

Ni 단층이 삽입된 비자성 4d 및 5d 전이금속 Rh, Pd 과 Pt 박막에서 자기모멘트 진동에 관한 제1원리 연구

인하대학교 김 인 기*, 김 선 회, 위 선 미, 이 재 일
인하대학교, 부평여자고등학교 이 상 조

A First-principles Study on the Oscillation of Magnetic Moments in the
Nonmagnetic 4d and 5d Transition Metal (Rh, Pd, and Pt) Thin Films with an Inserted
Ni Monolayer

Inha University I. G. Kim*, S. H. Kim, S. M. Wi and J. I. LEE
Inha University and Bupyoung Girl's High School S. J. LEE

1. 서 론

비자성 금속에 자성 불순물이 첨가되었을 경우 비자성 전이금속의 전도전자들이 불순물에서 멀어지면서 감쇠 진동하는 형태로 스핀분극 된다는 사실은 매우 잘 알려져 있으며, 그 진동주기는 Fermi 파동벡터 크기(k_F)의 역수의 절반이다[1]. 비자성 금속 내의 자성 불순물 사이의 상호작용은 전도성 전자의 감쇠 진동하는 스핀 분극에 바탕을 둔 RKKY 교환 상호작용[2]으로 잘 기술된다. 지난 10년에 걸쳐 관심을 끌고있는 자성 다층 박막에서 보이는 층간 교환결합의 형태를 RKKY 교환 상호작용으로 기술하려는 초기의 시도는 진동교환결합의 원인을 설명할 수는 있었으나, 전도전자를 자유전자로 근사하는 경우 교환결합의 세기와 진동 주기가 실험과 벗어날 수 있음이 지적되었다. 또한, Stiles는 다층 박막의 비자성 전이금속 매개 층의 Fermi 면에서의 특정한 확장 벡터가 자성 다층 박막에서 층간 교환 상호작용에 중요한 역할을 한다는 점을 보여주었다 [3]. 비자성 전이금속에서의 Fermi 면의 세부 구조에 의해 교환결합이 받는 영향은 비자성 전이금속에 자성 불순물이 2차원 면 형태로 삽입되었을 경우 비자성 전이금속의 전도성 전자를 더 이상 자유전자로 취급할 수 없다는 점을 알려준다. 따라서, 비자성 전이금속에 2차원 자성 불순물이 삽입되었을 경우의 자기모멘트의 변화에 대한 정확한 이해가 필수적이다.

본 연구에서는 총 퍼텐셜 선형 보강 평면 파(full-potential linearized augmented plane wave; FLAPW) 방법[4]을 이용하여 비자성 4d 및 5d 전이금속인 Rh, Pd, 및 Pt에 자성 전이금속 Ni 단층이 삽입되었을 경우의 자기모멘트의 진동 현상을 이론적으로 연구하였다.

2. 계 산 방 법

Ni(001) $p(1 \times 1)$ 단층면 양쪽에 Rh, Pd, 및 Pt를 4층씩 덮은 단일판을 구성하였다. $p(1 \times 1)$ 2차원 살창상수는 fcc Ni의 살창상수[5]로부터 4.7089 a.u.로 택하였고, Rh, Pd, 및 Pt 사이의 층간 간격은 이들의 fcc 단위세포를 Ni(001) 면에 일치하도록 변형한 fct의 c-축의 절반인 4.1862 a.u., 4.4813 a.u. 와 4.5979 a.u.으로 각각 택하였다. Ni과 Rh, Pd, Pt 사이의 간격은 위에서 결정한 간격의 평균으로 정하였다. 핵심 상태(core states)는 완전하게 상대론

표 1 Calculated magnetic moments (in units of μ_B) inside each MT sphere.

System	Ni(C)	S-3	S-2	S-1	S
4Rh/1Ni/4Rh(001)	0.341	0.127	0.038	-0.005	-0.003
4Pd/1Ni/4Pd(001)	0.750	0.176	0.051	-0.008	-0.025
4Pt/1Ni/4Pt(001)	0.590	0.147	0.020	-0.005	0.011

적(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 [6]. 원자 하나에 대략 100 개의 기저 함수(basis function)를 이용해서 파동 함수(wave function)를 전개했고, 격자 조화 함수(lattice harmonics)에 대해서는 l 값을 8 까지 사용해 전자 밀도, 퍼텐셜, 파동 함수 등을 전개했다. k 공간에서의 적분은 못줄이는(irreducible) 2 차원 Brillouin 영역에서 36 개의 k 값들에 대한 합으로 구했다. 전하와 스핀의 제곱-평균-제곱근(root-mean-square) 차이가 모두 1×10^{-4} electrons/a.u.³ 이하일 때를 수렴된 것으로 간주하였다.

3. 결과 및 고찰

표 1에 각 층별로 계산된 자기모멘트를 나타내었다. Ni(C) 층의 경우 Rh에 삽입된 경우에는 자기모멘트의 크기가 덩치 fcc Ni의 그것($0.6 \mu_B$)[7]과 비교하여 감소하였고, Pd에 삽입된 경우에는 증가하였으며, Pt에 삽입된 경우에는 덩치 Ni의 값을 유지하였다. 모든 경우 Ni(C) 층에서 두 층 이후에 자기모멘트의 부호가 바뀌는 것을 알 수 있다. S-3 층의 자기모멘트의 크기는 평균 $0.15 \mu_B$ 이며, S-1 층의 자기모멘트는 평균 $0.036 \mu_B$ 으로 계산되었다. Pt(S) 층의 자기모멘트는 Rh(S) 및 Pd(S)와는 반대로 다시 양(+)으로 분극된 것을 알 수 있다. 이러한 현상은 Pt 층 사이의 간격이 넓기 때문에 Pt(S) 층이 교환작용 진동의 한 주기 바깥에 위치하기 때문으로 여겨진다.

4. 참고 문헌

- [1] K. Yosida, *Theory of Magnetism* (Springer, Berlin, 1996) Chap. 15.
- [2] M. A. Ruderman and C. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954); T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16**, 4558 (1956); K. Yosida, Phys. Rev. **106**, 893 (1957).
- [3] M. D. Stiles, J. Magn. Magn. Mater. **200**, 322 (1999).
- [4] 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).
- [5] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed. (Wiley & Sons, New York, 1996), p. 23.
- [6] U. von Barth and L. Hedin, J. Phys. C **5**, 1629 (1972).
- [7] H. Krakauer, A. J. Freeman, and E. Wimmer, Phys. Rev. B **28**, 610 (1983).