

## 구리(001) 표면위에 올려진 철 나노선의 전자구조와 자성

인하대학교 김영구,\* 김인기, 이재일  
 인천대학교 장영록

The electronic structures and magnetism of monatomic Fe nanowires  
 on the Cu (001) surface

Inha University Y. J. JIN,\* I. G. KIM and J. I. LEE  
 University of Incheon Y. -R. JANG

## 1. 서 론

전자소재는 차원이 줄어들고 나노영역으로 감에 따라 기존에는 볼 수 없었던 새로운 물리적특성을 나타낸다. 일차원 나노선은 나노전자 소자를 이루는 중요한 요소로서 고밀도 자기기록매체나 나노발광소자 등으로 매우 중요한 응용 가능성이 기대되고 있다. 3d 강자성 전이금속의 경우 준2차원인 표면에서의 자성은 고체내부 보다 20~30% 증가된 자기모멘트를 가지고 있다 [1]. 수도포텐셜을 이용한 계산에 따르면 Cu(117) 표면에 놓인 철 나노선의 위치에 따라 철의 자기모멘트의 값은  $2.80\mu_B$  로부터  $2.96\mu_B$  사이에서 변화하였다 [2]. 이 논문에서는 일차원 철 나노선을 Cu(001)표면 위에 놓았을 때 전자구조와 자성에 대한 기초물성을 이해하기 위해 총 퍼텐셜 선형보강 평면파 (full-potential linearized augmented plane wave; FLAPW) 방법[3]을 이용하여 계산을 수행하였다.

## 2. 계산 방법

다섯층으로 이루어진 단일판 Cu(001) 표면의 양면에 철 나노선을 부착하였다. 철 나노선은 y-축에 평행하게 철 나노선이 놓여있고 이들 나노선은 x-축으로 주기적으로 놓여있도록 하였다. 철 나노선에서 두 철 원자 사이의 거리는  $3.61\text{\AA}$ , 그리고 철 나노선 사이의 거리는  $3\times 3.61\text{\AA}$  로 하였다. 이때 철 원자는 구리원자로 이루어진 정사각형의 가운데에 위치하도록 하였다. 자유롭게 떠 있는 철 나노선과 구리표면 층 사이의 거리( $1.80\text{\AA}$ )는 bcc 철의 원자당부피가 유지되도록 결정하였다. 전자구조를 얻기 위해 FLAPW 방법을 이용하여 Kohn-Sham 방정식을 자체 충족적으로 풀었다. 각 k-점당 약 3400 개의 기저함수를 사용하여 1/4의 못줄이는 2차원 브릴루앙 영역에서 12 개의 k-점에 대해 에너지 고유값을 계산하였다. 핵심전자는 완전 상대론적으로 다루었고 가전자상태는 준 상대론적으로 다루었다. 머핀-턴 구 내의 전하와 퍼텐셜을 기술하기 위해 각운동량  $l\leq 8$  까지의 격자조화함수를 이용하였다.

## 3. 결 과 및 고 찰

Cu(001) 표면위에 놓여진 철 나노선의 자기모멘트는  $3.11\mu_B$ 로 계산되었다. 이 값은 철 나노선이 Cu(117) 테라스의 윗면에 놓였을 때의 자기모멘트 값인  $2.96\mu_B$  이나 철 단층이 Cu(001) 표면 위에 부착되었을때의 자기모멘트 값인  $2.85\mu_B$  [4]보다 큰 값을 가지나, 자유롭게 떠 있는 철 나노선이 갖는 자기모멘트 값인  $3.39\mu_B$  보다는 작고 자유롭게 떠 있는 철 단층[5]의 값 ( $3.20\mu_B$ )에는 매우 근접함을 보여주었다. 그림 1 에서 보듯이 철 원자로부터 많은 양의 sp-전자들이 위스핀으로 분극되어 진공영역으로 분출되고 있고, 철 원자로부터 가장 이웃한 구리 원자도 위스핀으로 분극되어 있다. 그러나 다음 인접한 구리원자에서의 스핀분극은 무시될 수 있음을 볼 수 있다. 그림 1 (a) 에서 보듯이 나노선에 수직인 단면에서 철 원자와 가장 이웃한 구리의 스핀 분극된 궤도는 철 원자와 구리 원자를 잇는 방향으로 정렬하려는 경향을 갖고 있다. 철원자를 지나면서 나노선에 평행인 단면(그림 1 (b))에서 철 원자의 위스핀으로 분극된 sp-전자는 나노선을 따라 많이 퍼져있다. 이러한 특징은 Fe (001)의 (110) 단면[6]에서의 스핀밀도의 모양과 매우 유사하다.

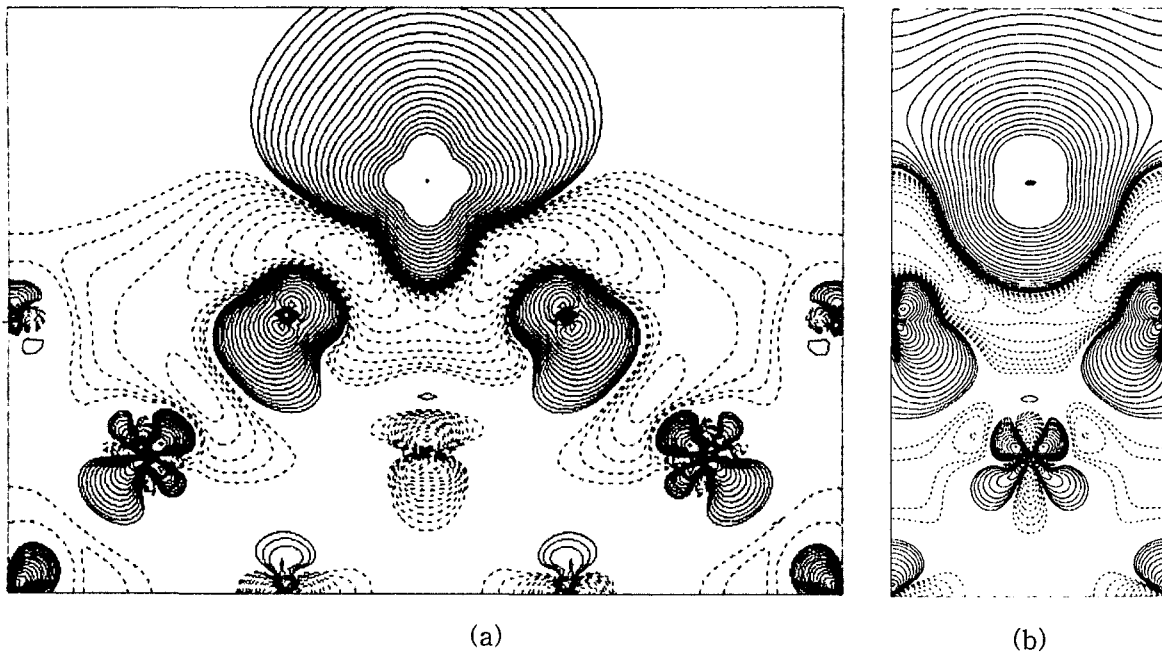


그림 1. (a) 철원자를 지나면서 나노선에 수직인 단면과 (b) 철원자를 지나면서 나노선에 평행인 단면에서 스핀밀도의 모양, 실선과 점선은 각각 위-스핀과 아래-스핀 밀도를 나타낸다. 제일 낮은 각 스핀의 선의 값은  $\pm 1 \times 10^{-4}$  (electrons/a.u.<sup>3</sup>)을 나타내고 그 다음 선들은  $\sqrt{2}$  배로 커진다.

이 연구는 과학기술부 2003년도 나노핵심기반기술개발사업 지원으로 수행되었습니다.

#### 4. 참 고 문 헌

- [1] E. Wimmer, A. J. Freeman, and H. Krakauer, *Phys. Rev. B* **30**, 3113 (1984).
- [2] D. Spišák, and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **65**, 235405 (2002).
- [3] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **24**, 864 (1981) and references there in; M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **26**, 1629 (1982).
- [4] C. L. Fu, and A. J. Freeman *Phys. Rev. Lett.* **35**, 925 (1987).
- [5] C. L. Fu, A. J. Freeman, and T. Oguchi, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2700 (1985).
- [6] S. Ohnishi, A. J. Freeman, and M. Weinert, *Phys. Rev. B* **28**, 6741 (1983).