(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년10월18일
(11) 등록번호 10-1909491
(24) 등록일자 2018년10월12일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G06F 19/00 (2018.01)
(52) CPC특허분류
G06F 19/703 (2013.01)
G06F 19/708 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2016-0119113
(22) 출원일자 2016년09월19일
심사청구일자 2016년09월19일
(65) 공개번호 10-2018-0031140
(43) 공개일자 2018년03월28일
(56) 선행기술조사문헌
남호현 외 1인, "제일원리 전자구조 총에너지 계산을 통한 산화물 격자 불안정성에 대한 결함 및 불순물 관점에서의 이해", 재료마당 제26권제5호, pp.14-21, 2013.09.*
Y. F. Zhukovskii 외 4인, "First-principles calculations of point defects in inorganic nanotubes", Physica Status Solidi B 250, No. 4, pp.793-800, 2013.03.20.*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
한국과학기술연구원
서울특별시 성북구 화랑로14길 5 (하월곡동)
(72) 발명자
김승철
서울특별시 성북구 화랑로14길 5
한상수
서울특별시 성북구 화랑로14길 5
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
박종한

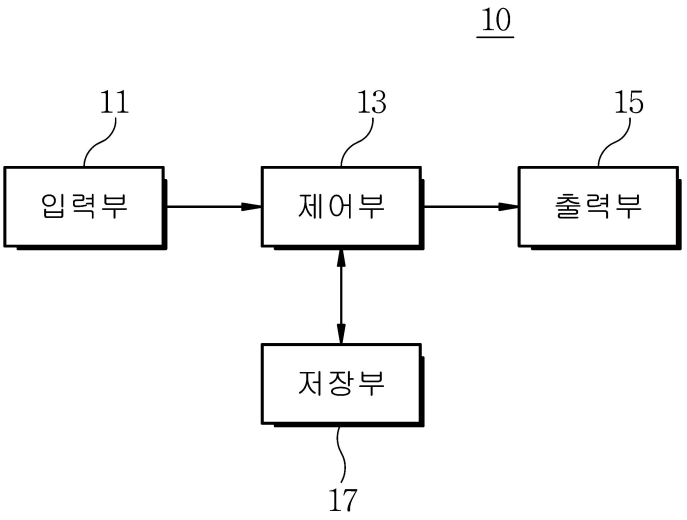
전체 청구항 수 : 총 9 항 심사관 : 성경아

(54) 발명의 명칭 **고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법 및 이를 지원하는 전자 장치**

(57) 요 약

본 발명은 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법 및 이를 지원하는 전자 장치가 개시된다. 본 발명의 전자 장치는 고체상 물질에서 호스트(host) 물질 및 불순물의 물질정보를 포함하는 사용자 입력을 수신하는 입력부 및 사용자 입력에 따라 적어도 일부의 불순물 구조 및 결함 구조를 생성하고, 생성된 불순물 구조 및 결함 구조의 에너지를 산출하며, 산출된 에너지를 기초로 불순물 구조 및 결함 구조의 열역학적 에너지를 산출하고, 산출된 열역학적 에너지를 기초로 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정하며, 결정된 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 특성을 분석하는 제어부를 포함한다.

대 표 도 - 도1



(72) 발명자

이광렬

서울특별시 성북구 화랑로14길 5

허가현

서울특별시 성북구 화랑로14길 5

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711038229
부처명	미래창조과학부
연구관리전문기관	한국연구재단
연구사업명	나노 · 소재기술개발
연구과제명	테마형 웹플랫폼 개발용 나노구조 모델링 및 전산모사 기법 집적화 기술 개발
기 여 율	1/1
주관기관	한국과학기술연구원
연구기간	2016.06.01 ~ 2017.02.28

명 세 서

청구범위

청구항 1

고체상 물질에서 호스트(host) 물질 및 불순물의 물질정보를 포함하는 사용자 입력을 입력받는 입력부; 및

상기 사용자 입력에 따라 적어도 일부의 불순물 구조 및 결함 구조를 생성하고, 상기 생성된 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 에너지를 산출하며, 상기 산출된 에너지를 기초로 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 열역학적 에너지를 산출하고, 상기 산출된 열역학적 에너지를 기초로 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정하며, 상기 결정된 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 특성을 분석하는 제어부;를 포함하되,

상기 제어부는,

상기 열역학적 에너지를 산출한 다음, 상기 불순물의 종류가 불충분하면 상기 불순물 구조를 추가로 생성하는 것을 특징으로 하는 전자 장치.

청구항 2

삭제

청구항 3

제 1항에 있어서,

상기 제어부는,

상기 불순물 구조의 농도가 기 설정된 기준보다 높은 경우, 이웃하는 불순물을 페르미 준위 기준으로 재설정하여 상기 열역학적 에너지를 재산출하는 것을 특징으로 하는 전자 장치.

청구항 4

제 3항에 있어서,

상기 기 설정된 기준은 0.01 atm% 내지 10 atm% 인 것을 특징으로 하는 전자 장치.

청구항 5

제 1항에 있어서,

상기 제어부는,

상기 불순물 구조 중 상기 열역학적 에너지를 산출한 계산의 정확도보다 높은 정확도를 필요로 하는 불순물 구조가 있는 경우, 상기 열역학적 에너지를 산출한 계산보다 높은 정확도를 가진 제일원리 총에너지 계산법을 이용하여 상기 열역학적 에너지를 재산출하는 것을 특징으로 하는 전자 장치.

청구항 6

제 1항에 있어서,

상기 제어부는,

호스트 물질 입력, 불순물 입력, 불순물 구조 및 결함 구조 입력, 불순물 구조 및 결함 구조 추가, 기준물질 입력 및 실행 중 적어도 하나의 사용자 입력을 입력하는 제1 메뉴와, 원자를 선택 또는 조작하거나 원자구조를 시각화하는 제1 시각화 윈도우를 제공하는 제1 사용자 인터페이스를 출력하도록 설정하는 것을 특징으로 하는 전자 장치.

청구항 7

제 1항에 있어서,

상기 제어부는,

온도 입력, 압력 입력, 불순물 구조 및 결함 구조 추가, 에너지 보정, 전자구조 분석 및 실행 중 적어도 하나의 사용자 입력을 입력하는 제2 메뉴와, 불순물 구조의 열역학적 에너지에 대한 그래프를 시각화하는 제2 시각화 윈도우와, 평형상태의 열역학적 에너지 및 불순물 구조의 농도를 시각화하는 제3 시각화 윈도우를 제공하는 제2 사용자 인터페이스를 출력하도록 설정하는 것을 특징으로 하는 전자 장치.

청구항 8

제 7항에 있어서,

상기 제어부는,

상기 전자구조 분석에 대한 메뉴가 선택되면, 상태밀도(Density of State, DOS), 부분상태밀도(Partial Density of States, PDOS), 연계상태밀도(Joint Density of States, JDOS), 국소상태밀도(Local Density of States, LDOS), 파동함수(Wave Function, WF), 전하밀도(rho), 전하밀도의 변화(Drho), 스핀밀도(spin density), 광흡수스펙트럼 및 실행 중 적어도 하나의 사용자 입력을 입력하는 제3 메뉴와, 분석된 결과를 그래프로 시각화하는 제4 시각화 윈도우와, 원자를 선택 또는 조작하거나 원자구조를 시각화하는 제5 시각화 윈도우를 제공하는 제3 사용자 인터페이스를 출력하도록 설정하는 것을 특징으로 하는 전자 장치.

청구항 9

컴퓨팅 장치를 기반으로 고체상 물질에서 호스트 물질 및 불순물의 물질정보를 포함하는 사용자 입력을 입력받는 단계;

상기 입력받은 사용자 입력에 따라 적어도 일부의 불순물 구조 및 결함 구조를 생성하는 단계;

상기 생성된 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 에너지를 산출하는 단계;

상기 산출된 에너지를 기초로 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 열역학적 에너지를 산출하는 단계;

상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 농도가 기 설정된 기준보다 높은 경우, 이웃하는 불순물 및 결함을 페르미 준위 기준으로 재설정하여 상기 산출된 불순물 구조 및 결함 구조의 열역학적 에너지를 재산출하는 단계;

상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조 중 상기 열역학적 에너지를 산출한 계산의 정확도보다 높은 정확도를 필요로 하는 불순물 구조 및 결함 구조가 있는 경우, 상기 열역학적 에너지를 산출한 계산보다 높은 정확도를 가진 제일원리 총에너지 계산법을 이용하여 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 열역학적 에너지를 재산출하는 단계;

상기 산출되거나 재산출된 열역학적 에너지를 기초로 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정하는 단계; 및

상기 결정된 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 특성을 분석하는 단계;

를 포함하는 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법.

청구항 10

컴퓨팅 장치를 기반으로 고체상 물질에서 호스트 물질 및 불순물의 물질정보를 포함하는 사용자 입력을 입력받는 단계;

상기 입력받은 사용자 입력에 따라 적어도 일부의 불순물 구조 및 결함 구조를 생성하는 단계;

상기 생성된 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 에너지를 산출하는 단계;

상기 산출된 에너지를 기초로 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 열역학적 에너지를 산출하는 단계;

상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 농도가 기 설정된 기준보다 높은 경우, 이웃하는 불순물 및 결함을 페르미 준위 기준으로 재설정하여 상기 산출된 불순물 구조 및 결함 구조의 열역학적 에너지를 재산출하는 단계;

상기 산출되거나 재산출된 열역학적 에너지를 기초로 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정하는 단계; 및

상기 결정된 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 특성을 분석하는 단계;

를 포함하는 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법.

청구항 11

삭제

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법에 관한 것으로, 보다 상세하게는 형광체, 광촉매 및 모든 비금속 고체상 소재와 같은 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법 및 이를 지원하는 전자 장치에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 현재, 고체상 물질에 임의적으로 불순물을 투입하여 불순물 구조, 기능, 종류, 농도, 열적인 안정성을 예측하고자 제일원리 총에너지 계산법을 이용하여 열역학적 자유에너지를 계산하고 있다. 즉, 하전된 불순물들 사이의 전하량 평형 조건으로부터 열평형 상태에서의 자유에너지, 농도 및 페르미 준위를 예측하는 방법을 사용하고 있다.

[0003] 하지만 이러한 방법은 저농도 도핑(doping)에서만 사용할 수 있으며, 고농도 도핑에서 사용할 경우 오차가 발생한다. 특히, 광학적 특성 변화를 위해 첨가되는 불순물의 농도는 수 %의 오차가 발생하고 있다.

[0004] 또한, 모든 불순물 구조에 대해 같은 제일원리 총에너지 계산법을 사용하기 때문에 사용한 제일원리 총에너지 계산법에 따라 주요 불순물의 농도 오차가 크거나 계산 효율이 떨어지는 현상이 발생한다.

[0005] 따라서, 고농도의 도핑 상황에서도 정확히 모사하고, 계산 효율과 정확도의 균형을 맞추는 산출방법이 필요한 실정이다.

선행기술문헌

특허문헌

[0006] (특허문헌 0001) 한국등록특허공보 제10-0704301호(2007.04.06)

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는 고체상 물질 내부에서 주어진 외부환경으로 인해 발생되는 점결함이 물성에 미치는 영향을 예측하는 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법 및 이를 지원하는 전자 장치를 제공하는데 목적이 있다.

[0008] 본 발명이 이루고자 하는 다른 기술적 과제는 물성 변화를 위해 도핑한 불순물 및 비의도적으로 도핑된 불순물 또는 자연발생된 결함의 영향을 예측하는 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법 및 이를 지원하는 전자 장치를 제공하는데 목적이 있다.

[0009] 본 발명이 이루고자 하는 또 다른 기술적 과제는 고농도 도핑 상황을 정확하게 모사하고, 계산 효율과 정확도의 균형을 맞추는 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법 및 이를 지원하는 전자 장치를 제공하는데 목적이 있다.

과제의 해결 수단

[0010] 상기 목적을 달성하기 위해, 본 발명에 따른 전자 장치는, 고체상 물질에서 호스트(host) 물질 및 불순물의 물질정보를 포함하는 사용자 입력을 입력받는 입력부 및 상기 사용자 입력에 따라 적어도 일부의 불순물 구조 및

결함 구조를 생성하고, 상기 생성된 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 에너지를 산출하며, 상기 산출된 에너지를 기초로 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 열역학적 에너지를 산출하고, 상기 산출된 열역학적 에너지를 기초로 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정하며, 상기 결정된 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 특성을 분석하는 제어부를 포함한다.

[0011] 또한 상기 제어부는, 상기 열역학적 에너지를 산출한 다음, 상기 불순물의 종류가 불충분하면, 상기 불순물 구조를 추가로 생성하는 것을 특징으로 한다.

[0012] 또한 상기 제어부는, 상기 불순물 구조의 농도가 기 설정된 기준보다 높은 경우, 이웃하는 불순물을 페르미 준위 기준으로 재설정하여 상기 열역학적 에너지를 재산출하는 것을 특징으로 한다.

[0013] 또한 상기 기 설정된 기준은 0.01 atm% 내지 10 atm% 인 것을 특징으로 한다.

[0014] 또한 상기 제어부는, 상기 불순물 구조 중 상기 열역학적 에너지를 산출한 계산의 정확도보다 높은 정확도를 필요로 하는 불순물 구조가 있는 경우, 상기 열역학적 에너지를 산출한 계산보다 높은 정확도를 가진 제일원리 총에너지 계산법을 이용하여 상기 열역학적 에너지를 재산출하는 것을 특징으로 한다.

[0015] 또한 상기 제어부는, 호스트 물질 입력, 불순물 입력, 불순물 구조 및 결함 구조 입력, 불순물 구조 및 결함 구조 추가, 기준물질 입력 및 실행 중 적어도 하나의 사용자 입력을 입력하는 제1 메뉴와, 원자를 선택 또는 조작하거나 원자구조를 시각화하는 제1 시각화 윈도우를 제공하는 제1 사용자 인터페이스를 출력하도록 설정하는 것을 특징으로 한다.

[0016] 또한 상기 제어부는, 온도 입력, 압력 입력, 불순물 구조 및 결함 구조 추가, 에너지 보정, 전자구조 분석 및 실행 중 적어도 하나의 사용자 입력을 입력하는 제2 메뉴와, 불순물 구조의 열역학적 에너지에 대한 그래프를 시각화하는 제2 시각화 윈도우와, 평형상태의 열역학적 에너지 및 불순물 구조의 농도를 시각화하는 제3 시각화 윈도우를 제공하는 제2 사용자 인터페이스를 출력하도록 설정하는 것을 특징으로 한다.

[0017] 또한 상기 제어부는, 상기 전자구조 분석에 대한 메뉴가 선택되면, 상태밀도(Density of State, DOS), 부분상태밀도(Partial Density of States, PDOS), 연계상태밀도(Joint Density of States, JDOS), 국소상태밀도(Local Density of States, LDOS), 파동함수(Wave Function, WF), 전하밀도(rho), 전하밀도의 변화(Drho), 스핀밀도(spin density), 광흡수스펙트럼 및 실행 중 적어도 하나의 사용자 입력을 입력하는 제3 메뉴와, 분석된 결과를 그래프로 시각화하는 제4 시각화 윈도우와, 원자를 선택 또는 조작하거나 원자구조를 시각화하는 제5 시각화 윈도우를 제공하는 제3 사용자 인터페이스를 출력하도록 설정하는 것을 특징으로 한다.

[0018] 본 발명에 따른 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법은, 컴퓨팅 장치를 기반으로 고체상 물질에서 호스트 물질 및 불순물의 물질정보를 포함하는 사용자 입력을 입력받는 단계, 상기 입력받은 사용자 입력에 따라 적어도 일부의 불순물 구조 및 결함 구조를 생성하는 단계, 상기 생성된 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 에너지를 산출하는 단계, 상기 산출된 에너지를 기초로 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 열역학적 에너지를 산출하는 단계, 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 농도가 기 설정된 기준보다 높은 경우, 이웃하는 불순물 및 결함을 페르미 준위 기준으로 재설정하여 상기 산출된 불순물 구조 및 결함 구조의 열역학적 에너지를 재산출하는 단계, 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조 중 상기 열역학적 에너지를 산출한 계산의 정확도보다 높은 정확도를 필요로 하는 불순물 구조 및 결함 구조가 있는 경우, 상기 열역학적 에너지를 산출한 계산보다 높은 정확도를 가진 제일원리 총에너지 계산법을 이용하여 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 열역학적 에너지를 재산출하는 단계, 상기 산출되거나 재산출된 열역학적 에너지를 기초로 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정하는 단계 및 상기 결정된 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 특성을 분석하는 단계를 포함한다.

[0019] 본 발명에 따른 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법은, 컴퓨팅 장치를 기반으로 고체상 물질에서 호스트 물질 및 불순물의 물질정보를 포함하는 사용자 입력을 입력받는 단계, 상기 입력받은 사용자 입력에 따라 적어도 일부의 불순물 구조 및 결함 구조를 생성하는 단계, 상기 생성된 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 에너지를 산출하는 단계, 상기 산출된 에너지를 기초로 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 열역학적 에너지를 산출하는 단계, 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 농도가 기 설정된 기준보다 높은 경우, 이웃하는 불순물 및 결함을 페르미 준위 기준으로 재설정하여 상기 산출된 불순물 구조 및 결함 구조의 열역학적 에너지를 재산출하는 단계, 상기 산출되거나 재산출된 열역학적 에너지를 기초로 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정하는 단계 및 상기 결정된 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 특성을 분석하는 단계를 포함한다.

[0020] 본 발명에 따른 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법은, 컴퓨팅 장치를 기반으로 고체상 물질에서 호스트 물질 및 불순물의 물질정보를 포함하는 사용자 입력을 입력받는 단계, 상기 입력받은 사용자 입력에 따라 적어도 일부의 불순물 구조 및 결함 구조를 생성하는 단계, 상기 생성된 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 에너지를 산출하는 단계, 상기 산출된 에너지를 기초로 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 열역학적 에너지를 산출하는 단계, 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조 중 상기 열역학적 에너지를 산출한 계산의 정확도보다 높은 정확도를 필요로 하는 불순물 구조 및 결함 구조가 있는 경우, 상기 열역학적 에너지를 산출한 계산보다 높은 정확도를 가진 제일원리 총에너지 계산법을 이용하여 상기 불순물 구조 및 상기 결함 구조의 열역학적 에너지를 재산출하는 단계, 상기 산출되거나 재산출된 열역학적 에너지를 기초로 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정하는 단계 및 상기 결정된 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 특성을 분석하는 단계를 포함한다.

발명의 효과

[0021] 본 발명에 따른 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법 및 이를 지원하는 전자 장치에 의하면, 고체상 물질 내부에서 주어진 외부환경으로 인해 발생되는 점결함이 물성에 미치는 영향을 예측할 수 있다.

[0022] 또한, 물성 변화를 위해 도핑한 불순물 및 비의도적으로 도핑된 불순물 또는 자연발생된 결함의 영향을 예측할 수 있다.

[0023] 또한, 고농도 도핑 상황을 정확하게 모사하고, 계산 효율과 정확도의 균형을 맞출 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0024] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 전자 장치의 구조를 설명하기 위한 도면이다.

도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법을 설명하기 위한 도면이다.

도 3은 본 발명의 다른 실시예에 따른 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법을 설명하기 위한 도면이다.

도 4는 본 발명의 또 다른 실시예에 따른 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법을 설명하기 위한 도면이다.

도 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 제1 사용자 인터페이스를 설명하기 위한 도면이다.

도 6은 본 발명의 일 실시예에 따른 제2 사용자 인터페이스를 설명하기 위한 도면이다.

도 7은 본 발명의 일 실시예에 따른 제2 시각화 윈도우를 설명하기 위한 도면이다.

도 8은 본 발명의 일 실시예에 따른 제3 사용자 인터페이스를 설명하기 위한 도면이다.

도 9는 본 발명의 일 실시예에 따른 제3 시각화 윈도우를 설명하기 위한 도면이다.

도 10은 본 발명의 일 실시예에 따른 제4 시각화 윈도우를 설명하기 위한 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0025] 이하 본 발명의 실시예를 첨부된 도면들을 참조하여 상세히 설명한다. 우선 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록 하고 있음에 유의한다. 또한 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 당업자에게 자명하거나 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

[0027] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 전자 장치의 구조를 설명하기 위한 도면이다.

[0028] 도 1을 참조하면, 전자 장치(10)는 고체상 물질 내부에서 주어진 외부환경으로 인해 발생되는 점결함(point defect)이 물성에 미치는 영향을 예측한다. 전자 장치(10)는 물성 변화를 위해 도핑한 불순물 및 비의도적으로 도핑된 불순물 또는 자연발생된 결함의 영향을 예측한다. 여기서, 불순물은 불순물과 점결함을 통틀어 사용될 수 있다.

[0029] 전자 장치(10)는 고농도 도핑 상황을 정확하게 모사하고, 계산 효율과 정확도의 균형을 맞춘다. 전자 장치는 데스트톱, 랩톱, 태블릿 PC, 핸드헬드 등의 컴퓨팅 장치일 수 있다. 전자 장치(10)는 입력부(11), 제어부(13), 출력부(15) 및 저장부(17)를 포함한다.

[0030] 입력부(11)는 고체상 물질에서 호스트(host) 물질 및 불순물의 물질정보를 포함하는 사용자 입력을 입력받는다. 즉, 입력부(11)는 호스트 물질, 불순물 및 결함의 물질정보, 호스트 물질의 크기, 불순물 구조, 결함 구조, 기준물질 등과 같이 불순물 구조 및 결함 구조에 대한 특성을 분석하는데 필요한 입력값을 입력받는다.

[0031] 제어부(13)는 입력부(11)에서 수신된 사용자 입력에 따라 적어도 일부의 불순물 구조 및 결함 구조를 생성한다. 즉, 제어부(13)는 사용자 입력에 따라 불순물 구조 및 결함 구조의 일부 또는 불순물 구조 및 결함 구조의 전부를 생성할 수 있다.

[0032] 이 때, 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조를 생성하기 전에 입력부(11)에서 입력된 가능한 불순물 및 결함의 종류를 기초로 불순물 및 결함의 기준물질을 정의한다. 여기서, 기준물질은 도핑 물질의 기준이 되는 물질을 의미한다. 제어부(13)는 불순물 및 결함의 기준물질을 후술되는 저장부(17)에 저장된 데이터를 불러와서 정의할 수 있다.

[0033] 제어부(13)는 생성된 불순물 구조 및 결함 구조의 에너지를 산출하고, 산출된 에너지를 기초로 각 구조의 열역학적 에너지를 산출한다. 이 때, 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조의 종류가 충분한지 판단을 하고, 만약 불충분한 경우, 불순물 구조 및 결함 구조를 추가적으로 생성할 수 있다. 여기서, 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조 중 어느 하나의 구조만 불충분한 경우, 불충분한 구조만을 추가할 수 있다.

[0034] 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조의 농도가 기 설정된 기준보다 높은 경우, 이웃한 불순물 및 결함 사이의 상호작용을 통해 열역학적 에너지를 재산출한다. 즉, 제어부(13)는 이웃한 불순물 및 결함 상의 전자 이동을 이용하여 열역학적 에너지를 보정한다. 예를 들면, 제어부(13)는 이웃한 불순물 및 결함을 페르미 준위 기준으로 재설정하여 이전에 산출된 불순물 구조 및 결함 구조의 열역학적 에너지를 재산출한다. 여기서, 기 설정된 기준은 0.01 atm% 내지 10 atm% 일 수 있으며, 바람직하게는 0.1 atm% 이상일 수 있다.

[0035] 또한 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조 중 열역학적 에너지를 산출한 계산의 정확도보다 높은 정확도를 필요로 하는 불순물 구조 및 결함 구조가 있는 경우, 열역학적 에너지를 산출한 계산보다 높은 정확도를 가진 제일원리 총에너지 계산법을 이용하여 열역학적 에너지를 재산출한다. 여기서, 높은 정확도를 필요로 하는 불순물 구조 및 결함 구조는 빈도수가 높은 불순물 구조 및 결함 구조일 수 있다. 이를 통해, 제어부(13)는 선택적으로 불순물 구조 및 결함 구조의 열역학적 에너지에 대한 계산을 할 수 있다. 즉, 제어부(13)는 보다 정밀한 계산이 필요한 불순물 구조 및 결함 구조에 대해 정밀한 계산을 수행할 수 있다.

[0036] 제어부(13)는 산출되거나 재산출된 열역학적 에너지를 기초로 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정한다. 여기서, 특정 불순물 구조는 불순물 구조 중 빈도수가 높은 불순물 구조이고, 특정 결함 구조는 결함 구조 중 빈도수가 높은 결함 구조일 수 있다. 즉, 제어부(13)는 불순물 구조 중 빈도수가 높은 불순물 구조 및 결함 구조 중 빈도수가 높은 결함 구조에 대한 종류 및 농도를 결정할 수 있다.

[0037] 제어부(13)는 결정된 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 특성을 분석한다. 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조에 대해 전자, 광학, 화학적 특성을 분석할 수 있다.

[0038] 출력부(15)는 전자 장치(10)를 수행하기 위한 사용자 인터페이스를 출력한다. 따라서, 출력부(15)는 사용자 인터페이스를 통해 제어부(13)에서 분석된 불순물 구조 및 결함 구조의 특성을 사용자에게 제공을 한다. 출력부(15)는 액정 디스플레이(liquid crystal display, LCD), 박막 트랜지스터 액정 디스플레이(thin film transistor-liquid crystal display, TFT LCD), 유기 발광 다이오드(organic light-emitting diode, OLED), 플렉시블 디스플레이(flexible display), 3차원 디스플레이(3D display) 중에서 적어도 하나를 포함할 수 있다. 특히, 출력부(15)가 터치스크린 기능을 구비하게 되면, 출력부(15)는 입력부(11)의 역할을 수행할 수 있다.

[0039] 저장부(17)는 입력부(11)에서 입력된 사용자 입력 및 제어부(13)에서 산출되거나 분석된 데이터가 저장된다. 특히, 저장부(17)에 저장된 데이터는 제어부(13)에 의해 불러질 수 있다. 저장부(17)는 플래시 메모리 타입(flash memory type), 하드디스크 타입(hard disk type), 미디어 카드 마이크로 타입(multimedia card micro type), 카드 타입의 메모리(예를 들어 SD 또는 XD 메모리 등), 램(Random Access Memory, RAM), SRAM(Static Random Access Memory), 롬(Read-Only Memory, ROM), EEPROM(Electrically Erasable Programmable Read-Only Memory), PROM(Programmable Read-Only Memory), 자기메모리, 자기 디스크, 광디스크 중 적어도 하나의 저장매

체를 포함할 수 있다.

[0041] 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법을 설명하기 위한 도면이다.

[0042] 도 1 및 도 2를 참조하면, 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법은 불순물이 고농도로 첨가된 상황에서 불순물의 영향을 예측하고, 계산의 정확도와 효율성을 향상시킬수 있다.

[0043] S101단계에서, 호스트 물질 및 불순물의 물질정보를 포함하는 사용자 입력을 입력받는다. 입력부(11)는 호스트 물질의 결정구조를 생성, 결정구조 파일을 업로드 및 저장부(17)에 저장된 결정구조를 불러오기를 수행하는 사용자 입력을 입력받는다. 여기서, 입력부(11)는 불순물이 도핑된 경우에만 불순물에 대한 사용자 입력을 입력받을 수 있다.

[0044] 예를 들면, 이산화 타이타늄(TiO_2)에 텅스텐(W)를 도핑하는 경우, 입력부(11)는 호스트 물질이 TiO_2로 선택되는 사용자 입력을 수신하고, 불순물이 W로 선택되는 사용자 입력을 수신할 수 있다.

[0046] S103단계에서, 호스트 물질의 크기를 결정하는 입력을 입력받는다. 입력부(11)는 호스트 물질이 선택된 다음 선택된 호스트 물질의 크기를 설정하는 사용자 입력을 입력받는다. 예를 들면, 입력부(11)는 1nm × 1nm ×1nm의 크기로 설정된 사용자 입력을 입력받을 수 있다.

[0047] S105단계에서, 가능한 불순물 및 결함의 종류에 대한 입력을 받는다. 입력부(11)는 불순물 및 결함의 종류를 선택하거나, 새롭게 종류를 생성하는 사용자 입력을 입력받는다. 예를 들면, 입력부(11)는 불순물의 인터스티셜(interstitial)이나 치환구조, 호스트 물질의 원자 공백, 안티사이트(antisite), 인터스티셜, 이러한 구조들의 조합 등을 입력받을 수 있다.

[0048] 여기서, 입력부(11)는 일부 또는 전체에 대한 불순물 및 결함의 종류에 대한 사용자 입력을 수신할 수 있다.

[0049] S107단계에서, 불순물 및 결함의 기준물질을 정의한다. 제어부(13)는 불순물 및 결함에 대한 기준이 되는 기준물질을 정의한다. 이 때, 제어부(13)는 입력부(11)로부터 사용자 입력을 수신하여 기준물질을 선택하거나 자동으로 선택하여 정의할 수 있다. 예를 들면, TiO_2에 W를 도핑하는 경우, W가 도핑된 구조, Ti와 O의 결함 구조 및 이들의 복합구조를 고려하고, W, O, Ti의 기준물질은 각각 W금속, WO_3고체, O_2분자, Ti금속, TiO_2고체가 될 수 있다.

[0050] S109단계에서, 불순물 및 결함의 기준물질에 대한 에너지를 산출한다. 제어부(13)는 기준물질의 에너지를 산출하거나 저장부(17)에 저장된 데이터로부터 각 원소들의 화학 퍼텐셜(chemical potential)을 산출한다.

[0051] S111단계에서, 불순물 구조 및 결함 구조를 생성한다. 제어부(13)는 입력부(11)에서 입력받은 불순물 구조 및 결함 구조에 대한 사용자 입력을 기초로 불순물 구조 및 결함 구조의 일부 또는 전체를 생성한다. 즉, 불순물 구조 및 결함 구조의 일부에 대한 정보만을 포함한 사용자 입력을 입력받은 경우, 제어부(13)는 사용자 입력에 따라 불순물 구조 및 결함 구조의 일부만을 생성하고, 불순물 구조 및 결함 구조의 나머지를 자동으로 생성한다. 또한 불순물 구조 및 결함 구조의 전체에 대한 정보를 포함한 사용자 입력을 입력받은 경우, 제어부(13)는 사용자 입력에 따라 불순물 구조의 전체를 생성한다.

[0052] 이 때, 제어부(13)는 각 도핑 및 결함의 구조에 하전되는 전하량을 설정할 수 있다. 예를 들면, 제어부(13)는 전하량을 -2, -1, 0, 1, 2로 설정할 수 있다.

[0053] S113단계에서, 불순물 구조 및 결함 구조의 에너지를 산출한다. 제어부(13)는 제일원리 총에너지 계산법을 이용하여 각 불순물 구조 및 결함 구조의 총에너지를 산출할 수 있다. 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조를 독립적으로 계산할 수 있다.

[0054] S115단계에서, 불순물 구조 및 결함 구조의 열역학적 에너지를 산출한다. 제어부(13)는 입력부(11)로부터 온도 및 압력에 대한 정보를 수신하고, 수신된 정보를 기초로 불순물 구조 및 결함 구조의 열역학적 에너지를 산출한다. 제어부(13)는 각 구조의 열역학적 에너지를 열역학적 변수에 대한 함수를 기초로 산출할 수 있다. 예를 들면, 제어부(13)는 온도 및 압력에 따른 각 원소의 화학 퍼텐셜을 산출하여 각 구조의 열역학적 에너지를 산출할 수 있다. 여기서, 압력은 주변 기체의 압력을 의미하며, 산소분압, 질소분압 등일 수 있다.

[0055] S117단계에서, 불순물 구조 및 결함 구조의 종류가 충분한지 판단한다. 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조의 종류가 기 설정된 기준보다 충분하지 않다고 판단하는 경우, 불순물 구조 및 결함 구조를 추가할 수 있다.

즉, 제어부(13)는 불순물 구조의 종류가 기 설정된 기준보다 충분하지 않다고 판단하는 경우, S111단계 이전으로 분기하여 이하 과정을 재수행할 수 있다. 여기서, 제어부(13)는 사용자 입력에 따라 S111단계 이전으로 분기하여 이하 과정을 재수행할 수도 있다.

[0056] S119단계에서, 불순물 구조 및 결함 구조의 농도가 기 설정된 기준보다 낮은지 판단한다. 제어부(13)는 평형상태에서 불순물 구조 및 결함 구조의 에너지가 전체 물질의 전하 중성조건으로 결정되는 것을 이용하여 불순물 구조 및 결함 구조의 농도를 산출한다. 제어부(13)는 평형상태에서의 에너지를 맥스웰-볼츠만 분포(Maxwell-Boltzmann distribution) 또는 페르미-디랙의 분포함수(Fermi-Dirac distribution function)에 적용하여 불순물 구조 및 결함 구조의 농도를 산출할 수 있다.

[0057] 제어부(13)는 불순물 구조의 농도가 기 설정된 기준보다 높은 경우, S121단계를 수행하여 불순물 구조의 열역학적 에너지를 보정을 하고, 아닌 경우, S121단계를 수행하지 않고 S123단계를 수행한다. 여기서, 기 설정된 기준은 0.01 atm% 내지 10 atm% 일 수 있으며, 바람직하게는 0.1 atm% 이상일 수 있다.

[0058] S121단계에서, 이웃한 불순물 및 결함 사이의 상호작용을 통해 열역학적 에너지를 재산출한다. 제어부(13)는 이웃한 불순물 및 결함 상의 전자 이동을 이용하여 열역학적 에너지를 보정한다. 예를 들면, 제어부(13)는 이웃한 불순물 및 결함을 페르미 준위 기준으로 재설정하여 열역학적 에너지를 재산출할 수 있다.

[0059] S123단계에서, 불순물 구조 및 결함 구조에 대한 계산의 정확도가 충분하지 판단한다. 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조에 대한 계산의 정확도가 충분하지 않다고 판단하는 경우, S125단계를 수행하여 불순물 구조 및 결함 구조의 열역학적 에너지를 보정하고, 아닌 경우, S125단계를 수행하지 않고 S127단계를 수행한다. 여기서, 계산의 정확도가 충분하지 않은 경우는 불순물 구조 및 결함 구조 중 열역학적 에너지를 산출한 계산의 정확도보다 높은 정확도를 필요로 하는 불순물 구조 및 결함 구조가 있는 경우일 수 있다.

[0060] S125단계에서, 보다 높은 정확도를 가진 제일원리 총 에너지 계산법을 이용하여 열역학적 에너지를 재산출한다. 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조 중 열역학적 에너지를 산출한 계산의 정확도보다 높은 정확도를 필요로 하는 불순물 구조 및 결함 구조를 선택하여 열역학적 에너지를 산출한 계산보다 높은 정확도를 가진 제일원리 총에너지 계산법을 이용하여 열역학적 에너지를 재산출한다. 여기서, 보다 높은 정확도를 필요로 하는 불순물 구조 및 결함 구조는 불순물 구조 및 결함 구조 중 빈도수가 높은 불순물 구조 및 결함 구조일 수 있다. 따라서, 제어부(13)는 불순물 구조 및 결함 구조 중 빈도수가 높은 불순물 구조 및 결함 구조를 선택하고, 선택한 불순물 구조 및 결함 구조에 대해 높은 정확도의 계산을 수행할 수 있다. 또한 제어부(13)는 열역학적 에너지에 대한 보정항을 추가할 수 있다.

[0061] S127단계에서, 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정한다. 여기서, 특정 불순물 구조는 불순물 구조 중 빈도수가 높은 불순물 구조이고, 특정 결함 구조는 결함 구조 중 빈도수가 높은 결함 구조일 수 있다. 즉, 제어부(13)는 불순물 구조 중 빈도수가 높은 불순물 구조 및 결함 구조 중 빈도수가 높은 결함 구조에 대한 종류 및 농도를 결정할 수 있다. 이 때, 제어부(13)는 특정 불순물 구조 및 특정 결함 구조의 종류 및 농도를 결정을 사용자 입력에 따라 결정할 수 있다.

[0062] S129단계에서, 주요 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 분석을 한다. 제어부(13)는 상태밀도(Density of State, DOS), 부분상태밀도(Partial Density of States, PDOS), 연계상태밀도(Joint Density of States, JDOS), 국소상태밀도(Local Density of States, LDOS), 파동함수(Wave Function, WF), 전하밀도(rho), 전하밀도의 변화(Delta rho, Drho), 스핀밀도(spin density) 및 광흡수스펙트럼 중 적어도 하나의 분석을 수행할 수 있다. 제어부(13)는 분석된 결과를 출력부(15)에서 출력할 수 있도록 설정할 수 있다.

[0064] 도 3은 본 발명의 다른 실시예에 따른 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법을 설명하기 위한 도면이고, 도 4는 본 발명의 또 다른 실시예에 따른 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법을 설명하기 위한 도면이다.

[0065] 도 2 내지 도 4를 참조하면, 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법은 사용되는 환경에 따라 다양한 방법으로 변형을 줄 수 있다.

[0066] 도 3에 도시된 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법(S201단계 내지 S225단계)은 도 2에 도시된 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법(S101단계 내지 S129단계)에서 S123단계 및 S125단계를 제외한 방법으로써, 계산의 정확도가 높은 경우 사용될 수 있다. 이를 통해, 도 3의 방법은 정확도 판단 및 보정으로 발생되는 시간 및 비용을 절감할 수 있다.

[0067] 또한 도 4에 도시된 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법(S301단계 내지 S325단계)은 도 2에 도시된 고체상 물질에서 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 산출방법(S101단계 내지 S129단계)에서 S119단계 및 S121단계를 제외한 방법으로써, 불순물 구조의 농도가 저농도일 경우 사용될 수 있다. 이를 통해, 도 4의 방법은 불순물 구조의 농도에 대한 판단 및 보정으로 발생되는 시간 및 비용을 절감할 수 있다.

[0069] 도 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 제1 사용자 인터페이스를 설명하기 위한 도면이다.

[0070] 도 1 및 도 5를 참조하면, 제1 사용자 인터페이스(50)는 계산에 필요한 변수에 대한 사용자 입력을 수신하도록 제공하는 사용자 인터페이스이다. 제1 사용자 인터페이스(50)는 제어부(13)로부터 출력되도록 설정되어 출력부(15)를 통해 출력될 수 있다. 제1 사용자 인터페이스(50)는 제1 메뉴(51) 및 제1 시각화 윈도우(58)로 구분된다.

[0071] 제1 메뉴(51)는 페이지의 왼쪽에 형성되고, 각 사용자 입력을 입력할 수 있도록 메뉴별로 분류된다. 제1 메뉴(51)는 호스트 물질 입력(52), 불순물 입력(53), 불순물 및 결함 구조 추가(54), 불순물 및 결함 구조 입력(55), 기준물질 입력(56) 및 실행(57)에 대한 메뉴를 포함한다.

[0072] 호스트 물질 입력(52)은 호스트 물질을 선택하거나 생성하는 메뉴이다. 호스트 물질 입력(52)은 크리스탈 빌더(crystal builder)를 이용하여 호스트 물질의 결정구조를 생성하거나, 사용자 입력으로 결정구조 파일을 업로드하거나, 저장부(17)에 저장된 결정구조를 불러와서 결정구조를 선택할 수 있는 기능을 지원한다. 또한 호스트 물질 입력(52)은 호스트 물질의 크기에 대한 설정하는 기능을 지원한다.

[0073] 불순물 입력(53)은 불순물을 선택하는 메뉴이다. 여기서, 불순물 입력(53)은 불순물이 도핑된 경우에만 입력을 하여 불순물을 선택하고, 불순물의 결함의 영향만을 보고자 할 경우에는 입력하지 않는다.

[0074] 불순물 및 결함 구조 추가(54)는 불순물 구조, 불순물 구조에 대한 에너지, 결함 구조 및 결함 구조에 대한 에너지를 추가하는 메뉴이다. 불순물 및 결함 구조 추가(54)는 계산에 필요한 불순물 구조, 불순물 구조에 대한 에너지, 결함 구조 및 결함 구조에 대한 에너지 중 적어도 하나가 불충분한 경우, 불순물 구조. 불순물 구조에 대한 에너지, 결함 구조 및 결함 구조에 대한 에너지가 충분해지도록 추가하는 기능을 지원한다.

[0075] 불순물 및 결함 구조 입력(55)은 불순물 구조 및 결함 구조를 선택하거나 생성하는 메뉴이다. 불순물 및 결함 구조 입력(55)은 불순물의 도핑 및 결함의 구조를 선택하거나 새롭게 생성하는 기능을 지원한다. 이 때, 불순물 구조 입력(55)은 불순물 구조 및 결함 구조의 일부 또는 전체에 대해 선택하거나 생성을 할 수 있다. 또한 불순물 및 결함 구조 입력(55)은 도핑 및 결함의 구조에 하전되는 전하량을 설정할 수 있다.

[0076] 기준물질 입력(56)은 기준물질을 선택하는 메뉴이다. 기준물질 입력(56)은 불순물 및 결함의 기준이 되는 물질인 기준물질을 선택하는 기능을 지원한다.

[0077] 실행(57)은 선택된 내용을 실행하는 메뉴이다. 실행(57)은 각각의 내용이 독립적으로 실행하는 기능을 지원한다. 즉, 실행(57)은 각각의 내용이 선택될 때마다 독립적으로 실행할 수 있도록 실행(57)이 활성화되면, 각각의 경우에 해당되는 사항만을 실행한다.

[0078] 제1 시각화 윈도우(58)는 페이지의 오른쪽에 형성되고, 제 1메뉴(51)을 통해 입력된 사항에 대해 시각적으로 표시한다. 제1 시각화 윈도우(58)는 원자를 선택하여 조작하거나 선택지에서 선택하는 기능을 지원한다. 또한 제1 시각화 윈도우(58)는 원자 구조를 시각화하여 사용자에게 시각효과를 제공할 수 있다.

[0080] 도 6은 본 발명의 일 실시예에 따른 제2 사용자 인터페이스를 설명하기 위한 도면이고, 도 7은 본 발명의 일 실시예에 따른 제2 시각화 윈도우를 설명하기 위한 도면이다.

[0081] 도 1, 도 5 내지 도 7을 참조하면, 제2 사용자 인터페이스(60)는 불순물 구조의 열역학적 에너지를 산출하도록 제공하는 사용자 인터페이스이다. 제2 사용자 인터페이스(60)는 제1 사용자 인터페이스(50)의 실행(57)을 수행한 후 제공되며, 제어부(13)로부터 출력되도록 설정되어 출력부(15)를 통해 출력될 수 있다. 제2 사용자 인터페이스(60)는 제2 메뉴(61), 제2 시각화 윈도우(68) 및 제3 시각화 윈도우(69)로 구분된다.

[0082] 제2 메뉴(61)는 페이지의 왼쪽에 형성되고, 각 사용자 입력을 입력할 수 있도록 메뉴별로 분류된다. 제2 메뉴(61)는 온도 입력(62), 압력 입력(63), 불순물 구조 추가(64), 에너지 보정(65), 전자구조 분석(66) 및 실행(67)에 대한 메뉴를 포함한다.

[0083] 온도 입력(62) 및 압력 입력(63)은 각각 온도와 압력에 대한 사용자 입력을 입력받는 메뉴이다. 온도 입력(62)은 주변 기체의 온도에 대한 사용자 입력을 입력하는 기능을 제공하고, 압력 입력(63)은 주변 기체의 압력에 대

한 사용자 입력을 입력하는 기능을 제공한다. 특히, 압력 입력(63)은 산소분압, 질소분압 등의 압력 변수를 입력할 수 있다.

[0084] 불순물 및 결함 구조 추가(64)는 제1 사용자 인터페이스(50)의 불순물 구조 추가(54)와 동일한 기능을 하는 메뉴이다. 즉, 불순물 및 결함 구조 추가(64)는 불순물 구조, 불순물 구조에 대한 에너지, 결함 구조 및 결함 구조에 대한 에너지를 추가하는 메뉴이다.

[0085] 에너지 보정(65)은 불순물 및 결함의 열역학적 에너지를 보정 방법 여부 및 보정 방법을 선택하는 메뉴이다. 에너지 보정(65)은 불순물 구조 및 결함 구조의 농도가 고농도인 경우, 이웃한 불순물 및 결함 상의 전자 이동을 이용하여 열역학적 에너지를 보정하는 기능을 지원한다. 즉, 에너지 보정(65)은 이웃한 불순물 및 결함을 페르미 준위의 기준으로 재설정하여 열역학적 에너지를 산출할 수 있다. 또한 에너지 보정(65)은 정밀한 계산이 필요한 불순물 구조 및 결함 구조를 선택하고, 이에 대한 열역학적 에너지를 보다 정확한 제일원리 총에너지 계산법으로 산출하는 기능을 지원한다.

[0086] 전자구조 분석(66)은 불순물 구조 및 결함 구조의 특성을 분석하는 메뉴이다. 전자구조 분석(66)은 후술되는 불순물 구조의 열역학적 에너지 그래프에서 각 선을 선택한 후, 선택된 선에 대한 전자구조 분석을 할 수 있다. 여기서, 전자구조 분석(66)은 열역학적 에너지 그래프의 선을 선택해야지만 메뉴가 활성화될 수 있다.

[0087] 실행(67)은 선택된 내용을 실행하는 메뉴이다. 실행(67)은 각각의 내용이 독립적으로 실행하는 기능을 지원한다. 즉, 실행(67)은 각각의 내용이 선택될 때마다 독립적으로 실행할 수 있도록 실행(67)이 활성화되면, 각각의 경우에 해당되는 사항만을 실행한다.

[0088] 제2 시각화 윈도우(68)는 페이지의 오른쪽에 상단에 형성되고, 불순물 구조의 열역학적 에너지 그래프를 시각적으로 표시한다. 제2 시각화 윈도우(68)는 도 7에 도시된 바와 같이 페르미 준위의 함수로 표시될 수 있다. 특히, 제2 시각화 윈도우(68)에 도시된 그래프의 각 선들은 마우스나 터치스크린 등의 방법으로 선택이 될 수 있다.

[0089] 제3 시각화 윈도우(69)는 페이지의 오른쪽 하단에 형성되고, 평형상태에서의 불순물 구조 및 결함 구조의 에너지와 불순물 농도를 시각적으로 표시한다. 제3 시각화 윈도우(69)는 제2 시각화 윈도우(68)에 도시된 그래프가 표시된 다음 실행(67)을 수행한 후 표시될 수 있다.

[0091] 도 8은 본 발명의 일 실시예에 따른 제3 사용자 인터페이스를 설명하기 위한 도면이고, 도 9는 본 발명의 일 실시예에 따른 제3 시각화 윈도우를 설명하기 위한 도면이며, 도 10은 본 발명의 일 실시예에 따른 제4 시각화 윈도우를 설명하기 위한 도면이다.

[0092] 도 1, 도 6 내지 도 10을 참조하면, 제3 사용자 인터페이스(80)는 불순물 구조 및 결함 구조의 특성 분석을 제공하는 사용자 인터페이스이다. 제3 사용자 인터페이스(80)는 제2 사용자 인터페이스(60)의 전자구조 분석(66)을 수행한 후에 제공되며, 제어부(13)로부터 출력되도록 설정되어 출력부(15)를 통해 출력될 수 있다. 제3 사용자 인터페이스(80)는 제3 메뉴(81), 제4 시각화 윈도우(88) 및 제5 시각화 윈도우(89)로 구분된다.

[0093] 제3 메뉴(81)는 페이지의 왼쪽에 형성되고, 각 사용자 입력을 입력할 수 있도록 메뉴별로 분류된다. 제3 메뉴(81)는 상태밀도(82), 부분상태밀도/연계상태밀도(83), 국소상태밀도(84), 파동함수/전하밀도/전하밀도의 변화/스핀밀도(85), 광흡수스펙트럼(86) 및 실행(87)에 대한 메뉴를 포함한다. 즉, 제3 메뉴(81)는 사용자에게 제공되는 메뉴에 따라 불순물 구조 및 결함 구조의 전자구조와 특성에 대한 분석을 지원을 한다.

[0094] 여기서, 제3 메뉴는 상태밀도, 부분상태밀도, 연계상태밀도, 국소상태밀도, 파동함수, 전하밀도, 전하밀도의 변화, 스핀밀도, 광흡수스펙트럼 및 실행 중 적어도 하나의 사용자 입력을 입력받거나 기본적으로 제공되는 값을 선택할 수 있다.

[0095] 제4 시각화 윈도우(88)는 페이지의 오른쪽 상단에 형성되고, 불순물 구조 및 결함 구조의 전자구조와 특성에 대한 분석된 결과를 시각적으로 표시한다. 제4 시각화 윈도우(88)는 상태밀도(82), 부분상태밀도/연계상태밀도(83), 광흡수스펙트럼(86)에서 분석된 결과를 그래프로 표시한다. 예를 들면, 제4 시각화 윈도우(88)는 상태밀도를 도 9에 도시된 그래프가 표시될 수 있다.

[0096] 제5 시각화 윈도우(89)는 페이지의 오른쪽 하단에 형성되고, 불순물 구조 및 결함 구조의 전자구조와 특성에 대한 분석된 결과를 시각적으로 표시한다. 제5 시각화 윈도우(89)는 파동함수/전하밀도/전하밀도의 변화/스핀밀도(85)에서 분석된 결과를 원자 구조, 공간에서 정의되는 함수 및 물리량을 표시한다. 예를 들면, 제5 시각화 윈

도우(89)는 도 10에 도시된 자기 모멘트(magnetic moment) 밀도가 표시될 수 있다.

[0098] 본 발명은 또한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체에 컴퓨터가 읽을 수 있는 코드로서 구현하는 것이 가능하다. 컴퓨터가 읽을 수 있는 기록매체는 컴퓨터 장치에 의하여 읽혀질 수 있는 데이터가 저장되는 모든 종류의 기록장치를 포함한다. 컴퓨터가 읽을 수 있는 기록매체의 예로는 하드디스크, ROM, RAM, CD-ROM, 하드 디스크, 자기테이프, 플로피 디스크, 광 데이터 저장장치 등이 있으며, 또한 캐리어 웨이브(예를 들어 인터넷을 통한 전송)의 형태로 구현되는 것도 포함한다.

[0099] 이상에서 본 발명의 바람직한 실시예에 대해 도시하고 설명하였으나, 본 발명은 상술한 특정의 바람직한 실시예에 한정되지 아니하며, 청구범위에서 청구하는 본 발명의 요지를 벗어남이 없이 당해 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자라면 누구든지 다양한 변형 실시가 가능한 것은 물론이고, 그와 같은 변경은 청구범위 기재의 범위 내에 있게 된다.

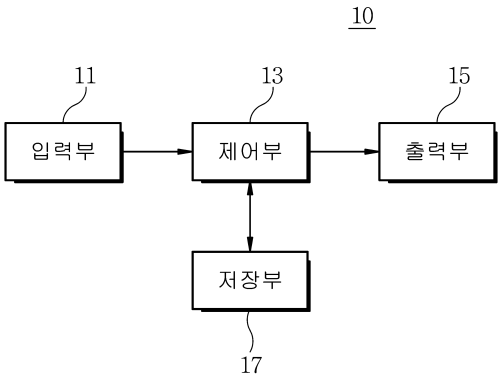
부호의 설명

[0100]

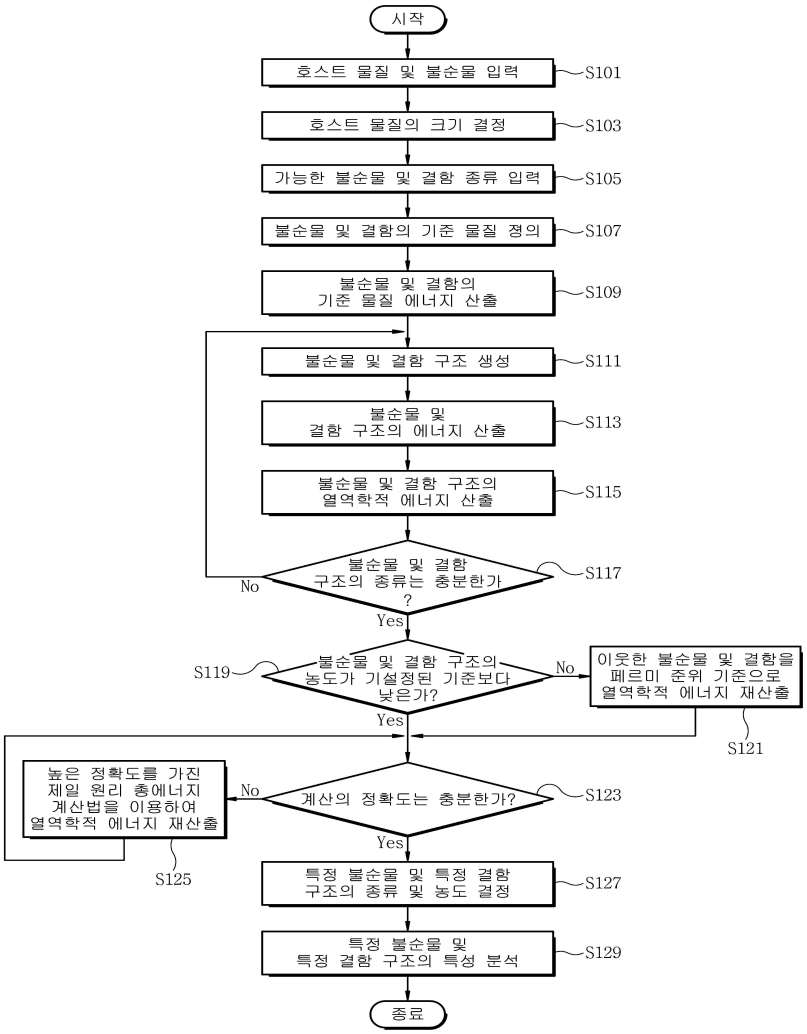
10: 전자 장치	11: 입력부
13: 제어부	15: 출력부
17: 저장부	50: 제1 사용자 인터페이스
51: 제1 메뉴	58: 제1 시각화 윈도우
60: 제2 사용자 인터페이스	61: 제2 메뉴
68: 제2 시각화 윈도우	69: 제3 시각화 윈도우
80: 제3 사용자 인터페이스	81: 제3 메뉴
88: 제4 시각화 윈도우	89: 제5 시각화 윈도우

도면

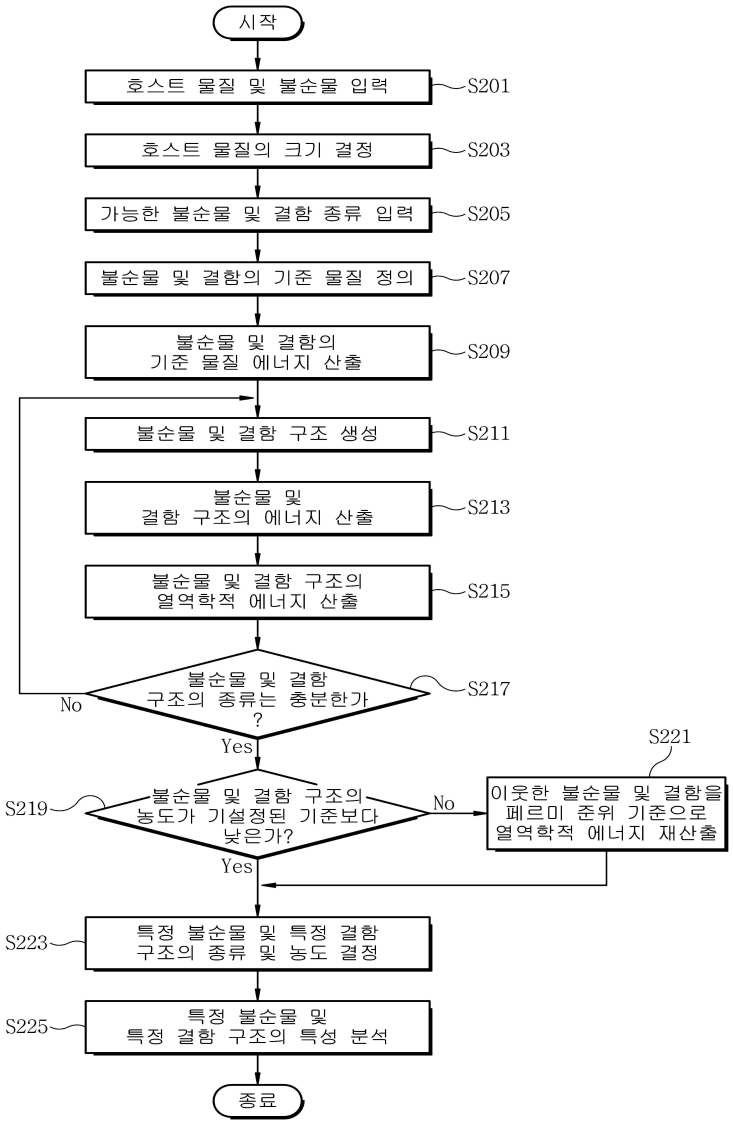
도면1



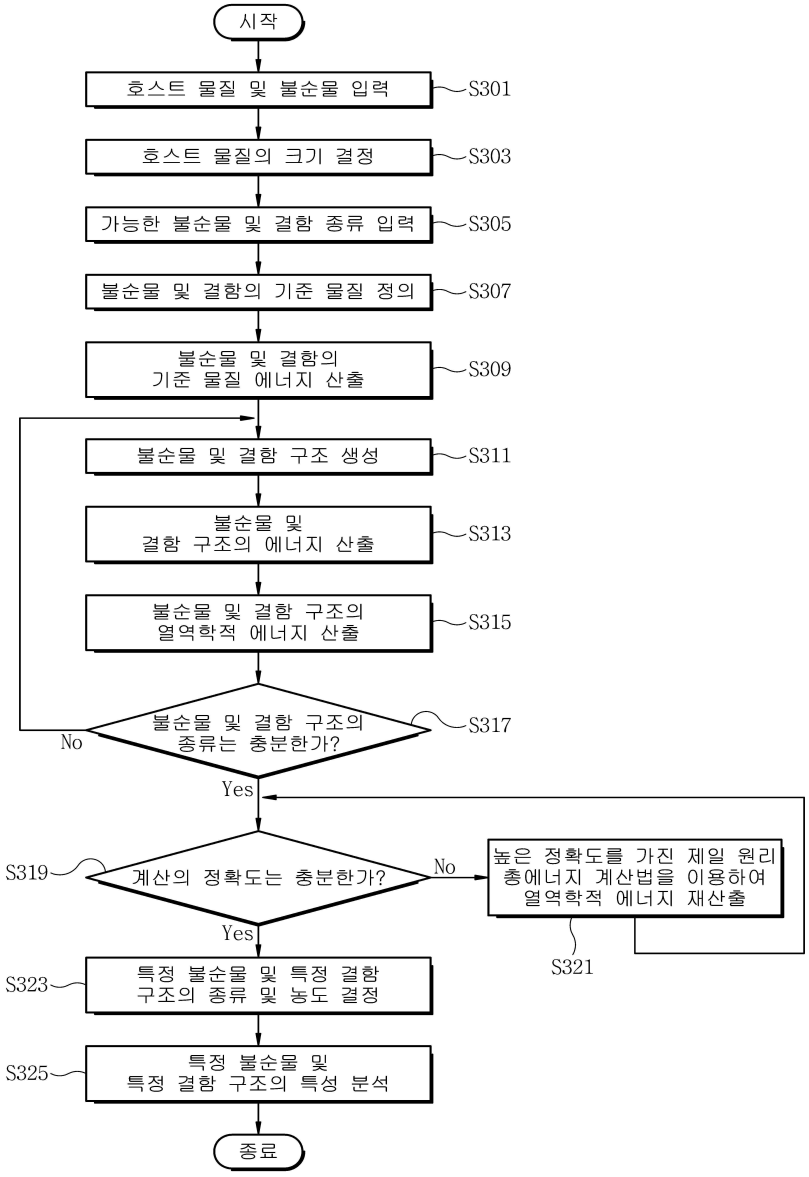
도면2


시작
호스트 물질 및 불순물 입력
S101
호스트 물질의 크기 결정
S103
가능한 불순물 및 결함 종류 입력
S105
불순물 및 결함의 기준 물질 정의
S107
불순물 및 결함의
기준 물질 에너지 산출
S109
불순물 및 결함 구조 생성
S111
불순물 및
결함 구조의 에너지 산출
S113
불순물 및 결함 구조의
열역학적 에너지 산출
S115
불순물 및 결함
구조의 종류는 충분한가
?
S117
No
Yes
S119
불순물 및 결함 구조의
농도가 기설정된 기준보다
낮은가?
No
이웃한 불순물 및 결함을
페르미 준위 기준으로
열역학적 에너지 재산출
S121
Yes
높은 정확도를 가진
제일 원리 총에너지
계산법을 이용하여
열역학적 에너지 재산출
S125
No
계산의 정확도는 충분한가?
S123
Yes
특정 불순물 및 특정 결함
구조의 종류 및 농도 결정
S127
특정 불순물 및
특정 결함 구조의 특성 분석
S129
종료

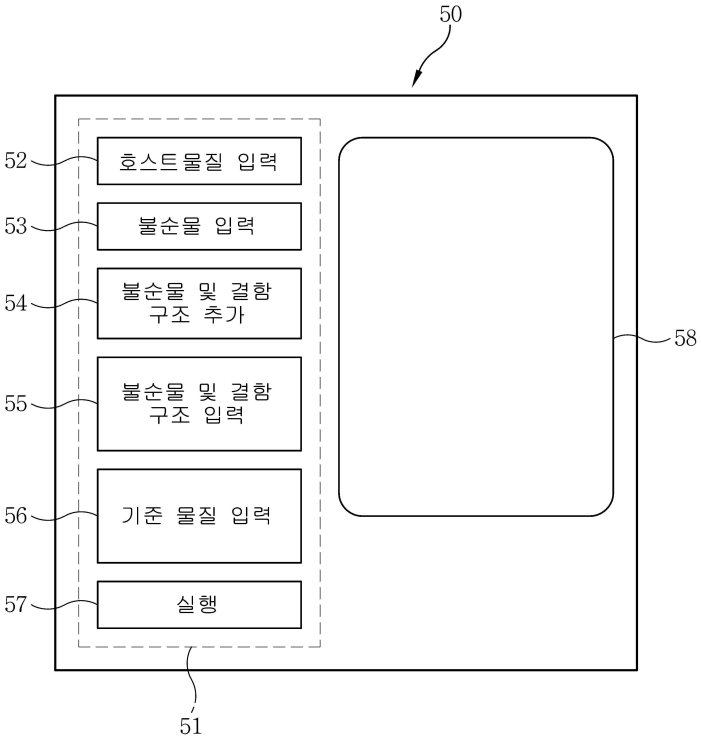
도면3


시작
호스트 물질 및 불순물 입력
S201
호스트 물질의 크기 결정
S203
가능한 불순물 및 결함 종류 입력
S205
불순물 및 결함의 기준 물질 정의
S207
불순물 및 결함의
기준 물질 에너지 산출
S209
불순물 및 결함 구조 생성
S211
불순물 및
결함 구조의 에너지 산출
S213
불순물 및 결함 구조의
열역학적 에너지 산출
S215
불순물 및 결함
구조의 종류는 충분한가
?
S217
No
Yes
S219
불순물 및 결함 구조의
농도가 기설정된 기준보다
낮은가?
No
Yes
S221
이웃한 불순물 및 결함을
페르미 준위 기준으로
열역학적 에너지 재산출
S223
특정 불순물 및 특정 결함
구조의 종류 및 농도 결정
S225
특정 불순물 및
특정 결함 구조의 특성 분석
종료

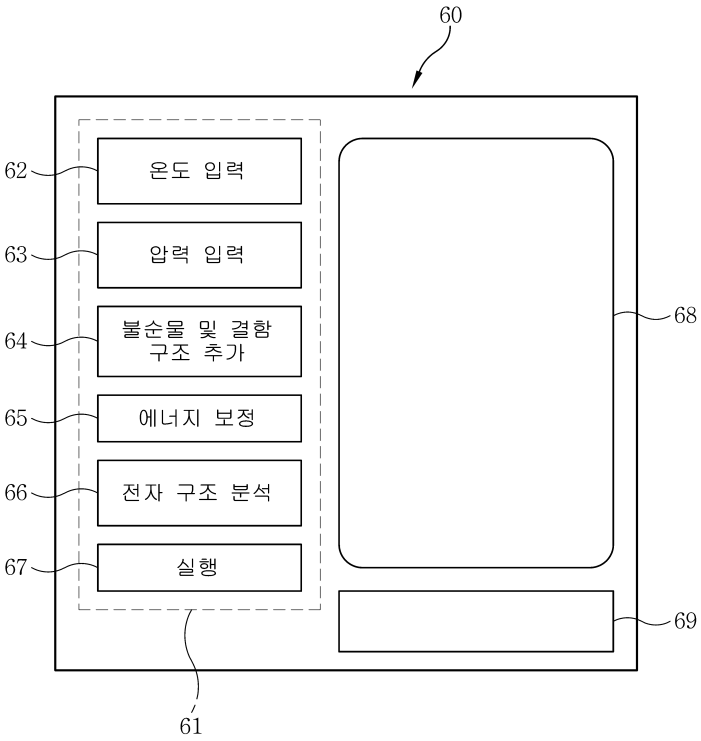
도면4


시작
호스트 물질 및 불순물 입력
S301
호스트 물질의 크기 결정
S303
가능한 불순물 및 결함 종류 입력
S305
불순물 및 결함의 기준 물질 정의
S307
불순물 및 결함의
기준 물질 에너지 산출
S309
불순물 및 결함 구조 생성
S311
불순물 및
결함 구조의 에너지 산출
S313
불순물 및 결함 구조의
열역학적 에너지 산출
S315
불순물 및 결함 구조의
종류는 충분한가?
S317
No
Yes
S319
계산의 정확도는 충분한가?
No
높은 정확도를 가진 제일 원리
총에너지 계산법을 이용하여
열역학적 에너지 재산출
S321
Yes
S323
특정 불순물 및 특정 결함
구조의 종류 및 농도 결정
S325
특정 불순물 및
특정 결함 구조의 특성 분석
종료

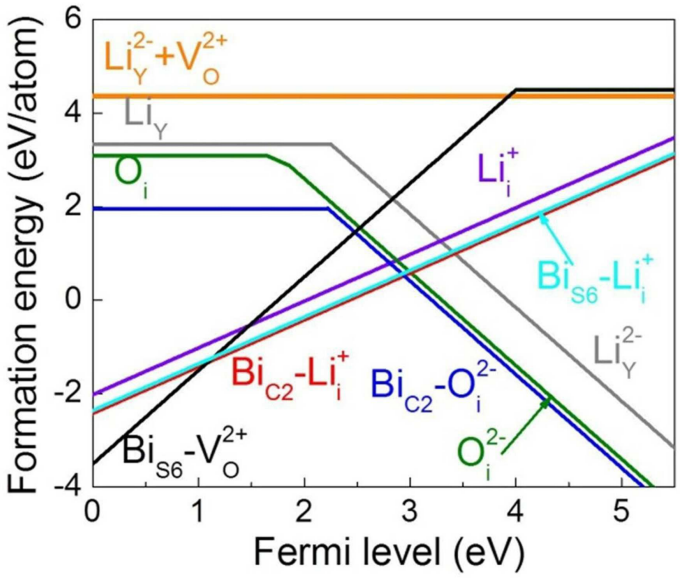
도면5


50
52
호스트물질 입력
53
불순물 입력
54
불순물 및 결함 구조 추가
55
불순물 및 결함 구조 입력
56
기준 물질 입력
57
실행
58
51

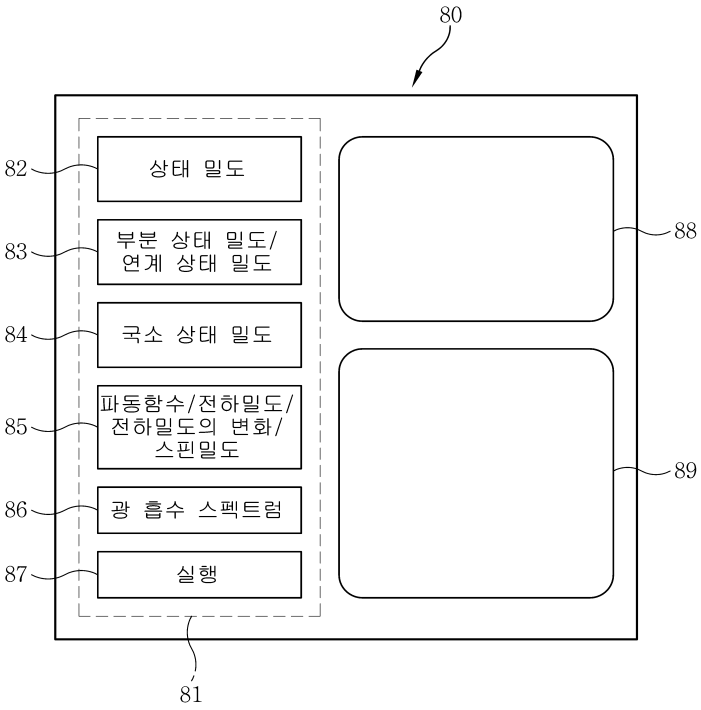
도면6


60
62
온도 입력
63
압력 입력
64
불순물 및 결함 구조 추가
65
에너지 보정
66
전자 구조 분석
67
실행
68
69
61

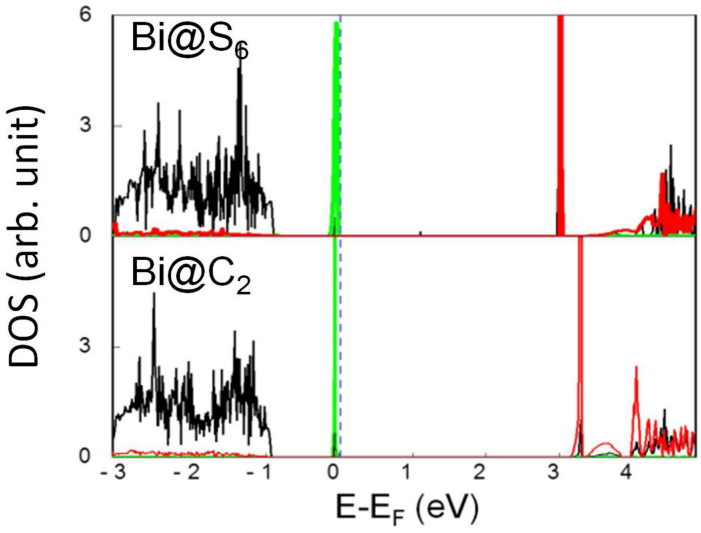
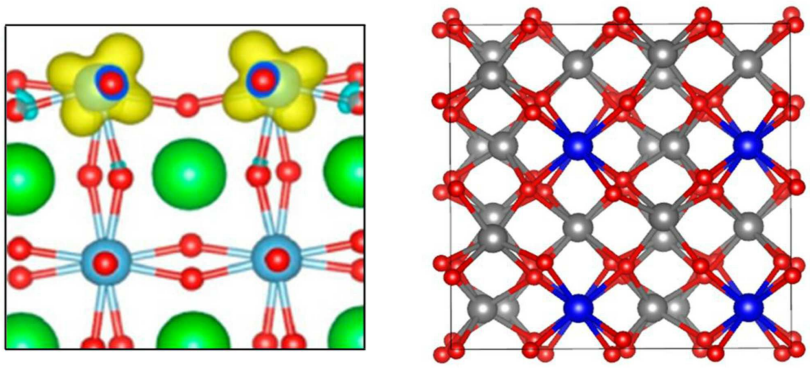
도면7


Formation energy (eV/atom)
Fermi level (eV)
$Li_Y^{2-}+V_O^{2+}$
Li_Y
O_i
Li_i^+
$Bi_{S6}-Li_i^+$
Li_Y^{2-}
$Bi_{C2}-Li_i^+$
$Bi_{C2}-O_i^{2-}$
$Bi_{S6}-V_O^{2+}$
O_i^{2-}

도면8


80
82
상태 밀도
83
부분 상태 밀도/
연계 상태 밀도
84
국소 상태 밀도
85
파동함수/전하밀도/
전하밀도의 변화/
스핀밀도
86
광 흡수 스펙트럼
87
실행
88
89
81

도면9



도면10