Nonstoichiometric 이산화 우라늄의 點缺陷에 따른 電子構造*
Electronic Structure of Defects in Nonstoichiometric Uranium Dioxide.

임헌화, 윤연숙 , 박광헌,
경희대학교
경기도 용인시 기흥읍 서천1리

송근우
한국원자력연구소
대전광역시 유성구 덕진동 150

요약

UO_{2+x}의 결함구조(2:2:2 및 2:1:2 구조)에 대한 전자적 특성을 분명히 하기 위하여 tight-binding 방법과 ab initio pseudopotential 방법을 병행하였다. 결함구조는 공간에서 각각의 구조를 포함하는 주기적 경계조건을 만족하는 초단위포(supercell) 구조 방법을 이용하였다. 이웃 supercell 사이의 상호작용은 무시하였다. 두 구조에서의 원자의 위치를 총 에너지 최소화방법으로 결정하여 Willi의 결과와 비교하였다. 우리는 결함주위원자를 이완시킨 결과와 시키지않은 결과를 비교 검토하였으며 두 결함원자, 즉 변위 (dislocation)원자와 사이(interstitial)원자의 총 상태밀도와 국소 상태밀도를 계산하여 그들의 위치가 UO_2의 에너지갭(gap)내에 위치하고 있음을 확인하였다.