

## Ni/Ta(110) 계의 전자 구조와 자성

*인천대학교		장영록
인하대학교	김인기	이재일
한라대학교		김동철
울산대학교		홍순철

## ELECTRONIC STRUCTURE AND MAGNETISM OF Ni/Ta(110)

University of Incheon Y. -R. JANG  
 Inha University I. G. KIM and J. I. LEE  
 Halla Institute of Technology D. C. KIM  
 University of Ulsan S. C. HONG

## 1. 서론

귀금속(noble metal)이나 전이 금속(transition metal) 밑층(substrate) 위에 놓여진 금속 옷층(metal overlayer)의 자성(magnetism) 연구는 오랫동안 많은 관심의 대상이 되었다 [1]. 특히, 전이 금속을 옷층으로 사용한 경우에 대해서 많은 연구가 있었다 [2]. 전이 금속 중에서 탄탈(tantalum; Ta)은 반응성이 적어서 옷층 금속과 잘 섞이지 않기 때문에 좋은 밑층이 될 수 있다고 알려져 있다 [3]. 니켈(nickel; Ni)이 부착된(deposited) Ta(110) 계에 일산화탄소(carbon monoxide; CO)를 화학 흡착(chemisorption) 시킬 때의 옷층 구조(overlayer structure)와 전자 밀도(electronic density)를 각 분해 광전자 분광법(angle-resolved photoemission spectroscopy; ARPES) 방법을 이용해서 연구한 경우는 있었지만 [4], 이 계에서 자성에 대한 연구는 아직 없었다. 본 연구에서는 총 퍼텐셜 선형 머핀-틴 보강 평면파(full-potential linearized augmented plane wave; FLAPW) 방법을 이용해서 [5] Ni/Ta(110) 계의 전자 구조(electronic structure)와 자성을 이론적으로 연구하였다.

## 2. 계산 방법

Ta(110) 밑층은 다섯 층의 단일 판 모형(single slab model)을 사용했고, 살창 상수(lattice constant)는 실험 값을 사용했다 [6]. 밑층 판 양쪽으로 한 층씩 Ni 원자들을 빈 자리(hollow site)에 놓고 계산했으며, 옷층과 밑층 사이의 간격은 각 물질 살창 상수의 평균 값으로 고정하였다. 핵심 상태(core states)는 완전하게 상대론적(fully relativistic)으로 취급했고, 가전자 상태(valence states)는 반 상대론적(semirelativistic)으로 계산했다. 스핀 분극된(spin-polarized) 계산에 사용된 교환-상관 퍼텐셜(exchange-correlation potential)은 von Barth-Hedin 모양을 이용했다 [7]. 원자 하나에 대략 100 개의 기저 함수(basis function)를 사용해서 파동 함수(wave function)를 전개했고, 격자 조화 함수(lattice harmonics) 전개에는  $l$  값을 8 까지 사용해 전자 밀도, 퍼텐셜, 파동 함수 등을 전개했다.  $k$  공간에서의 적분은 못줄이(irreducible) 2 차원 Brillouin 영역에서 20 개의  $k$  값들에 대한 합으로 구했다.

### 3. 결과 및 고찰

각 층에서 머핀-틴 구(muffin-tin sphere) 안에 있는 다수 스핀(majority-spin)과 소수 스핀(minority-spin) 전자들의 개수와 총 전자 수, 그리고 자기 모멘트(magnetic moment) 값 등을 계산해서, 그 결과를 Table I에 나타냈다. 강자성(ferromagnetic) 상태의 에너지가 상자성(paramagnetic) 상태 보다 약 2 eV 정도 낮아서 옷층 Ni이 자성을 가지는 것으로 나타났다. 그렇지만, 표면 Ni 원자의 자기 모멘트 값은  $0.1 \mu_B$  정도로서 덩치(bulk) 상태의 값 ( $0.56 \mu_B$ )이나 fcc Ni(110) 표면의 값( $0.63 \mu_B$ ) [8] 보다 훨씬 작았다. 따라서 옷층 Ni의 풀림(relaxation)을 고려할 경우 Ni 옷층의 자성 유지 여부는 아직 확실하지 않으며, 이에 대한 계산은 현재 진행 중이다.

Table I. The  $l$ -decomposed number of majority- and minority-spins, number of total electrons, and magnetic moments of each layer ( $\mu_B$ ) inside the muffin-tin spheres.

layer	spin	$s$	$p$	$d$	total	magnetic moment
Ni(S)	↑	0.15	0.06	4.15	4.37	0.10
	↓	0.15	0.06	4.05	4.27	
Ta(S-1)	↑	0.15	0.11	1.05	1.32	0.00
	↓	0.15	0.11	1.05	1.32	
Ta(S-2)	↑	0.15	0.12	1.08	1.37	0.00
	↓	0.15	0.12	1.08	1.37	
Ta(C)	↑	0.15	0.12	1.09	1.38	0.00
	↓	0.15	0.12	1.09	1.38	

### 4. 참고 문헌

- [1] A. J. Freeman and Ru-qian Wu, *J. Magn. Magn. Mater.* **100**, 497 (1991).
- [2] 홍순철, 이재일, *한국자기학회지* **5**, 315 (1995).
- [3] F. Strisland, S. Raaen, A. Ramstad, and C. Berg, *Phys. Rev. B* **55**, 1391 (1997).
- [4] M. W. Ruckman, M. Strongin, and X. Pan, *J. Vac. Sci. Technol. A* **5**, 805 (1987).
- [5] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **24**, 864 (1981); M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **26**, 1629 (1982).
- [6] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed. (Wiley & Sons, New York, 1996), p. 23.
- [7] U. von Barth and L. Hedin, *J. Phys. C* **5**, 1629 (1972).
- [8] H. Krakauer, A. J. Freeman, and E. Wimmer, *Phys. Rev. B* **28**, 610 (1983).