

(PL-6)

범밀도함수법을 이용한 산화물 표면의 전자상태 계산
Calculation on Electronic State of Oxide Surfaces
Using Density Functional Theory

이 동 윤

한국전기연구원 전자기소자연구그룹
641-120 경남 창원시 성주동 28-1
(E-mail: dylee@keri.re.kr)

최근 컴퓨터 기술의 발달에 따라 이전에 실험을 통해 얻던 결과들을 전산모사를 통해서 얻고자 하는 시도가 급속히 늘고 있다. 이 중, 물질의 물성을 좌우하는 전자구조를 연구함에 있어서, 실험 데이터를 사용하지 않고, 순수 이론적으로 슈레딩거방정식을 직접 풀어서 해를 구하는 다양한 제1원리 계산법이 개발되어 왔다. 일반적으로 슈레딩거방정식 방정식의 완전한 해를 구하는 것은 불가능하고, 이에 따라 각 계산법들은 방정식을 단순화시키기 위한 다양한 근사를 사용한다. 범밀도함수법 (Density Functional Theory, DFT)은 함수의 함수라는 개념을 도입하여, 상호 연관된 복잡한 전자궤도들을 모두 계산하지 않고, 전체전자의 전자기장 안에 있는 몇 개의 전자 또는 1개 전자의 문제로 슈레딩거방정식을 단순화시켜 계산을 행한다. 이에 따라, 계산에 포함되는 변수들을 크게 감소시킴으로써, 수 개에서 수십개의 원자로 구성된 클러스터에 대한 계산을 가능하여, 실제에 근접한 결과를 얻을 수 있다. 현재 DFT를 이용하는 계산법으로는 pseudo-potential을 이용하는 VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package), full potential을 사용하는 DV-X α (discrete variational X α)법 등 다양한 방법이 개발되어 있다. 여기서는, DV-X α 법을 중심으로 금속계 산화물의 벌크 및 표면 전자상태 계산에 대한 소개를 하고자 한다. 주로 DFT법을 배우고자 하는 연구자들과 이를 실제로 이용하여 계산을 행하는 사람들을 위하여 기본적인 계산과정과 이 과정에서 범하기 쉬운 오류에 대한 설명하고, ZnO, TiO₂, MnO₂ 등의 산화물을 예제로 하여 몇 개의 원자로 구성된 최소한의 클러스터 계산의 중요성 및 이를 통한 분자궤도의 해석에 대해 설명하고자 한다. 또한 최근 광촉매 및 염료감응형 태양전지용 전극으로 주목을 받고 있는 TiO₂의 표면해석 과정 및 결과를 보여줄 예정이다.