

표면 합금 CoW의 형성과 자성에 관한 제일원리계산

울산대학교 노태환, 권영수, 홍순철
표준과학원 황찬용
인하대학교 이재일

First Principles Calculation on the Formation of of the CoW Surface Alloy on
W(001) and its Magnetic Property

University of Ulsan T.H. Rho, Y. Kwon, and S.C. Hong
Korea Research Institute of Standards and Science C. Hwang
Inha University J. I. Lee

1. 서론

수 원자 층 두께의 자성 박막 물성에 대한 연구는 학문적 흥미뿐 아니라 산업에의 응용 가능성 때문에 오랫동안 연구되어 왔다. 계면, 표면 상태 등 환경에 따라 자기적 성질이 크게 변화함을 이론적으로, 실험적으로 예측하거나 확인되어 왔다. 예로 대표적인 자성 원소인 Fe 가 Ag 나 Au(001) 등 귀금속 위에 단층으로 성장하였을 때는 큰 자기모우멘트($\sim 3.0 \mu_B$)를 가지는 강자성 상태가 안정한 반면 Rh(001)에 성장하였을 때는 $2.78 \mu_B$ 의 자기모우멘트를 가진 반강자성 상태가 안정적임이 알려져 있다.[1] Co 의 경우에는 Pd 와 계면을 이룰 때는 자기모우멘트가 $2.10 \mu_B$ 로 덩치가 가지는 $1.6 \mu_B$ 에 비해 약 30% 이상 증가하는 반면 Zr 과 계면을 이룰 때는 자기모우멘트가 거의 없는 상태가 안정적임을 이론적으로 예측하고 있다.[2]

본 연구에서는 최근에 W(001) 면 위에 Co 층을 성장시킬 때, CoW 표면 합금이 형성됨을 실험적으로 관찰하였고 Co의 자기모우멘트가 증가하는 징후를 관찰하였다. 본 연구에서는 W(001), W(001) 면 위의 Co 단층, W(001) 면 위의 CoW 표면합금 단층에 대한 제일원리계산에 의한 전자구조 계산을 통해 표면 합금의 안정성과 자성을 연구하였다.

2. 계산방법

본 연구에서는 제일원리계산방법 중에서 전이금속의 자성 연구에 가장 적합하다고 알려져 있는 Full-potential Linearized Plane Wave (FLAPW) 방법[3]을 사용하였다. 원자가전자는 스핀-궤도 결합을 제외한 모든 상대론적인 항을 포함하여 준상대론적으로 취급하였고 핵심전자는 완전히 상대론적으로 취급하였다. 약 1000 개의 기저함수를 사용하였고 제일영역 브릴루앙 적분을 하기 위해 10 개의 특별 k 점을 사용하였다. 교환상관 전위는 General Gradient Approximation(GGA) 사용하였다. 전하밀도, 스핀밀도의 입

력과 출력 차이가 각각 $0.1 \times 10^{-4} \text{ e}/(\text{au})^3$ 보다 작을 때 자체충족적이라고 가정하였다.

3. 계산결과

표면합금의 안정성을 논의하기 위해 W(001), 1Co/W(001), 1(CoW)/W(001) 에 대한 총에너지 계산을 수행하였고 CoW 표면합금의 안정성은 다음과 같은 식으로 계산할 수 있다.

$$1/2[TE_{W(001)} + TE_{1Co/W(001)}] - TE_{1(CoW)/W(001)}$$

여기서 TE는 총에너지를 표시하고 있다. 계산 결과에 의하면 CoW 표면합금이 꽤 큰 에너지 차, 284 eV 로 안정됨을 알 수 있었다. W(001) 위에 Co 가 완전한 p(1x1) 단층으로 성장한 경우는 반강자성 상태가 강자성 상태에 비해 약 80 meV 에너지 차이로 안정한 것은 흥미로운 계산 결과이다.

1(CoW)/W(001) 에서 Co 의 스핀 자기모우멘트는 $1.73 \mu_B$ 으로 계산되어 덩치에 비해 약 8% 증가한 것으로 계산되었다. 계산된 궤도 자기모우멘트는 $0.20 \mu_B$ 이었다. 궤도 자기모우멘트를 포함하면 총 자기모우멘트는 $1.93 \mu_B$ 로 덩치에 비해 약 30% 증가한 것으로 나타나 실험 사실을 잘 설명하여 주고 있다. 한편, 1Co/W(001) 에 대한 계산에서 강자상태의 자기모우멘트($0.85 \mu_B$) 가 반강자성상태의 자기모우멘트 ($1.38 \mu_B$) 에 비해 상당히 작은 것은 매우 흥미롭다.

4. 결론

제일원리계산방법을 이용하여 Co 가 W(001) 표면 위에 성장할 때, CoW 표면합금이 형성될 가능성을 탐색하였다. W(001), 1Co/W(001), 1(CoW)/W(001) 에 대한 총에너지 계산결과, W(001) 표면 위에 CoW 표면 합금이 상당한 에너지 차(284 meV)로 안정함을 알 수 있었다. 그 합금에서 Co 의 스핀 자기모우멘트, 궤도 자기모우멘트는 각각 1.73, $0.20 \mu_B$ 로 총 자기모우멘트는 $1.93 \mu_B$ 으로 계산되었다. 이 값은 덩치에 비해 약 30 % 증가한 것으로 실험 사실과 일치하였다. Co 가 완전한 p(1x1) 단층 일 경우 반강자성 상태가 안정적이고 강자성 상태의 자기모우멘트가 $0.85 \mu_B$ 로 상당히 감소함이 계산되었다.

이 연구는 연세대 초미세표면과학연구센터를 통한 과학재단의 지원과 슈퍼컴퓨팅센터의 전략과제지원에 의해 수행되었으므로 이에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] C. Hwang, A.K. Swan, S.C. Hong, Phys. Rev. B60, 14429(1999).
- [2] Y. Kwon, T.H. Rho, S.C. Hong, and Y.P. Lee, JKPS 35, 323(1999).
- [3] E. Wimmer et al., Phys. Rev. B24, 864(1981).