

덩치 및 박막 CrPt₃의 자성 제일원리 계산

First principles calculations of bulk and thin-film magnetic CrPt₃

정태성*, 제갈소영, 권오룡, 임성현, 홍순철

Department of Physics and EHSRC, University of Ulsan, Ulsan, Republic of Korea

본 논문에서는 제일원리 계산방법을 이용하여 계산한 L1₂구조 CrPt₃의 덩치 및 박막의 자성에 대한 계산 결과를 보고하고자 한다. 계산방법으로는 Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)을 슈도포텐셜은 projected augmented wave(PAW)으로 생성하였다. 2차원 브릴루앙 영역 적분을 수행하기 위해 $8 \times 8 \times 8$ k-점 Monkhorst-Pack 그물을 사용하였다. 전자들 사이의 교환상관 작용을 고려하기 위해 Perdew-Burke-Ernzerhof에 의해 정립된 generalized gradient approximation (GGA)방법을 사용하였다. 기저함수로 절단에너지(cutoff energy)는 450eV까지의 평면 파를 사용하였다. 총 에너지 계산결과에 의하면 강자성 상태가 가장 안정하였고 평형 상태에서의 격자상수는 3.925 Å 이었는데 이는 실험치 3.877 Å보다 0.048 Å 컸다. 덩치 구조에서 반강자성 상태 A-type(A-AF), C-type(C-AF), G-type(G-AF)에 대해 계산을 하였는데 강자성 상태에 비해 각각 0.517 eV, 0.591 eV, 0.184 eV 높았다. 7층 박막 구조에서 반강자성 상태 A-type(A-AF), C-type(C-AF), G-type(G-AF)에서는 강자성 상태에 비해 각각 0.615 eV, 0.510 eV, 0.076 eV 높았다. 강자성 상태일 때 Cr의 자기모멘트는 2.748 μ_B 으로 계산되었다. A-type, C-type, G-type 반강자성 상태일 때 Cr 자기모멘트는 각각 2.805 μ_B , 2.794 μ_B , 2.869 μ_B 으로 계산되었다.

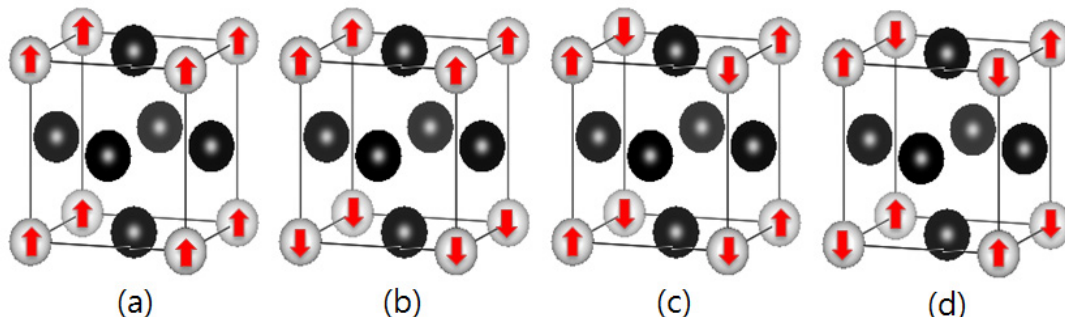


Fig. 1. (a) FM (b) A-AF (c) C-AF (d) G-AF

Table 1. 각 자성 상태일 때 Cr 과 Pt의 자기모멘트

	FM	A-AF	C-AF	G-AF
Cr	2.807 μ_B	-2.805 μ_B	-2.794 μ_B	-2.869 μ_B
Pt ₁	-0.05 μ_B	-0.012 μ_B	-0.01 μ_B	0
Pt ₂	-0.05 μ_B	0	0	0.022 μ_B
Pt ₃	-0.05 μ_B	0	0	0.027 μ_B

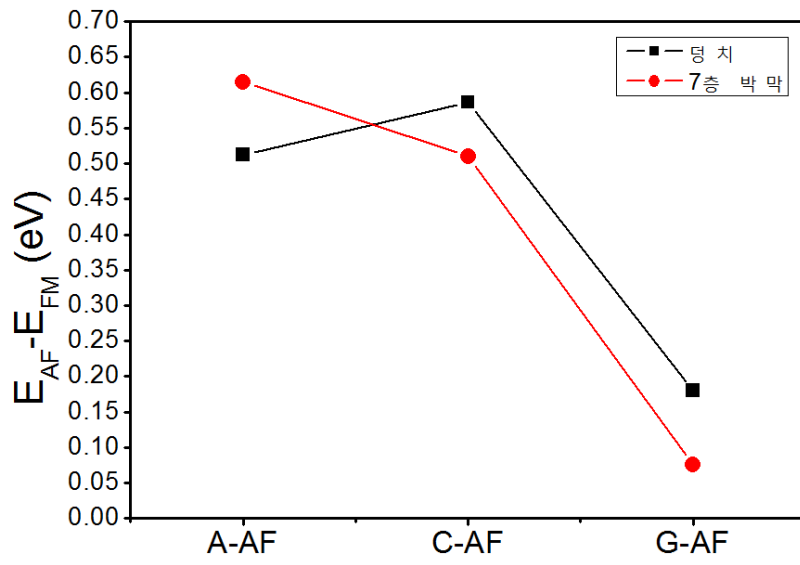


Fig. 2. 총 에너지 차이