

MgCFe₃(001) 표면의 전자구조와 자성

인하대학교 김영구 김인기* 이재일

Electronic structure and magnetism of MgCFe₃(001) surface

Inha University J. Y. JIU I. G. KIM* and J. I. LEE

1. 서론

최근에 발견된 산소원소를 포함하지 않은 perovskite MgCNi₃[1]는 니켈함량이 풍부하면서도 낮은 임계온도를 갖는 초전도체로서 많은 관심을 끌고 있다. 이와 더불어 Ni을 여러 종류의 자성원자로 치환한 가상의 MgCNi_{3-x}T_x(T = Co and Fe)에 대한 이론적연구에서 Co원자치환의 경우 $x \geq 2$ 일 때, Fe원자치환의 경우에는 $x=2$ 가되기 전에 강자성상태로의 전이가 나타나고 $x=3$ 일 때의 MgCFe₃에서 Fe원자의 자기모멘트가 $1.42 \mu_B$ 임을 계산하였다[2]. 본 연구에서는 총 퍼텐셜 선형보강 평면파(full-potential linearized augmented plane wave; FLAPW) 방법[3]을 이용하여 MgCFe₃(001) 표면의 전자구조와 자성을 이론적으로 연구하였다.

2. 계산 방법

Perovskite 구조를 갖는 MgCFe₃의 (001)표면을 기술하기 위하여 서로 다른 절단면, 즉 Mg원자와 Fe원자로 이루어진 MgFe표면과 C원자와 Fe원자로 이루어진 CFe표면을 가진 아홉층의 단일판 모형을 고려하였다. 층 사이의 거리는 MgCNi₃의 살창 상수[1]의 반으로 잡았다. FLAPW방법을 이용하여 Kohn-Sham 방정식을 자체 충족적으로 풀어 전자구조를 계산하였다. 각 k -점당 약 1600개의 기저함수를 사용하여 1/8의 못줄이는 2차원 브릴루앙영역에서 21개의 k 점에 대해 에너지 고유값을 계산하였다. 핵심전자는 완전히 상대론적으로 다루었고 가전자상태는 준 상대론적으로 다루었다. 머핀-틴 구 내의 전하와 퍼텐셜을 기술하기 위해 각운동량 $l \leq 8$ 까지의 격자조화함수를 이용하였다. 입력과 출력의 전하밀도의 제곱평균제곱근 차이가 $2 \times 10^{-4} e/(a.u.)^3$ 이하일 때 수렴된 것으로 간주하였다.

3. 결과 및 고찰

서로 다른 절단면, 즉 Mg원자와 Fe원자로 끝나는 MgFe표면과 C원자와 Fe원자로 끝나는 CFe표면에서 Fe원자의 자기모멘트를 계산한 결과, MgFe표면의 경우에 $2.50 \mu_B$ 로서 CFe표면의 $1.97 \mu_B$ 과 매우 큰 차이를 보이고 있다. 이러한 차이는 그림 1의 상태밀도에서 볼 수 있듯이 CFe표면에서의 Fe(S)d-C(S)p 혼성효과가 MgFe표면에서의 Fe(S)d-Mg(S)sp 혼성효과보다 강하여 Fe-d띠의 국소화를 약화시키기 때문으로 여겨진다.

4. 참고 문헌

- [1] T. He, *et al.* Nature (London) 411. 54 (2001).
 [2] I. G. Kim, J. I. Lee, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B 65, 064525 (2002).
 [3] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B 24, 864 (1981) and references there in; M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B 26, 1629 (1982).

Fig 1. Layer projected total density of states (DOS) of (a) MgFe-Term and CFe-Term. The solid lines indicate the DOS of Fe and the broken lines indicate the DOS of C or Mg which is times ten.

