

**CoO 단결정에서 점결합 및 산소의 확산기구
(Point Defects and Diffusion Mechanisms
of Oxygen in Single Crystal CoO)**

창원대학교 재료공학과 김명호, 백운규

1. 서론

P형 반도체 산화물 CoO에서는 양이온에 비해 확산속도가 느린 산소이온이 산화, 소결, 고온변형등 열적 활성화되는 고온 반응에서 반응속도에 중요한 영향을 주고 있지만 낮은 확산속도때문에 산소의 점결합 형태와 확산기구에 대해선 연구가 미미한 상태이다. 일반적으로 산화물에서 온도 및 산소분압에 따른 산소의 확산속도는 다음과 같이 표시할 수 있는데

$$D = D_0 \cdot P_{O_2}^{\frac{m}{n}} \cdot \exp(-\Delta H/RT)$$

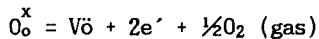
m/n 값을 구하면 산소의 점결합 형태 및 결합의 이온화 상태를 규명할 수 있다.

2. 실험방법

산소동위원소 ^{18}O 를 추적자로 사용하여 확산시간, 확산온도 및 산소분압(P_{O_2}) 변화에 따라 단결정 CoO를 Ar/H₂/H₂O 분위기에서 확산반응한 후 SIMS(Secondary ion mass Spectrometry)로 시편표면을 Sputtering하여 침투깊이에 대한 산소동위원소 (^{18}O)의 농도분포도를 측정하였다.

3. 결과 및 고찰

CoO에서 산소의 확산기구는 산소분압 범위에 따라 상이한 모델을 제안하였다. 낮은 산소분압범위에서는 2가로 이온화된 산소빈자리(V_O)형성에 의해 산소확산이 지배되었으며 산소빈자리 형성반응과 산소분압변화에 대한 산소의 확산속도(D)는 다음과 같다.



$$D \propto [V_O] \propto P_{O_2}^{-1/10}$$

반면에 높은 산소분압대에서는 격자간 산소원자(O_i^x)에 의한 산소확산으로 산소분압에 대한 확산속도는

$$D \propto [O_i^x] \propto P_{O_2}^{1/2}$$

$$D = 3.6 \times 10^{-7} \cdot \exp[-(299 \pm 21) kJ/mol] RT \text{ m}^2/\text{sec} \quad \text{계산되었다.}$$

$$1000^\circ\text{C} < T < 1350^\circ\text{C}, P_{O_2} = 0.21 \text{ bar}$$