

불순물의 도핑률에 따른 II-VI족 반도체화합물의 밴드구조의 변화에 관한 연구

박정민, 김태용, 윤도영*
광운대학교 화학공학과
(yoondy@kw.ac.kr*)

신 재생 에너지 산업으로 최근 발달하고 있는 태양광 박막 사업이 국내외로 대두되고 있는 가운데, 핵심적인 소재로서 ZnSe 를 위시한 II-VI족 반도체 화합물 공정이 크게 부각되고 있다. ZnSe 는 밴드갭(bandgap)이 큰 반도체 화합물로 분류가 되며, 여기에 미량의 Cu와 Mn 와 같은 불순물의 도핑함량에 따른 밴드갭 변화가 반도체 화합물의 공정에 활용될 수 있다. 본 연구에서는 도핑 물질로서 널리 사용되고 있는 Cu 또는 Mn에 초점을 맞추어 불순물의 도핑 퍼센트에 따른 밴드구조(band structure) 및 밴드갭의 특성의 변화를 조사하였다. 밴드구조의 변화를 확인하기 위한 방법으로 분자동역학(Molecular Dynamics) 해석을 수행하였으며, MD 해석을 위해서 상용화된 코드인 CASTEP을 이용하였다. 한편 실험적인 접근법으로는 균일한 영역에 박막의 형성을 위해 전기화학적 전착방법을 이용하였으며, 광학적특성은 UV spectrometer 를 활용하여 산출하였다. 본 연구를 통해 반도체 화합물의 도핑률에 따른 Band structure의 변화의 체계적인 경향성을 확보할 수 있었다.