

Graph 를 이용한 새로운 결정구조 표현을 위한 Quotient Graph 계산

정수진, 김호성*

서울대학교 재료공학부
*전남대학교 신소재공학부

결정구조는 원자들의 3 차원 공간에서의 배열을 의미하므로 이에 대한 이해는 용이하지 않은 편이다. 간단한 그림을 이용하여 결정구조를 표현하는 방법으로 1975 년에 Graph 를 이용하여 결정구조를 표현하고 이해하는데 획기적인 방법이 처음 발표되었다.¹ 이 방법으로는 복잡한 결정구조를 간단하게 표현할 수 있을 뿐만 아니라 수학적으로 가능한 구조가 어떠한 것이 있는지를 알 수 있다. 그 후 이에 대한 연구가 이루어졌으나^{2,3} 아직 수학적으로 체계를 갖추었다고 할 수는 없으며 매우 많은 경우의 수를 해결하는 알고리즘은 개발되지 않았다.

본 연구에서는 완전한 Graph 를 유도하기 위한 기초연구로 Quotient Graph 에 대한 연구를 통하여 isomorphism 문제를 해결하였고 이를 이용하여 임의의 Vertex 수와 Edge 수에 대한 컴퓨터 프로그래밍을 하였다.

참고문헌

- 1) "Possible and Existing Tetrahedral Framework", S.J. Chung and Th. Hahn, Acta Cryst. A31 (1975)
- 2) "Nomenclature and Generation of Three-Periodic Nets", S.J. Chung, Th. Hahn and W.E. Klee, Acta Cryst. A40 (1984)
- 3) "3-Regular Nets with Four and Six Vertices per Unit Cell", M. Barber, W.E. Klee and G. Thimm, Zeitschrift fur Kristallographie (1997)