상적으로 $x = 0 \sim 0.38$ 이내에서 발광 반도체 소자로 이용한다. GaAs와 AlAs의 실온에서의 에너지 밴드갭은 각각 1.43[eV], 2.16[eV]이다.

2.4 다음 물음에 답하라.

(a) 자유전자에 대한 $E-k$ 관계식을 고전적 운동에너지의 방정식으로부터 유도하라.

(b) 반도체 결정 내에서의 $E-k$ 다이어그램의 생성 원리를 논리적으로 설명하라.

(c) 그리고 (b)를 이용하여 직접천이 및 간접천이 반도체를 비교하라.

2.5 볼츠만상수 $k(= 1.38 \times 10^{-23} \text{J/K})$ 를 적용한 절대온도 T 에 대한 평균 열에너지 $E = kT$ 이다. $T = 300 \text{K}$ (실온)에 대한 열에너지가 0.0259[eV]임을 증명하라. 또한 100°C에 대한 열에너지를 구하라.

2.6 페르미-디랙 분포함수를 기술하고 페르미 준위를 정의하라.

- 2.7 As이 $10^{15} [\text{/cm}^3]$ 도핑된 Si에 대해, 외인성 반도체의 다수캐리어 농도에 대한 온도 의존성을 설명하라.
- 2.8 반도체 결정 내의 대표적 산란기구인 불순물 산란과 격자 산란으로 이동도의 온도 의존성을 설명하라.
- 2.9 [그림 2-35]에서 반도체 봉의 $w = 0.1 [\text{mm}]$, $t = 2 [\mu\text{m}]$, $L = 5 [\text{mm}]$, $B = 10 [\text{kG}]$, $I = 1 [\text{mA}]$ 가 그림과 동일하게 주어졌을 때 $V_{AB} = -2 [\text{mV}]$, $V_{CD} = 100 [\text{mV}]$ 이었다. 이 봉의 타입과 다수캐리어의 이동도를 구하라.