

# Electronic Structure Calculation for Experimentalist by Experimentalist

Bog G. Kim\*

Dept. of Physics, Pusan National University, Pusan 609-785

최근 들어 전자구조 계산을 위한 여러 가지 프로그램의 인터페이스가 향상되고, 컴퓨터의 사양이 비약적으로 발전하면서, 응집물리 실험가의 입장에서도 쉽게 전자구조 계산을 수행할 수 있게 되었다. 본 실험실의 그간의 경험을 바탕으로 실험가들의 입장에서 어떻게 전자구조 계산에 쉽게 접근할 수 있는지를 소개하고자 한다. 실험가의 입장에서 보면 전자구조 계산은 실험과 유사한 과정을 거쳐서 해 볼 수 있다. 우선 전자구조 계산을 위한 컴퓨터로는 현재 인텔 혹은 AMD의 6 core 1 CPU 시스템을 갖추면 크게 무리가 없다. 향후 2-4 CPU 워크스테이션, 또는 KISTI의 슈퍼컴퓨팅자원을 이용하면 장비 면에서는 아무런 무리가 없다. 본 실험실은 Gaussian Type 의 LCAO(Linear Combination of Atomic Orbit) 방법을 이용하는 CRYSTAL 이라는 상용프로그램과 Planewave pseudopotential 방법을 사용한 VASP의 상용프로그램을 사용하고 있다. 실제 계산에서는 “0: Dry run”, “1: Optimization” “2: Band and DOS”, “3: Phonon” “4: Other Calculations” 의 스텝을 사용하고 있다. 이는 실험에서 시료제작 - 시료제작 최적화 - 구조분석 - 저항/자성특성분석 - 다른 전문실험의 과정과 매우 유사하다. 본 튜토리얼에서는 이와 같은 방법을 자세히 하나하나씩 소개하고자 한다. 한편 최근의 계산 결과로 Layered ZnO 의 구조적 안정성에 관한 결과와 Binary Oxide 의 자성 구조 분석에 관한 결과도 함께 발표하고자 한다.

\*E-mail : [boggikim@pusan.ac.kr](mailto:boggikim@pusan.ac.kr)