

# 금속 자성의 기본 이론

민병일

포항공과대학교 물리학과  
경북 포항시 790-784

(1995년 7월 29일 접수)

## I. 서 론

최근 새로운 과학기술의 발달로 자기다층박막등 자기 분야의 신소재를 비롯하여 XMCD(X-ray Magnetic Circular Dichroism), MFM(Magnetic Force Microscope)등 자성분석방법등이 빠르게 개발되고 있고, 정보화 사회의 출현과 함께 자기기록에 대한 중요성이 증대되면서 자기 물성에 대한 연구는 새로운 르네상스 시기를 맞았다고 할 수 있다. 자기 현상의 근본 원리 규명에 대한 연구는 재료과학 또는 고체물성 연구과제중 가장 오랜 역사를 지닌 문제중의 하나라 할 수 있다. 자연계에 존재하는 자석은 기원전 7세기경부터 인간에게 알려진 것으로 기록되어 있고 그후 오랫동안 나침반으로 사용되어 왔다. 하지만 자석의 원리에 대한 규명은 양자역학이 생기고 전자의 스핀개념이 도입된 20세기 초에서야 시작되어졌다. 그러나 현재까지도 자기 현상의 아주 기본적인 개념만이 알려진 상황이고, 금속, 부도체 또는 화합물등에서 일어나는 다양한 자기 현상들을 일관성 있게 설명하는 완전한 이론의 정립은 아직도 요원한 문제라 할 수 있다.

주기율표에서 자성을 띠고 있는 물질은 Cr, Mn, Fe, Co, Ni등의 3d 전자를 갖는 전이 금속과 4f, 5f등의 전자들을 갖는 희토류, 악티나이드(actinides) 물질들, 또는 이들의 화합물들에서만 관측된다. 따라서 자성이 왜 3d나 f-전자들에서만 존재하는가 하는 것을 이해하는 것이 자기 현상 원리 규명의 첫 걸음이 될 것이다. 이들 전자들의 큰 특징은 한마디로 다른 전자들에 비하여 국재화(localized) 되어 있다는 것이다. 즉 전하밀도가 핵의 근처에 분포되어 있어 인근 원자에 위치한 전자들과의 파동함수 중첩(overlap)이 작고 따라서 주위 원자로의 이동확률(hopping probability)이 s, p전자나 4d, 5d 전자들에 비하여 작다. 그러므로 이들 물질은 에너지띠 폭이 좁은(narrow energy band) 특성을 갖고 있다. 이러한 상황에서 전자의 스핀들간의 교환 상호작용 효과가 커지고 이로 인하여 스핀이 한 방향으로 정렬하여 자성을 띠게 된다. 전이 금속의 자성은 대부분 3d 전자의 스핀의 정

렬에 기이하지만 희토류, 악티나이드 물질들에서는 전자의 스핀뿐만 아니라 궤도 각운동량에 의한 자기모멘트도 중요하여져 이들간의 spin-orbit 상호작용도 고려하여야 하기 때문에 문제가 더욱 복잡하게 된다.

본고에서 우리는 금속 자성에 대한 기본적인 이론들을 살펴보도록 한다. 우선 자기 현상을 기술하는 모델 Hamiltonian들인 Heisenberg 모델과 Hubbard 모델등을 소개하고 이들로부터 유도되는 스핀 자기감수율에 대하여 알아본다. 스핀 자기감수율의 성질로부터 자기 불안정성 여부를 판단하는 Stoner모델을 소개하고 RKKY 상호작용에 대하여 알아본다. 또한 자성을 띠지 않는 불순물이 금속내에 존재할 때 관측되는 Kondo 현상과 Anderson 모델에 대해 간단히 알아보기로 하자.

## II. Heisenberg 모델

자기 현상은 스핀이나 각운동량등의 자기모멘트들의 정렬에서 이루어 지는데 이러한 정렬은 자기모멘트간에 상호작용이 존재하여 일어나게 된다. 사실 이러한 상호작용은 전자간 Coulomb 상호작용에 기인한다. 양자역학을 만든 사람들 중의 하나인 Heisenberg에 의하여 고체내 자성을 주는 상호작용은 바로 전자간 쿨롱교환 상호작용이란 것이 밝혀졌다. Heisenberg 모델은 다음과 같은 해밀토니안으로 주어진다.

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1)$$

여기서  $J_{ij}$  는 전자간 쿨롱교환 상호작용이고  $\vec{S}_i$  와  $\vec{S}_j$  는 각각  $i, j$ -원자에 위치한 전자의 스핀연산자이다[1].

Heisenberg 모델에 의하면 온도가 낮아지면서 스핀들의 열적요동이 줄어들게 되고, 전자의 스핀들간의 쿨롱교환 상호작용이 열적요동 효과보다 커지게 됨에 따라 스핀들이 정렬되고 자성을 띠게 된다. 보통  $J_{ij} > 0$ 이므로 위식과 같이 주어지는 Heisenberg Hamiltonian은 스핀들이 서로 같은 방향으로 정렬할 때 낮은 에너지를 갖게 되

므로 강자성 효과를 기술하게 된다. Heisenberg 모델에서는 전자의 운동은 무시한다. 따라서 이 모델은 4*f*, 5*f* 등의 국재된 전자를 갖고 있는 부도체에서 보이는 자성 현상을 기술하는 모델이라 하겠다.

### III. Hubbard 모델

Fe, Co, Ni 등의 전이금속에서의 3*d* 전자는 *f*-전자들 보다는 비교적 잘 움직이는 (itinerant) 성질을 갖고 있다. 따라서 전자의 운동을 무시할 수 없으므로 이러한 금속에서의 자성 현상은 Heisenberg 모델로 기술할 수는 없다. Hubbard는 1960대에 다음과 같은 Hubbard 모델을 제안하여 전도성이 높은 전자들의 스핀 정렬을 설명하였다[2]. Hubbard 모델은 고체내의 복잡한 다체 Hamiltonian을 간단화하여 전자의 hopping에 해당하는 운동 에너지와 같은 원자위치에 두 전자가 존재할 때 생기는 Coulomb 에너지의 두 파라미터만으로 표현하는 모델이다.

$$H = \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \quad (2)$$

윗 식의 첫째항은 한 전자가 원자위치 *i*에서 *j*로 이동할 때의 운동에너지에 해당하고 *t<sub>ij</sub>*를 hopping 파라미터라 부른다 (*c<sub>iσ</sub><sup>†</sup>*, *c<sub>jσ</sub>*는 전자의 생성, 소멸 연산자). 여기서 hopping 파라미터의 크기는 에너지 띠의 폭을 결정하여 준다. 둘째항은 전자간 Coulomb 상호작용에 해당하는데 원자위치 *i*에 스핀 ↑, ↓의 전자쌍이 존재할 때의 쿨롱 상호작용을 나타낸다 (*n<sub>iσ</sub>*: 원자위치 *i*에서 *σ* 스핀을 갖는 전자의 갯수). 단일 띠(single band)로 이루어진 계를 생각하면 Pauli의 배타원리에 의하여 한 원자위치에서 스핀 방향이 같은 전자쌍은 존재할 수 없고 스핀 방향이 다른 ↑, ↓의 두개의 전자까지 들어갈 수 있다. 보통 쿨롱상관 파라미터라 부르는 *U*의 크기는 약 ~ 10eV이다.

원자당 평균 한개씩의 전자가 있는 Hubbard 모델계를 생각하여 보자. 이러한 계는 에너지띠의 반이 채워지는 상태이기 때문에 보통 half-filled계라 한다. 이러한 계에서 쿨롱상관 파라미터 *U*가 매우 큰 경우 (*U* = ∞)에는 한 원자에 스핀 ↑, ↓의 전자쌍조차도 존재할 수 없게 되어 전자의 이동이 불가능해진다. 따라서 *U* = ∞ half-filled계에서는 한 원자에 국재되어 있는 전자가 하나씩만 존재하게 되어 부도체와 같은 상태가 되고 Hubbard Hamiltonian의 첫째항과 둘째항의 기여가 없어진다. 이를 Mott-Hubbard 부도체라고 한다. 하지만 이때는 Hubbard 모델에서는 고려되지 않은 근접한 *i*, *j* 원자에

위치하는 두 전자간 교환 상호작용 *J<sub>ij</sub>*로부터

$$H = - \sum_{(i \neq j)} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (3)$$

유도되는 부도체에 대한 Heisenberg Hamiltonian을 더 고려하여야 한다.

Heisenberg Hamiltonian을 고려하여야 하는 *U* = ∞ 조건을 완화하여 *U*가 크긴 크지만 유한한 경우를 생각하여 보자. 이때는 hopping이 가능하여 *t<sub>ij</sub>*의 효과를 포함하여야 한다. 이 운동 에너지 효과를 2차항까지 고려할 때 생기는 Hamiltonian이 바로 다음과 같은 초교환(super-exchange) 상호작용이다[1].

$$H_s = 2 \sum_{ij} \frac{|t_{ij}|^2}{U} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4)$$

초교환 상호작용은 Heisenberg Hamiltonian의 직접적인 교환 상호작용에 비하여 간접적인 교환 상호작용이라 할 수 있다. 또한 상호작용 파라미터 (*J<sub>ij</sub>* = - $\frac{2|t_{ij}|^2}{U}$ )가 음수가 되어 스핀 방향이 서로 반대로 정렬되어있는 반강자성의 경우가 더 낮은 에너지를 가짐에 유의하자. MnO, MnF<sub>2</sub>와 같이 이온 결합성질이 큰 부도체 전이금속 화합물에서의 반강자성은 이 Hamiltonian으로 기술된다고 일반적으로 믿어진다. 초교환 상호작용은 고온 초전도체의 자성과 초전도현상을 기술할 때 많이 언급되는 *t* - *J* 모델에서의 *J*-Hamiltonian 항에 해당한다.

### IV. Stoner 모델

앞에서 3*d* 전이금속에서의 자성 현상은 전자의 전도성을 고려한 (itinerant) Hubbard 모델로 잘 기술되어진다고 언급하였다. 사실 전이금속 자성은 이러한 itinerant 성질때문에 에너지 띠이론으로 잘 설명되어진다. Fig. (1. a)와 같은 간단한 모양을 갖는 상자성 상태의 상태밀도를 생각하여 보자. 이러한 상태에서는 Fermi 준위까지 채워진 스핀 ↑, ↓의 전자 갯수가 같으므로 자기모멘트의 값은 0이다. 여기에 자기장 *H*를 걸어주면 Zeeman 효과에 의하여 스핀 ↑, ↓띠가 서로 μ<sub>B</sub>*H* (μ<sub>B</sub>: Bohr magneton) 만큼 움직여 Fig. (1. b)와 같이 상태밀도가 분리되게 된다. 상호작용이 없는 *U* = 0인 경우 ↑, ↓띠의 에너지 차이 Δ는 2μ<sub>B</sub>*H*가 되고 스핀 ↑, ↓의 전자 갯수가 달라져 자기모멘트의 크기 *M*은 2μ<sub>B</sub><sup>2</sup>*HN* (*E<sub>F</sub>*)가 된다 (*N*(*E<sub>F</sub>*)는 Fermi 준위에서의 스핀당 상태

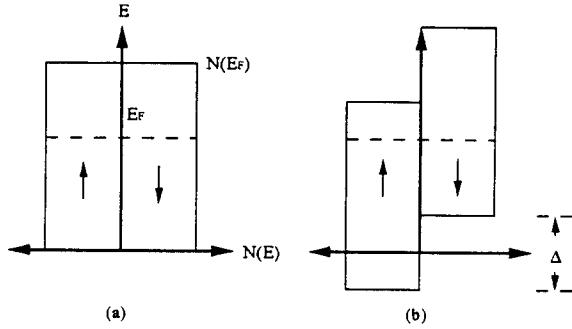


Fig. 1. (a) 상자성 상태, 자기장  $H=0$ 에서의 상태밀도.  $E_F$ 와  $N(E_F)$ 는 각각 Fermi 준위와 Fermi 준위에서의 상태밀도를 나타낸다; (b) 자기장  $H \neq 0$ 에서의 상태밀도. Zeeman 효과 때문에 스핀  $\uparrow, \downarrow$  에너지띠가 이동하여 상태밀도가 분리된다.

밀도). 여기에 스핀 감수율의 정의  $M = x_p H$ 를 사용하면 상자성 상태의 스핀 감수율  $x_p = 2\mu_B^2 N(E_F)$ 을 얻게 된다. 이를 Pauli 스핀 감수율이라 부른다. Pauli 스핀 감수율은 전자간 쿨롱 상관상호작용이 비교적 약한  $s, p$ -전자를 갖는 상자성 금속의 스핀 감수율을 잘 설명한다.

이 Pauli 스핀 감수율은 Kubo의 선형반응 이론을 사용하여서도 구할 수 있다[3]. 결과식만을 소개하면 상호작용이 없을 때 ( $U=0$ )의 스핀 감수율,  $x_o(q, \omega)$ 는

$$x_o(q, \omega) = 2\mu_B^2 \sum_k \frac{\langle n_{k+p} \rangle - \langle n_k \rangle}{\omega - (\epsilon_{k+p} - \epsilon_k)} \quad (5)$$

와 같이 계산된다.

여기서  $n_k$ 는  $k$ -state의 평균 occupation의 number이고  $\epsilon_k$ 는 전도전자의 에너지 밴드이다. 이 상자성 스핀 감수율은  $\omega=0, q=0$ 일 때 Fermi 준위에서의 상태밀도  $N(E_F)$ 로 주어지

$$x_o(0, 0) = 2\mu_B^2 N(E_F) \quad (6)$$

의 Pauli 스핀 감수율이 된다. 즉 Pauli 스핀 감수율은 일반적인 스핀 감수율 식(5)의 특별한 경우라 할 수 있다.

그러면 전자간 상호작용을 고려했을 때의 스핀 감수율의 성질을 살펴보자.  $U \neq 0$ 일 경우 위의 스핀  $\uparrow, \downarrow$ 띠는 자기장  $H$ 에 의한 Zeeman 효과뿐만 아니라  $U$ 의 효과 때문에 에너지 차이가  $\Delta = 2\mu_B H + UM/\mu_B$ 와 같이 주어진다. 즉 자기모멘트의 크기  $M$ 은  $(2\mu_B H + UM)N(E_F)$ 가 되고 따라서 스핀 감수율은

$$x = \frac{x_p}{1 - UN(E_F)} \quad (7)$$

로 주어진다. 이렇게 주어지는 스핀 감수율은 위에서 본 바와 같이 선형반응 이론으로 구한 일반적인 스핀 감수율

$$x(q, \omega) = \frac{x_o(q, \omega)}{1 - \frac{U}{2\mu_B^2} x_o(q, \omega)} \quad (8)$$

에서  $\omega=0, q=0$ 일 때의 특별한 경우에 해당한다[3].

식(8)에서  $\omega=0$ 일 때를 생각하면 스핀 감수율은

$$x(q, 0) = \frac{x_o(q, 0)}{1 - \frac{U}{2\mu_B^2} x_o(q, 0)} \quad (9)$$

가 된다. 이 식에서 우리는 우변의 분모가 0이 되면  $x(q, 0)$ 가 발산하게 됨을 알 수 있다. 어떤 계의  $x(q, 0)$ 가 특정한  $q = q_c$ 에서 발산할 때 자기적 불안정성(magnetic instability)이 있게 된다. 만일  $x(q)$ 가  $q=0$ 에서 발산하면 강자성(ferromagnetic) 불안정성이 있고  $q \neq 0$ 에서 발산하면 스핀 밀도파(spindensity wave)의 불안정성이 있다. 특히  $q_c = \frac{G}{2}$ 일 때는 반강자성 상태의 불안정성에 해당한다( $G$ : reciprocal lattice vector). 반강자성 특성을 갖는 Cr의 경우가 바로 이러한 경우라 할 수 있다.

강자성 불안정성의 경우, 즉  $q=0$ 일 때는 식(6)으로부터

$$x(0, 0) = \frac{x_p}{1 - UN(E_F)} \quad (10)$$

와 같이 되고 만일

$$UN(E_F) \geq 1 \quad (11)$$

이면 강자성 불안정성이 있음을 알 수 있다. 이러한 조건을 Stoner 기준[4]이라 한다. 예를 들어 강자성 물질인 Fe, Co, Ni 등은 앞에서 언급하였듯이  $3d$  전자가 다른 전이금속들에 비해 국재되어 있어 좁은 폭의  $3d$  에너지 띠를 갖게 되고 Fermi 준위에서 큰 상태밀도  $N(E_F)$ 를 갖는다. 따라서  $UN(E_F) \geq 1$ 의 조건을 만족하게 되고 강자성을 띠게 되는 것이다.

### V. RKKY 상호작용

희토류 금속합금이나 화합물에서의 국재 스핀간의 자

기 상호작용은 흔히 RKKY 상호작용으로 기술하기도 한다. RKKY 상호작용은 국재 스핀들간의 거리가 멀어 Heisenberg 모델에서의 직접적인 교환 상호작용은 없으나 국재스핀들 사이에 존재하는 전도전자들을 매개로 하는 간접적인 교환 상호작용이 가능할 때 일어난다. 즉 한 스핀이 전도전자들을 분극시키고 이 전자들이 멀리 떨어져 있는 다른 스핀에 영향을 미친다고 하면 간접적으로 두 국재스핀간에 상호작용이 존재하게 되는 것이다.

전이 원소나 희토류 원소나 같이 국재 스핀을 갖는 불순물들이  $s, p$ -전도전자를 갖는 금속에 존재할 때의 상황을 생각하자. 이 때의 Hamiltonian은

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + H_{s-d} \quad (12)$$

와 같이 쓸 수 있는데 우변의 첫째 항은 모금속의 전도전자의 운동에너지 항이고 둘째항은 국재스핀(보통  $d$ 나  $f$ -전자)과 전도 전자(보통  $s$ -전자)간의 교환 상호작용으로 다음과 같이 주어진다.

$$H_{s-d} = -J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma}(\vec{R}_i) \quad (13)$$

여기서  $\vec{S}_i$ 는  $i$ -원자에 위치하는 불순물의 국재 스핀을 나타내고  $\vec{\sigma}$ 는 전도 전자의 스핀을 나타낸다. 위의 형태는  $\vec{R}_i$ 의 위치에  $J\vec{S}_i$  크기의 자기장이 걸려 있어 전도 전자의 스핀에 영향을 주는 형태를 띠고 있다. 이 자기장의 Fourier 변환,

$$H(q) = J\vec{S}_i e^{-iqR_i} \quad (14)$$

을 생각하자. 그러면 이 자기장에 의하여 전도전자의 스핀밀도, 즉 자기모멘트는

$$M(r) = \sum_q M(q) e^{iqr} = \frac{1}{V} \sum_q x_o(q) H(q) e^{iqr} \\ = \frac{J\vec{S}_i}{V} \sum_q x_o(q) e^{iq(r-R_i)} \quad (15)$$

와 같이 분극된다. 여기서  $x_o(q)$ 는 앞절에서 구한 상호작용이 없는 경우의 전도전자의 스핀감수율이다. 모금속의 전도전자는 상호작용이 없다고 가정하였으므로 이는 타당하다 하겠다. 위 식을 보면 전도전자의 스핀 자기모멘트의 크기는 스핀감수율  $x_o(q)$ 의 Fourier 변환으로 주어짐을 알 수 있다.

$x_o(q)$ 의 Fourier 변환식  $F(r)$ 을 계산하면

$$F(r) = \frac{1}{V} \sum_q x_o(q) e^{iqr} = \frac{6\pi N}{V} N(E_F) \\ \frac{\sin(2k_F r) - 2k_F r \cos(2k_F r)}{(2k_F r)^4} \quad (16)$$

와 같이 된다[5]. 여기서  $k_F$ 는 전도전자의 Fermi momentum이며 스핀밀도의 진동 주기를 결정하게 된다. 따라서  $\vec{R}_i$ 에 국재 스핀이 있을 때  $s, p$  전도전자들의 스핀 밀도는 불순물에서의 거리에 따라 진동하는 형태를 갖는다. 이러한 진동 형태는 Ruderman-Kittel[6], Kasuya[7], Yosida[8] 등에 의하여 유도되어 이를 RKKY 진동이라 부른다. RKKY 진동은 금속에 전하를 가진 불순물이 존재할 때 그 주위에 불순물 전하를 가리기 위하여 모여드는 전자 밀도의 진동을 나타내는 Friedel 진동[9]과 같은 형태를 갖고 있다.

만일  $\vec{R}_i$ 에 다른 국재 스핀이 존재하면 이 전도전자들의 진동이 그 국재스핀에 영향을 줄 것이다. 즉

$$H_{d-d} = -J^2 F(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (17)$$

와 같이 되어 Fig. (2)와 같이 두 국재스핀간을 전도전자들이 간접적으로 상호 작용하게 만드는 효과를 주게 되는데 이러한 상호작용이 바로 RKKY 상호작용이다. RKKY 상호작용은 거리  $(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$ 에 따라 주기적으로 진동하는 것에 유의하자.

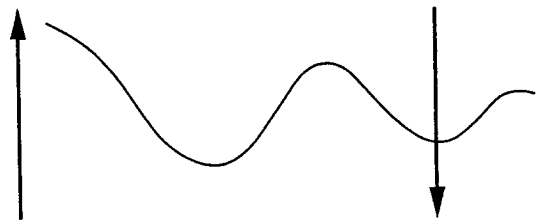


Fig. 2. 국재스핀간의 RKKY 상호작용.

최근 자기 분야에서 관심의 초점이 되고 있는 자성/비자성 전이금속간 거대자기저항 다층박막에서 보이는 진동 교환상호작용(oscillatory exchange interaction) 현상도 이러한 RKKY 상호작용에 기인할 것으로 예상된다. 하지만 다층박막의 복잡한 전자구조와 그에 따른 다양한 Fermi면, 2차원적 결정구조등이 교환상호작용에 미치는 효과에 대해 보다 심도있는 고찰이 필요하다.

## VI. Anderson 모델과 Kondo 현상

최근 물성 물리분야에서 큰 관심의 대상인 고온 초전도체를 비롯하여 혼합 원자가, heavy Fermion 물질계들은 보통 강상관 전자계(strogly correlated electron system)라고 불리우며 국제화 성질을 갖는  $d$  또는  $f$  전자들을 갖고 있다. 앞에서도 나왔듯이  $d$  또는  $f$  전자들은 에너지 띠 폭이 좁은 특성을 갖고 있다. 이러한 좁은 띠폭을 갖는 강상관 전자계들의 자기 및 초전도 특성을 기술하기 위하여 Hubbard Hamiltonian 또는 Anderson Hamiltonian 모형계에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. Anderson Hamiltonian의 정확한 해는 아직 풀지 못한 문제이고 지금까지 여러 종류의 근사방법이 고안되어 있다[10].

비자성체인 모금속, 즉  $s$  또는  $p$  전자들로 이루어져 비교적 넓은 에너지 띠 폭을 갖는 금속(예를 들어 Cu, Au 등)에 자성 불순물(예를 들어 Fe, Co, Ni 등과 같이 띠폭이 좁은  $d$  전자들을 갖는 물질들)을 첨가할 때 일어나는 물리 현상을 기술하기 위하여 Anderson은 약 30여년 전에 다음과 같이 간단하게 보이는 모델 Hamiltonian을 제안하였다[11].

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k n_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} (V_{kd} c_{k\sigma}^\dagger c_{d\sigma} + V_{dk} c_{d\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) + \epsilon_d \sum_{\sigma} n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \quad (18)$$

여기서 첫째항은 에너지 상태  $\epsilon_k$ 를 갖는 모금속 전도전자들의 운동에너지 항을 나타내며 둘째항은 모금속 전도전자와 불순물 국제전자간의 혼성 상호작용(hybridization interaction:  $V_{kd}$ )을 표현하며, 셋째, 네째항은 각각 불순물 국제전자의 에너지 상태  $\epsilon_d$ 와 불순물 국제전자간 쿨롱 상호작용  $U$ 를 표현한다.  $c_{k\sigma}^\dagger, c_{k\sigma}, n_{k\sigma}$ 는 각각 파동벡터  $k$ 와 스핀  $\sigma$ 를 갖는 모금속 전도전자들의 생성, 소멸, 수(number) 연산자를 나타내며  $c_{d\sigma}^\dagger, c_{d\sigma}, n_{d\sigma}$  등은 불순물 국제전자들의 생성, 소멸, 수 · 연산자에 해당한다. 이와같이 Anderson 모델은 전도전자와 국제전자의 두 종류 전자의 자유도를 고려한다는 점에서 Hubbard 모델과 대비된다. 그리고 전도전자들간의 쿨롱 상호작용은 무시하는 반면, 불순물 국제전자간 쿨롱 상호작용은 Hubbard 모델에서와 같이 스핀 양자수가 다른 두 전자간에만 존재한다고 가정한다.

사실 이 쿨롱항으로부터 흥미있는 여러 현상이 발생하며 또한 Anderson Hamiltonian의 정확한 해를 못 구하는 이유도 이 항 때문이다. 만일 쿨롱항이 없다면 Anderson Hamiltonian은 해석적으로 정확히 풀 수 있는데, 이러한 Hamiltonian을 Fano-Anderson Hamiltonian 이라고도 부른다[12]. 이 경우에는 전도전자와 국제 전자

간의 혼성 상호작용으로 인한 국제전자의 자체 에너지를 정확히 구할 수 있는데, 자체 에너지  $\sum_d(\epsilon)$ 는

$$\sum_d(\epsilon) = \sum_k \frac{|V_{kd}|^2}{\epsilon - \epsilon_k + i\delta} \quad (19)$$

와 같이 주어져 국제전자의 에너지 위치가  $Re(\sum_d(\epsilon))$ 만큼 이동하고 에너지 준위의 폭이  $Im(\sum_d(\epsilon))$ 만큼 넓어진 공명(resonance)상태를 갖게 된다. 이는 국제전자와 전도전자가 서로 바뀌면서 각각의 수명(life time)이 줄어들고 따라서 불확정성 원리에 의하여 불순물 에너지 준위의 넓어짐(broadening)이 일어나기 때문이다.

$U \neq 0$ 인 경우의 Anderson 모델은 불순물 자기모멘트의 형성여부 문제 때문에 많은 관심의 대상이 되고 있으나 아직까지 정확한 해를 못 구한 상황이다. Anderson에 의한 Hartree-Fock 근사해에 의하면  $U, V_{kd}, \epsilon_d$  등의 파라미터 크기에 따라 자기모멘트의 형성여부가 결정됨을 보여 준다. 즉  $U$ 가  $V_{kd}$ 보다 클수록, 또한 국제전자의 에너지 준위  $\epsilon_d$ 와  $\epsilon_d + U$ 가 Fermi 준위의 아래, 위에 대칭적으로 위치할수록 자기모멘트의 형성이 용이하다는 사실을 보여 준다[3]. 하지만 Hartree-Fock 근사에는 전자간 상관(correlation)효과가 고려되어 있지 않아 온도  $T \rightarrow 0$ 일 때 일어나는 전도 전자의 스크리닝에 의한 국제 자기 모멘트의 보상(compensation) 효과, 즉 Kondo 현상[13]을 기술하지 못하는 단점이 있다. 이러한 단점을 극복하기 위하여 여러 계산 방법들이 제안되었다[10]. 수치해석적 접근인 양자 몬테-카를로 방법도 그 중의 한가지에 속한다.

Kondo 현상은 비자성인 물질에 국제 스핀을 갖는 전이 금속이나 희토류 원소의 불순물이 미량으로 존재하는 계(예를 들어 CuMn, AuFe, LaCe 등)에서 보이는 기이한 현상이다. 즉  $T = 0$  근방에서 전체적으로 Fermi liquid의 성질을 보이며, 저항의 온도의존성에 minimum이 존재하고, 비열에서는 peak가 존재하며, 자기감수율에서는  $T \rightarrow 0$ 일 때 포화값을 갖는다. 이 현상은 국제스핀과 모금속의 전도 전자간의 상호작용에 기인한 것으로 오랫동안 고체물리의 주된 연구의 대상이었다. Kondo 현상을 기술하는 Hamiltonian은 Anderson 모델에서  $d$ -전자간의 Coulomb 상호작용  $U$ 가  $s$ - $d$  hybridization 상호작용  $V_{kd}$ 보다 매우 클 때 Schrieffer-Wolf [14] 변환으로부터 유도할 수 있다. 형태는 앞에서 보았던 RKKY 상호작용을 기술할 때의 Hamiltonian (식 12)과 유사한 형태를 갖게 되는데 Kondo 모델에서는 모금속에 불순물의 국제스핀이 하나만 존재한다는 점이 다르다.

Kondo 계에서는 다음과 같이

$$T_K = \text{Dexp} \left( \frac{1}{JN(E_F)} \right) \quad (20)$$

주어지는 Kondo 온도가 존재하게 된다( $D$ : 전도전자 에너지 띠폭;  $J$ : 전도전자와 국재스핀간의 반강자성 상호작용).  $T < T_K$ 일 때는 전도전자와 국재스핀간의 반강자성 상호작용이 증가하여 전도전자의 스핀이 국재스핀을 완전히 가리는(screen) 스핀 singlet 속박상태를 이룬다. 이리하여 전도 전자와 국재전자의 구별이 없어지고 Fermi 준위에 새로운 상태밀도 peak이 생기며 전체적으로 Fermi liquid의 성질을 갖게 된다. 이러한 이유로  $T = 0$  근처에서 자기감수율, 비열 등에 Fermi liquid의 특성이 관찰되는 것이다.

## Ⅶ. 맺음말

지금까지 설명한 Stoner 모델로 Fe, Co, Ni등 금속의 기저상태 ( $T = 0$ )에서의 자기특성은 어느정도는 파악할 수 있다. 그러나 Stoner 모델은 몇가지 큰 단점들을 갖고 있다. 예를 들어 Stoner 모델에서 스핀 감수율의 발산으로부터 구한 자성 전이온도, 즉 Curie 온도가 실험치에 비하여 10배 이상 크다는 점과, Stoner 모델에서 구한 스핀 감수율이나 자기모멘트의 온도 의존성이 실험사실과 잘 일치하지 않는 점등을 들 수 있다. 이들 물성은 모두 금속 자성의 유한 온도 ( $T \neq 0$ )에서의 물성에 해당하는 것으로 이들을 제대로 기술하려면 계의 여기상태에서의 모든 자유도를 고려하여야 한다. 즉 유한 온도에서는 전자간 상관 상호작용을 보다 정확하게 취급하여야 한다. 이를 위하여 많은 노력이 기울어져 왔으나 이론적으로는 아직 미해결의 문제이다[10, 15]. 자성에 대한 스핀요동 효과를 자체충족적인 방법으로 고려하여야 한다는 이론[16]으로부터 포논 등의 영향을 고려하여야 한다는 이론[17] 등 아직도 정밀한 고찰이 필요한 상황이라 하겠다.

한편 금속과 부도체의 중간에 위치하는 물질계, 즉 적당히 국재된 성질과 itinerant한 성질을 공유한 전자들을 갖는 물질들(예를 들어 heavy Fermion, 고온초전도체 등의 강상관 전자계)의 유한온도에서의 자기 특성에 대한 이해도 매우 부족한 상황이다. 그리고 앞서서도 언급하였던 금속다층 박막에서의 자기 특성은 거대자기저항등의 재미난 현상들과 결부하여 응용면에서나, 실험, 이론적으로 자기분야에서 매우 중요한 연구과제라 할 수 있다. 이와 같이 자성 이론분야 연구과제는 무궁무진하다고 생각되며 앞으로 많은 전문가들의 노력이 경주되어야 할 것으로 본다.

## 참고문헌

- [1] P. W. Anderson, In *Magnetism*, Vol I, edited by G. T. Rado and H. Suhl, Academic, New York (1963).
- [2] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A276**, 238 (1963).
- [3] S. Doniach and E. H. Sondheimer, *Green's functions for solid state physicists*, W. A. Benjamin, Inc. Reading, Massachusetts, (1974).
- [4] E. C. Stoner, Proc. Soc. London A **165**, 372 (1938)
- [5] C. Kittel, in *Solid State Physics*, edited by F. Seitz, D. Turnbull, and H. Ehrenreich (Academic, New York, 1968), Vol. 22, p. 1.
- [6] M. A. Ruderman and C. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954).
- [7] T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16**, 45 (1956).
- [8] K. Yosida, Phys. Rev. **106**, 893 (1957).
- [9] J. Friedel, Nuovo Cimento, Suppl. **2**, 287 (1958).
- [10] P. Fulde, *Electron correlations in molecules and solids*, Springer Ser. Solid-State Sci. Vol. 100, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg (1991); and references therein.
- [11] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [12] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum, New York, 1981).
- [13] J. Kondo, Prog. Theor. Phys. **32**, 37 (1964).
- [14] J. R. Schrieffer and P. A. Wolff, Phys. Rev. **149**, 491 (1966).
- [15] M. Cyrot, *Electron correlation and magnetism in narrow-band systems*, ed. by T. Moriya, Springer Ser. Solid-State Sci. Vol. 29, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg (1981); and references therein.
- [16] T. Moriya, *Spin fluctuations in itinerant electron magnetism*, Springer Ser. Solid-State Sci. Vol. 56, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg (1985)
- [17] D. J. Kim, Phys. Rep. **171**, 129(1988).