

# 한국 물리학회 회보

2010. 10 제28권 제2호

2010년  
가을학술논문발표회  
및 임시총회

• • •

휘닉스파크  
2010. 10. 20(수) ~ 22(금)

**Dp-III-107****Electronic Structures and Magnetism of Hexavalent 3d and 4d transition metal compounds :** **$K_2MO_4$  (M = Fe, Ru)**

김 민재, 민 병일

포항공과대학교, 물리학과.

We have studied the electronic structures and magnetic properties of hexavalent 3d and 4d transition metal compounds  $K_2MO_4$  (M = Fe, Ru) using the total energy all electron band structure method. The crystal structures of  $K_2MO_4$  (M = Fe, Ru) are orthorhombic of  $K_2CrO_4$  type. The hexavalent Fe and Ru ions are tetrahedrally surrounded by oxygen ions. We have confirmed the antiferromagnetic (AFM) insulating ground state in both compounds consistently with experiments. Covalent electronic structures are formed in  $K_2MO_4$  (M = Fe, Ru) as bonding and antibonding states. Our electronic structures show that  $K_2RuO_4$  has larger splitting between bonding and antibonding states and smaller exchange splitting in comparison with  $K_2FeO_4$  due to the stronger p-d hybridization for 4d than for 3d electrons. Relative total energy differences between AFM and ferromagnetic states are consistent with high Neel temperature in  $K_2RuO_4$  ( $T_N=14K$ ) than in  $K_2FeO_4$  ( $T_N=4K$ ).

**Dp-III-108\*****뫼스바우어 분광법을 이용한  $LiFePO_4$  물질의 Spin reorientation 연구**

김 철성, 이 찬혁, 이 인규, 문 승제, 김 우철, 심 인보

국민대학교 나노전자물리학과, 서울시 성북구 정릉동 861-1, 136-702.

2차전지 양극활 물질로 연구되고 있는  $LiFePO_4$  물질에 대하여 X-선 회절 측정,  $^{57}Fe$  뫼스바우어 분광 측정, SQUID magnetometer 측정을 통하여 결정학적 구조와 자기적 특성을 연구하였다.  $LiFePO_4$  물질은 저온에서 강한 결정장에 의한 비대칭적인 8개의 뫼스바우어 공명 흡수 스펙트럼을 얻었으며, Néel 온도( $T_N = 51$  K) 이상에서는 두 개의 공명 스펙트럼을 보였다. 한편 초미세 자기장의 온도에 따른 변화 값이 23 K 전후에서 다르게 변화됨이 관측되었고, 또한 전기 사중극자 분열치도 23 K에서 가장 큰 값으로 분석되었다. 이러한 현상은  $Fe^{2+}$  이온의 스핀-궤도 결합 효과와 이온 주변의 비대칭적 전하 분포에 의한 큰 결정장에 인한 것으로, 23 K에서  $LiFePO_4$  물질의 Spin reorientation 현상을 관측하였다.