

## DV-X $\alpha$ 분자궤도법을 이용한 전자구조해석

### Analysis of Electronic Structure by DV-X $\alpha$ method

<sup>0</sup>김명철, 황연\*, 강영석<sup>1</sup>, 박순자<sup>2</sup>  
<sup>0</sup>군산대학교 공과대학 재료공학과, <sup>1</sup>동력자원연구소, <sup>2</sup>서울대학교 공과대학  
 무기재료공학과

#### 1. 서론

최근 재료의 물성해석과 관련해 그 물성을 파동방정식을 이용한 전자에너지계산 방법에 의해 해석하고자 하는 시도가 많이 이루어지고 있다. 고체내의 입자운동에 대한 Schrodinger 방정식을 풀기 위해 1928년에 Hatree가 직관적인 방법에 의해 self-consistent법에 의한 해석방법을 제시한 이후에 Hatree-Fork법, LCAO법, X $\alpha$  법 등의 많은 구조해석 시뮬레이션법이 나왔고, 이같은 계산은 매우 많은 계산량을 포함하기 때문에 고속컴퓨터의 발전과 함께 점차 유용해지게 되었다. 이 중 X $\alpha$  법에는 Johnson에 의한 multiple-scattering(MS, 다중산란) X $\alpha$  법과 Ellis 등에 의해 개발된 discrete-vibrational(DV) X $\alpha$  법이 많이 쓰이고 있다. 특히, DV-X $\alpha$  법은 Adachi 등에 의해 개선되어 워크스테이션급의 소형계산기에서 충분히 짧은 시간에 원하는 궤도계산을 해낼 수 있게끔 발전되었고, 결정의 분석모델로 비교적 간편한 원자클러스터를 쓰기 때문에 사용이 간편한 장점이 있다. 현재 이방법을 이용해 금속, 산화물, 탄화물, 유기물 등에 관한 전자구조해석데이터가 많이 발표되고 있다. 이 방법의 응용분야로는 반도체 및 세라믹스의 전자상태 해석 및 물성치 예측, 광전자 스펙트럼, X선, 가시, 자외선의 흡수, 방출스펙트럼의 계산, 금속착체의 물성과 반응의 해석, 촉매계산, 금속표면의 분자흡착에서의 에너지 계산, 유기화합물, 폴리머의 전하분포, 전자상태 등의 계산에 광범위하게 응용될 수 있다. 본 연구에서는 H. Adachi 등에 의해 개발된 워크스테이션판의 소스프로그램을 이용하여 ZnO, Zn<sub>3</sub>BiO, TiO<sub>6</sub>, CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>에서의 삼방정 Co<sub>4</sub> 클러스터 등에 대한 전자구조해석을 시도해 보았다.

#### 2. 시뮬레이션 프로그램의 구성

주 프로그램으로 SCAT란 디렉토리에 SPIN과 NONSPIN 용으로 구분된 50개의 확일이 있고 이밖에 이에 필요한 데이터를 DATA란 디렉토리에 구비하고 있으며 이를 운용키 위한 배치파일로 구성된다. 그리고 전자궤도의 대칭데이터를 만들기 위한 SYMMETRY, 클러스터 주위에 포텐셜 원자를 배치키 위한 POTENTIAL 디렉토리 등으로 구성된다.

소스프로그램은 포트란 언어로 짜여져 있으며, 화면에 궤도모양, 전자밀도 분포, 상태밀도분포, 에너지 준위 등을 나타내는 프로그램은 C언어로 짜여져 있다. 이는 SUN사의 워크스테이션에 호환인 기종에 운용될 수 있도록 되어 있는 데 이번의 연구에서는 IBM PC에서 운용될 수 있도록 변형하여 사용하였다. 계산속도를 높이기 위해서 IBM PC 호환의 486 DX-66 급의 컴퓨터를 사용하였다.

#### 3. 결과

Wurtzite 구조의 산화아연과 페로프스카이트 구조의 BaTiO<sub>3</sub>에 관해 구조해석을 하였다. ZnO의 클러스터로 사면체의 Zn<sub>4</sub>O, 즉 4개의 Zn원자와 한개의 중심산소원자로 이루어지는 사면체 모델 클러스터를 잡고 이주위에 15개의 Zn과 18개의 산소원자로 이루어지는 포텐셜을 구성하였다. 한편, BaTiO<sub>3</sub> 입방정 페로프스카이트에 관해서는 내부에 있는 TiO<sub>6</sub> 클러스터, 즉 중심의 Ti원자 한개와 입방정의 면심에 있는 6개의 산소원자로 구성되는 팔면체 모델 클러스터를 잡고 이 주위에 다음 층의 8개의 Ba 원자, 그 다음 층의 6개의 Ti 원자, 그리고 그다음에 오는 24개의 산소원자로 이루어지는 포텐셜을 구성하였다. 한편, 역스피넬 구조의 CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

