

Vanadium 단층의 전자구조와 자성에 대한 제일원리계산: V/Mo(001)과 V/Cr(001)

(First Principles Calculations on Electronic Structure and Magnetism of Vanadium
monolayer: V/Mo(001) and V/Cr(001))

이승현*, 홍순철
울산대학교 물리학과

V, Mo, MoV 합금은 덩치에서는 자성을 띄지 않는다. 최근 V 자성에 대한 제일원리계산으로 연구 결과에 따르면 계산방법에 따라 V(001) 표면의 자기모멘트가 크게 차이가 날 뿐 아니라 실험 결과도 논란의 대상이 되고 있다. Pseudopotential 방법으로 계산하였을 때는 V(001) 표면층의 자기모멘트는 $1.77 \mu_B$ 이었으나,^{1,2} 자성에 관한 보다 정확한 계산 결과를 주는 것으로 알려진 Full-potential linearized augmented plane wave (FLAPW) 방법을 사용하였을 때는 거의 무시할만한 자기모멘트 ($0.01 \mu_B$)를 갖는 것으로 계산되어졌다¹. 실험적으로는, V(100)의 스핀 분극의 총량이 $\sim 34\%$ 라는 보고가 있다³. 이렇듯 V 표면에서의 자기모멘트에 대해 많은 논란이 있다.

최근에 제일원리계산(VASP, LMTO)에 의하면 V/Mo(100)과 MoV(001)의 표면이 각각 $1.12 \mu_B$, $1.41 \mu_B$ 의 자기모멘트를 가지는 것으로 보고되었다^{4,5}. 그러나 종종 V(001) 표면, Rh(001) 표면 등에 대한 Pseudopotential 방법에 의한 계산 결과에서 보여 주듯이 핵심 전자를 정확하게 처리하지 못하는 결점 때문에 잘못된 자기모멘트 값을 보고 하는 경우가 종종 있다.

본 연구에서는 자성 연구에 가장 적합하다고 알려진 FLAPW를 사용하여 이전의 계산 결과를 점검해 보기로 하였다. 교환 상관 포텐셜 대해서는 general gradient approximation(GGA)를 사용하였다. V 표면의 자기모멘트는 $1.10 \mu_B$ 정도이고, 표면 바로 밑의 Mo의 마그네틱 모멘트는 $-0.18 \mu_B$ 으로 서로 반강자성적으로 결합함을 알 수 있었다. 단일전자 에너지 스펙트럼을 통해 V/Mo(001)에서의 V 자성을 띠는 원인에 대해 논의할 것이고 V/Cr(001)과 MoV(001)의 자성에 대해서도 계산하여 기존에 보고된 V/W(001)에 대한 계산 결과와 비교하여 저차원 V의 자성 원인에 대해 논의하고자 한다.

* 본 연구는 한국과학재단 목적기초연구(Grant No. R01-2004-000-10957-0)지원으로 수행되었음.

References

- ¹I. G. Batyrev et al., Phys. Rev. B **63**, 172420 (2001).
- ²R. Robles et al., J. Quantum Chemistry **91**, 230 (2003).
- ³C. Rau et al., Phys. Rev. Lett. **57**, 2311 (1986).
- ⁴A. V. Ponomareva, L. V. Pourovskii et al., Phys. Rev. B **68**, 064409 (2003).
- ⁵B. A. Hamad, J. M. Khalifeh, J. Phys.:Condens. Matter **13**, 573 (2001).