

## 제 10회 고등과학원 전자구조계산학회

2014. 6. 19 ~ 2014. 6. 20

● 글\_김철운·경희대학교 물리학과 대학원생

제10회 고등과학원 전자구조계산학회가 지난 6월 19일부터 20일 이틀간 개최되었다. 본 학회는 제일원리 계산, 전산화학, 전산재료과학 등의 물성에 대한 정량적 수치연구와 방법론 개발 등을 주제로 15명의 초청연사와 포스터 세션으로 진행되어, 관련 분야 국내 연구자들의 최신 연구정보 교환 및 교류의 장이 되어 왔다.

Collective Phenomena에 대한 세션에서 이재일 교수는 용적 상태에서 반금속-강자성체가 되는 sp 반금속의 표면 전자적 성질과 자기적 특성에 대한 제일원리 계산 결과를 발표했다. 신영한 교수는 강자성과 압전성에 대한 일련의 연구와 2차원 압전물질에 대한 최근 연구에 대하여, 최형준 교수는 철의 자기모멘트의 자기 교환 커플링을 보기 위해 다양한 스핀에 대해서 iron pnictides와 chalcogenides의 전자적, 자기적 성질을 계산하고 수정된 엘리아스버그 이론을 이용한 초전도 특성에 대해 토의했다. 박경화 교수는 위상부도체인 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>의 이중접합 구조의 디락 계면을 조





사하고 자성이 있을 경우엔 어떻게 영향을 주는지 발표하였고, 진호섭 박사는 축퇴(degenerate)된 p-궤도와 d-궤도의 시스템에 큰 스핀궤도결합(spin-orbit coupling)의 영향에 대해 발표했다.

방법론 개발과 그 응용에 대한 세션에서, 이훈표 교수는 SrVO<sub>3</sub>에 대해 LDA+DMFT를 기반으로 한 LDA+DCA 계산 결과와 실험 결과를 비교하며 LDA+DCA를 소개하고 운동량 의존 자체에너지를 포함한 dual fermion 접근법을 발표했다. 권용경 교수는 더욱 정확한 응집에너지 계산을 위한 QMC 방법을 다양한 graphyne을 예시로 발표했다. 이인호 박사는 특정한 전자구조에 대한 재료물질 구조 최적화 방법에 대하여, 김형준 교수는 전자의 long-range 상관관계에서 오는 van der Waals 분산 상호작용을 어떻게 보다 정확하게 설명할 수 있는지에 금속과 알칼리 금속을 통한 예시를 들어 발표했다.

또, 표면/계면에 대한 연구 세션에는 유재준 교수가 LAO/STO 계면에서 전자가스의 조정과 근원, 산소결손이 전자구조에 주는 영향에 대한 연구와 이중 산화구조에서 전자적 산화-환원 가림에 대한 모델을 제시하고 발표했다. 최민석 박사는 산화물과 반도체 계면에서의 고정된 전하(fixed charge)와 수송자 웅덩이(carrier trap)를 해결하기 위해 산화 유전체의 불순물에 초점을 맞춘 연구결과를 발표했다.

마지막으로 에너지 관련 물질에 대해 함형철 박사는 Pd 기반의 다중 금속촉매에서 발생하는 촉매반응에 대한 연구, 한정우 교수는 고체 산화 연료전지의 산화환원반응을 향상하기 위한 연구, 박노정 교수는 에너지 저장/전환 관점에서 금속표면 위의 그래핀이나 산화물층에 대해 전자, 기하 구조에 대하여 발표했고, 김용현 교수는 SeeBeck 주사 현미경의 이론에 대해서 원자의 SeeBeck 효과를 제일원리 연구로 어떻게 수행할 수 있는지에 대해 발표했다.

전자구조계산학회는 다른 학회에 비하여 유사한 연구 방법과 주제를 가지고 모이기 때문에 많은 참가자가 본 학회를 통해 얻어가고 배워가는 것이 많을 것 같고, 내년에 열릴 제11회 전자구조계산학회도 기대된다.