

〈P85〉

Fergusonite 구조를 가진 형광체의 전자구조  
Electronic structure of fergusonite phosphor

이승권\*\*, 장현주\*, 박희동\*, 장호겸\*

\*한국화학연구소 화학소재연구부

\*고려대학교 화학과

Fergusonite 구조를 가진  $\text{YNbO}_4$ 와  $\text{YTaO}_4$ 는 자외선(Ultra-violet) 영역에서 효율적인 발광을 하며, FED용 저전압 형광체로써 가능성을 보여주고 있는 물질이다. 본 연구에서는  $\text{YNbO}_4$ 와  $\text{YTaO}_4$ 의 발광구조를 이론적으로 규명하기 위하여 범밀도 함수방법(Density functional theory)을 사용하여 전자구조를 계산하였다. 얻어진 상태밀도 함수(Density of states)로부터 두 모체의 밴드 갭과 흡수 메커니즘을 이론적으로 설명할 수 있었다.

〈P86〉

고체 전지용  $\text{Li}_2\text{O}-2\text{SiO}_2-x\text{CuO}$  계 전도성 유리의 제조에 마이크로파 에너지의 이용 및 특성 비교

The study for fabrication and characteristic of  $\text{Li}_2\text{O}-2\text{SiO}_2-x\text{CuO}$  conduction glasses using conventional and microwave energies

박성수\* · 김경태 · 이상은 · 김병찬 · 박진 · 박희찬

부산대학교 무기재료공학과, \*부경대학교 고분자공학과

마이크로파 열처리공정이 여러 가지 CuO 조성을 가진  $\text{Li}_2\text{O}-2\text{SiO}_2-x\text{CuO}$  유리의 전기전도도와 결정화 거동에 미치는 영향을 조사하기 위하여 재래식 열처리 공정과 비교하였다. 각기 재래식과 마이크로파 가열법으로 열처리하였을 때, 이 유리의 전기전도도는 CuO 함량이 증가할수록 증가하였고, 각 조성에서 마이크로파로 열처리된 유리가 재래식으로 열처리된 유리에 비하여 전기전도도가 높았다 또한 X-선 회절 실험 결과, 마이크로파 열처리는  $\text{Li}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ ,  $\text{Li}_2\text{Cu}_5(\text{Si}_2\text{O}_7)_2$  및  $\text{Li}_2\text{Cu}_2\text{O}_3$  상의 결정도를 높여 주었다.  $\text{Li}_2\text{O}-2\text{SiO}_2-1.3\text{CuO}$  (30 mol% CuO) 유리를  $500^\circ\text{C}$ 에서 30분 동안 재래식과 마이크로파 열처리 공정을 이용하여 열처리하였을 때, 이 유리의 전기전도도는 각기  $0.11 \times 10^{-4} (\Omega \text{cm})^{-1}$ 과  $0.68 \times 10^{-4} (\Omega \text{cm})^{-1}$ 이었다 마이크로파 에너지는 결정화를 촉진시키고 이에 따라 전기전도도를 향상시켜 주었다.