

TPt ( T = 3d 전이원소 ) 의 자기적 특성

( Magnetic structures of TPt(T=3d transition element) by first-principles calculations )

\*전 규환, 차 기범, 권 영수, 홍 순철  
울산 대학교 물리학과

3d 전이원소(T)와 8족 4d 혹은 5d 원소와의 질서합금은 다양한 자성구조를 가지는 것으로 알려져 있다. TPt(T=V, Cr, Mn, Fe, Co and Ni)가 그 중에 하나인데 CuAu I 형태의 정방결정구조를 갖고 있다. T 원소가 한 층을 이루고 정방 실창의 c축을 따라 Pt가 교차하면서 쌓여 있는 층 구조의 특징을 보여준다. 이 합금의 다양한 자기적 특징이 관찰된 논문이 많이 나와 있다.

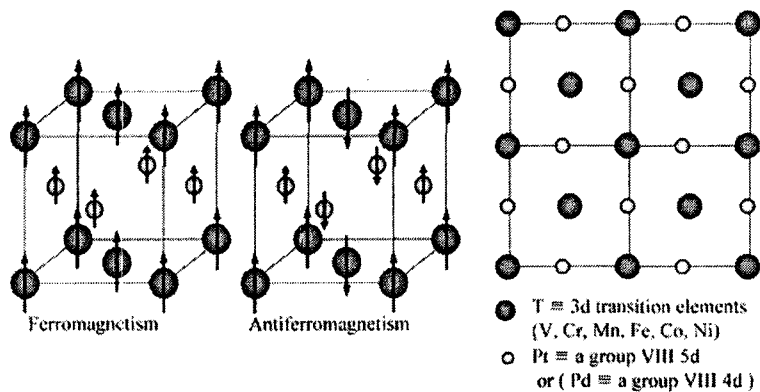


Figure 1 TPt 의 강자성과 반강자성 구조

실험에서 VPt와 NiPt 는 상자성 상태에서 안정한 것으로 보고되고 있다.<sup>1</sup> CrPt 와 MnPt는 반강자성 상태가 안정하며 CrPt 에서 Cr의 자기모멘트는  $2.24 \mu_B$  이고 Pt의 자기모멘트는 무시할 만 하였고, MnPt에서 Mn의 자기모멘트는  $4.3 \mu_B$  이고 Pt의 자기모멘트는 무시할 만 하였다.<sup>2</sup> FePt 와 CoPt는 강자성 상태가 안정하며 FePt에서 Fe와 Pt의 자기모멘트는 각각  $2.8 \mu_B$  ,  $-0.25 \mu_B$  이고, CoPt에서 Co와 Pt의 자기모멘트는 각각  $1.6 \mu_B$  ,  $0.25 \mu_B$  으로 나왔다.<sup>3</sup> FePt 경우 Fe와 Pt는 서로 반강자성을 보이며 Co와 Pt는 서로 강자성을 보이고 있다. TPt의 에너지 상태는 T 원자에 따라 상자성, 강자성, 반강자성의 다양한 상태를 보여준다.

허바드 모형의 히트리-폭 근사를 이용한 이전의 계산에서는 VPt는 반강자성 상태가 안정한 것으로 나타났고 V의 자기모멘트 값이  $2.13 \mu_B$  이고 Pt의 자기모멘트 값은  $0.03 \mu_B$  으로 계산되어 실험과 일치하지 않았다.<sup>3</sup> CrPt에서 반강자성 상태가 안정하다는 것은 실험과 일치하지만 반강자성 상태에서 Cr의 자기모멘트 값이  $3.96 \mu_B$  으로 실험과 일치하지 못했다. 그리고 MnPt 는 반강자성 상태와 강자성 상태의 총 에너지가 거의 같아 어느 상태가 안정한지에 대해 결론을 내리지 못하였다. 반강자성 상태에서 Mn의 자기모멘트 값이  $4.00 \mu_B$  이고 Pt의 자기모멘트 값은  $0.04 \mu_B$  으로 계산되어 실험과 비슷하게 나왔다.<sup>3</sup>

본 연구에서는 TPt의 전자구조와 자성을 연구하기 위한 full-potential linearized augmented plane wave (FLAPW) 방법을 사용하였으며 교환 상관 포텐셜에 대해서 일반화 구배근사(GGA)를 사용하였다. 총 에너지 계산결과 VPt는 상자성 상태가 안정한 것으로 나왔다. CrPt는 반강자성이 안정한 것으로 나왔고 반강자성 상태에서 Cr의 자기모멘트 값이  $2.60 \mu_B$  으로 실험과 일치하였고 Pt의 자기모멘트 값은  $0.05 \mu_B$  으로 나왔다. MnPt는 강자성 상태보다 반강자성 상태가  $0.78 \text{ eV}$  만큼 큰 에너지 차로 낮아 반강자성 상태가 안정하다는 실험결과와 일치하였다. 반강자성 상태에서 Mn의 자기모멘트 값은 약  $3.7 \mu_B$  였고 Pt의 자기모멘트 값은  $0.11 \mu_B$  으로 계산되었다. NiPt는 실험에서 상자성 상태가 안정하다고 나왔는데 본 연구에서는 강자성 상태가 상자성 상태보다  $0.073 \text{ eV}$  만큼 낮아 강자성 상태가 안정한 것으로 실험과 차이를 보였다. 강자성 상태에서 Ni의 자기모멘트 값은  $0.77 \mu_B$  이고 Pt의 자기모멘트 값은  $0.33 \mu_B$  으로 상당히 큰 자기 모멘트 값을 가지므로 NiPt가 상자성 상태가 아님을 보여주고 있다.

Table 1 TPt의 총 에너지 계산결과 비교( P : 상자성, F : 강자성, AF : 반강자성 )

TPt	$\Delta E_{EX}$	$\Delta E_{Hartree-Fork}$	$\Delta E_{FLAPW}$ ( $\Delta E = F - AF$ )	
VPt	P	AF	0.000 eV	P
CrPt	AF	AF	0.700 eV	AF
MnPt	AF	F $\approx$ AF	0.780 eV	AF
FePt	F	F	-0.617 eV	F
CoPt	F	F	-0.634 eV	F
NiPt	P / F	P	-0.073 eV	F

Table 2 TPt의 강자성과 반강자성일 때 각각의 자기모멘트 계산결과

TPt	$m_T(\mu_B)^F$	$m_{Pt}(\mu_B)^F$	$m_T(\mu_B)^{AF}$	$m_{Pt}(\mu_B)^{AF}$
VPt	0.00	0.00	0.00	0.00
CrPt	1.02	0.00	2.60	0.05
MnPt	3.73	0.23	3.67	0.13
FePt	2.92	0.34	2.84	0.09
CoPt	1.91	0.41	1.49	0.10
NiPt	0.77	0.33	0.36	0.08

NiPt의 실험과 에너지 상태가 차이를 보이는 것에 대해 논의할 것이고, TPt 표면에서의 자기 구조에 대해서도 논의할 예정이다.

<sup>1</sup> A Bieber, A Chakari and R Kuentzler, J. Magn. Magn. Mater. **15-18** 1161 (1980).

<sup>2</sup> E Kren, G Kadar, L Pal, J Solyom, P Szabo and T Tarnoczi, Phys. Rev. **171** 574 (1968).

<sup>3</sup> Y Ohta, M Miyauch and M Shimizu, J. Phys. Condens. Matter **1**, 2637 (1989).