

Donor와 Acceptor를 첨가한 TiO<sub>2</sub>의 결함형태 및 전기적 특성에 관한 연구  
Study on the Defect Types and Electrical Properties of TiO<sub>2</sub> doped with  
Donor and Acceptor

창원대학교 이순일, 송태권, 박태곤, 김명호

순수한 TiO<sub>2</sub>(rutile)는 상온에서 3.06eV의 band gap을 갖는 부도체이지만, 낮은 산소분압이나 고온에서는 비화학양론적인 TiO<sub>2-x</sub>가 되어 n형 반도체가 된다. 또한 가전자 값이 상이한 dopant를 첨가하여 반도체화 시킬 수 있다. 첨가제에 의한 여분의 전하 보상은 온도 및 P<sub>O<sub>2</sub></sub>에 따라 지배적인 결함형태가 변화하여 전기 전도도의 산소분압 의존성이 변화하게 된다. 따라서, 본 실험에서는 첨가제의 종류, 산소분압, 온도 및 첨가량의 변화에 따른 전기 전도도 변화를 관찰하여 여분의 전하 보상 메카니즘 및 결함 형태를 규명하고자 했다.

Donor인 WO<sub>3</sub>, Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>와 acceptor인 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>를 0.05~4.0mol% 첨가한 TiO<sub>2</sub>와 순수한 TiO<sub>2</sub>를 1400℃에서 10시간 동안 소결한 시편을 4탐침법으로 저항을 측정하여 전도도로 환산했다. 순수한 TiO<sub>2</sub>의 경우 본 실험의 산소분압 범위(10<sup>0</sup>~10<sup>-17</sup>atm)의 1100℃이상에서 고유결합 형태인 4가로 이온화된 Ti 침입형 이온이 지배적인 결함 형태로 존재하여 donor와 acceptor를 첨가한 TiO<sub>2</sub>에서 전기 전도도를 측정하기 위한 온도 범위를 1100~1300℃로 했다. 높은 산소분압은 O<sub>2</sub>/Ar gas의 혼합비로 조절하였고, 낮은 산소분압은 H<sub>2</sub>/Ar, CO/CO<sub>2</sub> gas비를 조절하여 YSZ 산소센서로부터 emf값을 측정하여 산소분압으로 환산했다.

이러한 실험 결과로서 전기전도도의 첨가제 종류, 온도, 첨가량 및 산소분압 의존성은 다음과 같다. 전기 전도도의 온도 의존성은 순수한 TiO<sub>2</sub>의 영역과 일치하는 주 결함의 형태가 4가로 이온화된 침입형 Ti이온인 영역에서 온도가 증가할수록 전도도가 증가하는 것으로 나타났다. 나머지 영역에서는 온도 의존성이 나타나지 않음을 확인할 수 있었다. acceptor를 첨가한 경우는 실험온도 범위에서 전 범위의 산소분압에서 온도의존성을 가졌다. 전기 전도도의 첨가량 의존성은 일정한 산소분압과 온도에서 donor의 첨가량이 증가할수록 전기 전도도가 증가하였다. 이러한 영역은 전도도가 donor이온이 Ti자리에 치환하여 donor의 첨가량에 의존하는 영역에서 확연하게 나타나고 있다. acceptor의 첨가량이 증가할수록 전도도는 다소 감소하였다. 그리고 일정 온도와 첨가량에서 전기 전도도의 산소분압 의존성(log σ /log P<sub>O<sub>2</sub></sub>)에서 3가지 특징적인 영역 즉, 전도도의 산소분압 의존성이 -1/5로 나타나는 주 결함의 형태가 TiO<sub>2</sub> 고유결합으로서 4가로 이온화된 침입형 Ti이온인 영역, donor가 Ti자리에 치환하여 donor의 첨가량에 의존하는 산소 분위기 독립적인 영역으로 전자보상에 의해 전도도가 증가하는 영역, 그리고 높은 산소분압에서는 전도도의 산소분압 의존성이 -1/4로 나타나는 donor의 첨가에 의한 4가로 이온화된 Ti 빈자리의 형태로 이온 보상에 의해 전도도가 변하는 영역으로 나타났고, acceptor의 경우는 고유결합 영역과 acceptor 첨가에 의한 4가로 이온화된 Ti침입형 영역임을 제안한다.