

## 금속 표면과 계면의 자성

인하대 물리학과 이재일

울산대 물리학과 홍순철

### Surface and Interface Magnetism of Metals

Inha University, Jae Il Lee

University of Ulsan, Soon C. Hong

#### I. 서론

최근에 들어 정교한 합성 기술의 발전에 힘입어 박막, 초격자등 여러가지 인공 물질을 제조할 수 있게 되었다. 예를 들어 MBE 방법을 써서 GaAs 위에 준안정적인 bcc Co [1] 를 합성할 수 있었으며, Fe 위에 bcc Ni [2] 이 합성되었다. 이러한 새로운 물질의 합성은 물질의 구조와 자성 사이에 대한 이론적 관심을 야기 시켰으며, 실제로 몇몇 연구진에 의해 고체 상태에서 이들의 전자 구조가 국소 밀도 범함수 이론에 근거한 에너지 띠 방법에 의해 연구되어 왔다 [3,4].

이들 물질의 표면에서의 자성에 대한 연구도 이론적으로 행해졌는데 그 결과 표면에서의 자기 모멘트는 고체 상태보다 증가하는 것으로 밝혀졌다.

여기서는 먼저 전이금속의 표면 자성에 대한 지금까지의 이론적 연구 결과를 간단히 고찰해 본 다음 표면과 계면에서의 자성을 함께 고찰하기 위해 몇몇 단순 금속과 전이 금속 접합면에서의 에너지 띠 이론에 의한 계산 결과를 소개하기로 한다. 특히 Al/Fe(001) [5] 과 bcc Ni/Fe(001) [6] 에 관심을 두기로 한다.

#### 2. 연구 방법

표면 및 계면의 자성을 연구하기 위해 몇개의 원자층으로 이루어진 평판(slab) 모형을 택하였는데 경험적으로 5 ~ 9 개의 원자층을 가진 평판의 경우 표면 상태를 기술하는데 무리가 없는 것으로 밝혀졌다.

표면의 전자 구조를 계산하기 위해 국소 밀도 범함수 이론에 바탕을 둔 FLAPW (Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave) 방법 [7] 에 의해 Kohn-Sham 방정

식을 자체 충족적으로 풀게 된다. FLAPW 방법에서는 Poisson 방정식에서 퍼텐셜이나 전하 밀도에 대해 형태에 따른 어떠한 근사도 쓰지 않는다. Muffin-Tin (MT) 구내의 전하 밀도, 퍼텐셜 및 파동함수는 각운동량  $l = 8$  까지의 각자 조화 함수를 써서 전개하였다. 핵심 전자에 대해서는 완전히 상대론적으로 계산하였으며 가전자는 궤도-스핀 상호작용을 무시하여 반상대론적으로 계산하였다.

### 3. 결 과

Al/Fe(001) 과 1Ni/Fe(001) 과 2Ni/Fe(001) 계에 대하여 각 층에 따른 자기 모멘트와 초미세 자기장, 상태밀도와 표면 에너지 띠풀을 구하였다. Al/Fe(001) 계에서 표면 Al 층의 자기 모멘트는  $-0.04 \mu_B$  이었으며 그 아래 계면 Fe 층의 자기 모멘트는  $1.38 \mu_B$  이었다. 이는 Al 으로 부터 Fe 층으로 전자가 이동하여 Fe 의 소수 스핀 상태를 채운 결과로 생각된다.

2Ni/Fe(001) 에서 표면 Ni 층의 자기 모멘트 ( $0.69 \mu_B$ ) 는 1Ni/Fe(001) 계의 표면 Ni 층의 자기 모멘트 ( $0.86 \mu_B$ ) 값 보다 줄어들었다. 그러나 계면 Fe 층의 자기 모멘트는 두 경우에 모두 고체 철의 경우에 비해 증가하였는데 이는 Ni - Fe 층 사이에 강한 혼성 결합 (hybridization) 이 있기 때문으로 생각된다.

### 4. 참고 문헌

- [1] G. A. Prinz, Phys. Rev. Lett. **54**, 1051 (1985).
- [2] B. Heinrich, A. S. Arrott, J. F. Cochran, C. Liu, and K. Myrtle, J. Vac. Sci. Tech. **A4**, 1376 (1986)
- [3] V. I. Moruzzi, P. M. Marcus, K. H. Schwarz, and P. Mohn, J. Magn. Magn. Mater. **54-57**, 955 (1986); Phys. Rev. **B34**, 1784 (1986); V. I. Moruzzi, Phys. Rev. Lett. **57**, 2211 (1986).
- [4] B. I. Min, T. Oguchi, and A. J. Freeman, J. Magn. Magn. Mater. **62**, 93 (1986).
- [5] J. I. Lee, S. C. Hong, C. L. Fu, A. J. Freeman, J. Magn. Magn. Mater. **99**, L45 (1991).
- [6] J. I. Lee, S. C. Hong, and A. J. Freeman, Phys. Rev. **B47**, 810 (1993).
- [7] E. Wimmer, A. J. Freeman, and H. Krakauer, Phys. Rev. **B30**, 3113 (1984); H. Krakauer, A. J. Freeman, and E. Wimmer, Phys. Rev. **B28**, 610 (1983).