

## Fe/Ni(001)의 자성과 자기이방성에 대한 제일원리계산

이주은\*, 임성현, 홍순철†  
울산대학교 물리학과, 울산 680-749

고밀도의 저장정보매체를 구현하기 위해서는 강한 수직 자기이방성을 가지는 물질이 요구되고 있다. 본 연구에서는 비교적 가격이 저렴한 3d 전이금속인 Fe, Ni 원소만으로 강한 수직 자기이방성을 구현할 수 있는지를 제일원리계산 방법으로 탐색하고자 하였다. 제일원리계산 방법으로는 Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)을 이용하였고 generalized gradient approximation (GGA)으로 교환-상관 전위를 나타내었다. 박막은 총 7층으로, 그림 1과 같이 Ni 5층의 양면에 Fe 단층이 부착된 구조를 택하였다. Ni과 Fe의 결합 길이는 각각 2.489 Å, 2.476 Å으로 차이가 0.52% 정도로 크지 않아 Ni(001) 표면 위에 Fe 원자가 잘 성장할 수 있을 것으로 기대된다. 자기이방성 에너지에 대한 계산결과는 k-point 수에 따라 민감하다. k-point 수에 대한 자기이방성의 수렴성을 확인하였고 수렴된 자기이방성은 약 0.098 meV/cell로 순수한 Fe(001) 표면에 비해 크지 않았다. Fe 표면은 2.758  $\mu_B$ 으로 덩치 Fe의 자기모멘트인 2.2  $\mu_B$ 보다 상당히 증가하였고, Ni은 덩치 Ni의 자기모멘트 0.7  $\mu_B$ 에서 큰 차이가 없었으나 계면에서 박막의 중심으로 가면서 자기모멘트 값이 감소하는 것을 볼 수 있다. 기체 흡착과 응력이 자성과 자기이방성에 미치는 영향도 논의할 계획이다.

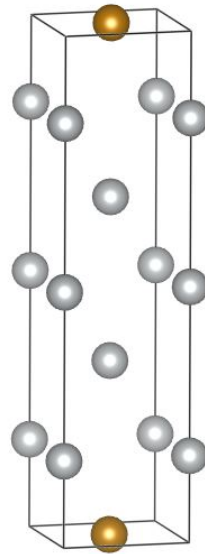


그림 1. Fe/Ni(001)의 원자구조