



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2021년09월06일  
(11) 등록번호 10-2299462  
(24) 등록일자 2021년09월01일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

G16C 20/30 (2019.01)

(52) CPC특허분류

G16C 20/30 (2019.02)

(21) 출원번호 10-2019-0009539

(22) 출원일자 2019년01월25일

심사청구일자 2019년01월25일

(65) 공개번호 10-2020-0092536

(43) 공개일자 2020년08월04일

(56) 선행기술조사문헌

Choi-Jun Yu, Advances in modelling and simulation of halide perovskites for solar cell applications(2019.1.14)

Ryotaro Aso, Atomic level observation of octahedral distortions at the perovskite oxide heterointerface(2013.7.16)

(73) 특허권자

연세대학교 산학협력단

서울특별시 서대문구 연세로 50 (신촌동, 연세대학교)

(72) 발명자

손알로이시우스

서울특별시 서대문구 성산로 394 JK캠퍼스 604호

장우선

서울특별시 강남구 일원로 127 가람아파트 107-201

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

김권석

전체 청구항 수 : 총 11 항

심사관 : 강민성

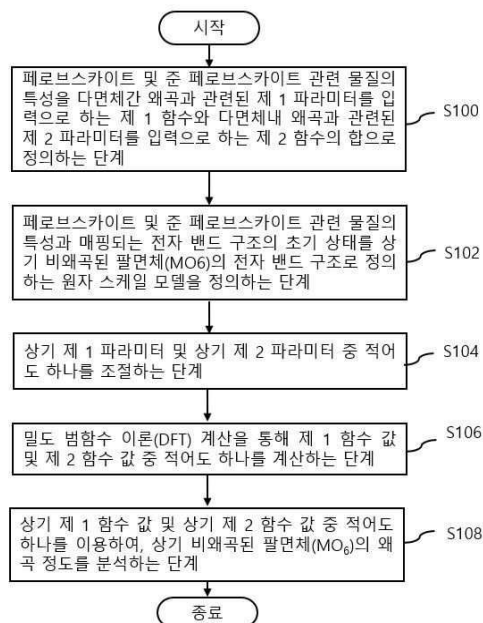
(54) 발명의 명칭 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법 및 장치

(57) 요약

본 발명은 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법 및 장치에 관한 것으로서, 다면체간 왜곡 및 다면체내 왜곡이 결합되는 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질의 물리-화학적 특성을 상기 다면체간 왜곡과 관련된 제 1 파라미터를 입력으로 하는 제 1 함수와 상기 다면체내 왜곡과 관련된 제 2 파라미터를 입력으로 하는 제 2 함수의 합으로 정의하는 단계

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1a



2 함수의 합으로 정의하는 단계; 하나의 금속 원소(M)가 중심에 위치하고 산소(O) 원소들이 6 개의 꼭지점에 위치하는 비왜곡된 팔면체(MO6)를 포함하는 정육면체 단위 셀을 정의하고, 상기 준 페로브스카이트 관련 물질의 물리-화학적 특성과 매핑되는 전자 밴드 구조의 초기 상태를 상기 비왜곡된 팔면체(MO6)의 전자 밴드 구조로 정의하는 원자 스케일 모델을 정의하는 단계; 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나를 조절하는 단계; 조절된 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나에 따라, 밀도 범함수 이론(density functional theory: DFT) 계산을 통해 제 1 함수 값 및 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 계산하는 단계; 및 상기 제 1 함수 값 및 상기 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 이용하여, 상기 비왜곡된 팔면체(MO6)의 왜곡 정도를 분석하는 단계를 포함하는 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법이 제공될 수 있다.

(72) 발명자

**윤종민**

서울특별시 마포구 백범로4길 26, 1층 (노고산동)

**이태훈**

서울특별시 마포구 만리재로 105 백상프로포즈오피스텔 1103호 (공덕동)

공지에외적용 : 있음

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

다면체간 왜곡 및 다면체내 왜곡 중 적어도 하나가 결합되는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질의 물리-화학적 특성을 상기 다면체간 왜곡과 관련된 제 1 파라미터를 입력으로 하는 제 1 함수와 상기 다면체내 왜곡과 관련된 제 2 파라미터를 입력으로 하는 제 2 함수의 합으로 정의하는 단계;

하나의 금속 원소(M)가 중심에 위치하고 산소(O) 원소들이 6 개의 꼭지점에 위치하는 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )를 포함하는 정육면체 단위 셀을 정의하고, 상기 페로브스카이트 및준 페로브스카이트 관련 물질의 물리-화학적 특성과 매핑되는 전자 밴드 구조의 초기 상태를 상기 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )의 전자 밴드 구조로 정의하는 원자 스케일 모델을 정의하는 단계;

상기 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )가 왜곡되도록 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나를 조절하는 단계;

조절된 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나에 따라, 밀도 범함수 이론(density functional theory: DFT) 계산을 통해 제 1 함수 값 및 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 계산하는 단계; 및

상기 제 1 함수 값 및 상기 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 이용하여, 상기 왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )의 왜곡 정도를 분석하는 단계를 포함하는 페로브스카이트 및준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법.

#### 청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 제 1 파라미터는 상기 팔면체의 각도 기울어짐(angle tilting) 및 개별 팔면체가 팔면체의 꼭지점, 모서리 또는 면을 통해 연결된 방식 중 적어도 하나를 포함하는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법.

#### 청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 제 2 파라미터는 상기 금속의 양이온이 상기 팔면체의 중심으로부터 벗어난 정도(metal off-center displacement), 상기 팔면체의 형상 및 상기 팔면체의 부피 중 적어도 하나를 포함하는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법.

#### 청구항 4

제 1 항에 있어서,

상기 제 1 함수 값 및 상기 제 2 함수 값 중 적어도 하나는 에너지 밴드 갭 및 상태 밀도(density of states: DOS) 중 적어도 하나를 포함하는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법.

#### 청구항 5

제 1 항에 있어서,

상기 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )의 왜곡 정도를 분석하는 단계는,

상기 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )의 왜곡에 대응하는 상기 준 페로브스카이트 관련 물질의 왜곡을 변수로 하여 에너지 밴드 갭을 매칭시키는 단계; 및

상기 준 페로브스카이트 관련 물질의 왜곡과 에너지 밴드 갭의 상관 관계를 이용하여 상기 에너지 밴드 갭을 정량 분석하는 단계를 포함하는 페로브스카이트 및준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법.

## 청구항 6

제 1 항에 있어서,

상기 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질은 이원계 삼산화물을 포함하며,

상기 이원계 삼산화물은 WO<sub>3</sub> 및 MoO<sub>3</sub> 중 하나를 포함하는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법.

## 청구항 7

삭제

## 청구항 8

제 1 항에 있어서,

상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 초기 부피는 하나의 금속 원소(M)가 중심에 위치하고 산소(O) 원소들이 6개의 꼭지점에 위치하는 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 부피로 정의되며,

상기 왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)는 최적화된 단사정계를 갖는 β-MoO<sub>3</sub> 또는 γ-WO<sub>3</sub> 구조체의 부피를 갖는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법.

## 청구항 9

제 1 항에 있어서,

상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 왜곡 정도는

이차신장(quadratic elongation:  $\lambda$ ) 및 결합 각 분산( $\sigma^2$ )을 포함하는 일반 측정 지표로 정량화되거나,

연속 형상 측정 방법(Continuous Shape Measurement Methodology: CShM)을 사용하여 정량화되거나,

인접한 2 개의 팔면체의 중심 금속 양이온들과 공유 꼭지점 산소 원자 사이의 각도( $\Theta_{MM}$ ), 2 개의 팔면체들의 기하학적 중심과 공유 꼭지점 산소 원자 사이의 각도( $\Theta_{OC}$ ) 및 인접한 팔면체에서 공유 꼭지점 산소 원자와 인접한 팔면체에서의 대각선 꼭지점 사이의 각도( $\Theta_{VV}$ ) 중 적어도 하나를 포함하는 기울어진 각도 측정을 통해 정량화되는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법.

## 청구항 10

제 9 항에 있어서,

상기 이차신장(quadratic elongation:  $\lambda$ )과 상기 결합 각 분산( $\sigma^2$ )은 하기 수학식으로 정의되는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법;

$$\langle \lambda \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{l_i}{l_0} \right)^2$$

여기서, n은 팔면체 내 중심 금속 원소의 배위수(coordination number)이고,  $l_i$ 는 중심 금속 원소에서 i번째 배위 원소(coordinating atom) 사이의 거리이고,  $l_0$ 는 동일한 부피의 이상적인 팔면체의 중심 금속 원소에서 꼭지점 사이의 거리임.

$$\sigma^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (\phi_i - \phi_0)^2$$

여기서, m은 결합 각도의 수,  $\phi_i$ 는 i번째 결합 각도이고,  $\phi_0$ 는 정팔면체의 이상적인 결합 각도임.

#### 청구항 11

제 9 항에 있어서,

상기 연속 형상 측정 방법은 하기 수학식으로 표현되는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법.

$$S = \min \left[ \frac{\sum_{i=1}^N |\vec{q}_i - \vec{p}_i|^2}{\sum_{i=1}^N |\vec{q}_i - \vec{q}_0|^2} \right] \times 100$$

여기서, N은 팔면체의 꼭지점 개수이며,  $\vec{p}_i$ 와  $\vec{q}_i$ 은 N 개의 팔면체의 꼭지점을 갖는 시스템에서 왜곡과 대칭된 구속 구조(distorted and symmetric constrained structure)의 원자 좌표(atomic coordinates)의 벡터이고,  $\vec{q}_0$ 는 기하학적 중심의 원자 위치에서 파생되는 벡터임.

#### 청구항 12

페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 장치로서,

하나 이상의 프로세서;

메모리; 및

상기 메모리에 저장되고 상기 하나 이상의 프로세서에 의해 실행되도록 구성되는 하나 이상의 프로그램을 포함하고, 상기 하나 이상의 프로그램은,

다면체간 왜곡 및 다면체내 왜곡 중 적어도 하나가 결합되는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질의 물리-화학적 특성을 상기 다면체간 왜곡과 관련된 제 1 파라미터를 입력으로 하는 제 1 함수와 상기 다면체내 왜곡과 관련된 제 2 파라미터를 입력으로 하는 제 2 함수의 합으로 정의하고,

하나의 금속 원소(M)가 중심에 위치하고 산소(O) 원소들이 6 개의 꼭지점에 위치하는 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)를 포함하는 정육면체 단위 셀을 정의하고, 상기 준 페로브스카이트 관련 물질의 물리-화학적 특성과 매핑되는 전자 밴드 구조의 초기 상태를 상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 전자 밴드 구조로 정의하는 원자 스케일 모델을 정의하고,

상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)가 왜곡되도록 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나를 조절하고,

조절된 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나에 따라, 밀도 범함수 이론(density functional theory: DFT) 계산을 통해 제 1 함수 값 및 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 계산하고,

상기 제 1 함수 값 및 상기 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 이용하여, 상기 왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 왜곡 정도를 분석하는 단계를 포함하는 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 장치.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 페로브스카이트 물질에 대한 분석 기술에 관한 것으로서, 더욱 상세하게는, 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법 및 장치에 관한 것이다.

## 배경 기술

[0003] 페로브스카이트 구조 물질( $ABX_3$ )은 뛰어난 물리 화학적 특성으로 오랫동안 알려져 있으며 불균일 촉매 작용(heterogeneous catalysis), 광전 소자, 연료 전지 및 다강체(multiferroic) 같은 광범위한 핵심 소재 기술 분야에서 활용되고 있다. 상기 페로브스카이트 구조 물질 같은 기능성 재료의 다양성은 결정 구조와 전자 구조가 복잡하게 연관되어 발생한다. 특히, 팔면체 내 왜곡 및 팔면체 간 왜곡이  $ABX_3$  구조를 가지는 물질들의 전자 구조를 설계하는 데 사용될 수 있는 핵심 인자임은 많은 연구들을 통해 보고된 바 있다.

[0004] 동일한  $ABX_3$  결정 구조를 가지는 할로젠 원소 기반 (할라이드 하이브리드) 페로브스카이트 물질들은 이를 활용해 제작한 태양 전지의 효율 (20 % 이상)을 증가시키는 것으로 알려졌으며, 우수한 가격 경쟁력과 합성의 용이성으로 인해 각광받고 있다. 실제로, 결정 구조 내부에 자리한 원자들의 공간적 배치에 관한 공학적 접근이 할로젠 화물 페로브스카이트의 광학적 밴드 갭을 조정하는 효과적인 수단이 될 수 있으며, 특히 할로젠화물 페로브스카이트의 팔면체 기울어짐(octahedral tilting)이 중요한 역할을 수행하는 것으로 보고되고 있다.

[0006] 종래의  $ABX_3$  페로브스카이트들의 구조-특성(structure-property) 관계는 이상적인 팔면체의 프레임워크 내(즉, 팔면체 내에서 강한 구조적 왜곡이 없는 환경)에서 미세하게 제어된 팔면체 간 왜곡을 조사함으로써 분석되고 있다. 이를 활용하면 광전자 특성(특히, 밴드 갭 에너지,  $E_g$ )을 에너지 소자에 맞게 제어하기 위한 기울어짐(tilting) 조정 기반 설계 규칙을 도출해낼 수 있다.

[0007] 또한,  $ABX_3$  페로브스카이트의 하위 클래스인 이원계 삼산화물(예컨대,  $WO_3$  및  $MoO_3$ 에서와 같이, 페로브스카이트 내에 A 양이온 자리가 비어 있는  $BO_3$ )는 광 촉매 및 유기 디바이스들 내에서의 캐리어 수송층과 같은 차세대 에너지 기술에서 중요한 역할을 하는 소재로서 활발히 연구되고 있다. 삼원계 산화물(ternary oxide) 대응물과 유사하게, 상기 이원계 삼산화물의 전자 구조가 원자 배열과 특정 결정 구조에 강한 의존성을 보인다는 점에서 이러한 이원계 삼산화물의 특성이 조절될 수 있다. 그러나,  $ABX_3$  페로브스카이트의 상위 클래스와 달리, 상기 이원계 삼산화물의 구조-특성 관계는, 구성 팔면체 프레임워크가 상위 클래스보다 훨씬 더 큰 구조적 변형을 겪으며, 팔면체 내 왜곡 및 팔면체 간 왜곡이 강하게 결합되어 있어 각각의 영향을 분리하기 어렵다는 점에서  $ABX_3$  페로브스카이트의 상위 클래스보다 이해 및 분석하는 것이 매우 난해하다.

[0008] 전술한 페로브스카이트 구조 물질( $ABX_3$ )에서 A 금속 원자의 존재로 인하여  $ABX_3$ 의 단위 구조체가 되는 다면체의 왜곡이  $MoO_3$ 이나  $WO_3$ 과 같은 이원계 삼산화물의 준 페로브스카이트에 비해 매우 작다. 특히,  $ABX_3$ 를 구성하는 다면체내 왜곡이 거의 없기 때문에 밴드 갭의 조정 가능 범위가 매우 좁다. 그러나, 상기 이원계 산화물은 A 금속 원자의 부재로 인해 다면체 왜곡 가능 범위가 훨씬 넓으며, 이에 기인한 밴드 갭 조정 가능 범위가 매우 넓어 이의 활용 범위가  $ABX_3$ 에 비해 매우 광범위하다.

[0009] 그러나, 기존의 분석 기술들은 다면체내 왜곡과 다면체간 왜곡을 분리하여 분석하기 어려우며, 다면체내 왜곡과 다면체간 왜곡을 분리하지 못하는 형태의 다면체 왜곡 서술자(descriptor)를 혼용함으로써 정량적인 설계 방법론을 제공하기 어렵다.

## 발명의 내용

### 해결하려는 과제

[0011] 본 발명이 해결하고자 하는 기술적 과제는, 팔면체 내 왜곡 및 팔면체 간 왜곡이 강하게 결합되어 있는 페로브스카이트 혹은 유사한 구조를 가지는 물질들의 구조-특성 관계를 활용할 수 있는 정량적인 설계 방법론을 제공하는 것이다.

### 과제의 해결 수단

[0013] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 면체내 왜곡 중 적어도 하나가 결합되는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질의 물리-화학적 특성을 상기 다면체간 왜곡과 관련된 제 1 파라미터를 입력으로 하는 제 1 함수와 상기 다면체내 왜곡과 관련된 제 2 파라미터를 입력으로 하는 제 2 함수의 합으로 정의하는

단계; 하나의 금속 원소(M)가 중심에 위치하고 산소(O) 원소들이 6 개의 꼭지점에 위치하는 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)를 포함하는 정육면체 단위 셀을 정의하고, 상기 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 물리-화학적 특성과 매핑되는 전자 밴드 구조의 초기 상태를 상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 전자 밴드 구조로 정의하는 원자 스케일 모델을 정의하는 단계; 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나를 조절하는 단계; 조절된 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나에 따라, 밀도 범함수 이론(density functional theory: DFT) 계산을 통해 제 1 함수 값 및 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 계산하는 단계; 및 상기 제 1 함수 값 및 상기 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 이용하여, 상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 왜곡 정도를 분석하는 단계를 포함하는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법이 제공될 수 있다.

[0014] 일 실시예에서, 상기 제 1 파라미터는 상기 팔면체의 각도 기울어짐(angle tilting) 및 개별 팔면체가 팔면체의 꼭지점, 모서리 또는 면을 통해 연결된 방식 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 상기 제 2 파라미터는 상기 금속의 양이온이 상기 팔면체의 중심으로부터 벗어난 정도(metal off-center displacement), 상기 팔면체의 형상 및 상기 팔면체의 부피 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 상기 제 1 함수 값 및 상기 제 2 함수 값 중 적어도 하나는 에너지 밴드 갭 및 상태 밀도(density of states: DOS) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0015] 일 실시예에서, 상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 왜곡 정도를 분석하는 단계는, 상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 왜곡에 대응하는 상기 준 페로브스카이트 관련 물질의 왜곡을 변수로 하여 에너지 밴드 갭을 매칭시키는 단계; 및 상기 준 페로브스카이트 관련 물질의 왜곡과 에너지 밴드 갭의 상관 관계를 이용하여 상기 에너지 밴드 갭을 정량 분석하는 단계를 포함할 수 있다.

[0016] 일 실시예에서, 상기 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질은 이원계 삼산화물을 포함하며, 상기 이원계 삼산화물은 WO<sub>3</sub> 및 MoO<sub>3</sub> 중 하나를 포함할 수 있다. 상기 밀도 범함수론(Density functional theory: DFT) 계산은 VASP(Vienna Ab initio Simulation Package)를 통해 수행될 수 있다.

[0017] 일 실시예에서, 상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 초기 부피는 최적화된 단사정계를 갖는 β-MoO<sub>3</sub>와 γ-WO<sub>3</sub> 구조체의 부피로 설정될 수 있다.

[0018] 일 실시예에서, 상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 왜곡 정도는 이차신장(quadratic elongation: λ) 및 결합 각 분산(σ<sup>2</sup>)을 포함하는 일반 측정 지표로 정량화되거나, 연속 형상 측정 방법(Continuous Shape Measurement Methodology: CShM)을 사용하여 정량화되거나, 인접한 2 개의 팔면체의 중심 금속 양이온들과 공유 꼭지점 산소 원자 사이의 각도(θ<sub>MVM</sub>), 2 개의 팔면체들의 기하학적 중심과 공유 꼭지점 산소 원자 사이의 각도(θ<sub>CVC</sub>) 및 인접한 팔면체에서 공유 꼭지점 산소 원자와 인접한 팔면체에서의 대각선 꼭지점 사이의 각도(θ<sub>VVV</sub>) 중 적어도 하나를 포함하는 기울어진 각도 측정을 통해 정량화될 수 있다.

[0019] 일 실시예에서, 상기 이차신장(quadratic elongation: λ)과 결합 각 분산(σ<sup>2</sup>)은 하기 수학식으로 정의될 수 있다.

$$\langle \lambda \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{l_i}{l_0} \right)^2$$

[0020]

[0021] 여기서, n은 팔면체 내 중심 금속 원소의 배위수(coordination number)이고,  $l_i$ 는 중심 금속 원소에서 i번째 배위 원소(coordinating atom) 사이의 거리이고,  $l_0$ 는 동일한 부피의 이상적인 팔면체의 중심 금속 원소에서 꼭지점 사이의 거리임.

$$\sigma^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (\phi_i - \phi_0)^2$$

[0022]

[0023] 여기서, m은 결합 각도의 수,  $\phi_i^{\text{th}}$ 는 i번째 결합 각도이고,  $\phi_0$ 는 정팔면체의 이상적인 결합 각도임.



[0024] 일 실시예에서, 상기 연속 형상 측정 방법은 하기 수학식으로 표현될 수 있다.

$$S = \min \left[ \frac{\sum_{i=1}^N |\vec{q}_i - \vec{p}_i|^2}{\sum_{i=1}^N |\vec{q}_i - \vec{q}_0|^2} \right] \times 100$$

[0025]

[0026] 여기서, N은 팔면체의 꼭지점 개수이며,  $\vec{p}_i$  와  $\vec{q}_i$  은 N 개의 팔면체의 꼭지점을 갖는 시스템에서 왜곡과 대칭된 구속 구조(distorted and symmetric constrained structure)의 원자 좌표(atomic coordinates)의 벡터이고,  $\vec{q}_0$  는 기하학적 중심의 원자 위치에서 파생되는 벡터임.

[0027] 본 발명의 다른 실시예에 따르면, 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 장치로서, 하나 이상의 프로세서; 메모리; 및 상기 메모리에 저장되고 상기 하나 이상의 프로세서에 의해 실행되도록 구성되는 하나 이상의 프로그램을 포함하고, 상기 하나 이상의 프로그램은, 다면체간 왜곡 및 다면체내 왜곡 중 적어도 하나가 결합되는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질의 물리-화학적 특성을 상기 다면체간 왜곡과 관련된 제 1 파라미터를 입력으로 하는 제 1 함수와 상기 다면체내 왜곡과 관련된 제 2 파라미터를 입력으로 하는 제 2 함수의 합으로 정의하고, 하나의 금속 원소(M)가 중심에 위치하고 산소(O) 원소들이 6 개의 꼭지점에 위치하는 비왜곡된 팔면체(MO6)를 포함하는 정육면체 단위 셀을 정의하고, 상기 준 페로브스카이트 관련 물질의 물리-화학적 특성과 매핑되는 전자 밴드 구조의 초기 상태를 상기 비왜곡된 팔면체(MO6)의 전자 밴드 구조로 정의하는 원자 스케일 모델을 정의하고, 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나를 조절하고, 조절된 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나에 따라, 상기 밀도 범함론(Density functional theory: DFT) 계산을 통해 제 1 함수 값 및 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 계산하고, 상기 제 1 함수 값 및 상기 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 이용하여, 상기 비왜곡된 팔면체(MO<sub>6</sub>)의 왜곡 정도를 분석하는 단계를 포함할 수 있다.

### 발명의 효과

[0029] 본 발명의 실시예에 따르면, 비왜곡된 팔면체(MO6)를 포함하는 정육면체 단위 셀을 정의하고, 상기 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 물리-화학적 특성과 매핑되는 전자 밴드 구조의 초기 상태를 상기 비왜곡된 팔면체(MO6)의 전자 밴드 구조로 정의하는 원자 스케일 모델에 기반하여 밀도 범함수 이론(density functional theory: DFT) 계산을 이용함으로써, 팔면체내 왜곡 및 팔면체간 왜곡이 강하게 결합되어 있는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 물질에 대하여 다면체내 왜곡과 다면체간 왜곡을 분리하여 분석할 수 있는 이점이 있다.

### 도면의 간단한 설명

[0031] 도 1a는 본 발명의 일 실시예에 따른 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법을 설명하기 위한 순서도이다.

도 1b는 본 발명의 일 실시예에 따른 준 페로브스카이트 관련 물질 내에서 왜곡된 모서리-공유 팔면체의 네트워크를 보여주는 개략도이다.

도 1c는 본 발명의 일 실시예에 따른 준 페로브스카이트 관련 물질들의 왜곡 정도에 따른 밴드 갭 에너지(E<sub>g</sub>)를 나타내는 도면이다.

도 1d는 본 발명의 일 실시예에 따른 준 페로브스카이트 관련 물질들의 다른 다형체 상들(polymorphic phases) 사이의 밴드 엣지 정렬(Band edge alignment)을 나타내는 도면이다.

도 2a는 본 발명의 일 실시예에서 팔면체간 기울어짐 각도(θ<sub>ww</sub>)의 변화에 따른 밴드 갭 에너지(E<sub>g</sub>)를 나타내는 그래프이고, 도 2b는 밴드 갭 에너지의 변화에 따른 상태 밀도(DOS)를 나타내는 그래프이다.

도 3a는 본 발명의 일 실시예에서 팔면체의 형상 왜곡 변화에 따른 밴드 갭 에너지(E<sub>g</sub>)를 나타내는 그래프이고, 도 3b는 밴드 갭 에너지의 변화에 따른 상태 밀도(DOS)를 나타내는 그래프이다.

도 4a는 본 발명의 일 실시예에서 부피 변화에 따른 밴드 갭 에너지(E<sub>g</sub>)를 나타내는 그래프이고, 도 4b는 밴드



갭 에너지의 변화에 따른 상태 밀도(DOS)를 나타내는 그래프이다.

도 5a는 본 발명의 일 실시예에서 금속 원소가 팔면체 중심에서 벗어난 변위 (off-center displacement)에 따른 밴드 갭 에너지( $E_g$ )를 나타내는 그래프이고, 도 5b는 밴드 갭 에너지( $E_g$ )의 변화에 따른 상태 밀도(DOS)를 나타내는 그래프이다.

도 6a 내지 도 6d는 본 발명의 일 실시예에 따른 다양한 일반화된 각도 서술자들 사이의 관계를 나타내는 그래프이다.

도 7a와 도 7b는 본 발명의 일 실시예에 따른 일반 측정 지표에 따른 밴드 갭 에너지( $E_g$ )를 나타내는 그래프이고, 도 7c와 도 7d는 공유결합 매트릭스(Cd,p)에 따른 밴드 갭 에너지( $E_g$ )를 나타내는 그래프이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0032] 이하, 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 바람직한 실시예를 상세히 설명하기로 한다.
- [0033] 본 발명의 실시예들은 당해 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에게 본 발명을 더욱 완전하게 설명하기 위하여 제공되는 것이며, 하기 실시예는 여러 가지 다른 형태로 변형될 수 있으며, 본 발명의 범위가 하기 실시예에 한정되는 것은 아니다. 오히려, 이들 실시예는 본 개시를 더욱 충실하고 완전하게 하고, 당업자에게 본 발명의 사상을 완전하게 전달하기 위하여 제공되는 것이다.
- [0034] 도면에서 동일 부호는 동일한 요소를 지칭한다. 또한, 본 명세서에서 사용된 바와 같이, 용어 "및/또는"은 해당 열거된 항목 중 어느 하나 및 하나 이상의 모든 조합을 포함한다.
- [0035] 본 명세서에서 사용된 용어는 실시예를 설명하기 위하여 사용되며, 본 발명의 범위를 제한하기 위한 것이 아니다. 또한, 본 명세서에서 단수로 기재되어 있다 하더라도, 문맥상 단수를 분명히 지적하는 것이 아니라면, 복수의 형태를 포함할 수 있다. 또한, 본 명세서에서 사용되는 "포함한다(comprise)" 및/또는 "포함하는(comprising)"이란 용어는 언급한 형상들, 숫자, 단계, 동작, 부재, 요소 및/또는 이들 그룹의 존재를 특정하는 것이며, 다른 형상, 숫자, 동작, 부재, 요소 및/또는 그룹들의 존재 또는 부가를 배제하는 것이 아니다.
- [0036] 또한, 당해 기술 분야에서 숙련된 자들에게 있어서, 다른 형상에 "인접하여(adjacent)" 배치된 구조 또는 형상은 상기 인접하는 형상에 중첩되거나 하부에 배치되는 부분을 가질 수도 있다.
- [0037] 본 명세서에서, "아래로(below)", "위로(above)", "상부의(upper)", "하부의(lower)", "수평의(horizontal)" 또는 "수직의(vertical)"와 같은 상대적 용어들은, 도면들 상에 도시된 바와 같이, 일 구성 부재, 층 또는 영역들이 다른 구성 부재, 층 또는 영역과 갖는 관계를 기술하기 위하여 사용될 수 있다. 이들 용어들은 도면들에 표시된 방향뿐만 아니라 소자의 다른 방향들도 포괄하는 것임을 이해하여야 한다.
- [0038] 이하에서, 본 발명의 실시예들은 본 발명의 이상적인 실시예들을 개략적으로 도시하는 단면도들을 참조하여 설명될 것이다. 이들 도면들에 있어서, 예를 들면, 부재들의 크기와 형상은 설명의 편의와 명확성을 위하여 과장될 수 있으며, 실제 구현시, 도시된 형상의 변형들이 예상될 수 있다. 따라서, 본 발명의 실시예는 본 명세서에 도시된 영역의 특정 형상에 제한된 것으로 해석되어서는 아니 된다. 또한, 도면의 부재들의 참조 부호는 도면 전체에 걸쳐 동일한 부재를 지칭한다.
- [0040] 도 1a는 본 발명의 일 실시예에 따른 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법을 설명하기 위한 순서도이고, 도 1b는 본 발명의 일 실시예에 따른 준 페로브스카이트 관련 물질들의 다른 다형체 상들(polymorphic phases) 사이의 밴드 엣지 정렬(band edge alignment)을 나타내는 도면이며, 도 1c는 본 발명의 일 실시예에 따른 준 페로브스카이트 관련 물질 내에서 왜곡된 모서리-공유 팔면체의 네트워크를 보여주는 개략도이고, 도 1d는 본 발명의 일 실시예에 따른 준 페로브스카이트 관련 물질들의 왜곡 정도에 따른 밴드 갭 에너지( $E_g$ ) 영역을 나타내는 도면이다.
- [0041] 도 1a를 참조하면, 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 방법은 다면체간 왜곡 및 다면체내 왜곡 중 적어도 하나가 결합되는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질의 물리-화학적 특성을 상기 다면체간 왜곡과 관련된 제 1 파라미터를 입력으로 하는 제 1 함수와 상기 다면체내 왜곡과 관련된 제 2 파라미터를 입력으로 하는 제 2 함수의 합으로 정의하는 단계(S100), 하나의 금속 원소(M)가 중심에 위치하고 음이온 원소들(예컨대, 산소(O) 원소들)이 6 개의 꼭지점에 위치하는 비왜곡된 팔면체( $MO_6$ )를 포함하는 정육면체 단위 셀을 정의하고, 상기 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 물리-화학적 특성

과 매핑되는 전자 밴드 구조의 초기 상태를 상기 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )의 전자 밴드 구조로 정의하는 원자 스케일 모델을 정의하는 단계(S102), 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나를 조절하는 단계(S104), 조절된 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나에 따라, 밀도 범함수 이론(density functional theory: DFT) 계산을 통해 제 1 함수 값 및 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 계산하는 단계(S106) 및 상기 제 1 함수 값 및 상기 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 이용하여, 상기 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )의 왜곡 정도를 분석하는 단계(S108)를 포함할 수 있다.

[0042] 일 실시예에서, 페로브스카이트( $\text{ABX}_3$ )와 페로브스카이트 관련 물질의 기본 빌딩 블록(basic building block)은 육팔면체 위치(cuboctahedral site)에서 A 양이온을 갖는  $\text{BX}_6$  팔면체이다. 이원계 금속 삼산화물(A 양이온이 없는 것)을 포함하는 준 페로브스카이트 관련 물질의 경우,  $\text{MO}_6$  팔면체가 어떤 요인에 의해 왜곡되는지, 그리고  $\text{MO}_6$  팔면체 왜곡과 물리 전체의 거시적인 물리 화학적 특성 사이의 관계는 중요할 수 있다. 상기 이원계 금속 삼산화물의 다형 표현은  $\text{MO}_6$  팔면체(기본 빌딩 블록으로서)를 연결하는 공간 네트워크에 의해 결정되며 특히 효과적으로 경쟁력을 갖출 수 있다.

[0043] 일 실시예에서,  $\text{WO}_3$ 은 입방정계(cub), 정방 정계(tet), 사방 정계(ort), 삼사정계(tri), 저온 단사정계( $\epsilon$ ), 실온 단사정계( $\gamma$ ) 및 2 개의 육방정계(H1 및 H2) 상의 8 가지 서로 다른 다형 상(polymorphic phase)을 가지며,  $\text{MoO}_3$ 는 사방 정계( $\alpha$ ), 육방정계(h) 및 2 개의 단사 정계(II 및  $\beta$ ) 상을 가질 수 있다.

[0044] 도 1b를 참조하면,  $\text{WO}_3$ 의 경우, 다형체 상에 따라,  $E_g$  값은 1.60 eV 내지 3.00 eV 범위를 가지며,  $\text{MoO}_3$ 의 밴드 갭 에너지( $E_g$ )는 2.80 eV 내지 4.12 eV 범위를 갖는다. 다면체 네트워크를 갖는 구조에서, 국부적 정전기 퍼텐셜(즉, 마텔롱 퍼텐셜)은 절대 밴드 에지 위치에 영향을 미칠 수 있다.  $\text{WO}_3$ 와  $\text{MoO}_3$  다형체에 대한 금속 양이온과 산소 음이온의 마텔롱 퍼텐셜의 변화, 이원계 금속 삼산화물의 팔면체 네트워크는 강한 팔면체내 왜곡 및 팔면체간 왜곡을 겪을 수 있다.

[0045] 도 1c를 참조하면, 상기 이원계 금속 삼산화물에서 모서리-공유 팔면체의 네트워크가 왜곡된다. V는 꼭지점 산소(O) 음이온을 나타내고, C는 팔면체의 기하학적인 중심을 나타내며, M은 팔면체 내의 금속 양이온을 나타낸다. 상기 이원계 금속 삼산화물의 팔면체 네트워크는 강한 팔면체내 왜곡 및 팔면체간 왜곡은 후술할 상기 다면체간 왜곡과 관련된 제 1 파라미터와 상기 다면체내 왜곡과 관련된 제 2 파라미터로 정의될 수 있다. 도 1d를 참조하면, 왜곡 정도에 따른  $\text{WO}_3$ 의 밴드 갭 에너지( $E_g$ ) 영역과  $\text{MoO}_3$ 의 밴드 갭 에너지( $E_g$ ) 영역이 서로 다른 것을 알 수 있다.

[0046] 종래에는, 팔면체 네트워크에서 팔면체내 왜곡 및 팔면체간 왜곡이 각 다형체의 물리-화학적 특성과 어떤 상관 관계를 가지고 연관되어 있는지 밝혀지지 않았다. 본 발명의 실시예에서는  $\text{WO}_3$ 과  $\text{MoO}_3$ 를 포함하는 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질(팔면체내 왜곡 및 팔면체간 왜곡이 강하게 결합할 수 있는 W와 Mo의 이원계 삼산화물을 포함함)에서 팔면체 왜곡에 대한 복잡한 요인들을 간단하게 분석하기 위해, 상기 준 페로브스카이트 물질의 물리-화학적 특성(X, 예, 밴드 갭 에너지,  $E_g$ )을  $X = f(I, i) \simeq f(I_{\text{tilt}}, I_{\text{connect}}) + f(i_M, i_{\text{shape}}, i_{\text{vol}})$ 으로 정의할 수 있다. 여기서, I와 i는 각각 팔면체간 왜곡과 팔면체내 왜곡에 대한 요인을 나타낸다.

[0047] 상기  $I_{\text{tilt}}$ 와  $I_{\text{connect}}$ 는 각각 2 개의 팔면체의 연결 꼭지점에 대한 기하학적 경사각과 각 팔면체가 팔면체의 꼭지점/모서리 또는 면을 통해 어떻게 상호 연결되어 있는지에 대한 팔면체간 왜곡 요인이다. 마찬가지로  $i_M$ ,  $i_{\text{shape}}$  및  $i_{\text{vol}}$ 은 각각 왜곡 시 금속 원소가 팔면체의 중심을 벗어난 변위, 모양 및 부피(또는 크기) 변화에 기인한 팔면체내 왜곡 요인이다.

[0048] 일 실시예에서,  $\text{WO}_3$ 와  $\text{MoO}_3$ 의 다양한 다형체에 대한 개별 구성 요소를 분석하기 위해서, 2 가지 산화물들에 대해 이상적인 비왜곡 입방체(cubic)로 시작할 수 있도록 이원계 금속 삼산화물 원자 스케일 모델이 정의될 수 있다. 여기서, 스케일 모델(또는 스케일 유사 모델)은 복잡한 시스템에서 관찰되는 특정 현상이나 특성을 설명하기 위해서 고안된 인공 모델을 나타낸다. 상기 스케일 모델의 개념은 모델의 모든 중요한 측면 사이의 정확한 관계를 유지하면서 관심있는 시스템의 물리적 표현을 제공할 수 있다. 이 근사 모델의 장점은 실제 시스템의 복잡성을 분해하여 복잡한 시스템에 직접적으로 관여하지 않고 원본의 일부 동작 또는 특성을 분석할 수 있게 한다

는 점이다.

- [0049] 일 실시예에서, 상기 제 1 파라미터는 상기 팔면체의 각도 기울어짐(angle tilting)( $I_{\text{tilt}}$ ) 및 개별 팔면체가 팔면체의 꼭지점, 모서리 또는 면을 통해 연결된 방식( $I_{\text{connect}}$ ) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 상기 제 2 파라미터는 상기 금속의 양이온이 상기 팔면체의 중심으로부터 벗어난 정도(metal off-center displacement)( $i_M$ ), 상기 팔면체의 형상( $i_{\text{shape}}$ ) 및 상기 팔면체의 부피( $i_{\text{vol}}$ ) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0050] 일 실시예에서, 상기 제 1 함수 값 및 상기 제 2 함수 값 중 적어도 하나는 에너지 밴드 갭 및 상태 밀도(density of states: DOS) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0051] 일 실시예에서, 상기 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )의 왜곡 정도를 분석하는 단계는, 상기 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )의 왜곡에 대응하는 상기 준 페로브스카이트 관련 물질의 왜곡을 변수로 하여 에너지 밴드 갭을 매칭시키는 단계 및 상기 준 페로브스카이트 관련 물질의 왜곡과 에너지 밴드 갭의 상관 관계를 이용하여 상기 에너지 밴드 갭을 정량 분석하는 단계를 포함할 수 있다.
- [0052] 일 실시예에서, 상기 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질은 이원계 삼산화물을 포함하며, 상기 이원계 삼산화물은  $\text{WO}_3$  및  $\text{MoO}_3$  중 하나를 포함할 수 있다. 그러나, 본 발명은 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질에 제한되지 않으며, 페로브스카이트 물질과 같이 다면체 내 혹은 다면체 간 왜곡이 특징적으로 나타나는 모든 물질들의 분석이 가능하다.
- [0053] 일 실시예에서, 이원계 금속 산화물인  $\text{WO}_3$  및  $\text{MoO}_3$ 에 나타나는 팔면체간 왜곡 및 팔면체내 왜곡으로부터의 효과를 분리하기 위해, 2 개의 이원계 삼산화물들에 대하여 원자 스케일 모델(atomistic scale model)을 정의한다. 구체적으로, 상기 원자 스케일 모델은 하나의  $\text{MO}_6$  팔면체를 포함하는 입방체(정육면체) 단위 셀로부터 시작할 수 있다. 여기서, 상기  $\text{MO}_6$  팔면체의 부피(또는 체적)는 최적화된  $\beta\text{-MoO}_3$ 와  $\gamma\text{-WO}_3$  구조체의 부피로 설정될 수 있다.  $\beta\text{-MoO}_3$ 는 단사정계를 갖는  $\text{MoO}_3$ 이며,  $\gamma\text{-WO}_3$ 은 실온 단사정계를 갖는  $\text{WO}_3$ 이다. 일 실시예에서, 상기  $\text{MO}_6$  팔면체가 모든 꼭지점에서 연결된 이상적인 비왜곡된 스케일 모델에 기반하여, 상기 최적화된  $\beta\text{-MoO}_3$  및  $\gamma\text{-WO}_3$  구조는 왜곡된 입방체 구조로 볼 수 있다. 또한, 이러한 이상적인 비왜곡된 구조는 팔면체간 왜곡 또는 팔면체내 왜곡을 갖지 않는다. 상기 원자 스케일 모델은  $\text{WO}_3$  및  $\text{MoO}_3$ 이 갖는 다형 구조들의 전자 밴드 갭 에너지와 맵핑되는 팔면체간 왜곡 및 팔면체내 왜곡에 기여하는 요인을 개별적으로 분석하는데 있어서 복잡한 계산없이 정확한 분석 결과를 제공할 수 있다.
- [0054] 일 실시예에서, 상기 밀도 범함수 이론(Density functional theory: DFT) 계산은 VASP(Vienna Ab initio Simulation Package) 프로그램을 포함하는 다양한 오픈-소스 혹은 상용 제일원리 시뮬레이션 프로그램들을 통해 수행될 수 있다. 상기 DFT 계산에서 전자밀도 함수를 입력 변수로 갖는 범함수는 국부적인 밀도 근사치(Local Density Approximation, LDA)을 이용한 교환-상관성(exchange-correlation) 범함수, 범함수, 일반화된 기울기 근사치(Generalized Gradient Approximation, GGA)을 이용한 교환상관성 범함수 및 하트리-포크(Hartree-Fock, HF) 방식의 교환에너지 부분과 GGA의 교환상관에너지 부분으로 표현되는 하이브리드(hybrid) 범함수를 포함할 수 있다. 전자-이온 상호작용은 PAW(Projector Augment-Wave method)에 의하여 서술될 수 있다.
- [0055] 본 발명의 실시예에서, 전체 에너지 계산은 (GGA)에 기초한 VASP 프로그램 패키지에 의하여 야기되는 PAW를 이용하여 수행될 수 있다. Mo, W 및 O 원자들을 위한 원자가 전자 구성(valence electron configurations)은 각각  $4s^2 4p^6 4d^5 5s^1$ ,  $5p^6 5d^5 6s^1$  및  $2s^2 2p^4$ 으로 설정될 수 있다. 또한, 적어도  $0.3 \text{ \AA}^{-1}$ 의 그리드 간격을 갖는  $\Gamma$  중심의 k-포인트 메시( $\Gamma$ -centered k-point mesh)가 브릴루인 영역(brillouin zone)을 샘플링하는데 사용될 수 있다.
- [0056] 상기 DFT 계산은 전체 에너지, 힘 및 외부 압력이 각각 20 meV,  $0.02 \text{ eV \AA}^{-1}$  및 0.5 kbar 미만으로 변하는 운동 에너지 컷오프 및 k-포인트 그리드와 관련하여 수렴 테스트를 포함할 수 있다. 자체 부합적 분야 연산(self-consistent field calculation)에서 총 에너지 수렴 임계 값은 대략  $10^{-5} \text{ eV}$ 로 유지될 수 있다. 전술한 환경 하에서 최적화된 형상을 얻은 후, 준 페로브스카이트 산화물의 전자 밴드 구조에 대한 보다 정확한 설명을 제공하기 위해서, Heyd, Scuseria 및 Ernzerhof (이하, 'HSE06' 라 칭함)로 인한 하이브리드 DFT 교환-상관 범함수가 이용된다. 상기 DFT 교환-상관 범함수를 통해 기하학적 전자 구조와 다면체간 왜곡 및 다면체내 왜곡 사이

의 상관관계를 분석할 수 있다.

[0057] GULP 코드를 사용하여, 마텔롱 포텐셜(madelung potentials)은 에발드 덧셈 기법(Ewald summation technique)을 사용한 점전하 모델(point charge model) 하에서 얻어질 수 있다. 여기서, 상기 마텔롱 포텐셜은 하기 수학식을 따르는 이온 전하와 이온 분리에 영향을 받을 수 있다.

$$V_0 = \sum_{i=1}^N \frac{q_i}{r_{0-i}}$$

[0058]

[0059] 여기서,  $V_0$ 는 마텔롱 포텐셜이고,  $q_i$ 는 이온 전하이며,  $r_{0-i}$ 는 이온 분리를 지칭한다.

[0060]

일 실시예에서, 상기 비왜곡된 팔면체(MO6)의 왜곡 정도는 이차신장(quadratic elongation:  $\lambda$ ) 및 결합 각 분산( $\sigma^2$ )을 포함하는 일반 측정 지표로 정량화되거나, 연속 형상 측정 방법(Continuous Shape Measurement Methodology: CShM)을 사용하여 정량화되거나, 인접한 2 개의 팔면체의 중심 금속 양이온들과 공유 꼭지점 산소 원자 사이의 각도( $\theta_{MM}$ ), 2 개의 팔면체들의 기하학적 중심과 공유 꼭지점 산소 원자 사이의 각도( $\theta_{CVC}$ ) 및 인접한 팔면체에서 공유 꼭지점 산소 원자와 인접한 팔면체에서의 대각선 꼭지점 사이의 각도( $\theta_{VV}$ ) 중 적어도 하나를 포함하는 기울어진 각도 측정을 통해 정량화될 수 있다.

[0061]

상기 이차신장(quadratic elongation:  $\lambda$ )과 결합 각 분산( $\sigma^2$ )은 하기 수학식으로 정의되거나 표현될 수 있다.

$$\langle \lambda \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{l_i}{l_0} \right)^2$$

[0062]

[0063] 여기서,  $n$ 은 팔면체 내 중심 금속 원소의 배위수(coordination number)이고,  $l_i$ 는 중심 금속 원소에서  $i$ 번째 배위 원소(coordinating atom) 사이의 거리이고,  $l_0$ 는 동일한 부피의 이상적인 팔면체의 중심에 자리한 금속 원소에서 꼭지점 사이의 거리이다.

$$\sigma^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (\phi_i - \phi_0)^2$$

[0064]

[0065] 여기서,  $m$ 은 결합 각도의 수,  $\phi_i$ 는  $i$ 번째 결합 각도이고,  $\phi_0$ 는 정팔면체의 이상적인 결합 각도이다.

[0066]

일 실시예에서, 상기 연속 형상 측정 방법은 하기 수학식으로 표현될 수 있다.

$$S = \min \left[ \frac{\sum_{i=1}^N |\vec{q}_i - \vec{p}_i|^2}{\sum_{i=1}^N |\vec{q}_i - \vec{q}_0|^2} \right] \times 100$$

[0067]

[0068] 여기서,  $N$ 은 팔면체의 꼭지점 개수이며,  $\vec{p}_i$ 와  $\vec{q}_i$ 은  $N$  개의 팔면체의 꼭지점을 갖는 시스템에서 왜곡과 대칭된 구속 구조(distorted and symmetric constrained structure)의 원자 좌표(atomic coordinates)의 벡터이고,  $\vec{q}_0$ 는 기하학적 중심의 원자 위치에서 파생되는 벡터이다.

[0069]

$S$ 는 완전한 대칭 구조  $P$ 에 대한 구조  $Q$ 의 형상에 대한 일치도를 표현한 것으로서,  $S$ 가 0에 가깝게 되면(대상 대칭과 비교할 때) 상기 구조에서 다면체 왜곡이 없다. 반대로 계산된  $S$ 가 큰 값인 경우 심한 구조적 왜곡이 존재하며 이상적인 대칭 및 모양에서 벗어난다.

[0070]

전술한 바와 같이, 팔면체내 왜곡( $i$ )에 대한 3 가지 가능한 요인을 고려할 수 있다. 팔면체내 왜곡( $i$ )은 팔면체



의 중심에서 멀리 떨어진 위치로 이동된 금속 양이온(이하, 금속 양이온이 팔면체의 중심에서 변위(off-center displacement)라 칭함)에 기인한 왜곡( $i_M$ ), 팔면체의 모양에 의한 왜곡( $i_{\text{sharpe}}$ ) 및 팔면체의 부피(또는 체적)에 기인한 왜곡( $i_{\text{vol}}$ ) 중 적어도 하나 이상을 포함할 수 있다.  $i_M$ 을 조절하기 위해, 팔면체의 꼭지점들에서 산소(0) 원자들을 고정시키고, 금속 양이온(M)을 팔면체의 중심 위치에서 가장자리 꼭지점으로 이동시킬 수 있다.  $i_{\text{sharpe}}$ 를 조절하기 위해서, 팔면체 체적을 상수로 유지하면서  $z$  방향으로 원자 스케일 모델에 압축 및 인장 변형을 인가할 수 있다. 이 경우, 상기 스케일 모델에서 팔면체의 전체 모양을  $z$  축 방향으로 왜곡하는 동안에,  $x$  및  $y$  방향에서 격자 파라미터는 자연스럽게 결정될 수 있다. 다른 실시예에서,  $z$  축 대신  $x$  축 또는  $y$  축으로 방향으로 팔면체의 모양이 왜곡될 수 있다. 또는 복수의 축 방향( $x$ ,  $y$ ,  $z$  축 중 적어도 둘 이상)으로 팔면체의 모양이 왜곡될 수 있다. 마찬가지로,  $i_{\text{vol}}$ 을 조절하기 위해, 입방 스케일 모형의 격자 상수를 등방성으로 확장하거나 압축하여 팔면체의 부피 또는 크기를 변화시킬 수 있다. 상기  $i_M$ ,  $i_{\text{sharpe}}$  및  $i_{\text{vol}}$ 을 개별적으로 조절하여, 상기 이원계 삼산화물의 팔면체내 왜곡을 분석할 수 있다.

[0071] 또한, 팔면체간 왜곡(I)에 대한 2 가지 가능한 요인을 고려할 수 있다. 팔면체간 왜곡(I)은 팔면체의 각도 기울어짐(angle tilting)( $I_{\text{tilt}}$ )으로 인한 왜곡 및 개별  $\text{MO}_6$ 이 팔면체의 꼭지점, 모서리 또는 면을 통해 연결된 방식으로 인한 왜곡( $I_{\text{connect}}$ )을 포함할 수 있다. 일 실시예에서, 각도 기울어짐(angle tilting)( $I_{\text{tilt}}$ )은 Glazer 표기법에 기반한 경사각(tilt angle) 시스템에 의해 설계될 수 있다. 바람직하게,  $a^+b^+c^+$  틸트(tilt) 시스템이 이용될 수 있다. 구체적으로, 원점에 위치한 중심 금속 원자와  $(\pm 1, 0, 0)d$ ,  $(0, \pm 1, 0)d$ , 및  $(0, 0, \pm 1)d$ 에 위치한 6 개의 꼭지점 산소(0) 원소들을 갖는 이상적인 입방체  $\text{MO}_6$  팔면체를 고려한다. 각각의  $d$ 는 이상적인 M-O 거리를 지칭한다. 상기  $I_{\text{tilt}}$ 를 조절하기 위해, 오일러 각(즉,  $\theta$ ,  $\phi$  및  $\psi$ )의 개념을 이용한다. 여기서,  $\theta$ 는  $c$  축으로부터의 경사각(tilt angle)이며,  $\phi$ 는  $c$  축에 대한 회전각(precession angle)을 나타내고,  $\psi$ 는 팔면체 정점 방향( $c$  축)의 스피닝 축을 갖는 스피닝 각도(spinning angle)이다. 여기서, 회전 행렬은 하기 수식식과 같이 정의될 수 있다.

$$\begin{pmatrix} \cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi & -\sin \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \cos \psi & \sin \theta \sin \phi \\ \cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi & -\sin \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \cos \psi & -\sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \psi & \sin \theta \cos \psi & \cos \theta \end{pmatrix}$$

[0072] 일 실시예에서, 왜곡된 팔면체의 경사각 측정을 위해, M-V-M 각( $\theta_{\text{VM}}$ ), C-V-C( $\theta_{\text{VC}}$ ) 및 V-V-V 각도( $\theta_{\text{VV}}$ )의 3 가지 경사각이 정의될 수 있다. 상기 M-V-M 각( $\theta_{\text{VM}}$ )은 인접한 2 개의 팔면체의 중심 금속 양이온들과 공유 꼭지점 0 원자 사이의 각도(도 1(b)의 M1-V2-M2)를 측정하며, 상기 C-V-C 각( $\theta_{\text{VC}}$ )은( $i_M$  비직교한 팔면체 왜곡 효과를 명확하게 고려함)와 2 개의 기하학적 중심과 공유 꼭지점 0 원자 사이의 각도(도 1(b)의 C1-V2-C2)이다. 마지막으로, V-V-V 각( $\theta_{\text{VV}}$ )은 인접한 팔면체에서 공유 꼭지점 산소(0) 원자와 그 대각선 꼭지점 사이의 각도(도 1(b)의 V1-V2-V3)을 지칭할 수 있다.

[0076] 본 발명의 다른 실시예에서, 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 분석 장치는 하나 이상의 프로세서, 메모리 및 상기 메모리에 저장되고 상기 하나 이상의 프로세서에 의해 실행되도록 구성되는 하나 이상의 프로그램을 포함할 수 있다. 상기 하나 이상의 프로그램은, 다면체간 왜곡 및 다면체내 왜곡이 결합되는 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트(pseudo-perovskite) 관련 물질의 물리-화학적 특성을 상기 다면체간 왜곡과 관련된 제 1 파라미터를 입력으로 하는 제 1 함수와 상기 다면체내 왜곡과 관련된 제 2 파라미터를 입력으로 하는 제 2 함수의 함수로 정의하고, 하나의 금속 원소(M)가 중심에 위치하고 산소(0) 원소들이 6 개의 꼭지점에 위치하는 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )를 포함하는 정육면체 단위 셀을 정의하고, 상기 페로브스카이트 및 준 페로브스카이트 관련 물질의 물리-화학적 특성과 매핑되는 전자 밴드 구조의 초기 상태를 상기 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )의 전자 밴드 구조로 정의하는 원자 스케일 모델을 정의하고, 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나를 조절하고, 조절된 상기 제 1 파라미터 및 상기 제 2 파라미터 중 적어도 하나에 따라, 밀도 범함수 이론(Density functional theory: DFT) 계산을 통해 제 1 함수 값 및 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 계산하고, 상기 제 1 함수 값 및 상기 제 2 함수 값 중 적어도 하나를 이용하여, 상기 비왜곡된 팔면체( $\text{MO}_6$ )의 왜곡 정도를 분석할 수 있다.

[0078] 도 2a는 본 발명의 일 실시예에서 팔면체간 기울어짐 각도( $\theta_{\text{VV}}$ )의 변화에 따른 밴드 갭 에너지( $E_g$ )를 나타내는

그래프이고, 도 2b는 밴드 갭 에너지의 변화에 따른 상태 밀도(DOS)를 나타내는 그래프이다.

[0079] 도 2a 및 도 2b를 참조하면,  $I_{\text{tilt}}$ 를 분석하기 위해, 최적화된  $\text{WO}_3$  및  $\text{MoO}_3$  구조에서 분석하는 것보다 최소  $d_{0-0}$  거리를 유지하면서,  $180^\circ$  내지  $130^\circ$  범위의 원자 스케일 모델에서 팔면체의 경사각인  $\Theta_{\text{VV}}$ (단순히 산소 꼭지점-꼭지점-꼭지점 각)를 조절하여  $I_{\text{tilt}}$ 를 분석한다. 각  $I_{\text{tilt}}$  모델에서, 하이브리드 HSE06 범함수를 사용하여, 각 기울어진 구조에 대한 전자적 밴드 갭 에너지( $E_g$ )를 계산할 수 있다.  $\Delta E_g$ 는 상기 스케일 모델을 기반으로  $E_g$ 의 변화로서,  $\Delta E_g \leq 0.15$  eV를 갖는다.

[0080]  $\text{MoO}_3$  스케일 모델 ( $\Theta_{\text{VV}} = 180^\circ$ )에서, 전자 밀도 상태(하이브리드 HSE06 함수를 사용하여 계산된 DOS)  $180^\circ$ ,  $157^\circ$ ,  $145^\circ$ )로 나타낼 수 있다. 팔면체 내 중심의 금속 원자가 팔면체 리간드 필드 내의 6 개의 이웃한 산소(O) 원자들에 결합되어 있다고 가정하면,  $d_z^2$ 와  $d_{x^2-y^2}^2$ 를 Mo 4d  $e_g$  상태로 그리고  $d_{xy}$ ,  $d_{yz}$ 와  $d_{xz}$ 를 Mo 4d  $t_{2g}$  상태로 그룹화하여 DOS에 오비탈 기여(orbital contribution)를 플로팅할 수 있다.  $\Theta_{\text{VV}} = 180^\circ$ 에서, 이상적인 비왜곡 입방 구조(cubic structure)는 가전자대와 전도대 에너지가 주로 O 2p와 Mo 4d  $t_{2g}$  상태로 구성되는 것을 알 수 있다.

[0081] 경사각 상태에서, 가전자대 영역에서는 여전히 O 2p 상태가 큰 기여가 있지만, 전도대 영역이 깊어지면 Mo 4d와 Mo 4d  $t_{2g}$  상태가 더 분열되어 나타난다. O 2p 상태는 또한 Mo 4d  $t_{2g}$  상태와 더 국부적으로 겹쳐진다. 전반적인 DOS가 팔면체간 경사각(특히 전도대 Mo 4d 상태에서)에 의해 수정되는 것을 알 수 있다. 그러나, 이러한 변화는 밴드 가장자리 근처의 상태보다 가전자대와 전도대 둘 다에서 훨씬 더 깊게 나타나며, 따라서 팔면체간 경사각 왜곡에 대한  $E_g$ 의 약한 의존성이 나타나는 것으로 보인다.  $\text{WO}_3$  스케일 모델의 DOS는  $\text{MoO}_3$  스케일 모델과 동일한 결과를 제공하므로,  $\text{MoO}_3$  스케일 모델의 설명을 참조한다.

[0083] 다면체 단위로 구성된 많은 종류의 물질에서, 상기 물질의 전반적인 안정성에 기여하는 기하학적 모양 왜곡을 찾는 것이 일반적이다. 가장 일반적인 왜곡 유형 중 하나는 Jahn-Teller 효과로, 특정 결정 대칭을 깨서 전자 수준에서 축퇴(degeneracy)를 해결하여 시스템의 전체 에너지를 낮출 수 있다.

[0084] 도 3a는 본 발명의 일 실시예에서 형상 왜곡 변화에 따른 밴드 갭 에너지( $E_g$ )를 나타내는 그래프이고, 도 3b는 밴드 갭 에너지의 변화에 따른 상태 밀도(DOS)를 나타내는 그래프이다.

[0085] 도 3a 및 도 3b를 참조하면,  $i_{\text{shape}}$ 를 분석하기 위해서, 원래 평형 팔면체 부피를 고정하고, z 방향을 따라 원자 스케일 모델에 압축 및 인장 변형(원래 모양의 최대 6 %까지)을 인가하여 Jahn-Teller 효과를 모방할 수 있다(도 2(b)의 원자 구조 삽입 참조).

[0086] 모양이 왜곡된 각 구조에 대해 에너지( $E_g$ )를 계산하고 이를 도 2(b)에 표시한다. 여기서, 이 Jahn-Teller 형 모양 변형은  $E_g$  값( $\Delta E_g \leq 0.3$  eV)에 최소한의 영향을 미친다는 것을 알 수 있다. 여기에  $E_g$ 가 압축 및 인장 변형률에 대해 거의 단조롭게 감소함을 알 수 있다. 도 2(b)에서 계산된 DOS를 검사하는 동안, 전체 DOS에 대해 거의 변화가 없음을 알 수 있다. 예를 들어, 가전자대 영역의 깊은 Mo 4d  $e_g$  상태의 일부 비편재화와 O 2p 상태의 작은 재규격화(renormalization)를 제외하고,  $I_{\text{tilt}}$ 과 유사하게,  $i_{\text{shape}}$ 에 대한  $E_g$ 의 약한 의존성은 모양 왜곡 시 영향을 받지 않는 밴드 가장자리 상태로 인한 것으로 보인다.

[0087] 도 4a는 본 발명의 일 실시예에서 부피 변화에 따른 밴드 갭 에너지( $E_g$ )를 나타내는 그래프이고, 도 4b는 밴드 갭 에너지의 변화에 따른 상태 밀도(DOS)를 나타내는 그래프이다.

[0088] 도 4a 및 도 4b를 참조하면,  $i_{\text{vol}}$ 는  $E_g$  변화에 약간 큰 영향이 있음을 알 수 있다. 여기서, 원자적 스케일 모델에서  $\text{MO}_6$  팔면체의 부피를 등방성으로(원래 부피의  $\pm 18\%$  정도) 변화시키고,  $E_g$  값이 최대 0.35 eV까지  $\Delta E_g$ 에 대한 팔면체 부피가 증가함에 따라 단조롭게 감소한다는 것을 알 수 있다. 도 2(c)에 표시된 계산된 DOS에서 약한 상관 관계는 변경되지 않은 밴드 가장자리 상태에서 다시 명확해지는 반면 DOS에 대한 가장 큰 변경은 밴드에서 특히 Mo 4d  $e_g$  상태에서 깊게 발생하는 것을 알 수 있다.

[0089] 단순한 원자 스케일 모델을 기반으로 직교한 팔면체내 왜곡( $i_{\text{shape}}$ 과  $i_{\text{vol}}$ )과 팔면체간 기울어짐( $I_{\text{tilt}}$ ) 효과를 모

이기 때문에  $\Delta E_g$ 가 이러한 직교 및 경사각 왜곡 효과에 대해 약한 의존성을 갖는 것으로 보인다.

- [0091] 마지막 비직교한 팔면체내 왜곡( $i_M$ ), 즉, 금속 양이온이 팔면체의 중심으로부터 멀리 이동한 것에 기인한 왜곡을 살펴본다.
- [0092] 도 5a는 본 발명의 일 실시예에서 금속 원소의 중심에서 벗어난 변위 (off-center displacement)에 따른 밴드 갭 에너지( $E_g$ )를 나타내는 그래프이고, 도 5b는 밴드 갭 에너지( $E_g$ )의 변화에 따른 상태 밀도(DOS)를 나타내는 그래프이다.
- [0093] 도 5a 및 도 5b를 참조하면, 상기 스케일 모델에 기초하여, 중심 금속 양이온을 유한 단계에서 팔면체의 가장자리 쪽으로 이동시키고 각각의 왜곡된 구조에 대한 전자  $E_g$  값을 계산하여,  $i_M$  효과를 분석한다. 도 2(d)에서, 금속 양이온의 중심 이탈이 증가함에 따라,  $WO_3$  및  $MoO_3$ 의 2 가지 스케일 모델 모두에서  $E_g$ 가 극적으로 증가한 다음 일정한 값으로 수렴된다. 예컨대,  $WO_3$ 와  $MoO_3$ 은  $i_M$ 이 증가함에 증가하다가 각각 대략 4.25 및 대략 3.32 eV에서 수렴하며, 양이온 중심 이탈시 최대  $\Delta E_g$ 는  $MoO_3$  및  $WO_3$ 에서 약 2.7 eV이다.
- [0094]  $\Delta E_g$ 의 큰 증가는 도 2(d)에서와 같이 계산된 DOS의 변경에서 뒷받침된다. 채워진 가전자대에 대한 많은 변화는 발견되지 않지만, 전도대 상태에 대한 더 높은 에너지로의 직접 업 시프트(upshifting)가 발견된다. Mo 4d  $t_{2g}$ 와 O 2p 상태는  $i_M$  효과에 집중되며, Mo 4d eg와 같은 상태의 분할이 관찰된다. 이는 Mo 4d eg와 O 2p 상태의 중첩이 작아지는 것을 결과를 초래한다.
- [0095]  $i_M$  왜곡 이후의 밴드 에지 상태에 초점을 맞추면, Mo 4d eg 및 O 2p 상태의 전도대 에지 상태에 대한 기여도가 증가하는 동안에, O 2p 상태는 여전히 가전자대 에지 상태에 대한 기여하고 있다. 금속 양이온이 팔면체 모서리 위치를 향하여 이동함에 따라 금속 양이온 4d 오비탈과 O 2p 오비탈의 이방성 중첩이 증가하는 것으로 보인다. 더욱이, 비직교한 내부 왜곡( $i_M$ )은 또한 팔면체 결정 필드가 왜곡된 사면체 필드로 끊어지는 것에 어느 정도 책임이 있는 것이며, 이는 에너지 레벨인 Mo 4d eg의 분열 및 감소에 반영되는 것으로 보인다.
- [0096] 결론적으로, 단순화된 이원계 금속 삼산화물 원자 스케일 모형을 사용하여, 상기 준 페로브스카이트 산화물의 전자 밴드 갭 에너지에 대한 팔면체간 왜곡 및 팔면체내 왜곡의 개별 기여를 분석할 수 있다. 가장 큰 지배 요인은 금속 양이온의 중심에서 벗어난 변위로 인한 왜곡( $i_M$ )을 포함한다.
- [0098] 일 실시예에서, 팔면체내 왜곡이 심한 환경에서, 팔면체간 경사각만 지배적인 경우(종래의 적당한 페로브스카이트처럼  $i_M$  효과가 거의 없는)를 포함할 정도로 각도 기반 서술자는 일반적이며 유연하다. 일반적으로 적당한 페로브스카이트는 팔면체의 이상적인 것에 가까운 기하학(무시할 수 있는  $i_M$  효과)으로 인해  $\Theta_{MVM}$ 과  $\Theta_{VVV}$ 가 팔면체 왜곡을 분석하기 위한 표준 서술자로 사용될 수 있다.
- [0099] 일 실시예에서, 이차 신장 지수 $\langle \lambda \rangle$ 와 결합 각 분산 지수( $\sigma^2$ )를 계산하고 마지막으로 연속 형상 측정 방법(CShM)을 사용하여 다면체 왜곡을 정량화할 수 있다. 대체로, 이러한 다면체 측정 방법은 주로 팔면체내 왜곡에 초점을 맞출 수 있다.
- [0100] 도 6a 내지 도 6d는 본 발명의 일 실시예에 따른 다양한 일반화된 각도 서술자들 사이의 관계를 나타내는 그래프이다. 도 6(a)의  $\Theta_{MVM}$  대  $\Theta_{CVC}$ , 도 6 (b)의  $\Theta_{CVC}$  대  $\Theta_{VVV}$ , 도 6(c)의  $\Theta_{MVM}$  대  $\Theta_{VVV}$ 의 관계를 그래프이다.
- [0101] 도 6a 내지 도 6c를 참조하면, 마커의 크기는 밴드 갭 에너지  $E_g$ 의 크기에 의해 가중될 수 있다.  $\Theta_{MVM}$  대  $\Theta_{CVC}$ 의 플롯에서의 대각선 경향선은 팔면체간 경사각의 존재 하에서 금속 양이온이 중심에서 벗어나 기인한 팔면체내 왜곡( $i_M$ )의 정도를 구별할 수 있고, 반면,  $\Theta_{CVC}$  대  $\Theta_{VVV}$ 의 플롯에서의 대각선 경향선은  $I_{tilt}$ 의 존재 하에서  $i_{shape}$ 과  $i_{vol}$ 의 심각한 정도를 나타낼 수 있다.  $\Theta_{MVM}$  대  $\Theta_{VVV}$ 의 플롯은  $I_{tilt}$ 를 포함하여  $i_M$ ,  $i_{shape}$  및  $i_{vol}$ 의 전체 효과를 측정할 수 있다.
- [0102] 본 발명의 장점은, 구조가  $\Theta_{MVM} \approx \Theta_{CVC} \approx \Theta_{VVV}$  인 대각선 직선에 수렴하는 현상을 정확히 예측하면서도 팔면체 내 왜곡이 강한 물질들이 추세선 밖으로 벗어나는 행태를 동시에 예측할 수 있다는 점이다. 이것은 팔면체간 경사각만이 가장 중요한 것으로 고려되는 산화물 페로브스카이트의 대부분에 대한 명확한 사례이다. 계산된 이원계  $MoO_3$  다형체의 대부분은 대각선에서 벗어나,  $MoO_3$  다형체에 대한  $i_M$  효과가 매우 크고 중요한 것을 알 수

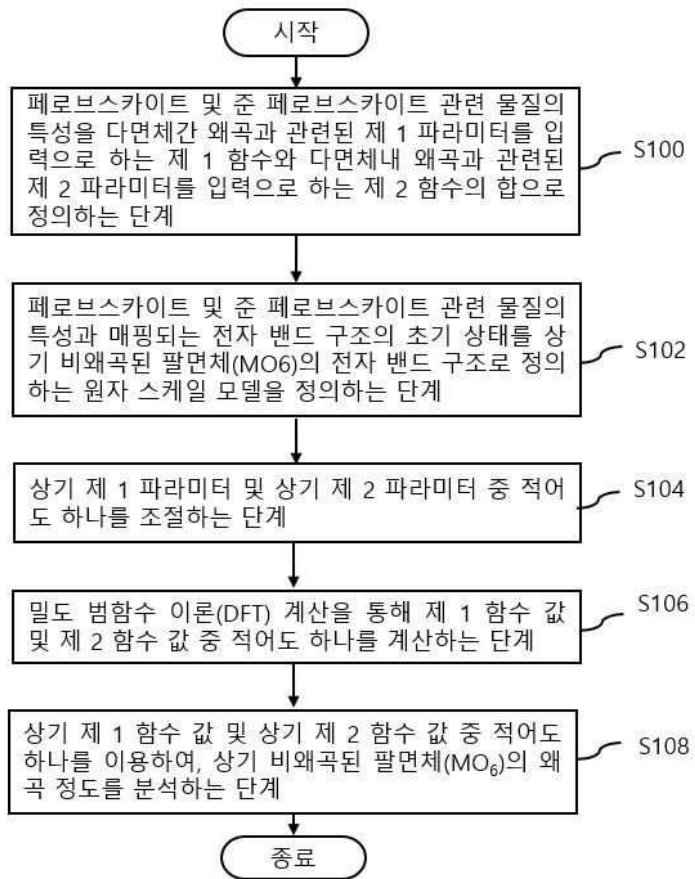


있다. 대조적으로,  $WO_3$  다형체는  $MoO_3$  다형체보다 작은  $i_M$  효과를 나타낸다.

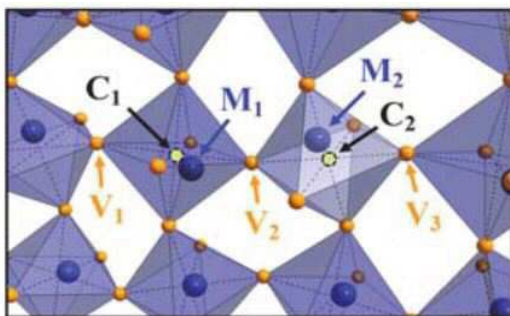
- [0103] 도 6d를 참조하면, CShM을 사용하는 또 다른 민감한 다면체 형상 측정 방법을 활용하여  $MO_6$  팔면체 왜곡과 O6 팔면체 왜곡 사이의 관계를 플로팅하여,  $E_g$ 의 크기로 마커를 가중한다. 이러한 CShM 접근법에서, 팔면체의 체적은 정규화되고, 팔면체간 경사각의 명시적인 영향은 고려되지 않는다(즉,  $i_{vol}$  및  $I_{tilt}$ 는 명시적으로 포함되지 않음). 여기서, 일반화된 각도 기반 서술자가 W와 Mo의 이원계 삼산화물에서 팔면체간 왜곡 및 팔면체내 왜곡의 복잡한 상호 작용을 분석할 수 있다. 여기서,  $WO_3$ 의  $i_M$ 의 신뢰도가 훨씬 약한 동안  $MoO_3$  다형체의  $E_g$ 가  $i_M$ 의 신뢰도를 더 강하게 나타낸다. 또한, 원자 스케일 모델과 일반화된 각도 서술자를 사용함으로써 이원계 금속 삼산화물이 종래의 페로브스카이트 산화물과 비교하여 상이한 구조(왜곡)-속성 관계, 예컨대, 팔면체내 왜곡 대 팔면체간 왜곡으로 동작한다는 것을 확인할 수 있다.
- [0105] 도 7a와 도 7b는 본 발명의 일 실시예에 따른 일반 측정 지표에 따른 밴드 갭 에너지( $E_g$ )를 나타내는 그래프이고, 도 7c와 도 7d는 공유결합 매트릭스( $C_{d,p}$ )에 따른 밴드 갭 에너지( $E_g$ )를 나타내는 그래프이다. 보다 명확한 "구조-특성"(즉, 예를 들어 왜곡) 관계 맵을 제공하기 위해, 도 7a와 도 7b에 각각  $E_g$  대  $\langle \lambda \rangle$  및  $\sigma^2$ 를 도시하고, 도 7c와 도 7d는 공유결합 매트릭스( $C_{d,p}$ )을 계산하고,  $C_{d,p}$ 의 함수로  $\langle \lambda \rangle$ 와  $E_g$ 의 변화를 표시한다.
- [0106] 도 7a와 도 7b를 참조하면, 팔면체내 큰 왜곡이 없는 경우(예를 들어, 종래의 페로브스카이트 산화물),  $\langle \lambda \rangle = 1$  및  $\sigma^2 = 0$ 에 매우 가깝게 위치한다는 것을 알 수 있다. 더 멀리 이 라인에서 벗어나면 팔면체내 왜곡이 더 커진다. 또한, 팔면체내 왜곡 서술자는 내부 왜곡이 지배적인 이원계 금속 삼산화물에 대해  $\Delta E_g$ 에 비례함을 알 수 있다. 반면에 종래의 페로브스카이트 산화물은 상당한 팔면체내 왜곡이 없기 때문에  $\Delta E_g$ 에 비례하는 경향을 보이지 않는다.
- [0107] 다양한  $MoO_3$  다형체에 대한  $\langle \lambda \rangle$ 의 계산된 값은 1.032 내지 1.070 범위에 있는 반면,  $WO_3$  다형체에 대한  $\langle \lambda \rangle$  값은 1.000 내지 1.020 사이의 값을 갖는다는 것을 알 수 있다. 이는  $MoO_3$ 의 팔면체 네트워크가 원자 스케일 모델 및 일반화된 각도 서술자 데이터를 뒷받침하여,  $WO_3$ 보다 더 심한 내부 왜곡을 겪는다는 것을 의미한다. 일 실시예에서, 비교적 높은 전기 음성도로 인해 상대적으로 높은 것으로 인해,  $Mo^{6+}$  양이온의 평균 중심 이탈이  $W^{6+}$  양이온의 평균 중심 이탈보다 더 심각한 것으로 예측될 수 있다.
- [0109] 도 7c와 도 7d를 참조하면,  $\langle \lambda \rangle$ 와  $E_g$ 는 모두  $C_{d,p}$ 에 직접적으로 비례함을 알 수 있다. 팔면체 왜곡이 더욱 심해질수록 이원계 금속 산화물 내에서 공유결합이 더 많이 중첩되고 금속 d와 산소 p 궤도 사이의 혼성(hybridization)이 증가함을 의미한다. 이러한 경향은 종래 페로브스카이트에 대한 결과와 다소 반대이다. 왜곡 거동과 페로브스카이트 및 이원계 금속 삼산화물의 화학 결합 특성이 다를 수 있다. 이러한 차이점을 고려할 때, 본 발명의 왜곡 분석 방법이 더 일반적일 수 있으며, 왜곡 지수의 유용성이 높다고 할 수 있다.
- [0111] 상술한 바와 같이, 원자 스케일 모델과 일반화된 각도 서술자에서 이원계 금속 삼산화물에 존재하는 2 가지 유형의 팔면체 왜곡, 즉 팔면체내 왜곡과 팔면체간 왜곡을 분석할 수 있다. 상기 이원계 금속 삼산화물의 상위 클래스 페로브스카이트와는 달리, 팔면체내 왜곡, 특히 금속으로부터 벗어난 것으로 기인한 왜곡은 전자 구조를 압도적으로 지배할 때, 팔면체간 왜곡은 전자 구조에 영향을 미치는 것으로 보인다. 이러한 분석에 기초하여, 이원계 금속 산화물 물질에 대한 물리적 편차와 이러한 편차의 기원을 이해할 수 있다.
- [0112] 따라서, 본 발명의 분석 방법은 다른 팔면체로 연결된 기능성 재료의 구조-특성 관계에 대한 분석에 도움이 될 것으로 예상된다. 예를 들어, 본 발명의 모델은 팔면체 네트워크(예를 들어, 전기 변색 스마트 윈도우 어플리케이션을 위한  $WxMo_{1-x}O_3$  합금)에서 이원계 산화물 물질의 합금을 분석하고 이해할 수 있도록 확장될 수 있다.
- [0114] 이상에서 설명한 본 발명이 전술한 실시예 및 첨부된 도면에 한정되지 않으며, 본 발명의 기술적 사상을 벗어나지 않는 범위 내에서 여러가지 치환, 변형 및 변경이 가능하다는 것은, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자에게 있어 명백할 것이다.

도면

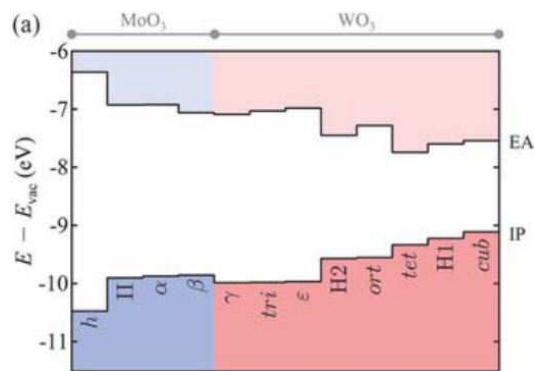
도면1a



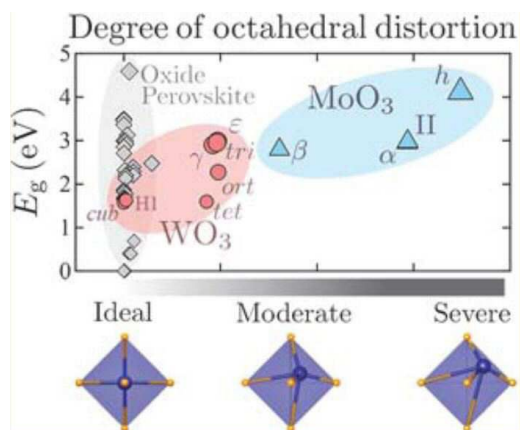
도면1b



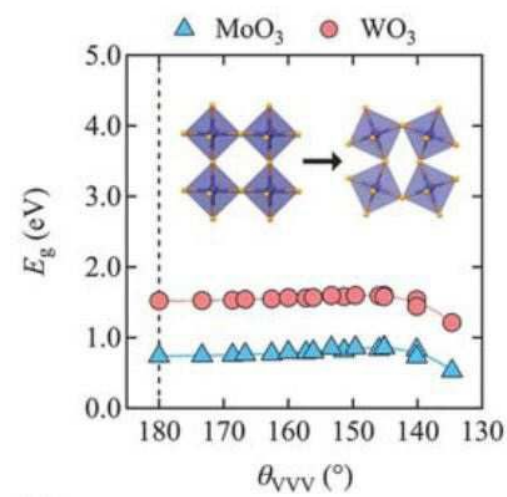
도면1c



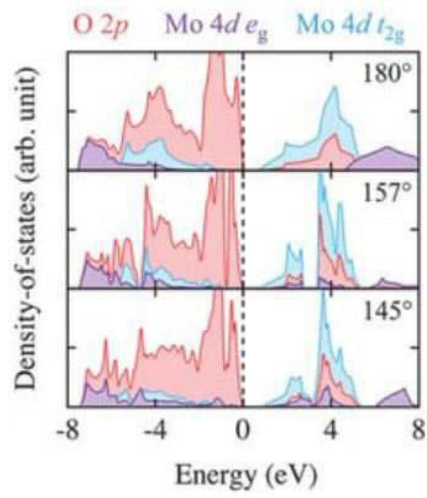
도면1d



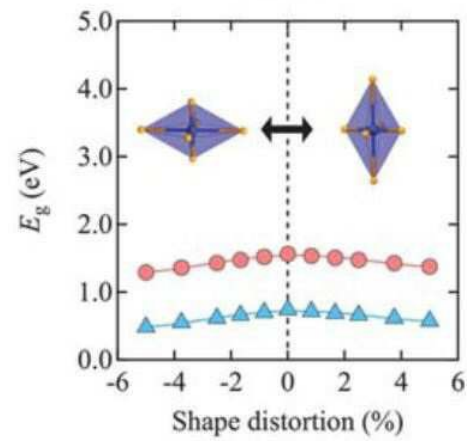
도면2a



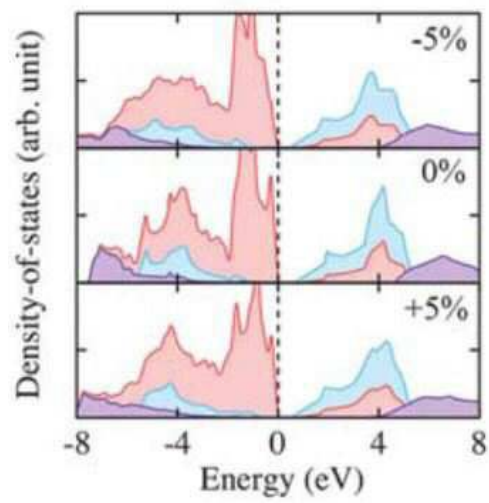
도면2b



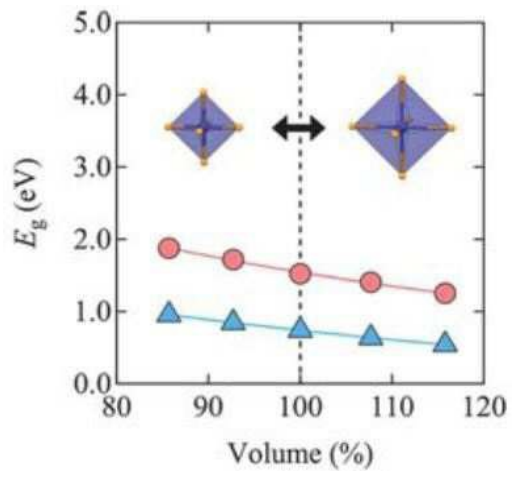
도면3a



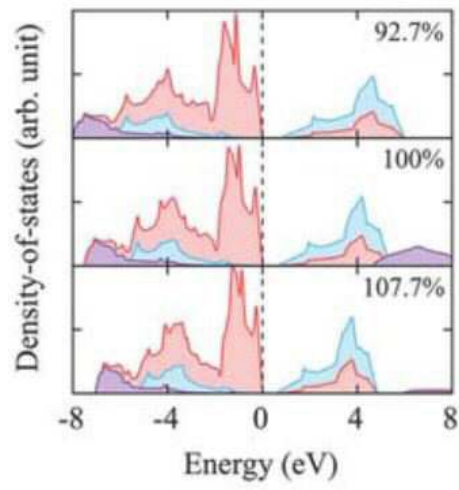
도면3b



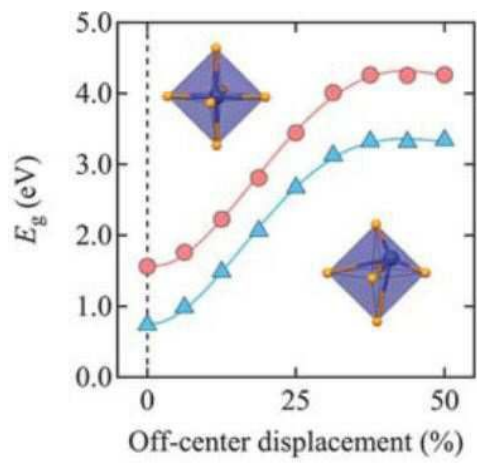
도면4a



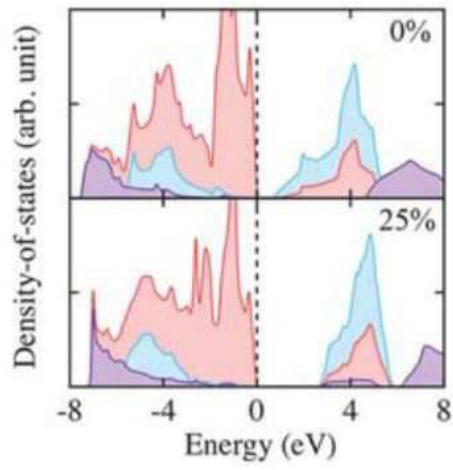
도면4b



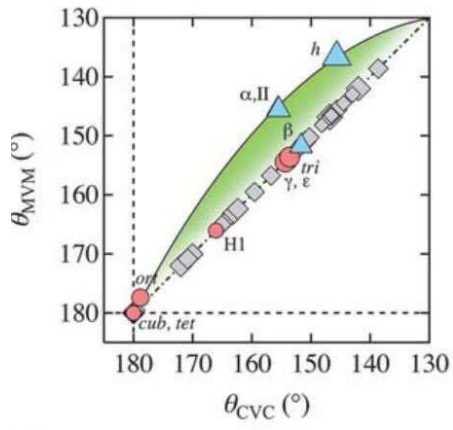
도면5a



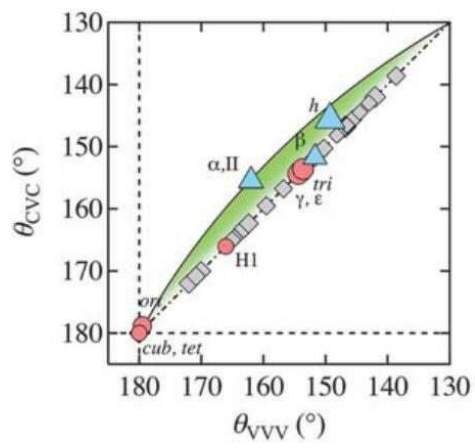
도면5b



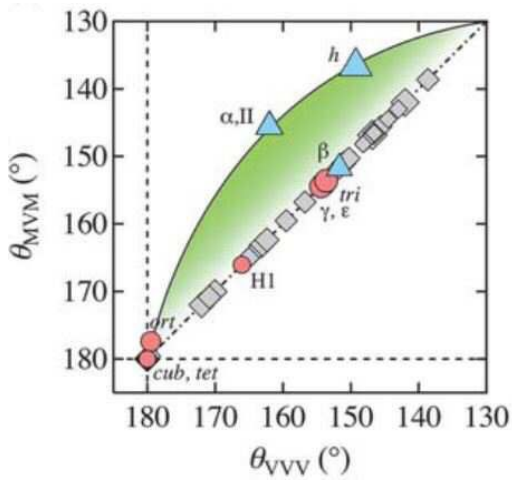
도면6a



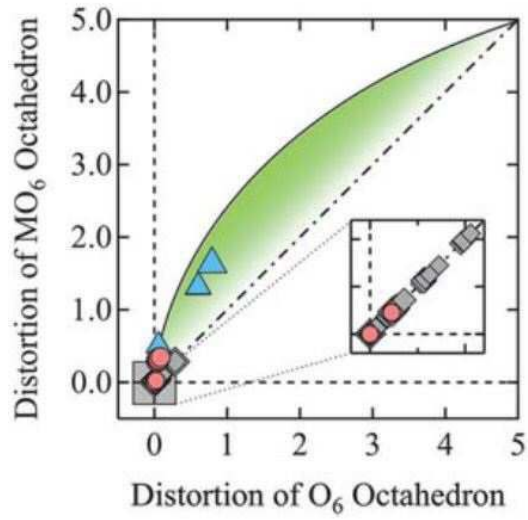
도면6b



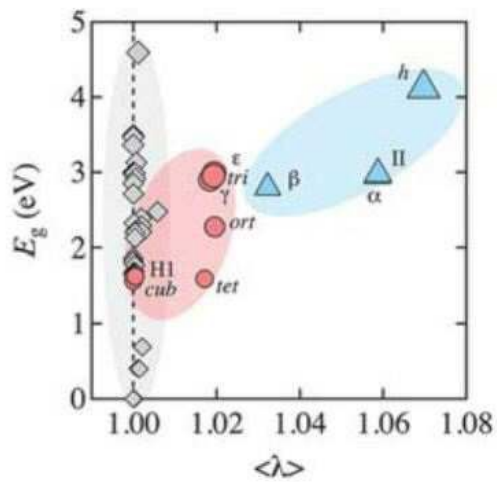
도면6c



도면6d

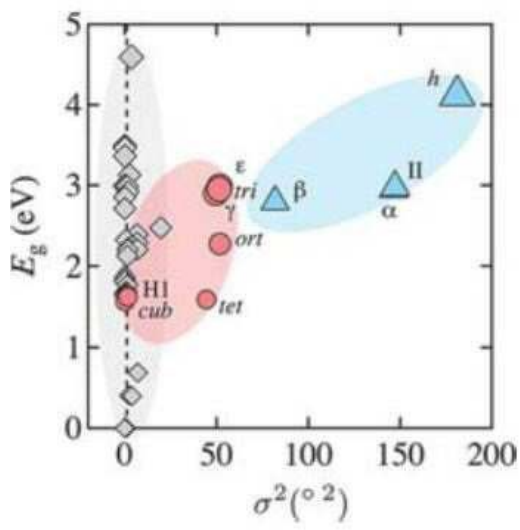


도면7a

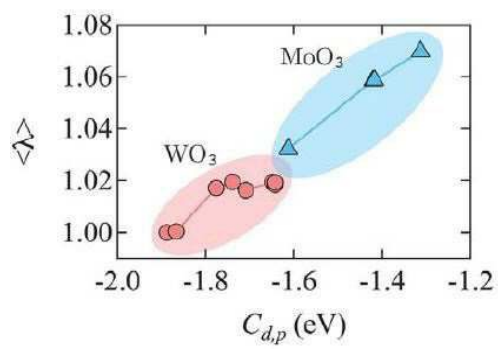




도면7b



도면7c



도면7d

