

액티나이드 산화물의 전자구조

The role of 5f Orbital in the Chemical Bonding and Electronic Structure of Actinide Dioxide.

윤연숙, 박광현, 임헌화

경희대학교

경기도 용인시 기흥읍 서천1리

송근우

한국 원자력 연구소

대전광역시 유성구 덕진동 150

요약

무결합(bulk) 결정 구조에 대한 전자구조는 물질내의 각종 결함과 불순물에 의한 물리적인 상태를 이해하는데 결정적인 정보를 준다. 핵연료로서의 물질 특성을 가지고 있는 actinide 원소들의 산화물(ThO_2 , UO_2 , PuO_2)에 대한 무결합 상태의 전자구조를 이해하기 위하여 tight-binding 방법과 ab initio total energy 계산방법에 의해 에너지 밴드와 상태 밀도 등을 계산하였다. 또한 actinide 원소들의 물리적, 화학적 특성을 지배하는 것으로 알려진 f-orbital의 특성과 bonding에서의 역할을 살펴보았으며, 계산 결과가 다른 실험이나 이론적 계산결과와 잘 일치함을 확인하였다.