

금속 (Pt)과 4H-SiC의 계면상태에 따른 실리콘 카바이드 기반 고온 가스센서 특성 분석

정지철¹, 구상모^{1,a}

¹ 광운대학교 전자재료공학과

The Effect of Catalytic Metal Work Functions and Interface States on the High Temperature SiC-based Gas Sensors

Ji-Chul Jung¹, Sang-Mo Koo^{1,a}

¹ Department of Electronic Materials Engineering, Kwangwoon University, Seoul 139-701, Korea

(Received January 12, 2011; Revised March 14, 2011; Accepted March 24, 2011)

Abstract: Silicon carbide (SiC)-based gas sensors can be operated at very high temperatures. So far, catalytic metal-schottky diodes respond fast to a change between a reducing and an oxidizing atmosphere. Therefore SiC diodes have been suggested for high temperature gas sensor applications. In this work, the effect of reactivity of the catalytic surface on the 4H-SiC sensor-structures in 375 K~775 K have been studied and some fundamental simulations have also been performed.

Keywords: Interface states, Schottky diode, SiC

1. 서 론

최근 우리사회는 첨단기술의 발달로 인해 고도산업 사회에 이르고 있다. 그러나 산업사회 발달 과정에서 파생된 환경오염 문제를 해결할 수 있는 기술수준은 아직 개발단계에 있다고 볼 수 있다 [1,2]. 환경오염 중에서 확산 속도가 빠르고 확산범위가 극히 넓은 것으로 알려져 있는 수질오염과 대기오염은 대중재해발생의 원인이 되고 있다. 대기오염에 의한 피해는 인구의 도시 집중화와 인구 증가 및 자동차 사용량의 증가로 인해 더욱 가속화 되어가고 있어 문제해결에 위한 기술적인 대책 마련이 필요하다 [3].

실리콘 (Si)과 같은 반도체를 능동 소자로 이용하는 가스 센서는 다이오드, MOS 캐패시터, MOSFETs와

같은 구조로 이루어져 있고 저온에서 안정적으로 동작할 수 있다. 그러나 실리콘 기반 가스 센서는 제한된 온도에서만 안정적으로 동작을 하기 때문에 고온에서 안정적으로 동작하고 물리, 화학적으로 안정적인 SiC와 같은 고에너지갭 반도체 기반인 가스 센서의 연구가 이루어지고 있다 [4]. 수소가스 감지를 위한 Schottky diode는 금속과 반도체 계면에서의 수소 쌍극자 (dipole)의 흡착에 의한 촉매 금속의 일함수 변화에 기인하지만 특수한 경우에는 금속 반도체 계면 영역에서 계면 상태 밀도의 변화도 영향을 주기 때문에 본 연구에서는 4H-SiC 기반 Schottky diode의 금속 일함수와 금속-반도체 (4H-SiC)계면상태에 의한 전기적 특성을 분석하였다.

고에너지갭 반도체로써, SiC는 기존의 반도체 재료인 Si, Ge 보다 높은 항복전압 (breakdown field)와

a. Corresponding author: smkoo@kw.ac.kr

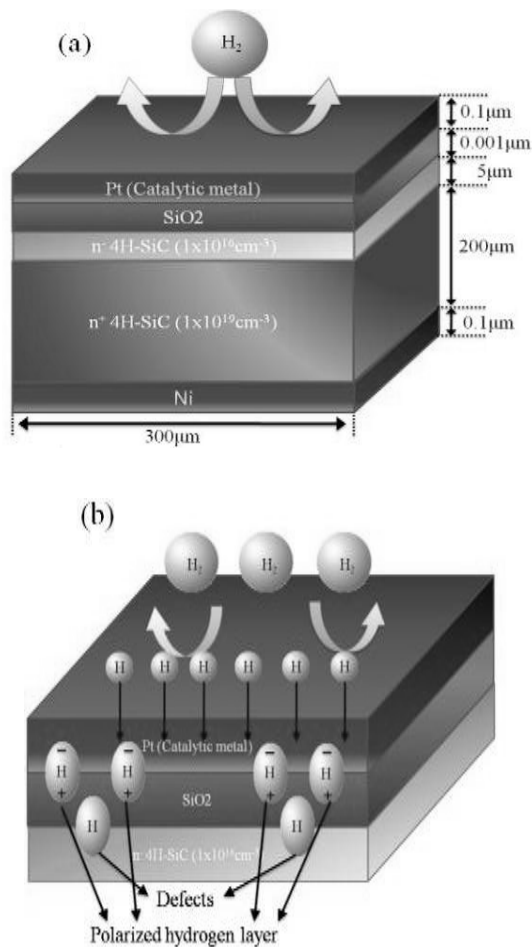


Fig. 1. (a) schematic structure of MISiC Schottky diode sensor, and (b) mechanism of gas sensor [5].

낮은 진성 캐리어 (intrinsic carrier) 농도 특성을 가지고 있으므로 고전력, 고주파, 그리고 고온 소자에 안정성 있게 사용할 수 있다.

자동차 산업의 엔진분야에서 gas 검출 속도가 빠르고 고온에서 안정적으로 동작하는 chemical sensor는 상당히 각광받는 분야이다. 그러므로 SiC 기반 gas sensor는 고온에서 작동하는 자동차 chemical sensor로써 매우 유용하게 사용될 수 있다.

2. 실험 방법

2차원 수치해석에 기반한 시뮬레이터를 사용하여 금속-반도체 계면사이에서 발생하는 장벽의 높이와

수소 쌍극자 (dipole)의 흡착에 의한 I-V 특성을 분석하였다. 추가적으로 온도 증가에 따른 I-V 특성을 밴드갭 다이어그램 (bandgap diagram)으로 분석하였다.

그림 1 (a)에서 처럼 실험에 사용된 MISiC 절연층 (SiO₂)의 두께는 1 nm 이고, 촉매 금속물질인 Pt ($\Phi = 5.7$ eV)의 두께는 100 nm 이다. 기판 (substrate)의 물질인 4H-SiC의 도핑농도는 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 이고 5 μm 의 에피층의 도핑농도는 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 이다.

그림 1 (b)는 Schottky diode를 이용하여 수소 가스를 감지하는 가스센서의 원리를 나타낸 것으로 촉매 금속 Pt의 표면에 붙은 수소는 일반적으로 금속-반도체 (SiC)계면에서 수소 쌍극자 (dipole)의 흡착과 결합 (defects)이 생겨 전압 변화의 원인이 되고 계면 상태 밀도 (interface state density)의 변화에도 영향을 미친다. 금속과 반도체 (SiC)사이에 SiO₂이 있으며 형성된 수소 쌍극자 (dipole)를 통하여 전류가 흐르기 때문에 Fowler-nordheim 모델을 사용하여 2D/3D 전산모사 하였다.

Fowler-nordheim 모델의 식은 다음과 같이 식 (1)에 나타내었다.

$$J_{F.N} = A E_{ox}^2 \exp\left(-\frac{B}{E_{ox}}\right) \quad (1)$$

$$\left(A = \frac{q^3 m_0}{8\pi h \Phi_b m_{ox}}, B = \frac{8\pi \sqrt{2m_{ox} \Phi_b^3}}{3qh}\right)$$

$J_{F.N}$ 은 전류밀도, E_{ox} 는 산화층 (절연층)의 전계, q 는 전하량 ($1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$), h 는 Plank 상수 ($6.63 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg/s}$), Φ_b 는 유효전위장벽, m_0 는 자유전자질량, m_{ox} 은 유효전자질량이다.

300 K ~ 775 K 온도에서 MISiC 소자의 열-전기적 인 특성을 실험하였고 0 V ~ 10 V cathode 전압 (Pt 금속)의 조건에서 시뮬레이션 결과를 얻었다. 이를 밴드갭 다이어그램 (band-gap diagram)으로 해석하였다.

3. 결과 및 고찰

그림 2 (a)는 온도가 300 K에서 775 K까지 증가할 경우, cathode 전압에 따른 cathode 전류의 변화를 나타낸 것이고 그림 2 (b)는 그림 2 (a)를 log 스케일로 나타낸 것이다. 0 V ~ 10 V의 cathode 전압 (Pt)에서 전류는 감소하는 것을 확인하였고 10 V의 cathode 전압에서 온도가 증가하면 약 0.05 V (300 K)에서 약 0.01 V (775 K)

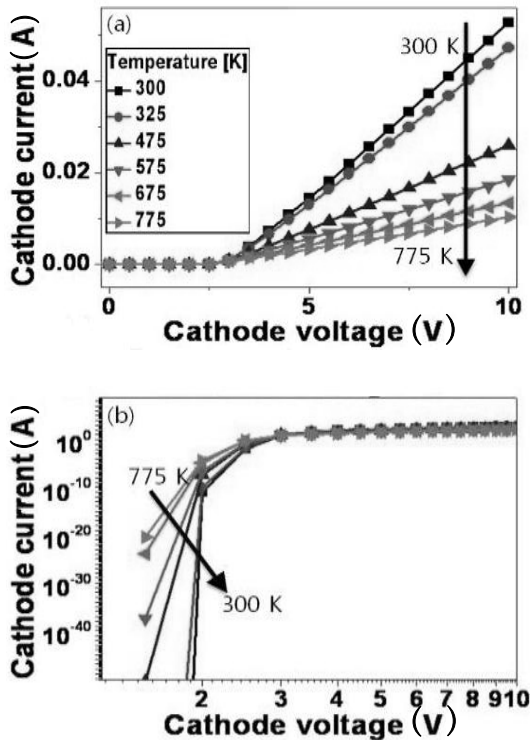


Fig. 2. (a) I-V characteristic for MISiC on temperature (300 K~775 K), (b) logarithmic scale of cathode current.

로 감소하며, 문턱전압이 2.5 V의 cathode 전압에서 나타나는 것을 확인하였다. 이는 온도가 증가할수록, 기판 (substrate)의 캐리어 (carrier) 이동도가 감소하기 때문에 드리프트 (drift)영역의 저항이 증가함을 의미한다. 추가적인 해석을 위하여 그림 3과 같이 2차원 시뮬레이션 결과인 MISiC 소자의 수직 단면의 밴드갭 다이어그램 (band-gap diagram)을 나타내었다. 그림 3(a)는 시뮬레이션 상의 MISiC 구조이고 그림 3(b)에는 cathode 전압이 10 V일 경우, X-X'까지 온도 증가에 따라 전류밀도를 나타내었고 이를 그림 3 (c)의 밴드갭 다이어그램 (band-gap diagram)으로 분석하였다. 온도 증가에 따라 전류밀도는 5배 정도 (300 K에서 1.76×10^4 A/cm², 775 K에서 3.43×10^3 A/cm²) 낮아지게 되고 에피층-기판 접합영역에서 전류밀도가 높다는 것을 그림 3 (b)에서 확인할 수 있었다. 또한 금속 (Pt), 절연층 (SiO₂)과 반도체 (SiC) 계면사이에서 전류밀도가 증가되는 것을 확인할 수 있었고, 온도가 증가하면 계면사이에서의 전류밀도는 감소하는 것을 확인하였다. 그림 3(c)의 x축에서

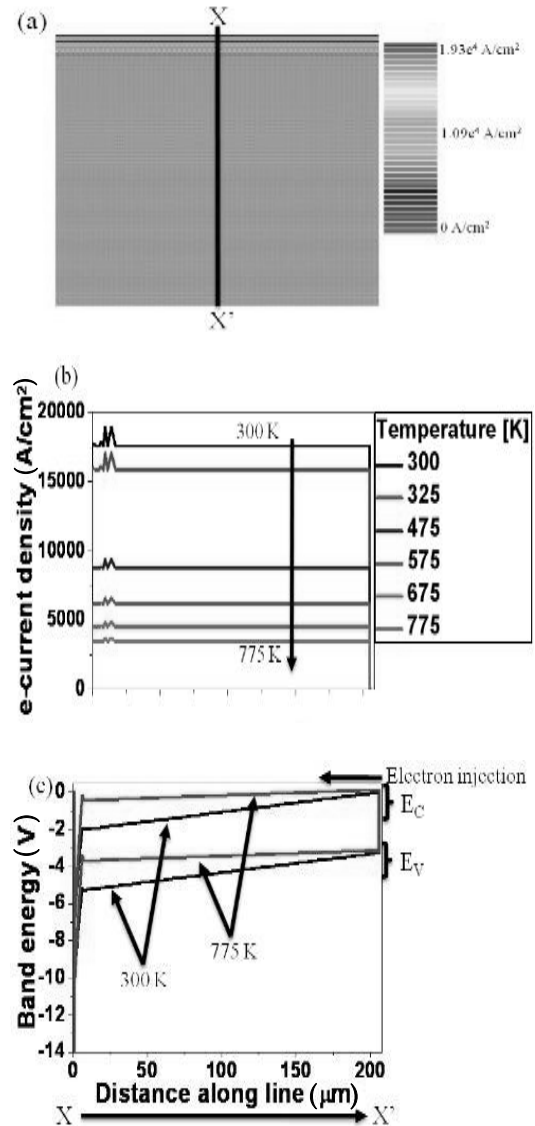


Fig. 3. Simulated results (a) MISiC structure with mesh profile, (b) electron current density from X to X', (c) band-gap diagram on temperature (300 K and 775 K).

0.001 μm부터 5 μm까지는 n형 4H-SiC (1×10^{16} cm⁻³)인 에피층이고 5 μm부터 50 μm까지는 n형 4H-SiC (1×10^{19} cm⁻³)인 기판 (substrate)이다. 온도가 증가할수록 전도대 (conduction band)와 가전자대 (valance band)는 300 K일 경우의 밴드갭 다이어그램 (band-gap diagram) 보다 올라갔다. 이는 anode (금속물질 Ni)영역에서 전자가 주입되어 cathode (금속물질 Pt)영역으로 흐르는 것을 알 수 있고 온도 증가에 따라 저항이 증가

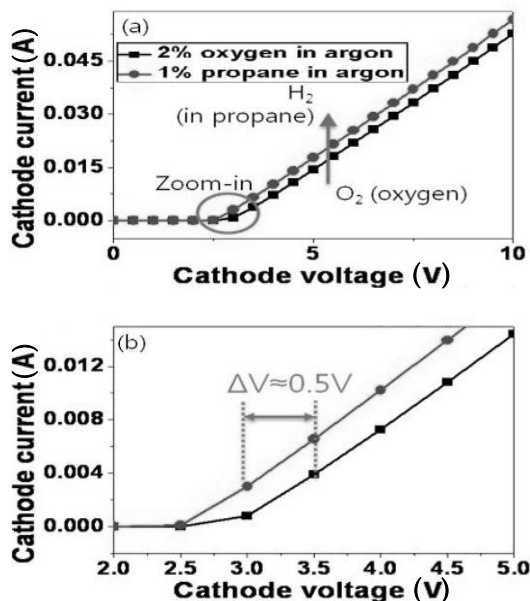


Fig. 4. I-V characteristics of the MISiC sensor during exposure to O_2 and propane, respectively.

되기 때문에 전류가 원활하게 흐르지 않는 특성을 확인할 수 있다.

그림 4 (a)는 아르곤 (argon, Ar)가스와 2%의 산소 (oxygen, O_2)의 혼합가스가 분포된 경우와 아르곤 가스와 1%의 프로판 (propane, $CH_3CH_2CH_3$)가스의 혼합가스가 분포되어 있는 경우에 따른 전기적 특성을 나타낸 것이다. 그림 4 (b)는 그림 4 (a)를 확대하여 나타낸 것으로 가스종류에 따른 전압차를 나타내었다. 산소 (O_2)가스가 분포되어 있는 경우의 전압과 프로판 ($CH_3CH_2CH_3$)가스가 분포되어 있는 경우의 전압은 0.5 V 정도 차이가 나고 금속물질 Pt를 증착시킨 MISiC구조는 산소 (O_2)가스가 분포되어 있는 경우보다 프로판 ($CH_3CH_2CH_3$)가스가 분포되어 있을 때 더 빨리 반응을 하는 것을 알 수 있다. 이는 산소 (O_2)보다 수소 (H_2)가 금속과 반도체 (SiC)계면 사이에서 더 많은 분극을 형성한다는 것을 의미한다.

4. 결 론

본 연구에서는 4H-SiC 기반 Schottky diode의 금속 일함수와 금속-반도체 (4H-SiC)계면상태에 의한 전기적 특성을 분석하였다. 금속과 반도체 (SiC)사이

에 절연물질 (SiO_2)이 있지만 수소 쌍극자 (dipole)를 통해 흐르기 때문에 Fowler-nordheim 모델을 사용하여 2차원 시뮬레이션으로 해석하였다. 온도가 300 K에서 775 K까지 증가할 경우, 0 V의 cathode 전압에서 온도가 증가하면 약 0.05 V (300 K)에서 약 0.01 V (775 K)로 감소하며, 문턱전압이 2.5 V의 cathode 전압에서 나타나는 것을 확인하였다. 이를 밴드갭 다이어그램 (band-gap diagram)으로 해석한 결과, 온도가 증가할수록 전도대 (conduction band)와 가전자대 (valance band)는 300 K 일 경우의 밴드갭 다이어그램 (band-gap diagram)보다 올라갔다. 이는 anode (금속물질 Ni)영역에서 전자가 주입되어 cathode (금속물질 Pt)영역으로 흐르는 것을 알 수 있고 온도 증가에 따라 저항이 증가되기 때문에 전류가 원활하게 흐르지 않는 특성을 확인할 수 있었다.

또한, 산소 (O_2)가스가 분포되어 있는 경우의 전압과 프로판 ($CH_3CH_2CH_3$)가스가 분포되어 있는 경우의 전압은 0.5 V 정도 차이가 나고 금속물질 Pt를 증착시킨 MISiC구조는 산소 (O_2)가스가 분포되어 있는 경우보다 프로판 ($CH_3CH_2CH_3$)가스가 분포되어 있을 때 더 빨리 반응을 하는 것을 알 수 있다. 이는 산소 (O_2)보다 수소 (H_2)가 금속과 반도체 (SiC)계면 사이에서 더 많은 분극을 형성한다는 것을 의미한다.

감사의 글

본 연구는 2010년 정부 (교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 지원 (2010-0011022) 및 지식경제부가 지원하는 국가 반도체연구사업인 “시스템집적반도체기반기술개발사업 (시스템IC2010)”와 지식경제부가 지원하는 전력계통기술개발사업인 “계통연계형 인버터 시스템을 위한 고효율 전력소자 기반기술개발”을 통해 개발된 결과임을 밝힙니다.

REFERENCES

- [1] A. Lloyd Spetz, P. Tobias, A. Baranzahi, P. Martensson, and I. Lundstrom, *IEEE Trans. on Electron Devices*, **46**, 3 (1999).
- [2] S. K. Lee, E. K. Suh, N. K. Cho, H. D. Park, L. Uneus, and A. Lloyd Spetz, *J. Solid State Electr.*, **49**, 1297 (2005).
- [3] J. Yu, M. Shafiei, W. Wlodarski, Y. X. Li, and K.

- Kalantarzadeh, *J. Phys. D*, **43**, 025103 (2010).
- [4] S. Kandasamy, W. Wlodarski, and A. Holland, *Appl. Phys. Lett.*, **90**, 064103 (2007).
- [5] A. Lloyd Spetz, L. Uneus, H. Svenningstorp, P. Tobias, L.-G. Ekedahl, O. Larsson, A. Go'ras, S. Savage, C. Harris, P. Martensson, R. Wigren, P. Salomonsson, B. Haggendahl, P. Ljung, M. Mattsson, and I. Lundstrom, *Solid State Phys.*, **185**, 15 (2001).