

양자역학적 원자 및 분자 구조 분석에 의한 정공의 이동 불가능성과 운반자로서의 주도 전자에 관한 이론

주 정규

한국과학기술원

서울특별시 서대문구 연희 1동 520-147번지

A Theory on the Impossibility of the Moving for Hole and the Primary Electron as a Carrier using the Analyses, by Quantum Mechanics, of the Structure of Atoms and Molecules

Jeong Kyu, Joo

KAIST

520-147, YeonHee 1Dong, SeoDaeMunGu, Seoul in Korea

ABSTRACT

In this theory, we explained the impossibility of the motion or moving of the hole that has been recognized to be a carrier, by giving some fundamental reasons. We treated energy gap and impurity concentration, in p- and n-type region, as functions of the mobility that is one of the factors which determine current quantity, and analyzed the primary electron theory as a carrier by introducing 2 hypotheses.

I. 서론

금속의 양편에 양(+)/음(-)극에 전압을 가하면, 음전하인 전자가 양극으로 이동하는 것은 양전하가 음극으로 이동되는 것에 해당하므로 이때에 흐르는 전류를 왼쪽으로 이동하는 음전하의 전자로 생각하지 않고, 오히려 오른쪽으로 이동하는 양공(positive hole)에 의한 것이라고 생각한다.^[1]

본 이론에서는 관습적으로 내려오는 이 개념을 타파하려는 것이 아니라 양자 역학과 고전 물리학 양측 모두에서 위배될 수 없는 사실에 입각, 정공의 운동성에 관련하여 해명될 수 없는 몇 가지 사항을 제시하고 운반자(carrier)로서의 전자 주도 이론에 관한 설명을 하는데 그 목적이 있다.

본론으로 들어가서 첫 번째로 기존의 정공 관련 반도체 이론을 의미하는 일반적인 정공이론에 대해 언급하였고, 두 번째 소 제목에서는 이동경로와 산란사상과 관련하여 정공이 운반자(carrier)가 될 수 없는 궁극적인 원인을 제시하였으며, 마지막 세 번째 절에서는 캐리어로서의 전자 주도 이론을 p형과 n형 반도체의 에너지 갭과 불순물 량의 이동도에의 기여를 중점으로 나름대로 합리적인 2가지 가설을 도입하여 고찰하였다.

지극히 제한된 지면 관계로 핵심적인 사항만을 기재하

였기 때문에 세부적인 설명은 발표 시와 추후 논문을 통해 약속할 수밖에 없다.

II. 본론

1. 정공 이론

1)p형 및 n형 반도체

B는 3가이기 때문에 4가인 Si와 결합 분자를 형성한 후에는 1개의 빈 준위(empty state)를 남기게 되며 이러한 이유로 B-Si 결합 관계로 이루어진 반도체를 p형이라 하고, 반면 5가인 P은 Si과의 결합 후에 잉여 전자 1개를 제공하기 때문에 P-Si 결합으로 이루어진 반도체는 n형이라 부른다. p형 반도체의 경우, 1개의 전자가 부족한 빈 준위를 남기게 되는데 전자와 반대되는 극성을 가지고 있기 때문에 이를 특별히 정공(hole)이라 명명한다.^[2]

2)일반적인 정공이론

①Si 반도체의 공유 결합 관계

Si-Si 결합은 VII족인 할로젠 원소와 I족 원소인 알칼리 금속의 정전기적인 상호작용(coulombic interaction)의 결과인 이온 결합(ionic bonding)과는 달리 양쪽 원자에 의한 전자의 공유로 해석되는 공유 결합(covalent bonding) 분자를 형성하며 이 경우에도 여전히 파울리의 배타원리(exclusion principle)^[3]에 위배되지 않는다.

②전자-정공 쌍의 생성과 재결합

Si 격자의 빈 준위에 포획(capture)된 전자가 외부로부터 에너지 갭을 극복할 수 있는 열적 에너지를 제공받으면 가전자대에서 전도대로 여기 되며 이때 가전자대에는 1개의 정공이 생성되는데 이를 전자-정공쌍(EHP)이라 한다. 전도대로 여기된 전자가 외부로부터 추가적인 에너지(예를 들면 전압 공급)를 공급받지 못하면 곧 에너지를 소실하여 다시 가전자대의 빈 준위로 복귀하는데 이 과정에서 전자와 정공의 재결합(recombination)이 이루어진다.^[4]

이 시점에서 정공(1) = 빈 준위(1/2) = 빈 궤도(1/2)는 모두 동일한 개념이기 때문에 본 이론에서 설명 중의 용어는 필요에 따라 적절히 선택하여 사용한다는 점을 밝혀 둔다.

2. 운반자로서의 정공의 이동 불가능성

1) 정공의 이동 경로

전자가 낮은 준위에서 높은 준위로 천이할 때 높은 준위에 있던 정공이 낮은 준위로 이동한다는 것이 정공 이론에 따른 원자 내에서의 첫 번째 정공의 운동이다. (그림 1(a)) 두 번째로 가전자대와 전도대에서의 전자의 여기 및 재결합과 관련된 정공 움직임에 관련하여 전도대에서는 정공이 존재할 수 없는 영역이기 때문에 그 운동을 생각할 수 없다고 단정지을 수 있다. 마지막으로 정공의 원자-원자간 이동으로 채워진 준위를 갖는 원자의 전자가 빈 준위를 가진 원자로 이동할 때, 정공은 두 번째 원자에서 첫 번째 원자로 움직인다는 것이다. (그림 1(b)) 여기에서 과연 정공의 움직임이 존재했었다고 생각할 수 있을까?

Si 원자들이 Si-Si 분자 결합을 형성할 때 두 가지 바뀌지 않는 사항이 존재하는데 첫 번째는 원자의 궤도와 같이 분자 궤도의 경우에도 파울리의 배타원리가 적용된다는 것이고, 두 번째는 원자의 궤도와 궤도 사이에 금지 영역(forbidden area)이 있듯이 분자의 궤도와 궤도 간에는 일정한 간격(이 경우는 전도 영역에 해당한다)이 존재한다는 점이다. 그림 2는 두 Si와 B 원자의 공유 결합에 의한 분자의 궤도간 간격을 가시화 한 것이다. 원자 내의 채워진 준위를 떠난 전자가 금지영역을 경유하는 어느 지점에서든 두 준위는 여전히 비어 있는 상태이고 전자가 다른 빈 준위를 채울 때 비로소 두 상태가 바뀔 것이며, (그림 3(a)) 이점은 원자-원자간 전자의 이동에 관련해서도 적용된다. (그림 3(b)) 이것은 정공 이동의 단절과 이동 경로의 부존 재를 의미한다. 모든 운동하는 물질 또는 물체에 대한 경로가 존재하고, 주어진 경로(path)의 모든 질점(elemental point)을 경유하는 특징을 가지며, 이러한 경우에 한해서 운동역학(Kinetics)은 그 실효성을 부여받게 되는 것이다. 이것은 고전 물리학이건 양자 역학이건 간에 예외가 될 수 없다. 이것이 본 이론의 가장 핵심적인 사항이다. 요약하면 전자의 이동은 분명히 존재하고 가시화 할 수 있는 반면 원자 내의 빈 준위에 관련해서건 원자-원자간 운동이건 간에 정공의 이동은 없으며, 따라서 그 운동성 또한 생각할 수 없다.

2) 정공의 산란 효과

Si 기지의 원자와 원자 사이의 빈 공간인 전도대를 통과하는 전자는 유사 사인파적인(sinusoidal)^[5] 거동과 상온 및 외부 바이어스(5[V])로부터 제공되는 열적 에너지에 의한 격자의 Si 원자와 P 및 B 불순물 원자의 진동(vibration)때문에 그 출발점에서 소자의 끝 부분까지 진행할 때 원자와의 산란사상^[6]을 반복한다. 그러나 정공은 빈 에너지 준위 혹은 빈 궤도 자체를 의미하고 원자의 일부가 되기 때문에 진행 캐리어로서의 산란사상과 관련된 효과는 오직 전자와 관련된 것이며, 정공에 대한 산란사상은 존재하지 않으므로 설명될 수 없는 것

이다.

3) 정공의 터널링 효과

p형과 n형 영역을 고농도로 도핑하면 에너지 대역의 차이가 커지거나 혹은 상대적으로 얇아진다. 역 전압이 인가되면 전자는 혹은 더욱 축소되기 때문에 가전자대의 충만된 전자가 동일 영역(p형)의 전도대보다는 반대편(n형)의 전도대로의 직접적인 투과가 가능할 때 전자의 터널링 현상이 발생된다. 반면 전자가 p형의 가전자대에서 n형의 전도대로 터널링되는 사실로부터 정공의 터널링 현상은 전도대로부터 가전자대로 이루어져야 함을 의미하는데 전도대는 정공이 존재할 수 없는 영역이기 때문에 정공의 터널링에 관련된 설명은 불가능한 것이다.

3. 캐리어로서의 전자 주도 이론

1) 산란 자체만으로는 이동도를 설명할 수 없다.

표 1에서 보듯이 P이 3주기 원소인 B보다 크므로 Si와 공유 결합 후에 이 결합($R_{P-Si} > R_{B-Si}$)이 바뀌지 않는다면 격자 진동에 의한 점유 반경 역시 클 것이고 이것은 동일한 불순물 주입의 조건하에서 전도대를 주행하는 전자는 p형보다는 n형 영역에서 산란사상의 빈도수가 더욱 클 것이며, 따라서 산란사상 영향에 의한 전자의 이동도는 p형보다는 n형 영역에서 더 작을 것이라는 점을 예상할 수 있다. 따라서 산란사상 자체만으로는 n형과 p형에서의 이동도를 설명할 수 없다. 이것이 본 이론의 두 번째 중요 사항이다.

2) 이온화에너지, 전자친화력, 그리고 에너지 갭

불순물을 주입하고 열처리과정(annealing)을 거쳐 이온화시킬 때 Si와 결합하는 B의 경우는 전자 1개를 외부로부터 제공받기 때문에 전자친화력이 되며, 그리고 P의 이온화과정에서는 전자를 외부로 떼어낼 때 측정되는 에너지이므로 이온화에너지에 해당한다.^[7] 에너지 갭이 공유결합을 깨는데 요구되는 에너지^[2]로 정의되는 반면 이온화에너지는 한 원소에서 1개의 전자를 이탈시킬 때 측정되는 에너지로 정의되지만 이 두 개념은 동일한 것이다. P-Si 이온화 과정 시에 측정되는 이온화에너지 0.044[eV]는 에너지 갭이 되지만, B-Si가 이온화될 때 관측되는 0.045[eV]은 전자친화력이며 이것은 에너지 갭이 아니다. 표 1에서 보인 물음표(?)는 B-Si 결합에 대한 회복 이온화에너지(에너지 갭)와 P-Si 결합과 관련된 회복 전자친화력을 나타낸 것이다. 이 시점에서 p형과 n형 영역에서의 B-Si 및 P-Si의 각 결합에 대한 이온화에너지인 에너지 갭을 독립적으로 취급할 필요가 있다.

3) 각 결합에 대한 실질적인 에너지 갭

이온화에너지는 곧 에너지 갭이라는 점을 인식하고 p형과 n형 영역에서의 불순물 주입이 동일할 때 기본 5[V]에 대해 Si-Si 결합과 관련된 에너지 갭에 의한 영향은 두 영역에서 동일하다는 가정 하에서 다음과 같은 가설을 세울 수 있다.

가설 1 : p형 반도체의 빈 준위에 포획된 전자에 대한 이온화에너지, ($E_i(p)$)는 Si-Si 결합에 대한 이온화에너지, ($E_i(Si)$)보다는 작고 n형 반도체의 P의 5번째 최 외각 전자에 대한 이온화에너지, ($E_i(n)$)보다는 크며, 전자친화력의 경우도 동일하게 적용된다. 즉,

$E_i(Si) > E_i(p) > E_i(n)$ 과

$E_{ea}(Si) > E_{ea}(p) > E_{ea}(n)$ 으로 나타낼 수 있다.

여기에서 Si-Si 공유결합 전자에 대한 이온화에너지 (1.11[eV]), $E_i(p)$ 는 B-Si 4번째 공유결합 빈 준위에 포획된 전자에 대한 이온화에너지(0.044[eV] < $E_i(p)$ < (1.11[eV])이며, $E_i(n)$ 은 P-Si P의 5번째 전자에 대한 이온화에너지(0.044[eV])이고 두 번째 관계식은 각 결합에 대한 전자친화력이다.

표 2는 주기율표의 선두 18개 원소에 대한 이온화에너지와 전자친화력을 보인 것이다.^[7] 표에서 보듯이 대부분의 원소에 대해 이온화에너지와 전자친화력은 비례하고, 모든 원소에 대해 전자친화력의 크기는 이온화에너지보다는 작다는 것을 알 수 있다. 전자에 관해서 일부 원소의 경우 비례관계에서 벗어나는 것은 s계열과 p계열에 명확한 구분이 존재함을 의미하고, 후자에 관련된 설명을 덧붙이자면 전자친화력의 경우는 자발적(spontaneous), 이온화에너지의 경우는 비자발적 과정의 결과이기 때문이라고 사료된다.

가설 2 : 기본 전압 5[V]는 B-Si의 4번째 빈 준위에 포획된 전자를 채여기시킬 수 있을 만큼 충분히 큰 열적 에너지를 제공한다. 즉, 이 전자에 대한 이온화에너지,

$E_i(p)$ 은 5[V]에 의해 충분히 극복될 수 있다. 정공이론에 의한 p형 반도체에서의 정공의 움직임은 이 채여기에 대한 분명한 증거를 보이는데 그 이유는 기본 전압 5[V]가 이 전자를 다시 여기시킬 수 없다면 전자의 협동적인 거동^[2]에 의한 정공 이동에 대한 설명이 불가능하기 때문이다. 그림 4는 Si 기지와 p형 및 n형 영역에 대한 독립적인 이온화에너지인 실질적인 에너지 갭을 도시한 것이다.

4)에너지 갭과 불순물 농도에 따른 이동도

일단 재결합 과정이 발생한 후에는 가설 2에 의해 전자는 분명히 전도대로 채여기될 것이다. 그림 5는 채여기에 관련한 에너지 갭의 영향을 보인 것이다. 여기에서 에너지 갭이 크면 클수록 재결합 확률은 더욱 크게되는데 이것은 거리의 측면에서 더욱 짧은 지점에서, 그리고 시간적으로는 더욱 빨리 재결합이 이루어진다는 것을 의미하지만 앞에서 설명하였듯이 p형보다는 n형 영역에서 산란의 빈도수가 큰 사실을 고려하여 편의상 그림 중에는 동일한 위치로 정하였음을 밝혀둔다. 한편 그림 중의 합정을 계단(step)으로 나타낸 것은 포획된 전자가 가설 2에 의해 채여기를 위한 충분한 열적 에너지를 제공받을음을 보인 것이다. (a)에서의 출발점과 종착점 사이의 수평거리(A-A')와 (b)의 그것(B-B')은 동일하며(L), n형과 p형의 에너지 갭의 차이는 (a)와 (b)의 합정의 깊이 차를 나타낸 것이다. 수평길이가 동일하기 때문에 합정의 수가 같다면 합정의 깊이가 깊을수록 시간은 분명히 지연될 것이다. 1개의 전자가 소자의 음극으로부터 양극에 도달하는 평균시간(< τ_n >), 혹은 이에 따른 평균속도(< v_d >)는 전적으로 합정1의 깊이에 따라 결정되고, 한편 합정의 수(불순물 양에 의한 빈 준위의 수)

가 증가한다면 전체속도는 분명히 감소할 것이다. 후자에 관련해서는 n형과 p형 반도체 양측 모두에 적용된다. 따라서 동일한 외부 조건에 대해 소자 내를 가로지르는 전자의 소요시간은 전적으로 에너지 갭의 크기와 불순물의 양의 두 함수에 의존한다고 결론지을 수 있다.

주행 전자에 대한 평균 이동도(< μ_n >)는 보편화된 식 ($v_d = -\mu_n E$)을 이용하면 다음과 같이 나타낼 수 있다. $|\langle \mu_n \rangle| = \left| -\frac{\langle v_d \rangle}{E} \right|$. 한편 소자의 길이를 L, 전자가 소자의 끝까지 진행하는데 소요되는 평균시간을 < τ_n >이라 할 때, 이동도는 아래와 같이 표현된다.

$$|\langle \mu_n \rangle| = \left| -\frac{\langle v_d \rangle}{E} \right| = \frac{1}{E} \frac{L}{\langle \tau_n \rangle}$$

소자의 길이와 기본 전압 5[V]에 의한 전계가 일정할 때, $|\langle \mu_n \rangle| \propto \frac{1}{\langle \tau_n \rangle}$ 과 같이 나타낼 수 있는데,

이 식으로부터 p형과 n형 영역에서의 전자의 이동도를 직접 관계시킬 수 있다. p형과 n형 영역에서의 주입되는 불순물의 양이 동일할 때, 재결합 과정을 밟는 전자의 주행시간은 전적으로 에너지 갭에 의해 좌우되는데 에너지 갭의 크기는 가설 1로부터 n형보다는 p형이 크기 때문에, 이는 소요시간이 더욱 길어짐을 의미하고 이동도는 이와 반비례한 관계를 가지므로 더욱 작아질 것이다. ($\mu_n(p) < \mu_n(n)$) 결과적으로 이동도 값은 소요시간과 직접인 관계를 갖기 때문에 불순물 농도와 에너지 갭의 두 요소를 고려해야 한다. 이 부분이 본 이론의 마지막 핵심 사항이다. 에너지 갭과 불순물 농도가 일정할 때 이와 관련한 전자가 소자를 가로지르는데 소요되는 평균시간과 또한 이와 직접적인 관계를 갖는 이동도는 소자가 제작된 후에는 고정된다는 것을 예상할 수 있다.

5)캐리어로써 전자 주도이론의 실제 적용

앞 절에서 설명한 원리에 의해 Hall 효과로부터 가 영역을 주행하는 전자의 이동도 차로부터 p형과 n형을 결정할 수 있고, Schottky(rectifying) 및 Ohmic(tunneling)으로 구분되는 M-S 접촉부에서의 전자 주입만으로 설명이 가능하며, 작아진 MOS 소자의 핫 캐리어 효과(HCE)에 의한 Avalanche 항복 때문에 유기되는 기관 전류(I_{SUB})에 대해서도 항복 영역에 대해 상대적으로 유극으로 대전된 접지로부터의 전자 주입에 의한 전류로 해석이 가능하고, 논리 회로에 응용되는 EPROM의 이중 게이트(double gate)에 의한 전하 축적 또한 전자가 매우 얇은 산화막 층을 터널링할 수 있으며, 게이트의 전압 극성을 바꾸어줌으로써 많은 빈 준위를 제공하는 다결정 실리콘(poly-Si)에서의 전자 포획과 방출에 따른 쓰기(write)와 읽기(read) 원리 등을 설명할 수 있듯이 본 이론은 기존의 설명 및 결과와 위배되지 않는다.

III. 요약

살펴본 바와 같이 원자와 원자 사이의 전도대와 원자

내의 캐드간 금지 영역에 대해 운동역학에 따른 운동 물질의 기본적인 진행 연속성의 원리에 위배된다는 점과 산란사상 및 터널링 현상과 관련된 사항에 대해 기존의 정공 이론으로는 해석될 수 없는 사실로부터 정공의 움직임은 존재하지 않음을 알 수 있었다. 전자의 이동도는 전적으로 에너지 갭(이온화에너지 및 전자친화력)과 불순물 양(빈 준위의 수)에 영향을 받으며 동일한 빈 준위가 제공된 경우에 에너지 갭의 차에 의해 p형보다는 n형 영역에서 이동도가 크다는 것을 알 수 있었다.

IV. 결론

원자 내의 전자 친이 및 가전자대에서의 전자의 여기 및 재결합과 관련해서는 상태 변화를 나타내고, 원자의 최 외각 부분을 구성함으로써 진행 중의 전자에 대해 산란사상에 의한 에너지 소실 과정과 전자가 이 산란으로 인해 충분한 에너지를 소실하였을 때 재결합에 대한 빈 준위를 제공하는 것이 진행 중의 전자에 대한 정공의 기여일 뿐 정공은 결코 캐리어는 될 수 없다. 따라서 원자 내에서의 이동과 소자를 수행하는 운반자는 오직 전자뿐이라고 결론지을 수 있다.

한편 주도 전자 이론에 관련된 전자의 이동도는 산란사상 자체에 대해서는 n형보다는 p형 영역에서 더 크며, 이온화에너지와 전자친화력은 비례하고 언제나 전자(前

者)경우가 크다는 사실로부터 재결합 확률은 p형 영역에서 그리고 재여기 확률은 n형 영역에서 더욱 크다. 이것은 n형보다는 p형 영역에서 이동도가 더 작다는 것을 의미한다. 결론적으로 산란사상과 전자의 재결합 및 재여기 과정을 고려할 때 전체 이동도는 전적으로 후자(後者)에 의해 지배된다는 것을 알 수 있다.

참고 문헌

- [1] Tony Hey and Patrick Walters, "The Quantum Universe", p.107, Cambridge University Press, 1992
- [2] Robert F. Pierret, "Semiconductor Device Fundamentals", p30. Addison Wesley Press, 1990
- [3] Robert F. Pierret, "Semiconductor Fundamentals", Modular Series on Solid State Devices, Vol.1, 2nd Ed., p.24, Addison Wesley Press, 1988
- [4] S. M. Sze, "Semiconductor Devices : Physical and Technology", 2nd Ed., pp.46-58, 회중당, 1991
- [5] E. S. Yang, "Microelectronic Devices", p.11, 회중당, 1992
- [6] B. G. Streetman, "Solid State Electronic Devices", 3rd Ed., pp.90-92, 회중당, 1991
- [7] Robert A. Albert, "Physical Chemistry", 7th Ed., pp.379-381, 심구당, 1992

Table 1. The Variation of Ei and Eea before and after Covalent Bonding in Si-matrix

	Si	B	Si-B	P	Si-P
Ei [eV]	8.15	8.30	?	11.0	.044
Eea [eV]	1.24	0.86	.045	0.77	?
R [pm]	107	77.6	91.9	X	X

Table 2. The Ei and Eea of the First 18 Elements

	H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
Ei [eV]	13.5	24.6	5.4	9.3	8.3	11.3	14.5	13.6	17.4	21.6	5.1	7.6	6.0	8.15	11.0	10.4	13.0	15.8
Eea [eV]	0.8	-0.2	0.6	-2.5	0.86	1.3	0	1.5	3.4	-0.3	0.5	-2.4	0.5	1.24	0.77	2.1	3.6	-0.3

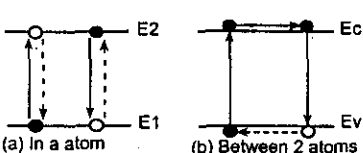


Fig 1. The Moving of the Hole by Classical Hole Theory

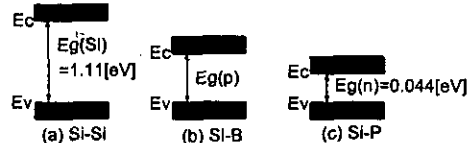


Fig 4. The Practical Energy Gap for the p- & n-type Region

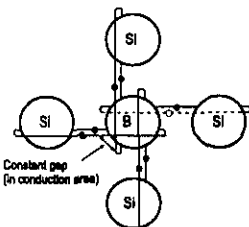


Fig 2. The Structure of the B-Si Bonding

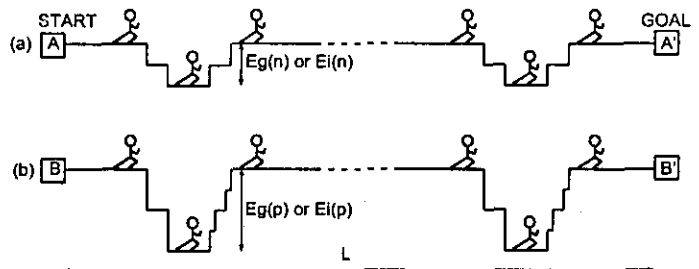


Fig 5. The Influence of the Energy Gap for the Mobility

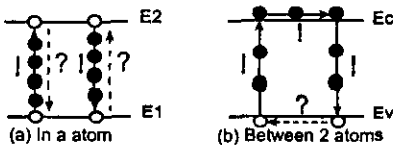


Fig 3. The Explanation for the Impossibility of the Moving Hole