

CrPt₃ 합금 박막의 자성에 대한 제일원리계산

정태성*, 제갈소영, 홍순철

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

본 논문에서는 제일원리 계산방법을 이용하여 계산한 L1₂ 구조 CrPt₃의 자성을 보고 하고자 한다. 계산방법으로는 Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)을 이용하였고 교환-상관 전위는 일반화물매근사(GGA: generalized gradient approximation)로 표현하였다. 덩치 CrPt₃ 합금의 총에너지 계산으로부터 구한 격자상수는 3.925 Å이었는데 이는 실험치 3.877 Å보다 0.048 Å 컸고 FM 상태가 가장 안정한 것으로 계산되어 실험 결과와 일치하였다. Table 1은 각 자성에 상태의 Cr 원자 당 총에너지를 강자성 상태를 기준으로 보여 주는데 A-AF, C-AF, G-AF의 에너지는 FM 상태에 비해 0.517 eV, 0.591 eV, 0.183 eV 높았다. 덩치 CrPt₃에서의 Cr의 자기모멘트의 계산치는 FM 2.807 μ_B , A-AF 2.805 μ_B , C-AF 2.794 μ_B , G-AF 2.869 μ_B 로 큰 차이가 없었다.

표면이 CrPt로 끝나는 CrPt₃ 박막과 Pt로 끝나는 박막에 대해 계산된 자성을 계산하여 그 결과를 Table 2와 3에 각각 정리하였다. 일정 두께 이상의 박막은 덩치 CrPt₃와 같은 강자성 상태가 가장 안정하였다. 그러나, CrPt로 끝나는 3층 박막은 C-AF 상태가 가장 안정하였으며, Pt로 끝나는 5층 박막은 G-AF 상태일 때 가장 안정하였다. Pt로 끝나는 박막도 두께가 얇아지면 가장 안정한 G-AF 상태를 포함하여 AF가 안정할 수 있음을 확인하였다.

교환-상관 전위에 대해 국소밀도근사(LDA: local density approximations)를 사용한 경우에 격자 상수 값이 3.845 Å으로 계산되었는데 이는 실험치보다 0.032 Å만큼만 작아 GGA 계산보다는 더 나은 격자 상수 값을 주는 것으로 나타났다. 위에 언급된 계산 결과를 LDA로도 점검 해 볼 필요가 있음을 알 수 있다.

Table 1. 덩치구조에서의 에너지 차이 E_{AF}-E_{FM}(eV/Atom)

	A-AF	C-AF	G-AF
Bulk	0.128 eV	0.147 eV	0.045 eV

Table 2. CrPt로 시작하는 표면 박막에서의 에너지 차이 E_{AF}-E_{FM}(eV/Atom)

	A-AF	C-AF	G-AF
9ML	0.092 eV	0.155 eV	0.021 eV
7ML	0.076 eV	0.064 eV	0.010 eV
5ML	0.074 eV	0.045 eV	0.007 eV
3ML	0.085 eV	-0.008 eV	-0.006 eV

Table 3. Pt로 시작하는 표면 박막에서의 에너지 차이 E_{AF}-E_{FM}(eV/Atom)

	A-AF	C-AF	G-AF
9ML	0.056 eV	0.612 eV	0.614 eV
7ML	0.033 eV	0.031 eV	0.031 eV
5ML	-0.004 eV	-0.007 eV	-0.009 eV