

Fe/Cr 계의 표면 및 계면에서 자성의 이해

인하대학교 물리학과 김인기* 이재일
인천대학교 물리학과 장영록

UNDERSTANDING OF SURFACE AND INTERFACE MAGNETISM OF Fe/Cr SYSTEM

Inha University I. G. Kim* and J. I. Lee
University of Incheon Y. -R. Jang

1 서론

강자성 박막 사이에 반강자성 또는 비자성 물질로 사이를 띄운 Fe/Cr, Fe/Ag, Co/Cu 등의 다층박막계는 거대자기저항 (GMR: Giant Magnetoresistance) 효과를 나타내는 등, 특이한 현상으로 인해 많은 관심의 대상이 되어 왔다. 특히, Fe/Cr 다층박막과 초격자에 대한 일련의 연구들[1]은 이들 계의 자성이 Fe-d와 Cr-d의 강한 띠 혼성에 기인한다는 증거를 제시하였다. 최근, 본 연구 그룹은 Fe/Cr(001)과 2Fe/Cr(001)[2] 및 Fe/Cr/Fe(001) 계[3]의 전자구조와 자기구조에 대하여 계산한 결과 이들 계의 자성은 Fe와 Cr의 d-d 띠 혼성에 기인하는 것으로 설명하였다.

본 연구에서는 Fe/Cr의 자성을 체계적으로 이해하기 위해 Jang 등[3]이 연구하였던 Fe/Cr/Fe(001) 계에서 Fe와 Cr 원자를 서로 바꾼 계, 즉 Cr/Fe/Cr(001) 계의 전자구조와 표면 및 계면의 자성을 총 퍼텐셜 선형 보강 평면파 (FLAPW: full-potential linearized augmented plane wave) 에너지 띠 방법[4]을 이용하여 탐구하고 그 계산 결과를 Fe/Cr/Fe(001) 계의 것과 비교 고찰한다.

2 계산방법

Cr/Fe/Cr(001)의 전자구조를 계산하기 위하여 Cr(001) 5층 양쪽에 Fe 한층을 붙이고 그 위에 Cr 한층을 얹은 단일 판 모형을 채택하였다. 전자구조를 얻기 위해 국소밀도 범함수 방정식을 자체충족적으로 풀었다. 2차원 제1 브릴루앙 영역의 1/8 몫줄이는 영역 내의 21-k 점에 대해 Kohn-Sham 방정식을 풀어 에너지 고 유값과 고유벡터를 얻었으며, 이들 k 점을 이용하여 페르미 에너지 계산 등을 위한 적분을 수행하였다. 이때, 각 k-점에 대하여 약 700개의 기저함수를 사용하였다. 자체충족적 과정에서 전하 및 스핀 밀도의 입력과 출력의 제곱 평균 제곱근차가 1.0×10^{-5} electrons/a.u.³ 이하로 되었을 때 수렴한 것으로 간주하였다.

TABLE I. Muffin-Tin 구 내에서 계산된 Cr/Fe/Cr(001) 계와 Fe/Cr/Fe(001) 계의 층별 자기모멘트 M (μ_B 단위).

| Cr/Fe/Cr(001) | | Fe/Cr/Fe(001) | |
|---------------|-------|---------------|-------|
| Layer | M | Layer | M |
| Cr(S) | 3.02 | Fe(S) | 2.37 |
| Fe(S-1) | -1.40 | Cr(S-1) | -0.75 |
| Cr(S-2) | 0.36 | Fe(S-2) | 2.01 |
| Cr(S-3) | -0.52 | Fe(S-3) | 2.43 |
| Cr(C) | 0.65 | Fe(C) | 2.43 |

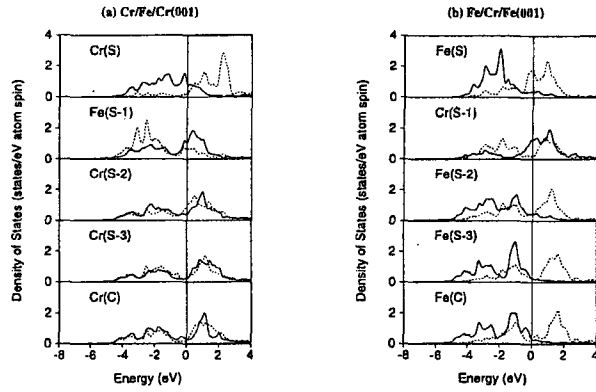


Fig. 1 (a) Cr/Fe/Cr(001)와 (b) Fe/Cr/Fe(001)에 대한 층별 상태밀도. 실선과 점선은 각각 위스핀과 아래스핀 상태를 나타낸다.

3 결과 및 고찰

TABLE I에 Cr/Fe/Cr(001)과 Fe/Cr/Fe(001)의 층별 자기모멘트를 나타냈다. Cr/Fe/Cr(001) 계에서는 모든 층이 반강자성 결합을 하였으나, Fe/Cr/Fe(001) 계의 경우에는 단지 사이에 낀 Cr 층과 이웃한 Fe 층 사이에서만 반강자성 결합을 하였다. Cr/Fe/Cr(001) 계와 Fe/Cr/Fe(001) 계에서 모두 Fe 층과 Cr 층 사이에서는 반강자성 결합을 하였다. 또한, Fe/Cr/Fe(001) 계에서는 계면 Fe(S-1) 층의 자기모멘트는 $1.40 \mu_B$ 로 덩치 상태에 비해 상당히 줄어들었지만, Cr/Fe/Cr(001) 계에서 계면 Cr(S-1) 층의 자기모멘트는 $0.75 \mu_B$ 로 덩치 상태에 비해 약간 늘어난 것을 알 수 있었다. Fig. 1에 나타난 층별 상태밀도에서 알 수 있듯이, 이들 계에 대한 자성은 서로 이웃하는 Fe-d 상태와 Cr-d 상태 사이의 강한 d 혼성에 의한 것임을 알 수 있다. Fe/Cr/Fe(001) 계는 표면 상태가 Fe(S) 층에만 존재하나, Cr/Fe/Cr(001) 계는 사이에 낀 Cr(S-1) 층의 표면 상태밀도 봉우리가 -3 eV 영역에서 관찰되었다. Fe/Cr 계의 표면 및 계면에서의 자성은 주로 Fe 층과 Cr 층 사이의 강한 d-d 혼성과 표면의 가리기 효과에 의해 결정됨을 알았다.

참고문헌

- [1] J. -S. Kang *et al.*, Phys. Rev. B **51**, 1039 (1995); and references therein.
- [2] I. G. Kim, J. I. Lee, Y. -R. Jang, and Soon C. Hong, J. Korean Phys. Soc. **31**, 491 (1997).
- [3] Y. -R. Jang, Soon C. Hong, and J. I. Lee, submitted to IEEE Trans. Magn. (1999).
- [4] E. Wimmer *et al.*, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981); E. Wimmer *et al.*, Phys. Rev. B **24**, 2292 (1981); M. Weinert *et al.*, Phys. Rev. B **26**, 4571 (1982).