

## Fe에 첨가된 3d, 4d 전이금속 불순물의 전자구조 및 자기적 성질에 관한 연구

박진호\*, 민병일  
포항공대 물리학과

### Electronic structures and magnetic properties of 3d, 4d transition metal impurities in bcc Fe

J. H. Park\* 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 방법[1]을 이용하여, bcc Fe 내의 3d, 4d 전이금속 불순물의 전자구조 및 자기적 성질에 대하여 연구 하였다.

이러한 불순물을 포함하는 계의 전자 상태밀도에서는 d 궤도에 의한 공명 준위 (resonance level)가 페르미 준위 근방에서 피크의 형태로 나타났다. 이러한 공명 준위와 전자 상태밀도의 특성을 불순물 원자와 접하고 있는 모원자 (Fe) 간의 결합차수 (bond order) 계산을 통하여 규명하였다. 모원자보다 가전자 수가 적은 불순물 원소(Ti, V, Zr 등)에서는 불순물의 국소 상태 밀도가 반결합(antibonding)의 특성을 가지고, 가전자 수가 많은 불순물 원소(Co, Ni, Pd 등)에서는 불순물의 국소 상태 밀도가 결합(bonding)의 특성을 가지고 있다.

한편, 가전자 수가 많은 불순물 원소에서는 불순물에서의 국소 자기모멘트의 방향이 모원소와 같은 방향이지만, 가전자 수가 적은 불순물 원소의 국소 자기모멘트의 방향은 모원소와 반대 방향을 가지고 있음을 발견하였다.

1. O.K. Andersen, O. Jepsen, and D. Glötzel, in *Highlights of Condensed-Matter Theory*, edited by F. Bassani, F. Fumi, and M.P. Tosi (North-Holland, New-York, 1985)