

SmCo₅ 영구자석의 전자기적물성 연구

포항공대 물리학과 민 병일*
장 영록

Electronic and Magnetic properties of Permanent Magnet : SmCo₅

Department of Physics, POSTECH
B.I. Min* and Y.-R. Jang

희토류(rare-earth)금속과 전이금속(transition metal)의 화합물인 희토류-영구자석(SmCo₅)의 전자구조 이론연구를 통하여 자성을 포함한 제반 물성, 즉 구조적, 전기적, 자기적 성질등을 고찰하였다.

Local Density Linearized Muffin-Tin orbital (LMTO) energy band 방법을 사용하여 SmCo₅ 화합물의 상자성(paramagnetic)과 강자성 상(ferromagnetic phase)에서의 전자구조 계산을 수행 하였다.

그림 (1) 은 SmCo₅ 상자성 상(paramagnetic phase)에서의 전자구조를 보여준다. 실선으로 표시된 총 상태밀도(total density of states: DOS)는 2개의 peak을 갖는데 그중 왼쪽에 위치한 것은 대체로 Co 원자들의 d-band에 해당하는 것이고 오른쪽 peak은 대부분 Sm-원자의 f-band에 해당한다. (total DOS 밑에 점선으로 표시된 DOS는 각각 Co-II, Co-I, Sm 원자의 projected DOS를 나타낸다.) 상자성 상에서의 상태밀도는 보는 바와 같이 Fermi level (E_F : 그림에서 energy zero에 해당)에서 매우 높은 DOS값을 갖는다(27 states/eV). 이는 대부분 Sm 원자의 f-band와 Co-3d band에 해당하는 상태밀도로 이러한 E_F 에서의 높은 상태밀도는 자기 상전이, 또는 구조 상전이의 가능성을 예고한다.

그림 (2)는 SmCo₅ 강자성 상(ferromagnetic phase)에서의 spin-polarized DOS를 보여 준다. 상자성 상에서의 높은 DOS는 앞에서 언급한 exchange interaction에 의한 energy band splitting으로 spin-up and down DOS로 나뉘어져 E_F 에서의 DOS가 약 35% 정도 줄어든 것을 볼 수 있다(20 states/eV). E_F 에 위치한 spin-up band는 상자성상에서와 마찬가지로 대부분 Sm 원자의 4f-band 에 기인한 것이며 E_F 에서의 spin-down band는 대부분 Co 원자의 3d-band에 해당한다. Sm-f band의 spin-up band와 down band의 energy splitting은 약 4.5 eV 정도이다.

Sm 원자의 spin magnetic moment는 $5.18 \mu_B$ 이고 CoI, CoII 원자의 spin magnetic moment는 각기 $1.25 \mu_B$, $1.41 \mu_B$ 로 주어지 SmCo₅ unit cell에서 총 $11.81 \mu_B$ 의 spin magnetic moment를 갖는 것으로 계산되었다. 이는 실험치 $7.8 \mu_B$ 에 비해 너무 큰 값이다. 우리는 이 차이를 Sm 원자의 magnetic moment가 너무 크게 계산되어진 때문이라 추정한다. Sm 원자와 같은 희토류 금속에서는 spin-orbit interaction에 의한 orbital magnetic moment의 total magnetic moment에의 기여가 상당하다. 따라서 희토류 원소의 spin-orbit interaction의 효과를 고려한 전자구조이론 연구가 선행되어야 할 것이다.

참고 문헌

- [1] E.P Wohlfarth and K.H.J. Buschow, "Ferromagnetic Materials, A Handbook on the Properties of Magnetically Ordered Substances", Vol 4, North-Holland (1988)
- [2] R.J. Parker, "Advances in Permanent Magnetism", John Wiley and Sons (1990)

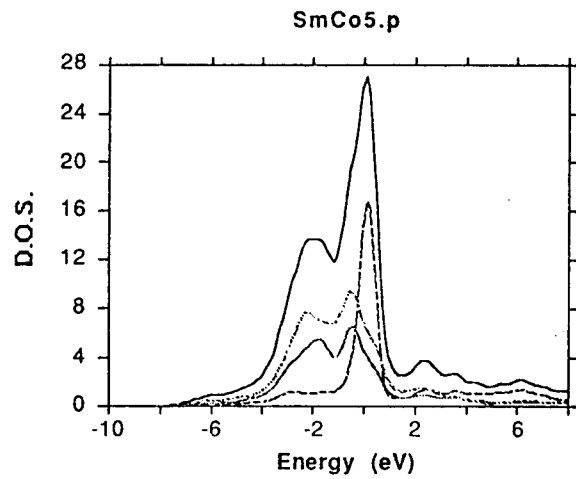


Fig. 1. DOS of paramagnetic SmCo5.

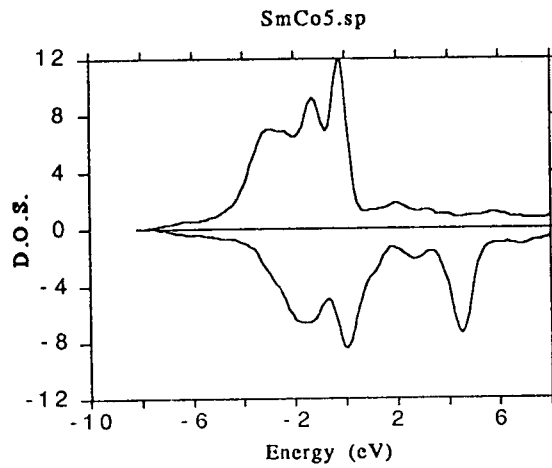


Fig. 2. DOS of ferromagnetic SmCo5.