

## 제일원리 계산에 의한 Fe/Pt (001) 표면의 평형 구조 및 자기이방성 연구

이응관, 최희채, 황유빈, 정용재

한양대학교 신소재공학부

제일원리 계산으로 Fe/Pt (001) 표면의 표면상태도를 계산하고 표면상태도로 부터 얻어진 평형 Fe/Pt (001) 표면구조의 자기이방성에너지를 계산하였음. 계산된 표면상태도로 부터 Fe-rich  $L1_2$  구조와 수직  $L1_0$  구조가 가장 안정한 표면 Fe/Pt (001) 구조임이 밝혀졌음. 제일원리로 계산된 두 구조의 자기이방성에너지를 관측하여 두 구조의 자기용이축이 모두 [001] 방향으로 정렬됨을 확인하였다. 자기이방성에너지가 격자 변화와 표면 형성 중 어떤 원인에 의해 발생하는지 판단하기 위해서 표면구조, 벌크구조, 및 표면구조와 동일한 격자상수를 가진 벌크구조를 비교하였다. 비교 결과에 의해 자기이방성에너지의 주 원인은 표면 형성임이 밝혀졌으며 이를 좀 더 명확히 하기위해 상태밀도함수를 계산하였다. 상태밀도함수 계산 결과 Fe 원자의  $3d_{22}$  오비탈의 페르미 준위 아래에서의 상태가 표면이 형성되면서 증가하는 것을 관측하였으며 이는 [001] 방향으로의 자기이방성을 증가시키는 오비탈이므로 표면 형성에 따른 자기이방성에너지 증가는 Fe 원자의  $3d_{22}$  오비탈에 의함이 판명되었다.

**Keywords:** Fe/Pt (001), ab initio, Magnetic anisotropy, Surface phase diagram