

ZnS 양자점 합성에 관한 분자동역학 모델링

신인성, 유도영*

광운대학교

(yoondy@daisy.kw.ac.kr*)

양자점은 양자제한효과가 일어나는 반도체 나노결정으로 그 크기에 따라 거시적인 상태와는 다른 광학적, 화학적 특성을 가진다. 현재 LED, 태양전지, 바이오센서 등과 같은 다양한 분야에서 응용되고 있으며, 최근에는 그 범위가 빠르게 확대되고 있다. 그러나 양자점 제조과정에는 변수가 많아 단순히 실험만을 통하여 최적의 합성조건을 찾기에는 시간적, 경제적인 한계가 있다. 이에 본 연구에서는 대표적인 양자점 물질 중 하나인 ZnS의 온도에 따른 양자점 성장을 시뮬레이션 하였다. 분자동역학시뮬레이션 중 하나인 LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)를 이용하여 시뮬레이션 하였으며 계산 결과는 VMD를 통하여 시각화하였다. 또한 Brus Equation을 통하여 각 크기에 따른 파장영역을 계산하였다.