

이 현 우⁰ . 류 강 식** . 김 봉 흠***
 한양대학교 대학원⁰ . 한양대학교 강사** . 한양대학교 교수***

A Study on the Correction of Error Involved in Activation Energies
 Calculated by the Initial Rise Method.

Hyun Woo, Lee⁰ . Kang Sik, Ryu** . Bong Heup, Kim**
 Hanyang University , Electric Engineering Department

1. 서 론

열자극전류 (Thermally Stimulated Current; TSC) 측정법은 이전부터 반도체 분야에서는 에너지 준위를 구하기 위해 이용되어 왔으나, 근래에는 천연체 및 유전체 내에 존재하고 있는 전자(정공). 이온 및 삼극자 등과 같은 하전입자들의 거동을 연구하는 강력한 수단으로 인정되어 그 기본이론과 응용에 관한 내용이 여러 방면에 걸쳐 급속도로 발전하고 있으며, 이와 더불어 TSC 측정에 의해 관측된 특성들을 가지고 하전입자들에 관계된 활성화에너지 및 트랩 에너지 준위의 등을 구할 수 있는 해석법이 많이 제안되고 있다. 이들중에서 Cowell 과 Wood등에 의해 제안된 이래 많은 연구자들에 의해 발전되어 온 Curve Fitting법과 같은 수치해석법은 재료내의 하전입자와 관련된 기본적인 물리량들을 비교적 정확하게 구할 수 있다는 장점이 있으나, 그 알고리즘이 매우 복잡하고 계산시간이 많이 소요된다는 단점이 있다.

그러나 Garlick과 Gibson 에 의해 제안된 초기상승법 (Initial Rise Method)은 Curve Fitting 법보다는 오차가 크다는 단점은 있으나 실험결과로부터 초기상승부분의 TSC값만을 취해 간단하게 활성화와 에너지를 구할 수 있다는 장점때문에 근래에 이르기까지 널리 사용되고 있는 방법이다. 이 방법의 요체는 초기상승부분에서 TSC 피크에 기여하는 트랩된 전하의 수가 변하지 않는다는 가정을 기초로 하기때문에 피크치의 약 10%이하의 부분만을 사용하였을 때만 정확한 값을 구할 수가 있다. 그러나 실험체의 관측된 실험결과에 있어서는 TSC 피크의 약 10%가 되는 초기부분에서의 완화과정이 불안정하기 때문에 보통, 피크의 50%되는 부분까지도 이용하고 있으나, 초기상승법 가정하였던 승온초기부분에서는 이때의 온도 T를 T₀로 보고 적분항을 0으로 가정하였기 때문에 TSC 피크의 어떤 범위의 가치를 승온초기로서 취하는가에 따라 계산된 활성화 에너지에 포함된 오차의 값들도 다를 것이다.

본 연구에서는 피크의 50%까지를 승온 초기로 취해 이때 수반되는 오차를 평가하여 그 값들을 보정하여 줌으로써 초기상승법의 사용범위를 넓히고 보다 더 일반적으로

정확한 값을 구할 수 있도록 하는데 그 목적이 있다.

2. 이론적 고찰

주지하는 바와 같이 TSC는 하전입자의 종류에 따라 발분극 전류와 탈트랩전류로 나누어지며, 여기서의 TSC의 발생기원을 단일완화에 의한 삼극자 및 트랩 전하로 가정하고 이 두 경우에서의 전류식을 개별적으로 정리하여 나타내면

$$I = A \exp\left\{-\frac{E}{kT} - B\right\} \frac{T}{T_0} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dt \quad (2.1)$$

과 같은 형태로 표현된다. 여기서 각 경우에 대한 변수 A, B는 표 2.1과 같으며, E는 발분극에서는 삼극자의 활성화 에너지, 탈트랩에서는 트랩깊이를 의미한다.

표 2.1

| A | Depolarization current $N N_0^2 E_0 / 3 k T_0^2$ | B | Retrapping Current $N_0 T_0 \nu M \gamma E_0$ |
|---|---|---|--|
| B | $1/B_0$ | | ν/B |

이 식(2.1)에서도 알 수 있는 바와 같이 TSC는 많은 변수들로 이루어져 그 식이 매우 복잡하고도 컴퓨터로 Simulation 하기 위해서는 TSC의 발생원인에 따라 각기 다른 해석을 하여야 하는 폐단이 있다, 따라서 이들 발생원인에 구애받지 않는 간단한 식이 요구되는데 이를 위해서는 식(2.1)에서 A와 B를 각각 소거한 식(2.2)와 같은 형태로 만들면 수치계산의 적용이 매우 용이하게 된다.

$$I = I_m \exp\left\{-(t-t_m) - t_m^2 \exp(t_m) (I(t) - I(t_m))\right\} \quad (2.2)$$

여기서 $t = E/kT$, $t_m = E/kT_m$ 이며, $I(t) = \int_t^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t^2} dt$ 이다.

3. 활성화 에너지의 보정에 관한 알고리즘

그림 1은 식(2.2)를 이용하여 $T_m = 300$, $I_m = 100$, $E = 0.9eV$ 일 때 TSC 온도 특성곡선을 도시한 것이며, 그림 2은 이를 Arrhenius plot한 것이다.

지금 TSC 피크에서 취한 각각의 상승부분으로부터 구한 활성화

에너지 값의 오차를 계산하기 위하여 상승부분으로서 취할 수 있는 TSC 피크의 범의(상한치, 하한치)와 t_m 의 변화에 대한 오차를 조사한다.

3.1 피크의 범위

I_2 과 I_1 를 각각 TSC 피크에서 취한 상한치와 하한치라 할 때 피크의 최대치 I_m 과 이들과의 비를 각각 $\delta_1=I_1/I_m$, $\delta_2=I_2/I_m$ 이라 하면, I_1 이 나타나는 온도 T_1 과 I_2 가 나타나는 온도 T_2 의 범위를 20개의 요소로 분할하여 각각에 대해서 초기상승법에 필요한 전류값과 그 발생온도의 데이터를 취하였으며, δ_1 와 δ_2 의 변화는 다음과 같다.

$$\delta_2: 1/2, 1/3, 1/4, \dots, 1/9, 1/10$$

$$\delta_1: \delta_2/5, \delta_2/10, \delta_2/15, \dots, \delta_2/45, \delta_2/50$$

3.2 t_m 의 변화

t_m 은 $1/t_m$ 의 형태로 0.02에서 0.1까지의 범위에서 0.005씩 증기하여 변화시켰으며, 본 연구에서는 편의상 $T_m=300$ K, $I_m=1$ 로 가정하여 t_m 의 변화에 따른 E의 변화를 $t_m=E/KT_m$ 로부터 0.37~2.59의 값으로 하였다. 이 변화의 범위는 같은 t_m 의 변화에서 T_m 에 의해 변화시킬 수 있다.

지금 위에서와 같은 각 경우에 대해서 초기상승법으로 구한 활성화 에너지를 E_1 , 이 때의 전압을 E라 하면 그림 3에서 알 수 있는 바와 같이 전압과 계산값사이의 Err은 $1/t_m$ 과 직선적인 관계가 있으므로

$$Err = (E - E_1) \times 100/E = A - B/t_m \quad (3)$$

과 같이 표현할 수 있으며, 여기서 A는 δ_1 과 δ_2 의 함수로 이루어 진다. 따라서 식 (2.3)으로부터

$$E = A'E_1 - B'KT_m \quad (4)$$

where; $A' = 100/(100-A)$
 $B' = B/(100-A)$

가 얻어진다.

그림 4 (a), (b)는 일정한 δ_1 에서 δ_2 의 값을 변화시켜 구한 A'와 B'를 도시한 것으로서 A'와 B'의 변화와 직선적인 관계를 알 수 있으며, 이로부터 A'와 B'는 각각

$$A' = A_0 + A_1\delta_1 + A_2\delta_2$$

$$B' = B_0 + B_1\delta_1 + B_2\delta_2 \quad (5)$$

과 같이 표현할 수 있다.

결론적으로 오차가 초기상승법으로 구한 오차가 함유된 활성화 에너지의 보정식은 식 (5)를 식 (4)에 대입하면

$$E = (A_0 + A_1\delta_1 + A_2\delta_2)E_1 + (B_0 + B_1\delta_1 + B_2\delta_2)KT_m \quad (6)$$

가 된다. 여기서 $A_0, A_1, A_2, B_0, B_1, B_2$ 는 그림 3의 결과를 식 (5)를 이용해 curve fitting 시켜 얻어진 값들로서

$$A_0 = 0.995836 \quad B_0 = -0.013812$$

$$A_1 = 0.661711 \quad B_1 = -1.555900$$

$$A_2 = 0.094467 \quad B_2 = -0.176232$$

과 같다.

4. 검토

그림 5(a), (b)는 각각 일정한 δ_2 에서 δ_1 을, 일정한 δ_1 에서 δ_2 를 변화시키면서 구한 % Error의 값을 도시한 것으로서 보정하기전의 약 10%의 오차를 $\pm 0.5\%$ 로 줄일 수 있음을 알 수 있으며, 이와 같은 방법을 이용하면 비록 관측된 실험결과로부터 구한 활성화 에너지의 값이 많은 오차를 갖고 있더라도 식 (6)에 의해 매우 정확한 값으로 보정이 가능하다.

끝으로 여기서는 편의상 $T_m = 300$ K으로 선정하였으나 T_m 이 변화하여도 보정계수의 값은 300K일때와 변함이 없었다.

참고 문헌

1. Cowell and Woods, Brit. J. Appl. Phys., 18, 1045 (1967)
2. 류 강 식, 김 봉 흡, Polymer (Korea), 11, 268 (1987).
3. G. F. Garlick and A. F. Gibson, Proc. Phys. Soc., A60, 574 (1948)M
4. J. Van Turnhout, "Thermally Stimulated Discharge of Polymer Electret", Ph. D. Thesis, Elsevier (Amsterdam) (1975).
5. S. Kuo, "Computer Application of Numerical Method", Eddison -Wesley, California (1972).

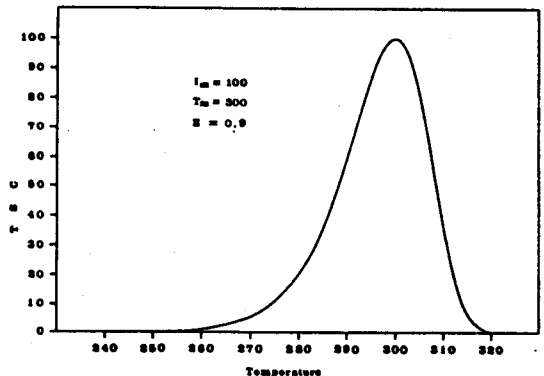


그림 1. 열자극전류의 온도특성 곡선

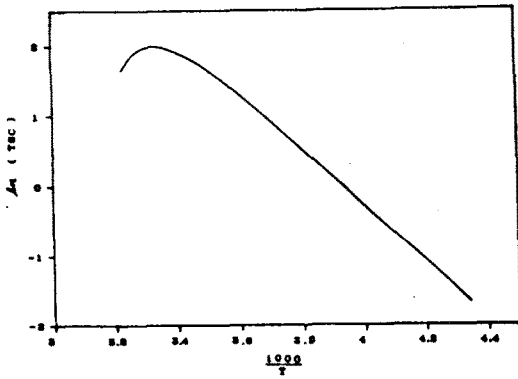


그림 2. Arrhenius plot.

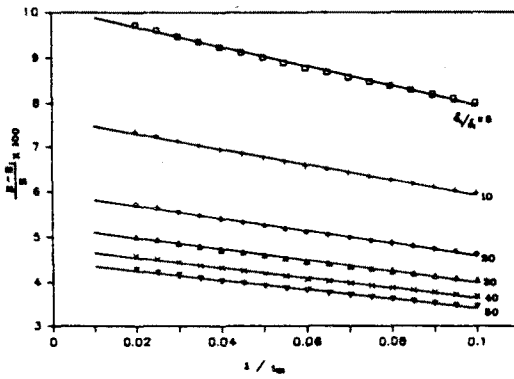
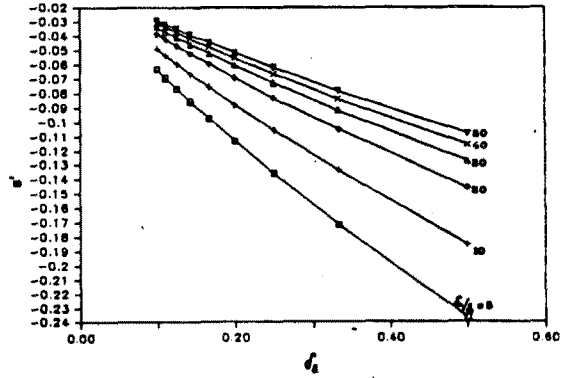
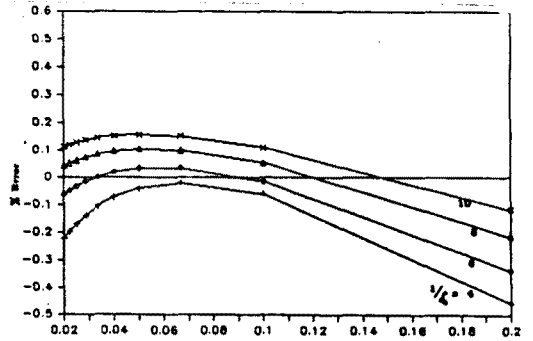


그림 3. $1/k_m$ 의 변화에 따른 활성화 에너지에 포함된 오차

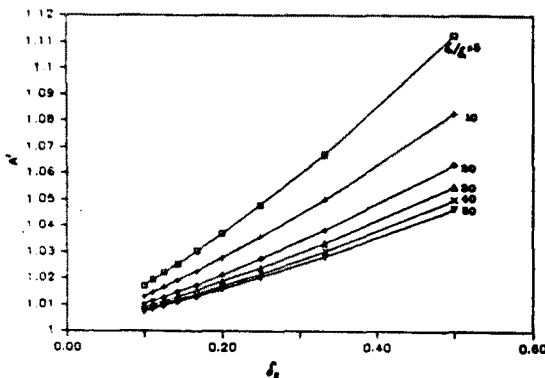


(b)

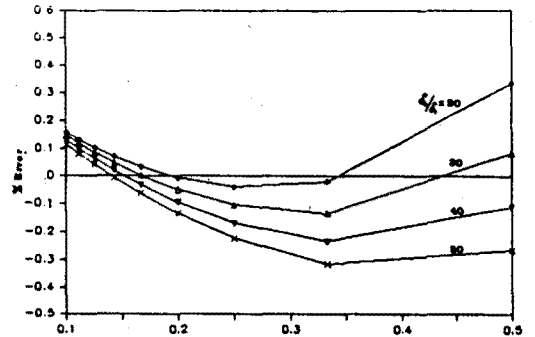
그림 4. 일정한 δ_1 에서 δ_2 의 변화에 따른 계수 A'와 B'의 관계



(a) δ_2 / δ_1



(a)



(b)

그림 5 δ_1, δ_2 의 변화에 따른 보정후의 % Error

그림 4. 일정한 δ_1 에서 δ_2 의 변화에 따른 계수 A'와 B'의 관계