

유한한 Co 나노사슬의 자기적 성질 (Magnetic properties of finite Co nanochains)

부경대학교 물리학과 홍지상

1. 서론

최근에 나노구조에서 일어나는 여러 가지 물리적 성질에 대한 연구가 아주 활발하게 진행이 되고 있는데 특히 나노자성체에서 나타나는 여러 가지 실험적 결과들은 순수하게 물리적인 측면은 물론 나노자성 소자의 응용이라는 측면에서도 많은 관심의 대상이 되고 있다. 이러한 나노자성체에서 일어나는 자기적 성질에 대한 연구에서도 가장 기본적이며 중요한 물리적인 양은 고밀도 자기소자응용 과도 아주 밀접하게 연관되어있는 자기이방성이다. 본 연구에서는 Co 원자의 개수가 2개에서 7 개로 이루어진 길이가 유한한 1차원 나노사슬 구조에서 일어나는 자기이방성 및 여러 가지 자기적 성질이 사슬의 길이에 따라서 어떻게 달라지는가에 대한 이론적인 계산을 하였다.

2. 이론적인 연구방법

먼저 우리가 구하고자 하는 물리적 구조의 전자구조를 알아내는 것이 일차적인 과제가 되는데 물리계의 전자구조는 여러 가지 제일원리 계산방법중에서도 가장 정확하다고 알려져 있는 full potential linearized augmented plane (FLAPW) 방법을 이용하여 구한다. 이때 사용된 교환상호작용은 GGA 방법을 사용하였고 파동함수의 전개를 위해서 각운동량은 $l=8$ 까지 값을 택하고 energy cutoff 는 225 Ry 값을 사용하여 계산을 하였다. 우리가 구하고자 하는 나노사슬은 z -방향으로 정렬되어 있다고 가정을 하고 주기적 경계조건을 주기위해서 격자상수는 13 atomic unit을 사용하였다. 이렇게 얻어진 전자구조를 바탕으로 자기이방성은 torque 방법을 사용하여 계산을 하였다.

3. 결과

계산결과 우선 전자의 스핀에 의한 자기모멘트의 크기가 bulk 상태 혹은 2차원 단층(monolayer) 상태에서 보다 아주 크게 나타남을 알았고 이러한 원인은 1차원 나노구조가 되면서 주변의 배위수가 줄어들기 때문에 나타나는 현상으로 생각을 한다. 한편 흥미롭게도 스핀에 의한 자기모멘트의 크기는 원자의 위치 및 나노사슬의 크기에 크게 영향을 받지 않지만 각운동량에 의한 자기모멘트의 크기는 상대적으로 원자의 위치 및 나노사슬의 크기에 영향을 받는다는 이론적인 결과를 얻었다. 우리가 구하고자 하는 가장 중요한 자기이방성에 대한 계산결과 자기이방성의 크기가 사슬의 길이에 따라서 아주 크게 영향을 받는다는 결과를 얻었고 특히 스핀의 정렬방향도 나노사슬의 크기에 따라서 달라진다는 아주 흥미로운 결과를 얻었다. 이러한 자기이방성을 간단하게 이해하기위해서 각운동량의 이방성도 계산을 하여 자기이방성과의 관계도 연구를 하였다. 그리고 자기적 성질을 실험적으로 구하는데 많이 이용되는 magnetic circular dichroism 의 sum rules 이 과연 나노구조에서도 적용이 되는가에 대한 이론적인 연구를 하였다.

4. 결론

유한한 길이의 Co 1차원 나노사슬의 자기이방성 및 여러 가지 자기적 성질에 대한 이론적인 연구결과 자기모멘트 및 스핀의 정렬방향이 나노사슬의 크기에 따라서 달라지는 사실을 알았고 특히 양자역학적인 2차 섭동론의 결과 나오는 아주 간단한 자기이방성과 각운동량의 비례관계는 적용될수 없음을 알았고 따라서 나노자성체의 자기이방성을 이해하기 위해서는 제일원리에 의한 계산이 반드시 필요하다는 결과를 얻었다. 한편 나노구조에서도 sum rules 은 아주 잘 적용된다는 이론적인 결과를 보였다.

5. 참고문헌

[1] P. Gambardella et al, Nature V416 301 (2002)

[2] N. Nilius et al, Science V297 1853 (2002)

[3] Jisang Hong and R.Q. Wu, Phys. Rev. B (rapid comm.) V67 020406 (2003)