

자기 강유전 $\text{Bi}_4\text{LaTi}_3\text{FeO}_{15}$ 의 결정구조와 자발분극Crystal Structure and Spontaneous Polarization of Magneto-electric $\text{Bi}_4\text{LaTi}_3\text{FeO}_{15}$ Phase

고태경, 한규석

인하대학교 세라믹공학과

$\text{Bi}_4\text{LaTi}_3\text{FeO}_{15}$ 는 실온에서 자기강유전성을 나타내는 화합물로서, 강유전성 aurivillius 상인 $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ 의 페롭스카이트 층에 강자성 LaFeO_3 가 고용된 화합물이다 이 화합물은 반자성을 띠는 것으로 알려져 있어 Fe^{3+} 이온의 자기모멘트의 배열은 페롭스카이트에서 알려진 팔면체내 양이온간의 Fe-O-Fe 초교환 기구에 의존할 것으로 생각된다 이에 비해, $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ 의 강유전성은 페롭스카이트 층에 있는 Bi^{3+} 이온의 상대적인 변이에 주로 기인하는 것으로 알려져 있다. 본 연구에서는 $\text{Bi}_4\text{LaTi}_3\text{FeO}_{15}$ 에서 페롭스카이트 층에서 Bi^{3+} 를 등방성 이온인 La^{3+} 로 치환하여, Fe-O-Fe의 초교환 기구와 자발분극의 원인인 이온 변이간의 연관성을 찾고자 하였다

$\text{Bi}_4\text{LaTi}_3\text{FeO}_{15}$ 의 결정구조는 중성자회절(Hanaro, HRPD)와 x선 회절(Kbsi, X'pert, Philips)에 대하여 Rietveld법을 사용하여 정산되었다 구조의 공간군은 $A2_1am$ 이었다 양이온 점유율 정산에서 산소자리는 정량적인 점유를 한다고 가정하였다 정산은 중성자 회절의 경우 $R_p=8.65\%$, $R_{wp}=11.2\%$, $R_{Bragg}=5.20\%$, $\chi^2=1.97$, $Gof=1.52$ 에서 수렴하였고, X선 회절에서는 $R_p=4.29\%$, $R_{wp}=5.42\%$, $R_{Bragg}=5.30\%$, $\chi^2=1.91$, $Gof=1.38$ 으로 수렴하였다 격자상수는 $a=5.4463(2)\text{\AA}$, $b=5.4405(2)\text{\AA}$, $c=41.275(1)\text{\AA}$ 이었다. La/Bi과 Ti/Fe의 점유율은 무질서 점유율과 비교하여 크게 차이가 나지 않았으나, 원자자리에 따른 차이는 있었다 그리고, Bi_2O_2 층에서 Bi/La 점유율은 La의 고용이 다소 될 수 있음을 보였다 페롭스카이트 층에서 Fe 점유율은 외부팔면체에 비해 내부팔면체에서 상대적으로 높았고, Bi 점유율은 외부팔면체에 인접한 자리에서 높았다.

구조자료를 바탕으로 얻은 각 이온의 결합전자 값은 해당 이온의 형식전하 값과 비슷하였다 하지만, 페롭스카이트 층에서 바깥팔면체의 산소는 다소 과전하이어서, Bi^{3+} 의 고립전자쌍과 산소 과전하 사이의 연관성이 있었다 페롭스카이트 층의 팔면체를 구성하는 산소의 변이는 자발분극의 값에 크게 기여하고 있었고, Bi의 변이에 의한 영향은 높지 않았다 계산된 자발분극 값은 $18.5 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ 이었다 페롭스카이트 층의 Fe-O-Fe 결합에서 산소 변위는 자발분극의 생성에 기여하고, 결합각을 변화함으로써 자기모멘트의 배열을 바꾸는 것으로 생각된다(혹은 그 반대로 생각할 수 있다)

Crystallinity Changes on Boron-doped Mesophase Pitch Formation from Decant Oil

Yun-Soo Lim, Jangsoon Kim*

Department of Ceramic Engineering, Myongji University

*Advanced Materials Research & Development, LG Chem. Ltd

The mesophase pitch was prepared by adding 0.5~2.0 wt% of the borane-pyridine complex to decant oil. It was prepared in a tubing bomb reactor equipped with fluidized sand bath held at 500°C for 30, 45, and 60 min, respectively. The mesophase pitches were analyzed using Thermo-Gravimetric Analyzer(TGA), X-Ray Diffraction(XRD) and polarized optical microscope. The XRD profiles did not show any effect of addition of pyridine-borane complex on the formation of mesophase pitch, while the crystallinity of mesophase pitches was increased when the materials were heat treated with boron compound. The anti-oxidizing property of the mesophase pitch containing the pyridine-borane complex was improved in TGA data as increases of yields. The pyridine-borane complex hindered the formation of mesophase acted as crosslinking agent.