

비정질규소 전기전도도에서 Meyer-Neldel 규칙의 유도

윤 병 국

물 리 학 과

(1984. 9. 30 접수)

〈요 약〉

두가지 가정으로부터 수소가 첨가된 비정질규소의 전기전도도에서 Meyer-Neldel 규칙을 유도했다. 그 가정은 온도에 따라 페르미준위가 선형으로 변한다는 것과 활성화에너지 E_a 의 온도에 대한 상대적인 변화율이 페르미준위의 위치 즉 E_a 의 크기에 관계없다는 것이다.

Semi-empirical Derivation of Meyer-Neldel Rule of a-Si:H

Yoon, Byung Gook

Department of Physics

(Received September 30, 1984)

〈Abstract〉

Meyer-Neldel Rule for the conductivity of a-Si:H is derived semi-empirically with following assumptions: Linear statistical shift of Fermi energy with temperature and that the fractional derivative of E_a with temperature is a constant.

I. 서 론

수소가 첨가된 비정질 규소(a-Si:H) 박막의 전기 전도도 $\sigma = \sigma_0 \exp(-E_a/kT)$ 의 σ_0 값에 log를 취해서 활성화에너지 E_a 의 값과 더불어 그래프를 그리면 직선이 나타난다. (그림 1 참조) 즉,

$$\sigma_0 = \sigma_{00} \exp(AE_a)$$

로 쓸 수 있고 A 는 상수로 대개 $14 \sim 27 \text{eV}^{-1}$ 인 것으로 알려져 있다. 이를 Meyer-Neldel 규칙이라 한다. (1) 이는 E_a 를 doping에 의해서, 또는 강한 빛을 쬐 때의 Staebler-Wronski 효과에 의해서 변화시킬 때 등 여러가지 경우에 적용된다. (2,3)

본고에서는 몇가지 가정하에서 Meyer-Neldel 규칙을 유도해 본다. (이하 M-N 규칙이라 함)

II. Meyer-Neldel 규칙의 유도

비정질규소의 mobility edge E_c 와 페르미준위

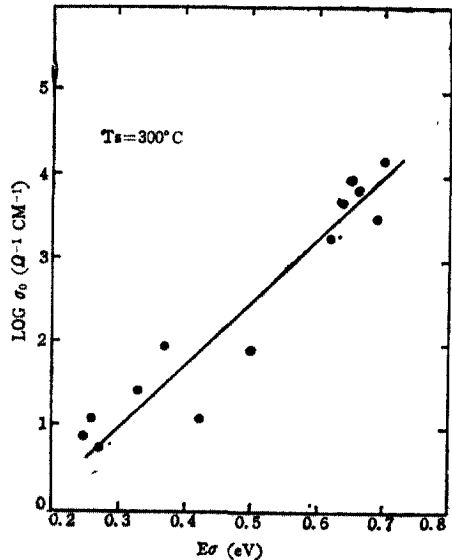


Fig. 1. The exponential prefactor of conductivity versus conductivity activation energy E_a for doped a-Si:H films.

E_F 는 들다 온도에 따라 변한다. 즉 optical gap 이 온도에 따라 선형으로 변하므로 E_c 와 E_F 의 변화를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} E_c &= E_{c0} - \gamma_c T \\ E_F &= E_{F0} + F(T) \end{aligned}$$

여기서 γ_c 는 양의 상수이고 E_{F0} 는 온도 $T=0$ 에서의 페르미준위이고 $F(T)$ 는 상태밀도에 관계된다. 그러면

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_{00} \exp[-(E_c - E_F)/kT] \\ &= \sigma_{00} \exp\left(\frac{\gamma_c}{k}\right) \exp\{-[E_{c0} - E_{F0} - F(T)]/kT\}. \end{aligned} \quad (2)$$

따라서 외견상의 활성화 에너지는

$$E_\sigma = -\frac{d(\log \sigma)}{d(1/kT)} = E_{c0} - E_{F0} - F(T) + T \frac{dF}{dT} \quad (3)$$

이고

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_{00} \exp\left[\frac{\gamma_c + \frac{dF}{dT}}{k}\right] \\ &\cdot \exp\left[-\frac{E_{c0} - E_{F0} - F(T) + \frac{dF}{dT} T}{kT}\right] \end{aligned}$$

로 다시 쓸 수 있으므로

$$\sigma = \sigma_{00} \exp\left[\frac{\gamma_c + \frac{dF}{dT}}{k}\right] \quad (4)$$

이다.

한편 원래의 E_σ 는 $E_\sigma = E_{c0} - E_{F0} - \gamma_c T - F(T)$

이므로

$$\frac{dE_\sigma}{dT} = -\left(\gamma_c + \frac{dF}{dT}\right)$$

로부터

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= \sigma_{00} \exp\left(\frac{\gamma_c + \frac{dF}{dT}}{k}\right) = \sigma_{00} \exp\left(-\frac{dE_\sigma}{dT}/k\right) \\ &= \sigma_{00} \exp\left(\frac{\gamma_c + \frac{dE_F}{dT}}{k}\right) \end{aligned} \quad (5)$$

를 유도할 수 있다. (5)식의 E_σ 는 원래의 E_σ 임에 주목해 둔다.

이제 $E_c - E_F$ 가 0.6eV 보다 작은 영역 즉 상태 밀도가 E_c 에서부터 감소하고 있는 영역에서 $M-N$ 규칙을 유도하기 위해 다음과 같은 두가지 가정을 한다.

① E_F 는 doping, light soaking 등과 온도에 의해 변하는데 보통과 같이 온도에 따라 선형으로 변

한다고 가정하고 다음과 같이 둔다.

$$E_F(T, \xi) = E_F(O, \xi) + \gamma_f(\xi)T \quad (6)$$

여기서 ξ 는 doping 이나 빛에 의한 E_F 의 이동을 표시하는 parameter 라 본다. 우리가 관심이 있는 에너지영역에서 γ_f 는 음수이다. 이 가정에 의하면

$$E_\sigma(T, \xi) = E_\sigma(O, \xi) - \gamma_i(\xi)T \quad (7)$$

$$\gamma_i(\xi) = \gamma_c + \gamma_f(\xi)$$

$$E_\sigma(O, \xi) = E_c(O) - E_F(O, \xi)$$

로 표시될 수 있다.

② $\gamma_i(\xi)/E_\sigma(O, \xi)$ 는 여기서 ξ 와 관계없이 거의 상수이다.

즉,

$$E_\sigma(T, \xi) = E_\sigma(O, \xi) \left[1 - \frac{\gamma_i(\xi)}{E_\sigma(O, \xi)} T\right] \quad (8)$$

이므로, 이는 온도에 대한 E_σ 의 상대적인 변화율은 E_F 의 위치에 관계없이 거의 같다는 말로, 실험적으로 검증되어야 하지만 충분히 있음직한 일이다.

위의 ①과 ②를 가정하고 $\gamma_i(\xi)/E_\sigma(O, \xi) \equiv A \cdot k$ 라 두자. A 는 상수이고 k 는 볼츠만 상수이다. 그러면 (8)식은

$$E_\sigma(T, \xi) = E_\sigma(O, \xi)(1 - AkT) \quad (9)$$

이 된다. 이때 (5)식에 의해

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= \sigma_{00} \exp\left(-\frac{dE_\sigma}{kdT}\right) \\ &= \sigma_{00} \exp[AE_\sigma(O, \xi)] \approx \sigma_{00} \exp(AE_\sigma) \end{aligned}$$

로 $M-N$ 규칙이 유도된다.

III. 검토 및 결론

이 유도에서 문제가 되는 것은 가정들의 타당성이다. ①은 보편적으로 반도체 페르미준위의 statistical shift에서 많이 쓰이는 가정이며 이 경우 별 무리가 없다. 가정 ②는 아마도 약간의 오차가 있을 것이다. 그러나 이를 가정함으로써 $M-N$ 규칙이 바로 유도되므로 $M-N$ 규칙이 실험적으로 증명되고 있는 한 이 가정은 근거가 있다고 볼 수 있다. 더우기 $M-N$ 규칙 자체가 데이터에 흩어짐(scattering)이 많으므로 그 흩어짐의 큰 이유는 가정 ②가 얼마만큼 맞는가의 여부에 있다고 보아도 좋을 것 같다.

이상 문고에서는 두가지 가정에 의하여 $M-N$ 규칙을 수직적으로 유도하여 보았다. 이 결과의 가정에 대한 검증이 앞으로의 과제라 하겠다.

Reference

1. H. Fritzsche, Solar Energy Materials **3**, 447(1980); J. Jang Ph.D. Thesis, KAIST
2. W.E. Spear, D. Allan, P.G. LeComber and A. Ghaith, Phil. Mag. **B41**, 419 (1980)
3. H. Overhof and W. Beyer, Phil. Mag. **B47**, 377 (1983)