

## 화학적으로 개질된 이산화티타늄( $\text{TiO}_2$ )의 상태 밀도(Density of States) 전산모사

이수승, 김진수, 윤창연, 이종협\*

서울대학교

(jyi@snu.ac.kr\*)

이산화티타늄( $\text{TiO}_2$ )은 독성이 없고 광촉매로서 우수한 성능을 가지고 있기 때문에 방오, 향균, 탈취 등 다양한 분야에서 응용되고 있다. 그러나  $\text{TiO}_2$ 는 자외선 이상의 강한 에너지에서 광활성을 보이기 때문에 가시광 영역 하에서는 그 활용에 한계가 있다. 따라서, 현재 N, F, S, C 등의 도핑에 의해서 이산화티타늄의 band-gap 에너지를 줄임으로써 가시광 영역 하에서도 광활성을 보이는 물질을 개발하려는 연구가 진행되고 있다.

도핑법에 의한 band-gap 에너지 줄임 현상을 상태 밀도(density of states, DOSs)의 전산모사를 통하여 조사하였다. 단일 유기물이 도핑된 이산화티타늄의 상태 밀도 분석을 통해서 band-gap 에너지의 간격을 확인하였으며, 동시에 두 가지 유기 성분이 도핑된 경우에 대해서도 전산모사를 실시해 본 결과 band-gap 에너지 간격이 줄어드는 효과를 확인하였다.