

# Rh 위층의 자성이 Au(001) 표면층의 완화에 미치는 영향

김동철, 이재일<sup>1\*</sup>

한라대학교 전기전자공학과, 강원도 원주시 한라대 1길, 220-712

<sup>1</sup>인하대학교 물리학과, 인천시 남구 용현동 253, 402-751

\*교신저자: jilee@inha.ac.kr

## 1. 서론

d 전자를 가진 전이금속의 표면층은 일반적으로 표면에서 안쪽으로 완화된다는 것이 실험적으로나 이론적으로 알려져 있다. 최근의 보고된 계산 결과의 예를 들면, Au(001)에서 표면층과 그 다음 층과의 간격이 2.41% [1]나 1.52 % [2] 만큼 줄어드는 것으로 되어 있다.

한편, Au나 Ag 등 귀금속은 다른 물질과의 상호작용이 작기 때문에 3d나 그 표면층 위에 3d 나 4d 비자성 금속의 얇은 층을 올리면 자성을 발현하게 될 가능성이 높을 것으로 생각되었다. 실제로 Ti 이나 V 등의 3d 전이금속이나 Ru, Rh 등의 4d 전이금속 단층을 Au나 Ag(001) 표면 위에 얹었을 때 위층 물질에 따라 0.5 에서 2 보어마그네톤의 자기모멘트를 가진다고 계산되었다[3].

여기서는, Au(001) 위에 Rh 단층을 얹었을 때 Rh단층의 자성이 Au(001) 층들의 완화에 미치는 영향을 전자구조 계산 결과를 이용하여 검토하고자 한다.

## 2. 계산과정 및 방법

먼저, Rh 위층이 없는 순수한 Au(001) 층들의 완화정도를 알기 위해 7층으로 이루어진 Au 판 모형을 고려하였으며 격자상수는 fcc 구조를 가지는 Au의 덩치 격자상수 값을 이용하였다. 층간 완화를 계산하기 위해, FLAPW 방법[3]에 원자힘 계산을 더하여 계산을 수행하였다. Rh위층의 자성이 Au 표면층의 완화에 미치는 영향을 검토하기 위해 자성상태와 비자성상태에 대한 계산을 수행하였다. 교환상관 퍼텐셜로는 Hedin-Lundqvist 의 L(S)DA 를 이용하였다.

## 3. 결과 및 논의

순수한 Au(001) 7층 판에서, 중간 층을 제외한 다른 모든 층들에서 표면에 수직인 방향의 완화를 고려하여 원자힘 계산을 통해 층간 간격의 변화를 계산한 결과를 보면, 표면(S)층과 그 아래 (S-1) 층 사이의 간격은 덩치상태의 값 (3.855 a.u.) 에 비해 2.35% 줄어든 3.764 a.u 였다. (S-1) 층과 (S-2) 층 사이의 간격은 3.860 a.u. 로 덩치상태에 비해 0.14% 늘어났다. (S) 층과 (S-1) 층 사이의 간격이 덩치의 경우에 비해 줄어든다는 결과는 참고문헌 [1]과 [2]의 결과와 부합하지만 (S-1)층과 (S-2)층의 간격이 다소 늘어난다는 것은 참고문헌 [2]의 결과와 부합한다.

Rh 위층의 영향이 Au 밑층 들의 완화에 주는 영향을 알아보기 위해 Au(001) 표면층 사격형 가운데 위에 Rh 원자가 위치한 11층으로 이루어진 판에 대해, 상자성 상태와 강자성 상태에 대한 전자구조 계산과 함께 층들의 완화를 계산하였다. 그 결과 상자성 상태나 강자성 상태 모두에서 순수한 Au 판에서와는 달리, Au 표면층이 바깥쪽으로 완화되어 나갔으며, 완화되어 나간 정도는 강자성상태의 경우 약 0.1 a.u. 로 상자성상태의 경우보다 미세하게 컸다. Rh 위층의 완화정도는 상자성 상태의 경우가 강자성 상태에 비해 0.01 a.u 정도 Au 표면층 쪽에 가까워지는 결과를 얻었다. 이러한 결과는 Rh 위층이 강자성상태나 상자성 상태 모두에서 Au 표면층을 바깥쪽으로 잡아당기는 효과를 주며, Rh 위층이 자성을 가짐에 따라 Au 표면층과 극미하게 밀치는 효과를 준다고 해석할 수 있다. Rh 위층의 원자 당 자기모멘트는 0.79 보어마그네톤으로 표면 층 완화를 고려하지

않은 Bluegel 등의 계산결과 [3]와 거의 일치한다.

## 참고문헌

- [1] L. Guan et al, Solid State Commun. **149**, 1561 (2009).
- [2] V. Zolioni et al, J. Phys.: Cond. Matt. **21**, 095007 (2009).
- [3] S. Bluegel, Phys. Rev. Lett. **68**, 851 (1992).
- [4] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981), and references therein;  
M. Weinert, E. Wimmer, A. J. Freeman, Phys. Rev. B **26**, 4571 (1982).