

A3

4d 전이금속 단층의 상자성, 강자성, 반강자성 상태에 대한 총에너지 연구*

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

Total energy studies on para-, ferro-, and antiferro-magnetic states of 4d transition metal monolayer

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

1. 서론

20년간의 3d 강자성 전이금속의 표면층, 단층 혹은 복층 두께의 얇은 옷층, sandwich 계를 비롯한 다양한 계의 자성에 관한 연구가 학문적인 흥미와 함께 산업적인 응용성 때문에 실현적으로, 이론적으로 활발하게 진행되어 왔었다. 이론적 계산은 표면에 국재된 surface states, 줄어든 결합수에 의한 띠좁힘의 영향으로 표면에서의 자기모멘트가 20-300% 증가한다는 것을 예측하였고¹ 이 예측을 확인하기 위해 많은 실험 연구가 수행되었고 일부 계에 대해 검증되었다². 자기모멘트의 증가에도 불구하고 표면에서의 자기초미세장의 세기는 전도전자의 직접 분극으로 오히려 줄어든다는 것을 이론적 연구는 주장하고 있다¹.

3d 전이금속에 대한 표면 및 계면의 자성에 대한 연구에 이어 4d 전이금속의 표면 및 계면 자성에 대해서도 이론적으로, 실험적으로 활발하게 연구가 진행되고 있다^{3,4}. 원자번호 39의 Y에서 46의 Pd까지의 4d 전이금속 단층의 강자성 상태에 대한 체계적인 계산 결과를 지난 추계 자성학회에서 발표하였었다. 이 계산 결과에 의하면 Mo 단층은 3.0 μ_B 의 자기모멘트를 가지며 총에너지 계산결과, 상자성 상태에 비해 강자성 상태가 20 mRy 만큼 안정된 것으로 밝혀졌다.

본 연구에서는 4d 전이금속 단층의 강자성 상태에 관한 이전의 연구에 이어 반강자성 상태에 대해서도 LDA 을 근거로 한 Full Potential Linearized Augmented Plane Wave (FLAPW) 방법⁵을 이용하여 스핀분극 계산을 수행함으로써 4d 전이금속 단층의 자성에 대한 연구를 완전하게 하고자 하였다.

2. 계산방법 및 결과

단층의 물성에 대한 실험연구를 위해서는 MgO, CaO, Ag, Au 등 적절한 substrate을 선택하여 그 substrate 위의 옷층의 형태로 연구하여야 실질적일 것이다. 그러므로 여기서는 2 차원 격자를 정사각으로 가정하고 원자간 거리는 해당 금속의 bulk 값을 이용하였다. 교환상관 전위는 von Barth-Hedin 의 공식을 도입하였고 핵심전자는 완전히 상대론적으로 취급하였고 가전자들은 스핀-궤도 상호작용을 제외한 Dirac 방정식의 모든 항을 고려하여 준상대론적으로 취급하였다. FLAPW 방법에서는 Poisson 방정식의 해를 구하는 데 있어 포텐셜이나 전하밀도에 대해 아무런 행태근사를 취하지 않았다.

반강자성 상태에 대한 계산 결과에 의하면 4d 전이금속 계열의 중앙에 위치한 Mo 과 Tc 는 반강자성 상태가 상자성 상태에 비해 총에너지가 각각 106 mRy, 17mRy 만큼 낮고 강자성 상태에 비해서도 85 mRy, 20 mRy 낮아 반강자성 상태가 가장 안정한 상태임이 계산되었다. 반자성 상태의 Mo 의 자기모멘트는 $3.36 \mu_B$ 로 강자성 상태의 자기모멘트 보다 약 $0.36 \mu_B$ 만큼 컸다. Nb 의 반강자성 상태의 총에너지는 상자성 상태에 비해 약 10 mRy 낮았으나 강자성상태에 비해서는 3 mRy 높아 강자성 상태가 가장 안정적이었다. 그외 다른 4d 전이금속 단층의 반강자성은 불안정한 것으로 계산되었다.

Mo 가 반강자성 상태에 대해서도 가장 흥미를 끄는 원소이다. 절연체인 MgO 나 CaO 는 Mo 와 상호작용이 약하여 Mo/MgO 나 Mo/CaO 계의 Mo 단층은 준 2 차원적이어서 자성을 보일 가능성이 높다⁶. 이러한 가능성을 시험하기 위해 MgO 나 CaO 와 같은 2 차원 격자 상수의 Mo 단층에 대한 계산도 수행하였다. 반강자성 상태가 MgO, CaO 의 격자 상수에 대해 각각 약 50 mRy, 60 mRy 만큼 강자성 상태에 비해 낮아 가장 안정적이었다. 이 결과는 Zhu 등이 격자상수가 5.545 bohrs 이 상일 때 강자성상태가 가장 안정된다는 Gaussian-orbital expansion 으로 계산한 결과와 상이하다. 그러나 자기모멘트는 비교할 만 하였다.

3. 결론

4d 전이금속 단층의 자성에 관한 연구를 위해 FLAPW 방법을 이용하여 스핀분극 계산을 수행하였다. 상자성, 강자성, 반강자성 상태에 대한 총에너지 계산결과 Mo, Tc 의 단층은 반강자성 상태가, Zr, Nb, Ru, Rh, Pd 의 단층은 강자성 상태가 안정적이었다. Y 단층은 상자성 상태가 가장 안정하였다. 좀 더 정밀한 계산을 위하여 k-point, basis function 에 따른 수렴성 시험이 요구된다.

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 Soon C. Hong, C.L. Fu, and A.J. Freeman, J. Appl. Phys. 63, 3655 (1988); M.J. Zhu, D.M. Bylander, and L. Kleinman, Phys. Rev. B43, 4007 (1991); S. Bluegel, Phys. Rev. Lett. 68, 851(1992).
- ④ M.B. Brodsky, J.Phys. (Paris) C5, 349 (1984); E.R. Moog and S.D. Bader, Superlatt. Microstruct. 1, 543(1985); C. Liu, E.R. Moog and S.D. Bader, Phys. Rev. Lett. 60, 2422(1988); J. Appl. Phys. 64, 5325 (1988).
- ⑤ E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A.J. Freeman, Phys. Rev. B24, 864 (1981).
- ⑥ C. Li and A.J. Freeman, Phys. Rev. B43, 780 (1991).

+ 이 연구는 울산대학교의 학술연구 조성기금에서 일부 재정 지원을 받아 수행되었기에 이에 감사드립니다.