

Pd(001) 위에 얹혀진 4d 전이금속 Tc, Ru, Rh 단층의 비자성

인하대학교 물리학과	김인기* 이재일
인하대학교 물리학과	김동철
한라대학교 전기전자컴퓨터 공학부	
울산대학교 물리학과	홍순철

NONMAGNETISM OF 4d TRANSITION METAL (Tc, Ru, and Rh)
MONOLAYERS ON Pd(001) SURFACE

Inha University	I. G. Kim* and J. I. Lee
Inha University &	D. C. Kim
Halla Institute of Technology	
University of Ulsan	Soon C. Hong

1. 서론

지난 십 수년에 걸쳐 분자살켜쌓기(MBE: Molecular Beam Epitaxy) 등의 기술 발전에 힘입어, 덩치 상태에서 자성을 띠지 않는 4d 전이금속을 커쌓아 자성 가능성을 탐구하는 분야에 많은 연구가 있었다. 특히, Ru과 Rh이 Cu, Ag 혹은 Au 등의 커금속 표면에 얹혀졌을 경우의 자성 가능성이 예측되었다[1]. 또한, Pd은 그 살창 상수가 Ag와 Cu의 중간에 위치하며 큰 스핀 요동으로 인해 옷층이나 불순물의 자성을 유발하기 위한 좋은 재료로서 관심을 끌어왔다. Blügel[2]은 Pd(001) 표면 위의 Ru 단층의 경우 $0.21 \mu_B$ 의 작은 자기모멘트를 지님을 예측하였다. 최근, Beckmann 과 Bergmann[3]은 Pd(001) 표면 위에 Ru이 한층 이하로 쌓였을 경우 자성을 가짐을 비정상 Hall 효과를 이용한 실험 결과를 보고하였다.

본 연구에서는 Tc, Ru, 및 Rh 등 4d 전이금속 단층이 Pd(001) 표면에 얹혀졌을 경우에 대해 제일원리적 총퍼텐셜 선형보강평면파 (FLAPW: Full-potential Linearized Augmented Plane Wave) 방법[4]을 통하여 체계적으로 계산하였는데, Blügel의 결과와는 달리 Pd(001) 위의 Ru 또한 Tc, Rh과 마찬가지로 자성을 띠지 않았다. 계산된 전자구조를 바탕으로 이들 계가 자성을 띠지 않는 원인에 대하여 고찰한다.

2. 계산방법

Pd(001) 표면 위에 얹혀진 4d 전이금속의 표면의 전자구조를 체계적으로 이해하기 위해, Tc, Ru, 및 Rh 단층을 5층의 fcc Pd(001) 단일 판 위에 얹은 모형을 채택하였다. 옷층과 기저층 사이의 간격은 옷층과 Pd의 덩치 살창상수의 평균의 반으로 하였다. 자체충족 국소밀도 범함수 방정식인 Kohn-Sham 방정식을 $1/8$ 의 못줄이는 2차원 Brillouin 영역 내의 21 k-점에 대해 풀어 에너지 고유값과 고유 벡터를 얻었다. 이 때, 각 k-점에 대하여 약 700 개의 LAPW 기저함수를 사용하였다. 자체충족 과정에서 입력과 출력 전하밀도의 제곱 평균 제곱근 차가 $1 \times 10^{-4} e/(a.u.)^3$ 이하일 때로 정하였다.

3. 결과 및 고찰

이들 계의 자성 가능성에 대하여 알아보기 위하여, 각 계에 대하여 스핀 분극된 경우에 대해서도 계산해 보았다. 모든 계에서 자기화에너지 $\Delta E = E_{PM} - E_{FM}$ 와 강자성 상태의 자기모멘트가 모두 0으로 수렴하여 이들 계가 자성을 가지지 않음을 알 수 있었다. 이러한 결과는 Blügel[2]이 이전에 얻었던 Pd(001) 면 위의 Ru 옷층이 약한 자기모멘트를 갖는다는 것과는 상반된다.

이러한 비자성의 원인을 알아보기 위하여 Tc/Pd(001), Ru/Pd(001) 및 Rh/Pd(001)의 상태밀도를 비교하여 Fig. 1에 나타내었다. 옷층과 Pd(001) 층의 상태밀도가 모두 $-6 \sim 2$ eV 영역에 걸쳐있는 것이 관찰된다. 또한, $-2 \sim 1$ eV 영역에 걸쳐 Pd(S-1) 층의 상태밀도가 증가한 것을 볼 수 있다. 이러한 사실로부터 옷층과 아래층 Pd 사이의 강한 락 혼성이 있음을 알 수 있다. 이러한 사실은 귀금속의 상태밀도가 페르미 에너지 이하로 많이 내려가 있어서 귀금속 위에 얹혀진 4d 전이금속이 자성을 가지는 것과는 달리, Pd 위에 얹혀진 4d 전이금속 단층이 자성을 띠지 않음을 설명해 준다.

참고 문헌

- [1] O. Eriksson, R. C. Albers and A. M. Boring, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1350 (1991); R. Wu and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **45**, 7222 (1992); C. S. Chang, *et al.*, *J. Magn. Magn. Mater.* **177-181**, 1255 (1998).
- [2] S. Blügel, *Europhys. Lett.* **18**, 257 (1992); S. Blügel, in "Equilibrium Structure and Properties of Surfaces and Interfaces," ed. by A. Gonis and G. M. Stocks (Plenum, New York, 1992) p. 297.
- [3] H. Beckmann and G. Bergmann, *Eur. Phys. J. B* **1**, 229 (1998).
- [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).

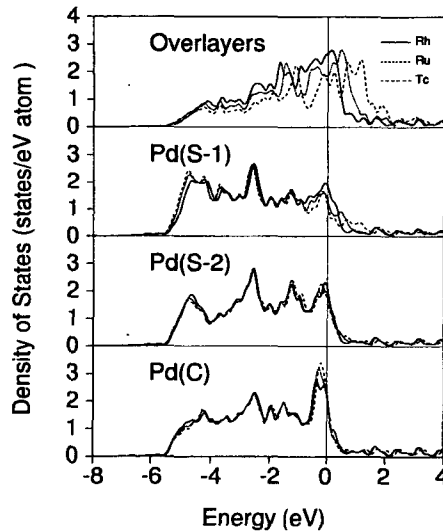


Fig. 1 Tc/Pd(001), Ru/Pd(001) 및 Rh/Pd(001)의 층별 상태밀도. 파선과 점선, 실선은 각각 Tc/Pd(001), Ru/Pd(001) 및 Rh/Pd(001)의 상태밀도를 나타낸다.