

계면자성에 미치는 피혼합의 영향: Ni/Fe(100)

울산대학교	홍순철*
인하대학교	이재일
Northwestern University	A.J. Freeman

Effects of Band Hybridization on Interface Magnetism: Ni/Fe(100)

University of Ulsan	S.C. Hong*
Inha University	J.I. Lee
Northwestern University	A.J. Freeman

1. 서론

지난 20년간 표면 및 계면 자성에 관한 연구는 표면 혹은 계면에 극재되어 있는 surface 및 interface states가 자성에 미치는 영향, 피혼합을 통한 표면 및 계면원자의 줄어든 대칭성과 결합수가 자성에 미치는 영향, 계면을 이루고 있는 원자 사이의 결합형태가 자성에 미치는 영향 등을 중심으로 활발하게 진행되어 왔다. 특히 최근의 실험기술의 발달에 힘입어 원하는 물리적 성질을 갖는 준안정상태의 결정구조를 가지는 물질을 적절한 substrate를 선택함으로써, overlayer 형태로 성장시킬 수가 있게 되었다. 본 연구에서는 Heinrich Group¹이 Fe(100)표면 위에 성공적으로 성장시킨 준안정결정구조인 bcc Ni에 대한 전자구조 및 자성을 Local Density Approximation(LDA)에 기초를 둔 Full Potential Linerized Augmented Plane Wave (FLAPW) method²을 사용하여 이론계산을 수행하였다.

2. 계산방법 및 결과

일반적으로 금속차폐길이가 대략 1-2원자층 두께정도이므로 표면 및 계면 효과는 표면 및 계면으로부터 1-2층에 극한될 것으로 기대된다. 그러므로, Fe(100)표면 위에 성장한 Ni 윗층을 5-layer Fe 양면에 monolayer (1Ni/Fe) 및 bilayer Ni(2Ni/Fe)이 부착된 single slab으로 근사하였다. Fe와 Ni 사이에 강한 3-d 피혼합이 예상되므로 Fe와 Ni 사이의 결합길이가 이 계의 자성에 중요한 역할을 할 것이다. 우선 전자구조, 자성을 연구하기 앞서 총에너지계산을 통해 Fe-Ni 결합길이를 결정하였는데, 그 길이는 1Ni/Fe, 2Ni/Fe에 대해 각각 2.39, 2.34 a.u.로 2Ni/Fe 경우가 더 작은 아랫방향의 계면 relaxation을 보여 주었다. 이는 1Ni/Fe의 Ni이 2Ni/Fe에서 보다 큰 자기모멘트를 가져 더 큰 자기 압력을 가지기 때문이다.

LDA에서는 전자 및 스핀밀도가 기본적인 양으로 직접적인 물리적 의미를 지닌다. 그림 1a와 b는 각각 1Ni/Fe와 2Ni/Fe의 스핀밀도를 보여주고 있다. 1Ni/Fe의 경우, 2Ni/Fe와 1Ni/Ag³와는 다르게 Ni의 스핀밀도가 바깥쪽으로 편치면서 비등방성을 보여주고 있다. 1Ni/Fe의 자기모멘트 ($0.72\mu_B$)는 2Ni/Fe의 표면 Ni($0.68\mu_B$)와 1Ni/Ag($0.56\mu_B$)에 비해 증가됨이 밝혀졌다. 이는 Fe와 Ni의 강한 피혼합에 기인하는 듯하다. 계면 Fe의 자기모멘트는 1Ni/Fe와 2Ni/Fe에 대해 각각 $2.62\mu_B$ 와 $2.56\mu_B$ 로 bulk Fe($2.22\mu_B$)에 비해 증가하였다. 가운데층 Fe의 자기모멘트는 $2.38\mu_B$ 로 bulk Fe의 자기모멘트를 재현하지 못하였으나, Ag/Fe(100) 계산결과⁴에 의하면 가운데층이 bulk와 다른 자기모멘트를 가진다 하더라도 계면 Fe의 자기모멘트를 잘 기술할 수 있음이 밝혀졌다.

그림 2는 1Ni/Fe의 상태밀도(DOS)를 층층을 구별하여 보여주고 있다. 왼쪽 그림은 majority spin을 오른쪽 그림은 minority spin에 대한 것이다. 피폭이 Ni/Ag(100)와 비해 아주 넓음을 보여 주는데 이는 Fe substrate와 강한 피혼합이 있음을 나타내는 것이다. 2Ni/Fe의 경우, 표면 Ni의 피폭은 1Ni/Fe에 비해 다시 좁아짐을 알 수 있었다.

3. 결론

1Ni/Fe와 2Ni/Fe계에 대해 LDA에 기초를 둔 총에너지 FLAPW방법으로 이론 계산을 수행하였다. 총에너지 계산결과, 1Ni/Fe와 2Ni/Fe에 대해 Ni-Fe 사이의 결합길이는 2.39, 2.34a.u. 이었다. Ni-Fe 사이에 강한 피혼합이 발견되었고 이 피혼합은 Ni의 자기 모멘트(1Ni/Fe에 대해 0.72

μ_B)를 증가시킴을 밝혔다.

4. 참고문헌

- ① B. Heinrich, A.S. Arrott, J.F. Cochran, C. Lui, and K. Myrtle, J. Vac. Soc. Technol. A4,1376(1986).
- ② E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A.J. Freeman, Phys. Rev. B24, 864(1981) and reference therein.
- ③ Soon C. Hong, A.J. Freeman, and C.L. Fu, Phys. Rev. B39, 5719(1988).
- ④ S. Ohnishi, M. Weinert, and A.J. Freeman, Phys. Rev. B30, 36(1984).

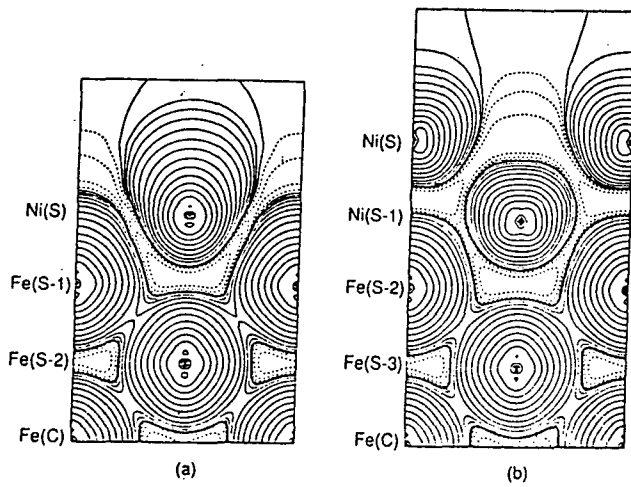


Figure 1. Spin Density of (a)1Ni/Fe(100) and (b)2Ni/Fe(100) in the(110) plane perpendicular to the surface in units of $10^{-4}e/(a.u.)^3$. Each contour line differs by a factor 2.

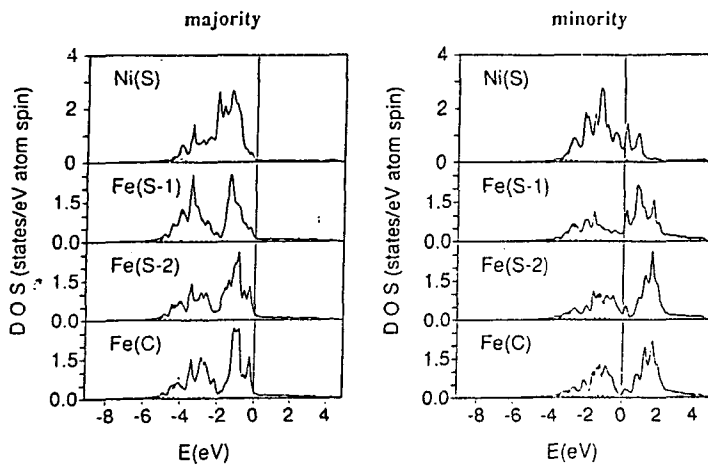


Figure 2. Layer-projected density of states of 1Ni/Fe(100).