

Cu/Ru/Cu(001) 의 전자구조와 자성

인하대학교 물리학과 조이현*, 이재일
울산대학교 물리학과 홍순철

Electronic Structure and Magnetism
of Cu/Ru/Cu(001)

Inha University L. H. CHO*, J. I. LEE
University of Ulsan S. C. HONG

1. 서론

4 d 원소중 Ru 과 Rh 은 덩치상태로는 자성을 갖지 않지만 단층이나 귀금속 위에 옷층으로 얹혀진 경우 자성을 가지는 것으로 알려져 있다 [1-3]. 최근에 Hayden 등 [2]은 Auger 전자 분광법과 운동량 분해 역 광전자 방출 실험에 의해 버금 한 층의 Rh 이 Cu(001) 위에 얹혔을 경우, Rh 의 4 d 띠 폭이 옷층에서와는 달리 상당히 좁혀지는 현상이 나타났으며 이로부터 Rh 옷층이 자성을 가질 가능성이 있음을 추론하였다. 이를 이론적으로 확인하기 위하여 본 연구진은 이전의 연구에서 한 층의 Rh 이 Cu(001) 위에 얹혔을 경우[Rh/Cu(001)]의 자성 [3]을 총 퍼텐셜 선형 보충 평면 파동(F LAPW: Full Potential Linearized Augmented Plane Wave)방법에 의해 계산한 결과 Rh 옷층이 $0.23 \mu_B$ 자기모멘트를 가짐을 알았다. 한 층의 Cu 가 더 얹힌 경우[Cu/Ru/Cu(001)]의 자성을 계산하여 본 결과 Cu 가 얹히지 않은 경우에 비해 Rh 층의 자성이 훨씬 약화되었다. 또한 Cu(001) 위에 한 층의 Ru 이 얹힌 경우에는 Rh/Cu(001) 과는 달리 자성이 나타나지 않았다.

본 연구에서는 Ru 이 Cu(001) 위에 얹힌 상태에 다시 Cu 를 덮어 씌웠을 경우의 전자구조를 총 퍼텐셜 선형 보충 평면 파동 방법에 의해 계산하고 이로부터 그 자성을 고찰하였다.

2. 계산방법

Cu/Ru/Cu(001) 에서 Ru 사이 층의 전자구조를 계산하기 위하여 Cu(001) 5 층 양쪽에 Ru를 붙이고 그 위에 한 층의 Cu 를 더 얹은 판 모형을 구성하였다. $\frac{1}{8}$ 의 못줄이는 2 차원 브릴루앙 영역에서 모두 45 개의 k-점에 대해 에너지 고유값을 계산하였고, 이 때 각 k-점에 대해 약 640 개의 기저함수를 사용하였다. 자체충족적 과정에서 입력과 출력의 전하밀도와 스핀밀도의 제곱 평균 제곱근 차가 $5 \times 10^{-5} e/(a.u.)^3$ 이하일 때 수렴된 것으로 간주하였다.

3. 결과 및 논의

Cu/Ru/Cu(001) 계에 대해 상자성 상태와 강자성 상태에 대한 총 에너지 차가 0.00047 eV로서 상자성 상태의 에너지가 강자성 상태보다 극히 작긴 하지만 낮은 에너지를 나타냈다. 따라서 Cu/Ru/Cu(001)은 자성을 갖지 않는 것으로 볼 수 있다. 이러한 사실은 또한 Fig. 1에 주어진 Cu/Ru/Cu(001) (a)과 Cu/Rh/Cu(001) (b)의 계에서 상자성 상태의 상태밀도를 비교함으로써 알 수 있다. 즉, Cu/Ru/Cu(001) 계에서 Ru(S-1) 사이층에 대한 페르미 준위의 상태밀도가 Cu/Rh/Cu(001) 계에서의 Rh 사이층의 경우보다 상당히 작았고, Cu/Rh/Cu(001) 계에서 Rh 이 매우 약한 자성을 가지는 것으로부터 Cu/Ru/Cu(001)에서의 Ru 사이층은 자성을 갖지 않는다고 할 수 있다.

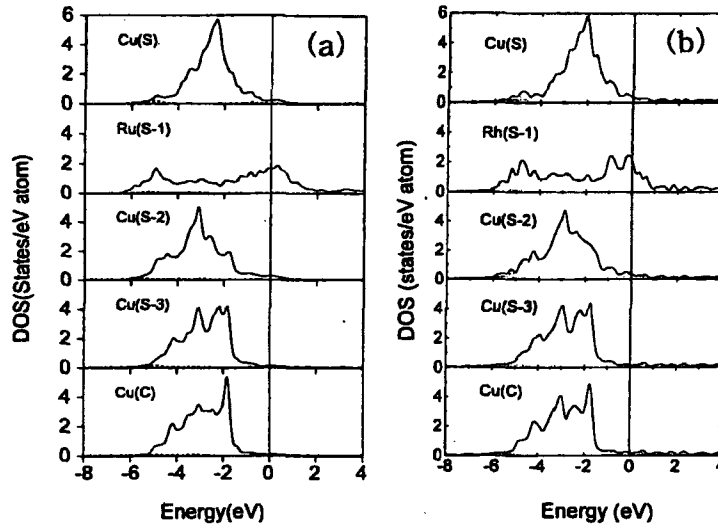


Fig. 1 (a) Cu/Ru/Cu(001) 과 (b) Cu/Rh/Cu(001) 에 대한 상자성 상태에서의 상태밀도.

* 이 논문은 과학기술처 미래원천 기반기술 연구비 지원에 의하여 수행되었습니다.

4. 참고 문헌

- [1] R. Wu and A. J. Freeman, Phys. Rev. B45, 7222(1992).
- [2] A. B. Hayden, T. Valla, and D. P. Woodruff, J. Phys.: Condens. Matter 7, 9475(1995).
- [3] C. S. Chang, L. H. Cho, J. I. Lee, S. C. Hong, R. Wu, and A. J. Freeman, J. Magn. Magn. Mater. 177-181, 1255(1998).