

이온 교환형 스피넬  $\text{Li}_{1.6}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$  의 화학결합  
 Chemical bonding of ion-exchange type sites in spinel-type  $\text{Li}_{1.6}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$

김양수, 노광수, Shuji KASAIISHI\*, Ramesh CHITRAKA\*, Kenta OOI\*  
 한국과학기술원, \*AIST(Japan)  
 (dvxa@dvxa.net)

리튬은, 세라믹스, 2차전지, 냉매흡착제, 촉매, 의약품등 넓은 분야에 이용되고 있다. 하지만, 자원으로 리튬의 양은 한정되어 있으며, 리튬의 안정적인 확보는 장래 에너지공급 등을 고려할 때 매우 중요한 문제의 하나로 대두되고 있다. 이와 같이 리튬의 안정적인 공급을 위한 해결수단으로써 리튬을 바다에서 채취하고자 하는 연구가 주목을 받고 있다. 본 연구는 리튬이온 흡착제 성능을 높이기 위해 새로 개발된 스피넬형  $\text{Li}_{1.6}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$ 의 전자상태 및 화학결합을 통하여, 리튬 이온의 거동 및 각 원자간의 상호작용에 대해 알아보는 것을 목적으로 하고 있다.

연구방법으로는 DV- $X\alpha$ 분자궤도법(1-3)을 이용한 클러스터계산을 수행했고, 밀리켄의 전자밀도 해석을 통해 각 원자의 이온성 및 각 원자간의 상호작용에 대해 고찰했다.

참고문헌 :

- (1) 처음배우는 전자상태 계산, 도서출판 한림원.
- (2) 양자재료화학입문, 도서출판 한림원.
- (3) 양자재료학의 기초, 도서출판 한림원.