

## ZnSe의 격자변수에 따른 밴드구조의 변화에 대한 분자동역학적 거동 해석

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

신 재생 에너지 산업 중에서 최근 확대되고 있는 태양광 산업계에서 박막 태양전지에 관한 관심이 국내외적으로 고조되고 있다. II-VI 반도체 족에서 대표적인 ZnSe는 큰 밴드갭을 갖는 중요한 반도체용 재료로서의 특징을 가진다. ZnSe 박막을 제조하기 위해 가장 많이 사용되는 방법으로는 전기화학적 전착방법을 들 수 있다. 이 경우 ZnSe는 FCC구조의 Zinc blend구조를 가진다고 알려져 있다. 이 경우 일반적으로 2.7eV의 밴드갭을 가진다고 알려져 있다. 문헌을 참조하면 실험적인 데이터들은 항상 같은 밴드갭을 가지지 않고 2.7eV를 기준으로 다소 오차를 보인다. 이 오차의 원인을 찾기 위해 FCC구조의 격자변수(Lattice Parameter)를 변화시켜 변화에 따른 밴드구조(Band Structure)의 변화에 대하여 해석하였다. 구조의 해석을 위해서 상용화된 코드인 B3LYP 코드를 이용하여 반도체 박막의 Band Structure와 Density of state를 해석하였다. 분자동역학적 해석 결과 격자변수가 밴드갭(Bandgap) 특성에 중요한 역할을 하고 있음을 확인 할 수 있었다.