Hot Wall Epitaxy(HWE)법에 의한 $CuGaSe_2$ 단결정 박막의 성장과 에너지 밴드갭의 온도 의존성

이 상 열, 홍 광 준

조선대학교 물리학과

Growth and temperature dependence of energy band gap for $CuGaSe_2$ Single Crystal Thin Film by Hot Wall Epitaxy

sangyoul Lee, Kwangjoon Hong

Department of Physics, Chosun University, Kwangju 501-759,Korea(kjhong@chosun.ac.kr)

Abstract A stoichiometric mixture of evaporating materials for $CuGaSe_2$ single crystal thin films was prepared from horizontal electric furnace. Using extrapolation method of X-ray diffraction patterns for the polycrystal $CuGaSe_2$, it was found tetragonal structure whose lattice constant a_0 and c_0 were 5.615 Å and 11.025 Å, respectively. To obtain the single crystal thin films, $CuGaSe_2$ mixed crystal was deposited on thoroughly etched semi-insulating GaAs(100) substrate by the hot wall epitaxy (HWE) system. The source and substrate temperatures were 610℃ and 450℃, respectively. The crystalline structure of the single crystal thin films was investigated by the photoluminescence and double crystal X-ray diffraction (DCXD). The carrier density and mobility of $CuGaSe_2$ single crystal thin films measured with Hall effect by van der Pauw method are 4.87×10^{17} cm^{-3} and 129 $cm^2/V{\cdot}s$ at 293 K, respectively. The temperature dependence of the energy band gap of the $CuGaSe_2$ obtained from the absorption spectra was well described by the Varshni's relation, $E_g(T)$ = 1.7998 eV - (8.7489×10^{-4} eV/K)T^2/(T + 335 K).

Key word : $CuGaSe_2$ single crystal thin films, optimum growth condition, photoluminescence, double crystal X-ray diffraction (DCXD), energy band gap

1. 서 론

$CuGaSe_2$는 I-III-VI_2족 화합물 반도체로서 상온에서 에너지 띠 간격이 1.68 eV[1-2]인 직접천이형 반도체이어서 태양전지[3-6], LED(Light Emitting Diode)[7], 발광소자[8], 광전도 소자[9-10], 광 음향 소자[2]등에 응용성이 기대되고 있어 양질의 결정 성장과 물성 연구가 활발히 진행되고 있다.

본 연구에서는 합성된 $CuGaSe_2$ 다결정을 증발원으로 하여 HWE 방법을 이용하여 반절연성 GaAs(100)기판 위에 $CuGaSe_2$ 단결정 박막을 성장시켰으며, 온도에 의존하는 광흡수 스펙트럼을 측정하여 vashnish 방정식을 만족하는 에너지 밴드갭의 온도 의존성을 연구하였다.

2. 실 험

2.1. HWE에 의한 $CuGaSe_2$ 단결정 박막 성장

$CuGaSe_2$ 단결정 박막성장은 진공조속의 hot wall 전기로와 기판으로 구성된 HWE 방법을 사용하였다. 전기로는 직경 0.4 mm 칸탈선을 직경 35 mm 석영관에 감아 만들었으며, 전기로 둘레의 열차폐 원통은 열효율을 높이기 위해 석영관에 금을 증착하여 사용하였다. 증발원은 합성된 $CuGaSe_2$ 다결정의 분말을 사용하였고 반절연성 GaAs(100) 기판과 증발원을 HWE 장치 속에 넣고 내부의 진공도를 10^{-6} torr로 배기시킨 후 증발원의 온도를 610 ℃, 기판의 온도를 450 ℃로 하여 0.5 ㎛/hr 성장속도로 성장하였다.

3. 실험 결과 및 고찰

3.3.1 $CuGaSe_2$ 단결정 박막의 광흡수 스펙트럼

$CuGaSe_2$ 단결정 박막의 온도에 따르는 광흡수 스펙트럼을 293 K에서 10 K까지 측정하여 그림 1에 보였다. 광흡수 스펙트럼으로 부터 조사광의 에너지 (hν)에 대응하는 광흡수 계수 (α)를 구하고 $(\alpha h\nu) \sim (h\nu - E_g)$ 의 관계로부터 에너지 갭을 구하였다. 그림 2는 $CuGaSe_2$ 단결정 박막의 흡수 곡선에 의한 direct band gap의 온도 의존성을 나타내고 있다. Direct band gap의 온도 의존성은 Varshni 식인

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T+\beta} \quad (1)$$

을 잘 만족하고 있다. 여기서, $E_g(0)$는 0 K에서의 에너지 갭, α와 β는 상수이며, $E_g(0)$는 1.7998 eV이고 α는 8.7489×10^{-4} eV/K, β는 335 K이다.

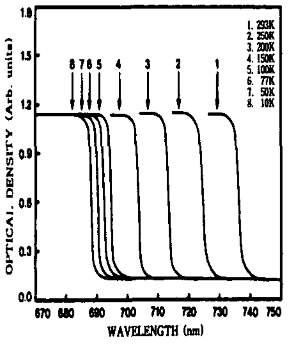

Fig. 1. Optical absorption spectra according to temperature variation of $CuGaSe_2$ single crystal thin films

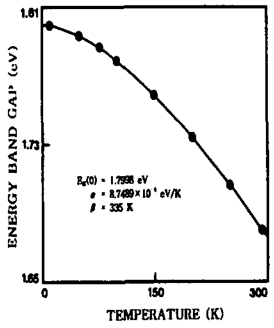

Fig. 2. Temperature dependence of energy gap in $CuGaSe_2$ single crystal thin film. (the solid line represents the Varshni equation.)

4. 결 론

$CuGaSe_2$ 단결정 박막을 HWE 방법으로 성장시켰다. X-선 회절 측정 결과 Laue의 회절 무늬로 부터 $CuGaSe_2$ 박막은 (110)면으로 성장된 단결정 박막임을 알 수 있었다. $CuGaSe_2$ 단결정 박막의 최적 성장 조건은 기판의 온도가 410 ℃, 증발원의 온도가 680 ℃ 일때였고, 이때 PL 스펙트럼의 exciton emission 스펙트럼이 가장 강하게 나타났고, 이중 결정 X선 요동곡선(DCRC)의 반치폭(FWHM) 값은 127 arcsec로 가장 작았다.

Direct band gap의 온도 의존성은 Varshni 식인

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (1)$$

을 잘 만족하고 있다. 여기서, $E_0(0)$는 0 K에서의 에너지 갭, α와 β는 상수이며, $E_0(0)$는 1.7998 eV이고 α는 8.7489×10^{-4} eV/K, β는 335 K이다.

Refernce

[1] W. Gebicki, J. Filipowicz and R. Bacewicz " Raman scattering in novel $CuGaSe_2$ crystals" J. Phys. Condens. Matter, 8 : 8695-8703. 1996

[2] J. E. Kim, H. Y. Park, S. G. Lee and J. Y. Lee " Photoacoustic spectra of $CuGaSe_2$" new physics, 28(4) : 515-519. 1998

[3] L. Kronik, L. Bursten and M. Leiboritch " Band diagram of the polycrystalline CdS/CuGa(In)Se heterojunction" Appl. Phys. Lett, 67(10) : 1405-1407. 1995

[4] N. Nadenau, U .Rau and A. Jasenek " Electronic properties of $CuGaSe_2$-based heterojunction Solar cells. Part Ⅰ. Transport analysis" J. Appl. Phys. 87(1) : 584-593. 2000