

## 한 층의 Ru 이 Ni(001) 위에 얹힌 경우의 계면 Ni 의 자성

인하대학교 물리학과                      조이현, 김인기, 이재일  
 인천대학교 물리학과                      장영록

### Magnetism of Ni(001) surface covered by Ru monolayer

Inha University                      L. H. Cho, I. G. Kim\*, and J. I. Lee  
 University of Incheon                      Y.-R. Jang

#### 1. 서론

최근 4d 전이금속 윗층의 자성에 대해 상당히 많은 연구가 행해지고 있다. 특히, Ru 은 다른 4d 금속과 마찬가지로 덩치상태에서 자성이 없지만, 한 층의 Ru 을 Ag(001)이나 Au(001) 위에 얹었을 경우에 대한 제일원리적 전자구조계산에서는 그 자기모멘트가  $1.5\sim 1.7\mu_B$  로서 매우 큰 자기모멘트를 갖는 것으로 보고되었다 [1]. 그러나, 귀금속이 아닌 Fe 밀층 위에 한 층의 Ru 을 얹은 경우 Ru 은  $0.36\mu_B$  의 자기모멘트를 가지고 계면 철의 경우는 그 값이  $2.09\mu_B$  로 덩치상태에 비해 줄어든 값을 갖는다고 보고되었다 [2]. 마찬가지로 Ni 을 밀층으로 하고 그 위에 불순물로서 Ru 을 얹었을 경우에 대한 제일원리계산에서 Ru 원자는  $2\mu_B$  의 큰 자기모멘트를 가졌다 [3].

본 연구에서는 한 층의 Ru 이 Ni(001) 위에 얹혀진 계에 대해 그 전자구조를 총 퍼텐셜 보강 평면파 (full-potential linearized augmented plane wave; FLAPW) 방법에 의해 계산하고 Ni 밀층과 Ru 윗층의 자성을 논의한다.

#### 2. 계산방법

Ru/Ni(001)에서 계면 Ni 의 자성을 FLAPW 방법에 의해 계산하기 위하여 Ni(001)로 이루어진 5 층 단일판을 구성하고 이 판 양쪽에 각각 한 층의 Ru 을 얹은 모형을 구성하였다.  $1/8$  의 못 줄이는 2 차원 브릴루앙 영역에서 모두 45 개의  $k$ -점에 대해 에너지 고유값을 계산하였고, 각  $k$ -점 당 약 600 개의 기저함수를 이용하였다. 자체 충족적 계산과정에서 입력과 출력의 전자 밀도와 스핀밀도의 제곱 평균 제곱근 차가  $3\times 10^{-4} e/(a.u.)^3$  이하일 때 수렴된 것으로 간주하였다.

#### 3. 결과 및 논의

Ru/Ni(001) 계의 상자성상태와 강자성상태에 대한 총에너지 계산에 의하면 강자성상태의 에너지가  $0.16 eV$  낮았다. 각 층에서 궤도에 따른 전자수와 자기모멘트를 Table 1. 에 제시하였다. 계면 Ni(S-1) 은 중심 층에 비해 자기모멘트 값이 상당히 줄어들어  $0.30\mu_B$  이고, 표면 Ru(S)층은 자성을 갖지 않

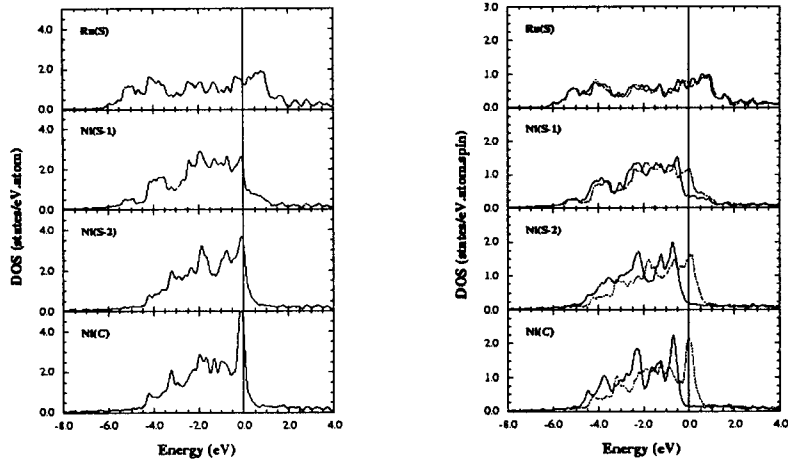


Fig. 1. Layer-projected para- and ferromagnetic density of states (DOS) of Ru/Ni(001)

Table 1 The layer - by - layer magnetic moment and  $\uparrow$ -decomped spin-up and spin-down charges inside the muffin-tin sphere for Ru/Ni(001) .

|         | s    | p    | d    | f    | Total | Moments( $\mu_B$ ) |
|---------|------|------|------|------|-------|--------------------|
| Ru(S)   |      |      |      |      |       |                    |
| up      | 0.14 | 0.10 | 2.80 | 0.02 | 3.06  |                    |
| down    | 0.14 | 0.11 | 2.78 | 0.02 | 3.05  | 0.00               |
| total   | 0.28 | 0.21 | 5.58 | 0.04 | 6.11  |                    |
| Ni(S-1) |      |      |      |      |       |                    |
| up      | 0.21 | 0.21 | 4.26 | 0.01 | 4.69  |                    |
| down    | 0.21 | 0.21 | 3.94 | 0.01 | 4.37  | 0.30               |
| total   | 0.42 | 0.42 | 8.20 | 0.02 | 9.06  |                    |
| Ni(S-2) |      |      |      |      |       |                    |
| up      | 0.20 | 0.18 | 4.43 | 0.01 | 4.82  |                    |
| down    | 0.21 | 0.20 | 3.75 | 0.01 | 4.17  | 0.65               |
| total   | 0.41 | 0.38 | 8.18 | 0.02 | 8.99  |                    |
| Ni(C)   |      |      |      |      |       |                    |
| up      | 0.20 | 0.18 | 4.44 | 0.01 | 4.83  |                    |
| down    | 0.21 | 0.20 | 3.73 | 0.01 | 4.15  | 0.68               |
| total   | 0.41 | 0.38 | 8.17 | 0.02 | 8.98  |                    |

고 있다. 각 층에 대한 상자성 및 강자성 상태밀도를 Fig. 1.에 나타냈다. Ru-4d 와 계면 Ni-3d 띠 사이의 매우 강한 혼성이 관찰된다. Ru/Ni(001) 계의 표면 Ru 의 비자성층 형성과 Ni(S-1) 층의 매우 큰 자기모멘트 감소의 원인으로 여겨진다.

## References

- [1] S. Bluegel, Phys. Rev. Lett. **68**, 851 (1992); R. Wu and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **45**, 7222 (1992).
- [2] A. J. Freeman and R. Wu, J. Magn. Magn. Mater. **100**, 497 (1991).
- [3] B. Nonas, K. Wildberger, R. Zeller, and P. H. Dederichs, and B. L. Gyorffy, Phys. Rev. B **57**, 84 (1998).