

2009년 4월

제27권 제2호

ISSN 2005-8942

한국물리학회

회보

BULLETIN OF THE KOREAN PHYSICAL SOCIETY

응집물질, 응용, 통계, 반도체물리학분과 편

2009년 봄 학술논문발표회 및 제85회 정기총회

대전컨벤션센터

2009. 4. 23(목)~24(금)

주최: **KPS** 사단법인 한국물리학회
The Korean Physical Society www.kps.or.kr

후원: **DCC** 대전컨벤션센터
DAEJEON CONVENTION CENTER

Dp-II-096**Theoretical study on various spin configurations of bulk manganese**YANG Heok, LEE Young joo¹, LEE Eok kyunKAIST, Department of Chemistry. ¹RIST, New Material & Components Research Division.

Manganese is known to be one of the most complex metallic element. At ambient pressure, Mn can have four different configurations which are energetically close to each other. The ground state of Mn has a complex body centered cubic(bcc) like structure with 29 atoms in a unit cell. And it becomes antiferromagnetic below 95K. Among various theoretical approaches, density functional calculations have provided great contribution to analyze the ground states of 3d transition metals during recent decade. The adoption of exchange-correlation functionals using the generalized gradient approximation(GGA) improved the accuracy of calculated ground state and relative energies of many materials. We report the theoretical results of stable structures and magnetic properties of bulk manganese using density functional method with spin-dependent GGA. We examine the relative stabilities of bcc and fcc structure. For each structure, we calculate nonmagnetic(NM), ferromagnetic(FM), antiferromagnetic(AFM). This study reveals relative stabilities of antiferromagnetic and ferromagnetic configuration at low temperature.

Dp-II-097**스피넬 FeCr₂S₄에 Al이 치환된 자기적 성질에 관한 연구**김 철성, 김 삼진, 이 보화¹, 김 진모국민대학교, 물리학과. ¹한국외국어대학교, 물리학과.

Al이 치환된 FeCr₂S₄를 직접합성법으로 제조하였다. 제조된 시료를 x-선 회절기 (XRD), 진동 시료 자화율 측정기(VSM), 뫼스바우어 분광기(mössbauer spectroscopy)를 이용하여 자기적인 성질을 연구하였다. XRD를 이용하여 시료의 단일상을 확인하였으며 Rietveld 정련법 결과 분석오차 5% 이내로 확인되었으며 결정구조는 공간 그룹 *Fd3m*을 가지는 Cubic Spinel 구조로 결정하였다. 진동 시료 자화율 측정기를 이용하여 온도구간 50 K부터 300 K까지 외부자기장 0.5 T 하에서 시료의 자화곡선(zero-field-cooled curve:ZFC) 측정한 결과 Al 치환량이 증가함에 따라 Néel온도가 170K에서 130K로 점차 감소함을 확인하였다. 초미세 자기 상호작용의 변화를 알아보기 위해 뫼스바우어 스펙트럼을 측정하였고 Al 치환량이 증가함에 따라 초미세자장의 크기가 감소하였으며 77K 스펙트럼의 비대칭성이 커지는 relaxation distortion을 확인하였다.