

Ag와 Au(001) 표면위에 올려진 철 나노선의 전자구조와 자성

인하대학교 김영구*, 이재일

Electronic structures and magnetism of monatomic Fe nanowires on Ag(001) and Au(001) surface

Inha University Y. J. JIN* and J. I. LEE

1. 서론

전자소재는 차원이 줄어들고 나노영역으로 감에 따라 기존에는 볼 수 없었던 새로운 물리적 특성을 나타낸다. 일차원 나노선은 나노전자 소자를 이루는 중요한 요소로서 고밀도 자기기록매체나 나노발광소자 등으로 매우 중요한 응용 가능성이 기대되고 있다. 3d 강자성 전이금속의 경우 준2차원인 표면에서의 자성은 고체내부 보다 20~30% 증가된 자기모멘트를 가지고 있다 [1]. 수도포텐셜을 이용한 계산에 따르면 Cu(117) 표면에 놓인 철 나노선의 위치에 따라 철의 자기모멘트의 값은 2.80 ~ 2.96 μ_B 사이에서 변화함을 보였고 [2] 철 나노선을 [110] 방향에 따라 Cu(001) 표면위에 놓았을 때의 자기모멘트 값이 2.99 μ_B 로서 [3] 덩치상태(2.22 μ_B)에 비하여 매우 큰 증가를 보여주었다. 이 논문에서는 일차원 철 나노선을 주기율표에서 구리와 동족인 Ag(001)과 Au(001) 표면 위에 놓았을 때 전자구조와 자성에 대한 기초물성을 이해하기 위해 총 퍼텐셜 선형보강 평면파 (full-potential linearized augmented plane wave; FLAPW) 방법[4]을 이용하여 계산을 수행하였다.

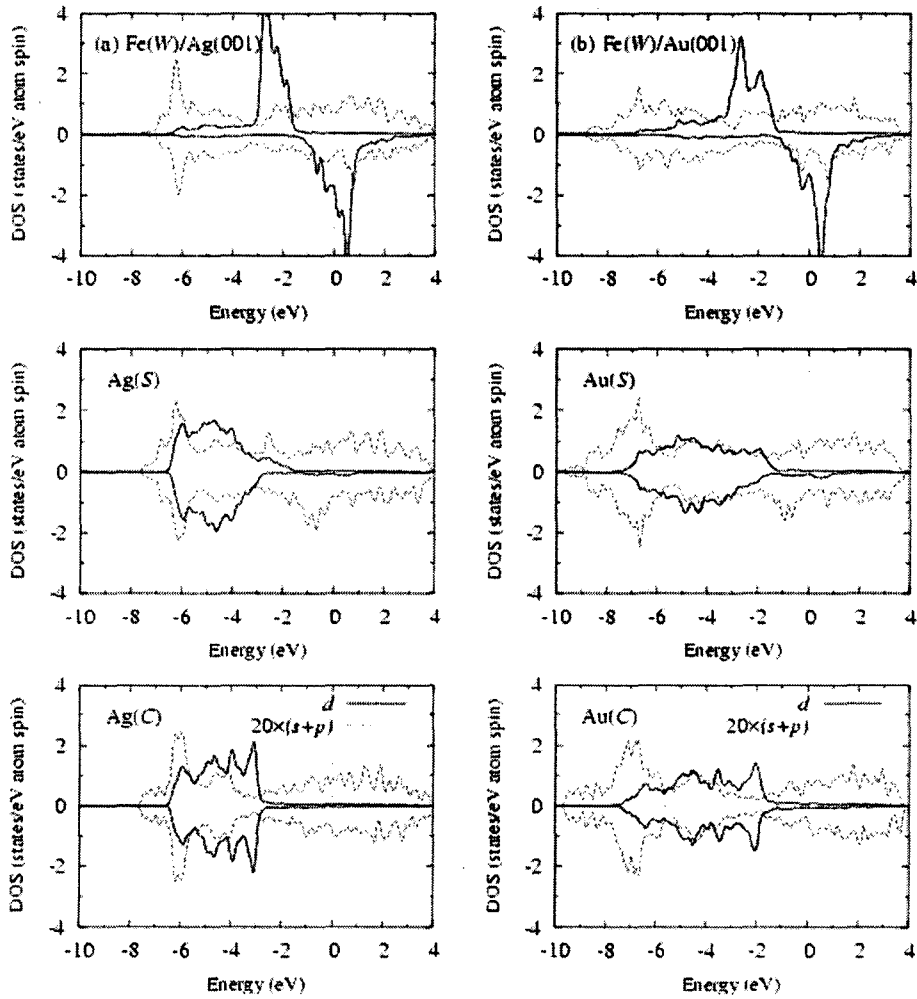
2. 계산 방법

다섯층으로 이루어진 단일판 Ag(001) 또는 Au(001) 표면의 양면에 [110] 방향을 따라 철 나노선을 부착하였다. 철 나노선에서 두 철 원자 사이의 거리는 2.90 Å으로 하였다. 이때 철 원자는 구리원자로 이루어진 정사각형의 가운데에 위치하도록 하였다. 자유롭게 떠 있는 철 나노선과 구리표면 층 사이의 거리(1.42Å)는 bcc 철의 원자당부피가 유지되도록 결정하였다. 전자구조를 얻기 위해 FLAPW 방법을 이용하여 Kohn-Sham 방정식을 자체 충족적으로 풀었다. 각 k -점당 약 2300 개의 기저함수를 사용하여 1/4의 몫 줄이는 2차원 브릴루앙 영역에서 27 개의 k -점에 대해 에너지 고유값을 계산하였다. 핵심전자는 완전 상대론적으로 다루었고 가전자상태는 준 상대론적으로 다루었다. 머핀-틴 구 내의 전하와 퍼텐셜을 기술하기 위해 각운동량 $l \leq 8$ 까지의 격자조화함수를 이용하였다.

3. 결과 및 고찰

Ag(001) 또는 Au(001) 표면위에 놓여진 철 나노선의 자기모멘트는 각각 3.02와 3.05 μ_B /atom으로 계산되었다. 이러한 값은 철 나노선이 Cu(001) 표면위에 놓였을 때의 자기모멘트 값인 2.99 μ_B 에 비하여 약간 증가하였고 덩치상태의 철에 비해서는 매우 크게 증가하였다. 그림 1은 철 나노선을 (a) Ag(001) 과 (b) Au(001) 표면에 올렸을 때 층에 따라 분해한 스핀분극 된 상태밀도를 보여주고 있다. Fe의 d -전자상태와 비하여 Ag원자의 경우에는 d -전자상태가 상대적으로 낮은 에너지영역에 분포되어 있고 Au원자의 경우에는 얇은 에너지영역에도 d -전자상태가 존재하여 철 원자의 d -전자상태와 큰 혼성을 보여주고 있다. 이러한 결과는 표면에서 유도된 Ag와 Au원자의 자기모멘트 값인 0.03과 0.07 μ_B /atom으로부터도 확인할 수 있다.

그림 1 철 나노선을 (a) Ag(001) 과 (b) Au(001) 표면에 올렸을 때 층에 따라 분해한 스핀분극 된 상태밀도를 보여준다. 페르미 에너지는 영으로 잡았고 실선은 d -전자의 상태밀도를 점선은 $(s+p)$ -전자의 상태밀도를 나타낸다. 편의를 위하여 $(s+p)$ -전자의 상태밀도는 20배로 확대하였고 소수스핀에는 -1을 곱하였다.



4. 참고 문헌

- [1] E. Wimmer, A.J. Freeman, and H. Krakauer, Phys. Rev. B **30**, 3113 (1984).
- [2] D. Spišák, and J. Hafner, Phys. Rev. B **65**, 235405 (2002).
- [3] Y. J. Jin, I. G. Kim, and J. I. Lee, phys. stat. sol. (b) **241**, 1431 (2004).
- [4] 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).