

*Sm* 금속의 전자구조

포항공과대학

장 영륙\*, 윤 석주, 민 병일

울산대학교

홍 순철

인하대학교

이 재일

Electronic Structures of *Sm* Metal

Pohang Institute of Science and Technology

Y. -R. JANG\*, S. J. YOUN, B. I. MIN

University of Ulsan

Soon C. HONG

Inha University

J. I. LEE

## 1. 서 론

*f* 전자껍질이 채워져 있지 않은 희토류 (Rare-Earth) 계에서 관찰되는 흥미있는 현상 중 하나는 이들이 들어간 화합물이나 합금에서 볼 수 있는 혼합원자가 (mixed valence) 현상이다. 금속 상태의 *Sm* 은 5개의 4*f* 전자를 가지고 있는 3가의 원자가를 가진다고 알려져 있다. 그러나, XPS (X-ray Photoemission Spectroscopy) 등의 실험에서 새로운 결과들이 발견되어 *Sm* 의 원자가 상태에 관해서 의문이 제기되고 있다.

더욱 복잡한 계에 대한 연구를 위한 시작으로, 우리들은 금속 *Sm* 의 총 에너지 (total energy) 를 계산함으로써, *Sm* 의 원자가 상태에 대한 연구를 하였다 [1].

## 2. 계산방법 및 결과

밀도 범함수 이론 (Density Functional Theory) 에 기초한 자체충족적 (self-consistent) LMTO (Linear Muffin-Tin Orbital) 전자구조 (electronic structure) 계산을 수행하였다.

LSDA (Local Spin Density Approximation) 방법으로 스핀 분극 (spin polarized) 계산을 하였고, 전자 사이의 교환-상관 상호작용 (exchange-correlation interaction) 의 고려를 위해서 von Barth-Hedin 포텐셜을 이용하였다.

Rhombohedral (trigonal) 구조를 가진 *Sm* 금속의 에너지띠 (energy band), 상태밀도 (density of states), 페르미면 (Fermi surface) 을 결정하고, 또한 총에너지를, 3가  $[4f^5(5d6s)^3]$  인 경우와 2가  $[4f^6(5d6s)^2]$  인 경우에, Wigner-Seitz 반경  $r_{WS}$  의 함수로 계산하였다.

3개의 경우에 평형 격자상수 (equilibrium lattice constant) 는 실험치와 비슷한 값을 얻었다.

### 3. 참고문헌

(1) S. C. Hong, J. I. Lee, Y. -R. Jang, B. I. Min, and A. J. Freeman, J. Mag. and Mag. Mat. **104-107**, 659 (1992).