

Cu(001) 위의 Rh 옷층의 자성에 대한 이론적 연구

인하대학교 물리학과 조 이 현*, 장 종 섭, 이 재 일,

인천대학교 물리학과 장 영 록

울산대학교 물리학과 홍 순 철

A Theoretical Study on the Magnetism of Rh Overlayers on Cu(001)

Inha. University L. H. CHO*, C. S. CHANG, J. I. LEE

University of Incheon Y. -R. JANG

University of Ulsan S. C. HONG

1. 서론

4d 전이금속은 덩치상태에서 자성을 갖지 않는 것은 잘 알려진 사실이다. 최근에 이러한 4d 전이금속이 단층상태나 귀금속 위에 올려졌을 때 자성을 가질 수 있는 가능성에 대해 많은 관심을 갖게되었다. 이중 특히 Rh 에 대하여 많은 연구가 행해지고 있다. Freeman 그룹은 총 퍼텐셜 선형 보충 평면 파동 (FLAPW: Full Potential Linearized Augmented Plane Wave) 방법에 의하여 Rh 단층의 자기모멘트를 계산한 결과 $1.45 \mu_B$ 임을 알았다 [1]. Zhu 등은 수도퍼텐셜과 가우스-오비탈 전개방법에 의해 [2] Au(001) 위의 Rh 한 층이 옷층으로 올려졌을 때 $1.09 \mu_B$ 의 자기모멘트를 계산하였다. 또한 Blügel 은 Ag(001) 옷층에 Rh 한 층을 올렸을 때 자기모멘트를 계산한 결과 $1.03 \mu_B$ 이었으며 Rh 두층이 올려졌을 때는 표면 층의 자성이 $0.33 \mu_B$ 이고 표면 밑 층은 $0.18 \mu_B$ 의 값으로 한 층을 올렸을 경우보다 훨씬 작은 결과를 보였다 [3,4]. 이와는 달리 실험에서는 Au(001) 이나 Ag(001) 위에 Rh 이 옷층으로 올려졌을 때 자성을 발견하지 못했다는 결과가 있다 [5,6]. 이와 같이 실험과 이론에서 차이를 보이고 있는데 최근 Hayden 은 오제 전자 분광법과 운동량-분리 역 광전자방출에 의하여 [7] Cu(001) 옷층에 Rh 박막을 성장시키고 전자구조를 실험적으로 연구하였다. 그는 이 실험으로부터 박막상태에서의 4d 띠폭이 두꺼운 층의 경우보다 더 좁은 것을 발견하였고, 이로부터 Rh 표면 층에서 자성이 있을 것으로 추정하였다. 본 연구에서는 FLAPW 방법에 의하여 Cu(001) 옷층에 각기 Rh 한 층과 Rh 두층이 올려진 경우에 대한 자성을 이론적으로 연구한다.

2. 계산방법

Cu(001) 위의 Rh 옷층의 두께에 따른 자성을 연구하기 위하여 Cu(001) 옷층에 Rh 한층 올려진 경우와 두층이 올려진 경우에 대해서 그 층에너지와 전자구조를 계산하였다. k 공간에 대한 적분은 대칭성을 고려하여 더 이상 못 줄이는 2차원 브릴루앙영역의 1/8에 해당하는 영역에 대하여 21개의 k-점을 고려하여 계산하였다. 전하밀도와 스핀밀도의 차가 $1 \times 10^{-5} e/(a.u.)^3$ 보다 작을 때 수렴된 것으로 하였다. Cu(001) 위에 Rh 이 한층 올려진 경우는 표면 층의 변화를 주어서 가장 안정된 상태를 층에너지계산에 의하여 찾았다. Cu(001) 옷층에 Rh 이 2층 올려진 경우는

Rh과 Cu 사이의 층 간격은 두 살창상수의 중간 값으로 하였으며 표면에서 Rh-Rh 간격은 덩치 값인 3.591 a.u. 으로 하였다.

3. 결과 및 논의

Cu(001) 윗층에 Rh 한 층이 올려졌을 때의 총에너지는 스핀분극된 경우가 더 낮은 에너지를 보였지만 그 에너지 차는 매우 작았다. Cu(001) 윗층에 2층의 Rh 을 올렸을 경우에 대하여 표면 층의 변화를 주지 않은 상태에서 계산한 결과 스핀분극된 경우가 더 낮은 에너지였고 그 에너지 차는 매우 작은 값이었다. 표 1로부터 표면 층의 자성은 한 층의 Rh 이 올려졌을 때 $0.23 \mu_B$ 였지만 2층의 Rh 이 올려졌을 때는 Rh 표면 층에서 $0.032 \mu_B$ 였고 계면 Rh 의 자기모멘트는 $0.013 \mu_B$ 를 나타냈다. 본 계산에서 살펴본 바에 의하면 Cu(001) 위에 Rh 이 한층 올려진 경우 와 두 층이 올려진 경우 모두 상자성인 상태와 스핀분극된 경우의 에너지 차가 매우 작다. 따라서 다른 자성상태 즉 반강자성상태의 가능성도 생각할 수 있으며, 현재 이에 대한 계산을 수행하고 있다.

Table I. Calculated magnetic moments of Rh overlayers on Cu(001).

		자기모멘트(μ_B)
1Rh/Cu(001)	Rh(S)	0.23
2Rh/Cu(001)	Rh(S)	0.032
	Rh(S-1)	0.013

* 이 논문은 과학기술처 미래원천 기반기술 연구비 지원에 의하여 수행되었습니다.

4. 참고문헌

- [1] A. J. Freeman, J. Magn. Magn. Mater. 100, 497 (1991).
- [2] M. J. Zhu, D. M. Bylander, and L. Kleinman, Phys. Rev. B43, 4007 (1991).
- [3] S. Blügel, Phys. Rev. B51, 2025 (1995).
- [4] R. Q. Wu and A. J. Freeman, Phys. Rev. B45, 7222 (1992).
- [5] G. A. Mulhollan, R. L. Fink, and J. L. Erskine, Phys. Rev. B44, 2393 (1991).
- [6] C. Liu and S. D. Bader, Phys. Rev. B44, 12062 (1991).
- [7] A. B. Hayden, T. Valla, and D. P. Woodruff, J. Phys.: Condens. Matter 7, 9475 (1995).