

진공증착된 비정질 규소의 상태밀도 결정

이 주 열
재 료 공 학 과
(1981. 4. 10 접수)

〈요 약〉

진공증착된 비정질 규소는 Plasma deposition 에 의해 제작된 시료보다 gap 内에 局在化된 defect states 가 많기 때문에 상온의 전기 전도도(σ_{RT})가 크다. gap 内의 상태밀도, $N(\epsilon)$, 가 field effect 실험에 의해 $0.4\text{eV} < (\epsilon_c - \epsilon) < 0.9\text{eV}$ 의 에너지 영역에서 결정되었다.

진공증착된 비정질 규소의 $N(\epsilon_f) - \epsilon_f$ 는 Fermi 준위—가 $10^{18}\text{cm}^{-3}\text{eV}^{-1}$ 로 plasma deposition 에 의해 제작된 시료보다 크게 나타났다. hydrogenation 된 시료는 $N(\epsilon)$ 가 낮게 나타났는데 $T_H=350^\circ\text{C}$ 에서 가장 작았다. $N(\epsilon)$ 는 저온에서 variable range hopping 의 여러가지 이론적인 모형에 대한 결과의 分析에 사용되었다.

Determination of the Density of states of the vacuum evaporated a-Si

Rhee, Joo Yull

Dept. of Materials Science

(Received April 10, 1981)

〈Abstract〉

The room temperature conductivity (σ_{RT}) of the evaporated a-Si is higher than that of the plasma deposited one, because of the many localized defect states in the gap. The density of states in the gap, $N(\epsilon)$, was determined in the energy range $0.4\text{eV} < (\epsilon_c - \epsilon) < 0.9\text{eV}$ using the field effect experiment. $N(\epsilon)$ of the evaporated a-Si, where ϵ_f is Fermi level, was about $10^{18}\text{cm}^{-3}\text{eV}^{-1}$ and was larger than that of plasma deposited sample. $N(\epsilon)$ was lowered by the hydrogenation and was minimized at $T_H=350^\circ\text{C}$. The knowledge of $N(\epsilon)$ was used in the analysis of the results of the variable range hopping at low temperature using various theoretical models.

I. 서 론

비정질 반도체는 그 mobility gap 内에 많은 localized defect states 를 갖고 있는데, 이는 정사면체 구조가 깨지거나 일그러지면서 생긴다. 이 localized states 에 대한 정보는 다른 여러 실험결과—주로 전하수송체 전달현상—를 분석하는데 매우 중요하다.

1972년 Spear et. al.^{1),2),3)}은 plasma deposition

으로 제작한 a-Si의 상태밀도 함수를 field effect 실험을 이용하여 구했다.

본 실험은 진공증착으로 제작한 a-Si 박막에 대해 field effect 실험을 행하여 상태밀도함수를 구했다. data 분석은 참고문헌 1)의 방법을 따랐다. 또 저온에서 variable range hopping (vrh)의 여러가지 모형들, 즉 Mott⁴⁾의 $T^{-1/4}$ 법칙에 대해 전기전도도의 pre-exponential term 이 각각 $T^{-1/2}$, $T^{-1/4}$, $T^{-0.35}$ ⁵⁾에 비례한다고 주장하는 모형들에 대한 검증은 Fermi 준위 근처의 상태밀도로 부터 실시했다.

II. 시료제작 및 실험방법

1. 시료제작

고순도(6N)의 다결정 Si를 Perkin-Elmer Ultek Model MX-14 ion-pump system을 이용하여 고진공($<10^{-7}$ torr)을 유지하면서 corning 2948 slide glass에 증착시켰다. 두께는 Fizeau Fringe를 이용하여 측정하였다. 증착시 substrate는 350°C 정도로 가열하였으며, 증착후 수소분위기($200\sim 400\text{m Torr}$)속에서 glow 방전시켜 hydrogenation시켰다. 각 시료에 대한 제작조건이 Table.1.에 나타나 있다.

Table.1. 시료제작 조건

시료 번호	$P_b(10^{-7}\text{ torr})$	$P_c(10^{-7}\text{ torr})$	$T_H(^{\circ}\text{C})$	$\sigma_{RT}(\Omega^{-1}\text{cm}^{-1})$	두께(μm)	증착속도($\text{\AA}/\text{sec}$)
1	≤ 2.7	≤ 6.4	250	1.67×10^{-6}	1.0	1.4
2	≤ 1.5	≤ 1.5	300	6.9×10^{-6}	.45	.63
3	≤ 2.7	≤ 5.6	350	1.79×10^{-7}	.35	.5
4	≤ 2.7	≤ 5.6	400	9.00×10^{-6}	.35	.5

P_b : base pressure
 P_c : coating pressure

2. Field Effect 실험

dielectric은 mylar(두께 $25\mu\text{m}$) 혹은 mica(두께 $50\mu\text{m}$)를 사이에 두고 stainless steel plate와 a-Si를 Tetlon 판으로 mechanical하게 압착시켰다. (Fig.1). Field voltage V_F 는 Hewlett-Packard 6516A d.c. power supply로 50V씩 증가시키면서 specimen current i 를 측정하였다. 전류는 Keithley 616 electrometer로 측정했다. 전류값이 극히적으므로 모든 실험은 shielding box 안에서 실시됐다.

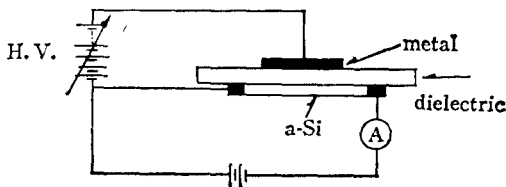


Fig.1 Field effect sample configuration.

3. 전기전도도

D.C. four probe 방법을 이용하여 -130°C 에서

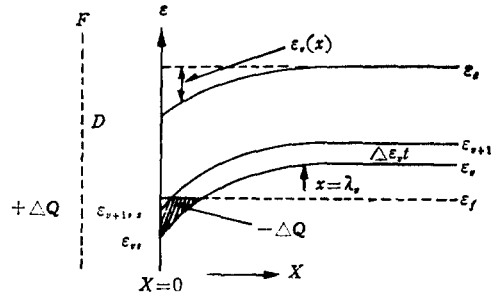


Fig.2 Schematic diagram of band structure used in field effect experiment.

150°C 까지 온도를 변화시키면서 전기전도도를 측정하였다.

III. 결과 및 논의

Fig.3과 4에 field voltage V_F 에 따른 specimen current i 가 각 시료에 대해 나타나 있는데 V_F 의 증가에 따라 i 도 증가한 것은 그 전하수송체가 전자임을 알수있다. 이것으로 보아 undoped a-Si은 n-type임을 알수있는데, a-Si이 형성될때 dangling bond가 많이 형성되어 상당수의 자유전자가 생기기 때문이다.

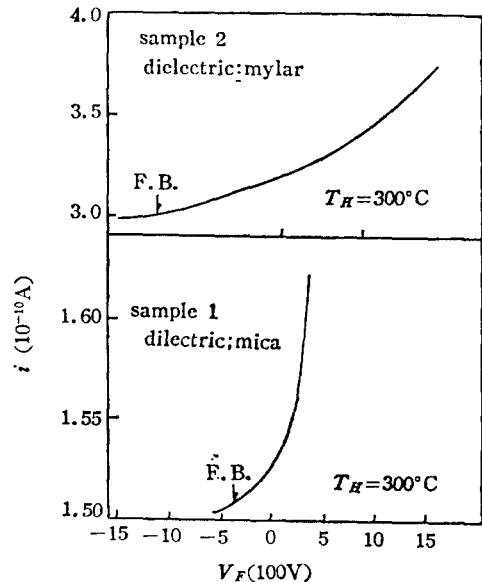


Fig.3 The dependence of the specimen current i on the applied field potential V_F .

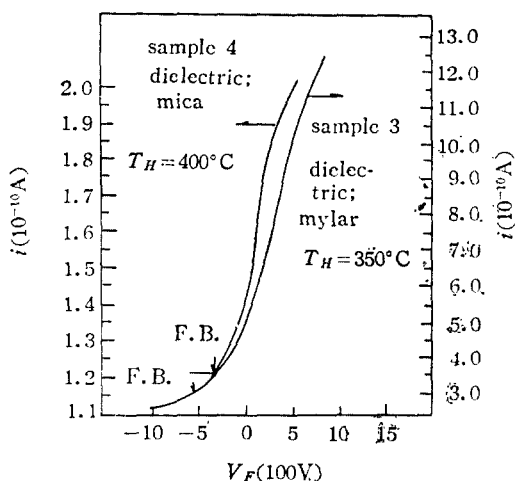


Fig. 4 The dependence of the specimen current i on the applied field potential V_F .

Fig. 2와 같은 band diagram 으로부터 Fig. 3과 Fig. 4의 data 를 前記한 참고문헌 1)의 방법으로 분석하여 Fig. 5와 같은 상태밀도함수 $N(\epsilon)$ 를 얻었다.

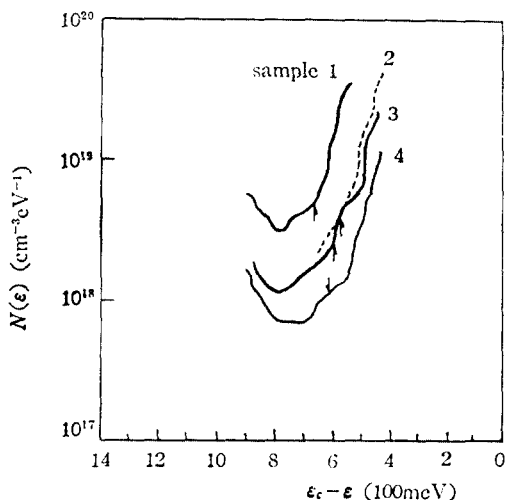


Fig. 5 Density of state distribution. Fermi level is indicated by the arrow.

Fermi준위 근처에서 대략 $N(\epsilon_F) \sim 10^{18} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ 인데 이는 Plasma deposition 으로 제작한 시료보다 매우 크다. ($\sim 10^{17} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$)

V_F 의 변화에 따른 i 의 변화가 작은 것은 진공증착 시료가 증착시 많은 defect를 갖게 되므로 localized state가 많아져서 field voltage가 증가해도 band

의 휨는 정도가 매우 작기 때문이다. 이것은 상온의 전기전도도가 진공증착 시료의 경우 매우 크게 나타나는 것보다도 잘 일치한다. 이 localized states를 줄이는 방법으로 수소화(hydrogenation)를 시켰는데 이는 surface states의 영향을 없애는데도 필수적인 것이다. 원자상태의 수소는 a-Si속에 확산되어 들어가 dangling bond를 채우게 되므로 gap内的 localized states를 줄인다.

Fig. 5에서 시료 3($T_H=350^\circ\text{C}$)이 가장 작은 $N(\epsilon)$ 를 나타낸 것은 350°C 에서 수소화가 가장 잘되었다는 J. Jang et al⁷⁾의 결과와 잘 일치한다.

Madan et. al.²⁾은 gap의 中央부근에서 $N(\epsilon)$ 가 극소치가 되고, $(\epsilon_c - \epsilon) = 0.4\text{eV}$ 에 peak가 나타났다고 하였는데 진공증착 시료역시 gap의 中央부근에서 극소값을 갖고 있으나 0.4eV 근처의 peak가 있는지는 확인하지 못했다.

N. B. Goodman et. al⁸⁾은 Madan et. al²⁾의 결과를 가지고 computer iteration method를 써서 $N(\epsilon)$ 를 재조정하였다. 이것은 Fig. 2의 band bending 형태를 schottky barrier로 사용하여 많은 오차의 원인을 갖고 있기 때문이다.

Fig. 6에 Sample. 2.의 전기전도도가 온도변화에 따라 나타나있고 ($\Delta E = 0.59\text{eV}$, ΔE : activation energy), Fig. 7는 이중 저온에서의 data를 여러가지 vrh모형에 대해 나타냈다.

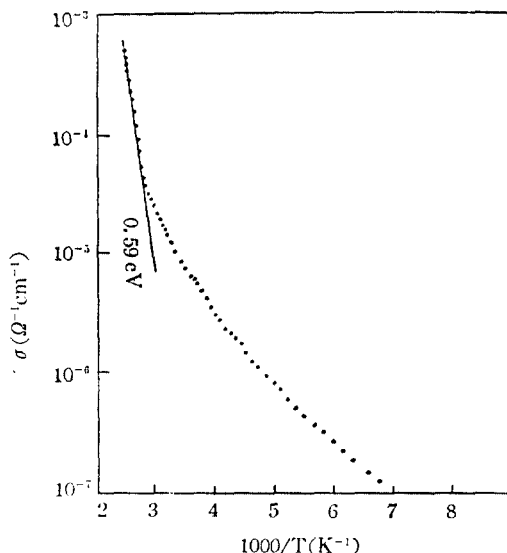
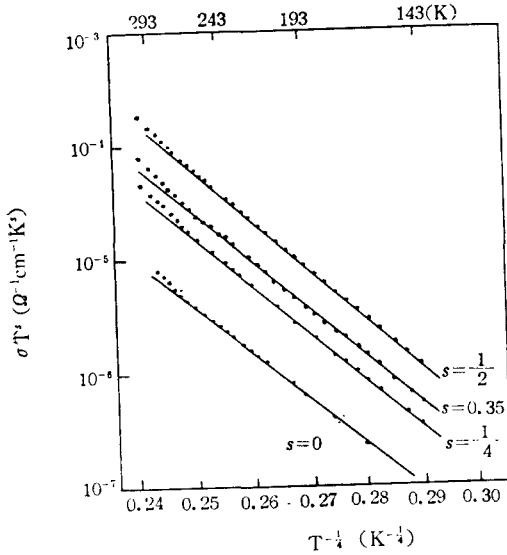


Fig. 6 Conductivity of sample 2 as a function of a reciprocal absolute temperature.

Table 2. $\sigma_0(T)$ 의 온도 의존도에 따른 세가지 이론

	$\sigma_0(T)$	T_0
Mott ⁴⁾ $s = \frac{1}{2}$	$\frac{16e^6 E_1^2}{576\pi^3 \kappa^2 \rho v^5 \hbar^4} \left(\frac{2\pi\alpha^3}{N_f k_B T} \right)^{1/2}$	$\frac{512}{9\pi} \frac{\alpha^3}{k_B N_f}$
Pollak ⁵⁾ $s = \frac{1}{4}$	$\frac{128\pi e^6 E_1^2 \alpha^4}{702\kappa^2 \rho v^5 \hbar^4} \left(\frac{\alpha}{N_f k_B T} \right)^{1/4}$	$\frac{60}{\pi} \frac{\alpha^3}{k_B N_f}$
Kirkpatrick ⁶⁾ $s = 0.35$	$\frac{0.022 E_1^2}{\rho v^5 \hbar^4} \left(\frac{2e^3}{3\kappa} \right)^2 \left(\frac{60\alpha^3}{\pi N_f k_B T} \right)^{0.35}$	$\frac{60}{\pi} \frac{\alpha^3}{k_B N_f}$

E_1 : deformation potential of Si
 ρ : mass density of Si
 v : sound velocity of Si
 κ : dielectric constant of Si

Fig. 7 σT^s as a function of $T^{-1/4}$ Table 3. 각 모형에 대한 α^{-1}

모형	$T_0(K)$	$\sigma_0(\infty) T^s (\Omega^{-1} \text{cm}^{-1} \text{K}^s)$	① $\alpha^{-1}(\text{\AA})$	②
$S = \frac{1}{2}$	1.05×10^8	3.18×10^{13}	8.13	5.51
$S = 0.35$	8.24×10^7	3.74×10^6	8.98	31.4
$S = \frac{1}{4}$	7.49×10^7	1.86×10^9	9.27	26.3
$S = 0$	1.00×10^8	2.08×10^4	8.26	

(① T_0 로부터 ② $\sigma_0(\infty) T^s$ 로부터 계산한 것임)

hopping 전기전도도 σ_H 는

$$\sigma_H = \sigma_0(T) \exp\{-[T_0/T_0^{1/4}]\}$$

이므로 Fig. 7로부터 각 모형에 대해 T_0 를 구하고

이것으로부터 localization factor α^{-1} 을 여러 모형에 대해 구했다.

Table 3에서 보면 Mott⁴⁾의 이론이 가장 잘 맞았다. 다른 두 이론에 의한 α^{-1} 의 계산값은 서로 많은 차이가 있으나 $S = \frac{1}{2}$ 일때의 두계산값이 잘 일치하므로 $\sigma_0(T)$ 는 $T^{-1/2}$ 에 비례하는 것을 알 수 있다.

IV. 결 론

진공증착된 a-Si의 $N(\epsilon)$ 를 field effect 실험으로 구했다. Fermi 준위 근처 상태밀도는 $10^{18} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ 로 plasma deposition으로 제작된 시료에 비해 매우 크다. 즉 진공증착된 a-Si은 plasma deposited a-Si보다 많은 defect를 갖고 있다.

이 defect states는 수소화하므로 해서 상당히 감소시킬 수 있었다. 수소화할때 substrate temperature를 350°C 로 유지하는 것이 가장 작은 $N(\epsilon)$ 를 나타냈다.

저온에서 전기전도도-주파수 vrh에 의한 것임-의 pre-exponential term은 $T^{-1/2}$ 에 비례한다.

참 고 문 헌

1. W.E. Spear and P.G. Lecomber "J. Non-Cryst. Solids" 8-10, 727(1972)
2. A. Madan, P.G. Lecomber, and W.E. Spear "J. Non-Cryst. Solids" 20, 239, (1976)
3. A. Madan and P.G. Lecomber Proc. 7th Int. Conf. on Amor. and Liq. semicond. ed., W.E. Spear. (CICL Univ. of Edirburgh

- 1977), p. 377.
4. N.F. Mott, *Phil. Mag.* **19**, 835, (1969).
 5. M. Pollak, "J. Non-Cryst. Solids." **11**, 1. (1972)
 6. M.S. Kirkpatrick, *Amor. and Liq. Semicond.* eds, J. Stuke and W. Brenig. (Taylor and Francis, London, 1974) p. 183.
 7. J. Jang and C. Lee., *New Phys.* **19**, 162 (1979).
 8. N.B. Goodman and H. Fritzsche. *Phil. Mag* **42**, 149, (1980)