DV-Xα 분자궤도법을 이용한 도핑된 ZnO의 전자상태
(Electronic States of Doped ZnO Using DV-Xα Molecular Orbital Method)

이성명, 김영철, 김양수*
Dept. of Materials Engineering. Korea University of Technology and Education
*Dept. of Materials Science & Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology

Abstract

Wide bandgap 화합물 반도체인 ZnO의 전자-정공 결합 에너지는 GaN와 ZnSe보다 두 배 이상 크다. 큰 전자-정공 결합에너지로 높은 방사에너지를 얻을 수 있는 ZnO를 광전자 반도체로 이용하기 위해서는 n-형과 p-형이 필요하다.

본 연구는 ZnO에 불순물을 첨가 후 전자상태의 변화를 DV-Xa 분자궤도법을 이용하여 계산하였다. 기본 클러스터는 ($Zn_{29}O_{62}$) 와 ($O_{29}Zn_{62}$)이고 중심에 있는 Zn 혹은 O 에 이온가와 원자 번호가 다른 불순물(Al, Ga, In, N, P)을 치환하였다. 불순물 첨가에 따른 밴드 구조(band structure)의 변화를 분석하기 위해, 원자간 전하 흐름(net charge), 부분 전자상태밀도(partial electronic state of density), 그리고 유효 공유결합 전하(energy distributions of bond overlap population)를 계산하였다.

이와 같은 전자상태계산을 통하여 Al, Ga, In는 도너로 그리고 N과 P는 억셉터로 분류되었다. 불순물의 원자량과 이온 크기는 전하 흐름에 영향을 주어 순수한 ZnO의 공유 결합은 이온 결합으로 변화한다. 부분 전자 상태 밀도와 유효 공유 결합 전하 계산을 통하여 n-형은 가전자대에서 결합 특성이 주로 나타나고, 불순물 원자번호가 커지면 반결합 특성과 내각궤도가 생김을 알 수 있다. p-형은 비대칭 에너지 밴드 구조를 가지며 가전자대에서 결합과 반결합 특성이 함께 나타났다.