

전이금속 (Fe, Ni)의 유한온도에서의 전자구조 및 자기적 성질에 관한 연구

박진호*, 권세균, 민병일
포항공대 물리학과

Electronic structures and magnetic properties of transition metals (Fe, Ni) at finite temperature

J. H. Park*, S. K. Kwon, and B. I. Min
Department of Physics, POSTECH

밀접 결합 (tight-binding: TB) linearized-muffin-tin-orbital (LMTO) 방법과 회귀 (recursion: R) 방법을 결합한 실공간 전자구조 방법인 제일원리-자체충족적-스핀분극 TB-LMTO-R 방법을 이용하여, 전이금속의 유한온도 ($T > 0$)에서의 전자구조 및 자기적 성질에 대하여 연구 하였다.

이제까지의 연구 결과에 의하면 $T > 0$ 에서 국재 자기모멘트 (localized magnetic moment)의 방향은 한 방향으로 정렬 되어 있지도 아니하고, 그 크기도 일정하지 아니한 것으로 알려져 있다. 우리는 $T > 0$ 에서의 자기모멘트 성질을 연구하기 위하여 스핀-나선 (spin-spiral) 모형과 비스듬히 기울어진 스핀 (spin-canting) 모형의 두 모델을 가정하여 전자구조를 계산하였다. 스핀-나선 모델이란 연속된 인접 층간의 국재 자기모멘트의 방향이 일정한 각을 이루는 나선 모양을 보이고, 같은 면내의 국재 자기모멘트의 방향은 나란한 형태이다. spin-canting형 모델은 인접한 두면에서의 국재 자기모멘트의 방향이 임의의 축과 이루는 각이 서로 반대가 되는 형태이며, 같은 면내의 국재 자기모멘트의 방향은 서로 나란한 구조이다.

본 연구에서는 두 모델에 대하여 인접 면에서의 국재 자기모멘트 방향 각도를 변화 시켜 가면서 전자 구조와 자기모멘트를 계산 하여, 스핀-나선 모형이 에너지적으로 보다 안정된 모델임을 보였다. 또한 전자 구조 계산으로 구한 계의 총 에너지의 결과를 유사 Heisenberg model에 적용하여 Heisenberg 상호 작용 계수를 구하고, 평균장 이론에 근거한 Curie 온도 T_c 와 스핀파 경도 (spin-wave stiffness) 상수를 구하였다. 마지막으로, 우리는 계산의 결과를 다른 이론 및 실험 결과들과 비교 하였다.