

Pd 나노 선의 자성과 구조 계산

장영록^{1*}, 이재일²

¹인천대학교 물리학과, (인천 남구 도화동 177, 인천 402-749)

²인하대학교 물리학과 (인천 남구 용현동 253, 인천 402-751)

1. 서론

덩치 상태에서 자성을 가지는 전이금속인 Fe, Co, Ni 등은 표면이나 계면 상태가 되면 자기모멘트가 더 커지며, 덩치 상태에서 자성을 가지지 않는 전이금속들 중에서도 어떤 금속들은 표면 또는 계면에서 자성을 가질 수 있게 된다는 이론 및 실험 결과들이 보고되었다 [1]. 표면에서 일차원 선으로 차원을 더 낮추면 일반적으로 자성금속계는 결합거리가 더 짧아지고 자기모멘트는 더 커지는 것으로 계산되었다 [2]. 귀금속인 Ag과 Au의 경우에도 지그재그 구조가 직선 구조보다 더 낮은 에너지를 가진다는 계산 결과가 있었다 [3].

Pd 금속은 Ni과 같은 족에 속하는 4d 전이금속으로서 덩치 상태는 물론 표면 상태에서도 자성을 가지지 않는 것으로 보고되었지만 [2], 나노 선 구조가 되면 자성을 가진다는 보고가 있었다 [2, 4]. 본 연구에서는 Pd 금속 나노 선의 자성과 구조적 성질을 연구하기 위해 제일원리 계산 방법을 이용하여 직선 구조와 지그재그 구조에 대한 총에너지 계산을 수행하였다. 각각의 경우에 안정된 자성 상태에서 결합거리와 결합각도 그리고 자기모멘트를 계산하여 비교하였다.

2. 계산방법

그림 1에 나타낸 것처럼 직선 구조와 지그재그 구조를 가지는 Pd 나노 선에 대해 결합거리와 결합각도를 변화시키면서 총에너지를 계산하였다. 계의 총에너지가 가장 낮은 안정된 구조의 경우에 총에너지, 결합거리, 결합각도, 자기모멘트를 결정하였다.

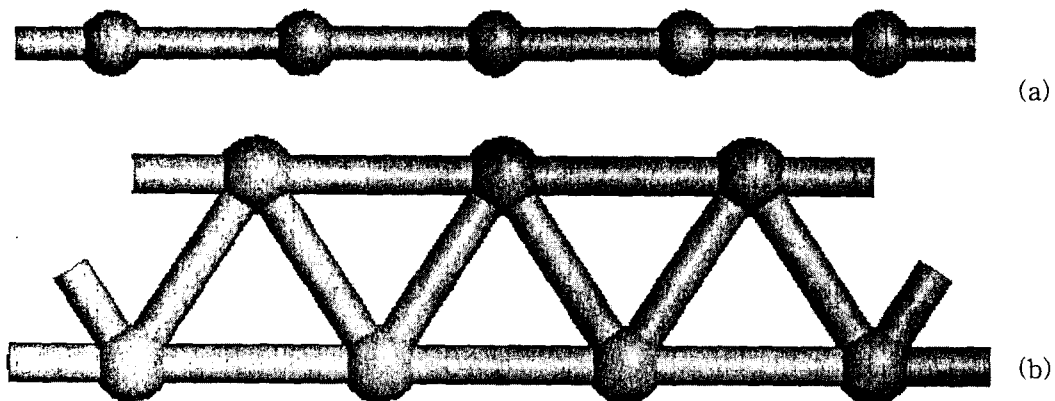


그림 1. Pd 나노 선 (a) 직선 구조 (b) 지그재그 구조

에너지 계산을 위해서 제일원리 계산 방법 중의 하나인 VASP 코드를 이용하였다 [5]. 교환상관퍼텐셜은 PW91의 일반기울기 근사를 사용했고 [6], 240 eV의 끊음에너지보다 작은 평면파들을 이용했으며, 총에너지의 차이가 10^{-5} eV보다 작을 때 수렴된 것으로 간주하였다. 나노 선 사이에 상호작용이 없도록 하기 위해서 서로 12 Å 떨어진 초세포 구조를 잡아 계산을 하였고, 브릴루앙 기약영역에서 21 개의 k-점을 사용하였다 [7].

3. 계산결과와 고찰

단위세포 안에 2 개의 원자가 있는 경우에 계산한 계의 총에너지를 표 1에 나타냈다. 직선 구조와 지그재그 구조 각각의 경우에 반자성, 강자성, 상자성 등 서로 다른 자성 상태에 대해서 총에너지를 계산하여 안정된 구조와 자성 상태를 결정하였다. 표 1에서 보듯이, 모든 경우에 지그재그 구조가 항상 더 낮은 총에너지를 가지는 것을 알 수 있다. 직선 구조는 강자성 상태가 안정된 구조로서 자성을 가졌지만, 지그재그 구조의 경우에는 상자성 상태가 더 에너지가 낮았다. 덩치 또는 표면 상태와 마찬가지로 지그재그 구조는 자성을 가지지 않는 것으로 계산되었다.

표 1. Pd 나노 선의 구조와 자성 상태에 따른 총에너지 계산 결과 (단위: eV).

| 구조 / 자성 | 반자성 | 강자성 | 상자성 |
|---------|-------------|-------------|-------------|
| 직선 구조 | - 5. 445940 | - 5. 452244 | - 5. 445949 |
| 지그재그 구조 | - 6. 975064 | - 6. 975043 | - 6. 975082 |

안정된 구조에 대해서 결합거리, 결합각도, 자기모멘트를 계산한 결과를 표 2에 나타냈다. 비교를 위해서 다른 방법으로 계산한 앞선 결과도 함께 나타냈다 [2, 4]. 표 2에서 알 수 있는 것처럼, 직선 구조의 경우에 우리의 계산 결과는 다른 앞선 계산 결과들과 비슷한 값을 보여주고 있다.

표 2. Pd 나노 선의 결합거리 (Å), 결합각도 (°), 자기모멘트 (μ_B) 계산 결과.

| 구조 / 구조, 자성 | 결합거리 | 결합각도 | 자기모멘트 | |
|-------------|---------|---------------|--------|---------------|
| 직선 구조 | present | 2. 45 | - | 0. 52 |
| | [2] | 2. 44 | - | 0. 53 |
| | [4] | 2. 50 / 2. 56 | - | 0. 45 / 0. 70 |
| 지그재그 | present | 2. 66 | 57. 32 | - |

완전한 일차원 직선 구조의 경우에는 파이얼스 불안정 때문에 직선 구조를 유지하면서 원자들 사이의 거리가 교대로 변하는 구조 변화가 있다고 알려져 있는데, 우리의 계산 결과는 직선 구조의 유지 보다는 지그재그 구조로 변화하는 것이 더 가능성이 있음을 보여주고 있으며 이와 동시에 표면 또는 덩치 상태와 마찬가지로 자성을 잃는다는 것을 나타내고 있다.

4. 참고문헌

- [1] A. J. Freeman and R. Wu, *J. Magn. Magn. Mater.* **100**, 497 (1991).
- [2] T. Nautiyal, T. H. Rho, and K. S. Kim, *Phys. Rev. B* **69**, 193404 (2004).
- [3] M. Springborg and P. Sarkar, *Phys. Rev. B* **68**, 045430 (2003); D. Sánchez-Portal, E. Artacho, J. Junquera, P. Ordejón, A. García, and J. M. Soler, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3884 (2004).
- [4] A. Delin, E. Tosatti, and R. Weht, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 057201 (2004); M. Wierzbowska, A. Delin, and E. Tosatti, *Phys. Rev. B* **72**, 035439 (2005).
- [5] G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **47**, 558 (1993); G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
- [6] J. P. Perdew and Y. Wang, *Phys. Rev. B* **46**, 6671 (1992).
- [7] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).