

A 5

4d 전이금속 단층의 자성: Y 에서 Pd 까지

울산대학교	홍 순 철*
인하대학교	이 재 일
포항공대	민 병 일
Northwestern University	A. J. Freeman

Magnetism of 4d Transition Metal Monolayer: from Y to Pd

University of Ulsan	S. C. Hong*
Inha University	J. I. Lee
POSTECH	B. I. Min
Northwestern University	A. J. Freeman

1. 서론

지난 20년간의 3d 전이금속의 표면 자성에 관한 연구결과, 표면에 국재된 surface states, 줄어든 결합수에 의한 띠좁힘의 영향으로 표면에서의 자기모멘트가 20-300% 증가한다는 것을 이론적으로 발견하였고¹ 실험적으로도 이 이론 결과의 정당성을 밝히기 위해 노력을 하고 있고 일부 검증하기도 하였다². 자기모멘트의 증가에도 불구하고 표면에서의 자기초미세장의 세기는 전도전자의 직접 분극으로 오히려 줄어든다는 것을 이론적 연구는 주장하고 있다¹.

그러면 bulk 상태에서는 비자성인 4d 전이금속에 대한 surface states 와 띠좁힘의 영향이 4d 전이금속의 표면자성에 영향을 미쳐 4d 전이금속이 표면에서 강자성이나, 반강자성일 가능성이 있는가 하는 질문은 상당히 흥미롭다. bulk 상태의 Pd는 Fermi 에너지 준위에서 상태밀도가 커 꾸준히 자성의 가능성에 대해 연구되고 있고 Au/Pd/Au sandwich 계에서 Pd가 강자성일 가능성을 실험³과 이론 연구⁴에서 발견하였다.

본 연구에서는 4d 전이금속의 표면자성에 관한 예비연구로 강자성이나 반강자성의 가능성이 있는 4d 전이금속 (원자번호 39에서 46까지) 단층의 자성을 LDA 을 근거로 한 Full Potential Linearized Augmented Plane Wave (FLAPW) 방법⁵을 이용하여 스핀분극 계산을 수행함으로써 연구하였다.

2. 계산방법 및 결과

2 차원 격자를 정사각으로 가정하고 원자간 거리는 해당 금속의 bulk 값을 이용하였다. 교환상관 전위는 von Barth-Iledin 의 공식을 도입하였고 핵심전자는 완전히 상대론적으로 취급하였고 가전자는 스핀-궤도 상호작용을 제외한 모든 항을 준상대론적으로 취급하였다. FLAPW 방법에서는 Poisson 방정식의 해를 구하는 데 있어 포텐셜이나 전하밀도에 대해 아무런 행태근사를 취하지 않았다.

표 1에 총에너지 차 (상자성 상태의 총에너지 - 강자성 상태의 총에너지)와 자기모멘트에 대한 계산 결과를 제시하고 있다. 계산된 총에너지 차에서 Y 와 Tc 를 제외한 모든 경우 강자성 상태가 에너지적으로 안정됨을 알 수 있어 4d 강자성의 가능성이 있음을 발견하였다. 원자상태에서 5개의 띠지워지지 않는 4d 전자배치를 가지는 Mo 의 자기모멘트는 $3.00 \mu_B$ 으로 가장 크고 총에너지 차도 20 mRy 로 가장 커 Mo 이 자성일 가능성이 있음을 제시하고 있다. Rh 단층의 경우 자기모멘트가 $1.29 \mu_B$ 로 상당히 크고 총에너지 차도 13 mRy 로 강자성 상태가 상자성에 비해 안정되어 있음을 보여 주고 있다. 다른 방법에 의한 계산 결과에 의하면 Rh 단층의 자기모멘트가 $1.56 \mu_B$ 로 계산된 바 있어 비교가 된다⁶. Pd 의 경우 강자성상태가 에너지적으로 안정되나, 총에너지 차가 2 mRy 로 비교적 작고, 자기모멘트도 $0.37 \mu_B$ 로 작은 것으로 계산되었다.

4d 계열의 중앙에 위치한 Nb, Mo, Tc, Rh 등의 자기초미세장의 방향이 자기모멘트와 평행한 것으로, 처음과 끝에 위치한 Y, Zr, Pd 의 자기초미세장의 방향은 반평행인 것으로 계산되었다. 3d 전이금속의 자성연구에서 강자성상태에서는 자기초미세장이 자기모멘트에 반평행하고 반강자성의 경우에는 평행하였다. 이 점을 감안하면 우리의 초미세장에 대한 계산 결과는 전이금속 계열의 처음과 끝은 강자성 혹은 상자성이고 중앙은 반강자성 혹은 상자성이라는 Heine-Samson⁷ 의 정리와 관계가 있는 것으로 보인다.

3. 결론

4d 전이금속 단층의 자성에 관한 연구를 위해 FLAPW 방법을 이용하여 스핀분극 계산을 수행하였다. Y 와 Tc 원소를 제외한 모든 원소는 에너지적으로 강자성상태가 안정된 것으로 계산되었고 Mo 의 경우, 자기모멘트가 $3.00 \mu_B$ 로 가장 크고 총에너지 차도 20 mRy 로 비교적 커 자성이 될 가능성이 가장 크다. 4d 전이금속 계열의 처음과 끝 (Y, Zr, Pd)은 강자성, 중앙 (Nb, Mo, Tc, Rh)는 반강자성일 징후가 보였다. 이를 위해 강자성상태와 반강자성상태의 총에너지를 비교하는 계산이 수행되어야 할 것이다.

4. 참고문헌

- ① S. Ohnishi, A.J. Freeman, and M. Weinert, Phys. Rev. **B28**, 6741(1983). C.L. Fu and A.J. Freeman, Phys. Rev. **B33**, 1755(1986).
- ② H.J. Elmers, G. Liu, and U. Gradmann, Phys. Rev. Lett. **63**, 566(1989).
- ③ M.B. Brodsky, J. Phys. (Paris) **C5**, 349 (1984).
- ④ Soon C. Hong, C.L. Fu, and A.J. Freeman, J. Appl. Phys. **63**, 3655 (1988).
- ⑤ E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A.J. Freeman, Phys. Rev. **B24**, 864 (1981).
- ⑥ M. J. Zhu, D.M. Bylander, and L. Kleinman, Phys. Rev. **B43**, 4007 (1991).
- ⑦ V. Heine and J.H. Samson, J. H. Samson, J. Phys. **F13**, 2155 (1983).

Table I. Total energy differences, magnetic moments, and magnetic hyperfine fields of 4d transition metal monolayers

	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd
Total Energy Difference (mRy)	-1.8	0.7		20.7	-2.5		13.0	2.1
Magnetic Moment (μ_B)	0.45	0.79	2.40	3.00	1.22		1.29	0.37
Magnetic Hyperfine field (kGauss)	-31	-88	468	595	721		150	-4