

자성물질의 탄성 이론

연세대학교 물리학과 김철구*
권태송
남균

Theory of Elastic Properties in
Magnetic Materials

Department of physics

Yonsei University Chul Koo Kim*

Tae Song Kwon

Kyun Nahm

초 록

자성 물질의 탄성계수의 온도 의존성을 설명하는 이론을 체계적으로 제시하였으며, 이 이론을 지금까지 적용되지 않은 다른 형태의 자기적인 물질에 적용시키는 문제에 대해서도 논의하였다.

1. 서 론

Th₃P₄ 나 A-15 등 자성물질은 어떠한 원소로 조합시키느냐에 따라 초전도 전이, 격자구조 전이 그리고 자기적인 전이 등의 재미있는 물리적인 성질들을 갖고 있다. 또한 일반적으로 이들 결정체는 탄성계수가 보통의 금속화합물과 다른 이상한 변화를 보인다.[1]

현재까지의 이론에 의하면 C' 은 strain-split level 사이에서 전자들의 재배치함을 고려 함으로서 설명된다. 본 연구에서는 현재까지의 이론을 다시한번 검토하고, 에너지띠가 좁지 않을때에도 적용이 가능한지를 알아본다. 또한 상호작용 효과가 강할 경우의 일반적인 접근 방법에 대해서도 논의 한다.

2. 이 론

희토류 원소를 포함한 물질의 경우에는 Hamiltonian 에 자기적인 상호작용이 포함 되어야 하며 이 상호작용은 Heisenberg Hamiltonian 으로 기술될 수 있다. 그러므로 C'에 기여하는 모든항을 고려하면 C'을 다음과 같이 쓸수 있다.

$$C' = C_0' + BT - P[1 + \exp(-\frac{T_F}{T})]^{-1} + X(\frac{M^2}{M_0^2}) + \Delta C'_{\text{domain}} \quad (1)$$

식(1)의 첫번째 항과 두번째 항은 각자에 의한 항들이다. 세번째는 전자에 의한 것이고, 네번째는 자기적인 상호작용에 의한 항이고 마지막 항은 domain 에 의한 항이다. 식(1)로 Nd₃Se₄ 의 경우에 대해 잘 설명할수 있음은 이미 발표한바 있다.[1] 그러나 위의 이론에서는 에너지 준위들이 매우 좁아서 원자적인 성격을 그대로 유지하고 있다는 가정을 하였다. 그러나 띠가 충분히 좁지 않을때에는 계산시 에너지

준위의 피성격을 넣는 것이 필요하다. 이것은 deformation potential 기여와 연결된 tight binding (TB) Hamiltonian 을 사용하면 다음과 같이 주어진다.

$$H_{KK'} = \langle K | (H + D_{ij} \epsilon_{ij}) | K' \rangle \quad (2)$$

이식에서 $|K\rangle$ 와 $|K'\rangle$ 은 2중 축퇴된 띠에 대한 TB basis 함수들이다.

이 Hamiltonian 으로 자유에너지 변화를 계산할수 있으며 탄성계수 변화도 계산할수 있다. 물론 닫혀진 형태의 표현식이 더 이상 존재하지는 않지만 만일 띠가 좁으면 수치계산의 결과 식(1)과 비슷하게 됨을 알수 있다. Heisenberg 표현으로 더 이상 나타낼수 없는 피자성이 존재시에는 이식은 대폭적으로 수정되어야 한다. 이경우에 이중 Hubbard Hamiltonian 띠에 의해 표현될수 있다.[2] 이 Hamiltonian 은 Hartree-Fock 근사를 이용하여 계산될수 있으며, 그결과를 이용하여 자유에너지와 탄성계수를 계산할수 있으며 그 온도의존성이 그림1에 나타나 있다.

그림을 보면 d-전자 자성을 갖고 있는 invar 의 C' 모습과 비슷하다. 그러므로 이 이론이 f 및 d-전자 자성물질에 다같이 적용됨을 알수 있다. 또한 고온 초전도체는 강한 상호작용에 의해 생기는 것으로 사료되므로, 이 모델을 더 연장하여, 강한 상호작용의 경우에도 적용시킬 경우 고온 초전도체의 원인 규명도 가능하리라 본다.

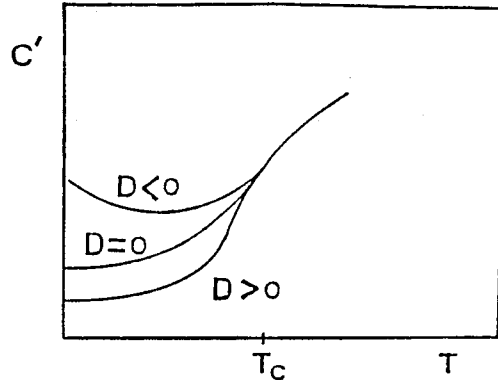


Fig 1. Temperature dependence of c' using the Hubbard Hamiltonian

3. 결 론

본 연구에서 자성물질과 비자성물질의 탄성계수가 어떻게 온도에 따라 변하는가를 설명하는 이론을 제시하였다. 본이론에 의하면 전자의 재배치가 탄성을 약화시키며 spin-spin 상호작용이 탄성강화 효과를 갖고 있음을 알수 있다. 그러나 급속피자성은 탄성계수 변화에 거의 영향을 미치지 않음을 알게 되었다.

* 과학기술처 특정연구비에 의해 수행됨

4. References

- [1] T.S. Kwon, K. Nahm, Y. Cho, H. Fütterer, C.K. Kim, and J. Pelzl, Solid State Commun., 74, 1233(1990).
- [2] D.K. Ray and S.K. Ghatak, Phys. Rev. B, 36, 3868(1987).