

DV- $X\alpha$ 분자궤도법을 이용한 CuO 및 Cu_2O 에서의 화학 결합 및 전자상태
 Chemical bonding and electronic state in cuprous and cupric oxide using DV- $X\alpha$
 method.

김영하, 김양수, 한영희*, 한상철*, 성태현*, 노광수
 한국과학기술원, *한국전력공사 전력연구원
 (kimads@kaist.ac.kr)

최근, Cu기판 위에 $YBaCuO_{7-x}$ 초전도체를 입혀 초전도 선재를 제작하려는 연구가 이루어지고 있으며 이 과정에서 CuO와 Cu_2O 가 생성된다는 보고가 있다. CuO 및 Cu_2O 의 생성은 초전도 선재의 전기전도적 특성 및 기계적 특성에 상당한 영향을 끼칠 수 있다. 따라서 CuO와 Cu_2O 에 대한 연구가 필요하다고 할 수 있다. 본 연구에서는 DV- $X\alpha$ 분자궤도법을 통해 CuO와 Cu_2O 에 대한 $(Cu_{29}O_{58})^{58-}$, $(Cu_{52}O_{19})^{14+}$ 모델을 이용하여 전자상태계산을 하였다. CuO, Cu_2O 의 valence orbital level 구조 및 DOS (Density of State)를 통해 Cu원자와 O원자간의 공유결합 세기를 측정하였으며 CuO, Cu_2O 서로간의 차이점을 분석하였다.