

주기적 결함을 가진 철 단층의 전자구조와 자성

Kalpana Landge, Beata Bialek, 이재일*

인하대학교 물리학과

Electronic Structure and Magnetism of Fe Monolayer with Periodic Defects

Kalpana Landge, Beata Bialek, and Jae Il Lee

Department of Physics, Inha University, Incheon 402 751

1. 서론

불순물이나 결함은 물질의 전기적, 자기적 성질은 물론 광학적, 열적 성질 등 다양한 물리적 성질에 영향을 미친다. 덩어리 고체 내에 결함이 존재할 때의 컬러 센터 등 광학적 성질이나 전기전도성 등에 대한 연구는 오랜 동안의 관심사였으나, 결함과 자성을 연관시키는 연구는 아직 활발하지 않은 편으로 알고 있다. 본 연구에서는 철 단층에서 점 결함, I 자, + 모양, 그리고 H 자 모양의 결함이 주기적으로 존재할 때의 자성을 제일원리 전자구조 계산 방법을 통하여 연구하였다.

2. 모형 및 계산 방법

Fe 단층 내에 주기적 결함을 만들기 위해 7×7 로 이루어진 정사각형 모양의 단위세포가 주기적으로 배열된 단층을 생각하고, Fig. 1, 2, 3, 4 와 같이 이 단위세포 가운데에 각기 점 결함, 3개의 원자자리 결함으로 이루어진 I 자 모양의 결함, 5개의 원자자리 결함으로 이루어진 + 모양의 결함, 7개의 원자자리 결함으로 이루어진 H 자 모양의 결함을 가지고 있는 계를 고려하였다. 이들 네 결함계의 전자구조를 계산하기 위하여 all electron FLAPW (Full potential linearized augmented plane wave) 방법을 이용하였으며 [1] 교환상관 퍼텐셜에 대해서는 일반가울기 근사 (GGA) [2] 를 이용하였다. 결함 주위 원자들의 자기모멘트는 각각 2.2 보어의 반지름을 가진 머핀-틴 구내에서 스핀 위와 아래의 전자수 차이로 계산하였다.

3. 결과 및 논의

네 가지 종류의 결함계에서 전자구조를 계산하고 이를 바탕으로 모든 원자들의 자기모멘트를 계산하였다. 이중 관심을 가질 만한 결함 주위 원자들의 자기모멘트 값을 비교 검토하기로 한다.

먼저, Fig. 1의 점 결함 주위 원자들에 대해 번호로 표시한 바와 같이 결함에서 가장 가까운 원자 1의 스핀모멘트는 3.09 보어 마그네톤으로 결함에서 먼 다른 원자들의 자기모멘트 값인 2.99 보어 마그네톤 보다 증가하였다. 결함자리로부터 그 다음 이웃 원자인 원자 2의 자기모멘트는 2.97로 결함으로부터 먼 다른 원자들 보다 미세하게 줄었는데 이는 Friedel 진동에 의한 것으로 보인다. Fig. 2의 I 자 모양 결함주변 원자들의 자기모멘트도, 결함에 가까운 정도에 따라 자기모멘트가 결정되어 원자 1과 2의 자기모멘트는 3.08, 원자 3의 자기모멘트는 3.07 보어마그네톤으로 점 결함의 경우보다 증가하였다. 여기에서도 원자 4의 자기모멘트는 2.97보어마그네톤으로 다른 원자들에 비해 다소 작았으며 이 역시 Friedel 진동의 결과이다.

Fig. 3의 + 형 결함의 경우, 결함에서 가장 가까운 원자 1의 경우 자기모멘트가 3.15, 그 다음 가까운 원자 2는 3.08로 상당히 큰 자기모멘트를 가졌으며, 결함으로부터 다소 먼 원자 3, 4 는 각기 2.95와 3.01 보어마그네톤의 자기모멘트를 가졌는데, 여기서도 원자 3의 자기모멘트가 다른 원자들에 비해 작은 것도 Friedel 진동의 결과이다. Fig. 4의 H 자 모양의 결함계에서도, 결함에서의 거리에 따라 원자 1, 2, 3, 4의 자기모멘트는 각기 3.30, 3.06, 3.06, 3.10 보어마그네톤의 자기모멘트를 가졌는데, 원자 4가 3.10의 자기모멘트를 가진 것은 Friedel 진동의 결과이다. 4개의 모든 결함계를 비교하여 보면 결함원자자리 수가 증가함에 따라 결함에 가장 이웃한 원자의 자기모멘트가

증가하였으며, Friedel 진동의 진폭도 크게 나타났다. 본 계산에서는 원자위치의 풀림을 고려하지 않았으나, 이를 고려하면 자기모멘트 값이 다소 변하리라 생각된다.

참고 문헌

- [1] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981), and references therein; M. Weinert, E. Wimmer, A. J. Freeman, Phys. Rev. B **26**, 4571 (1982).
 [2] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

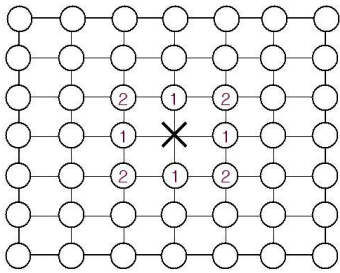


Fig. 1. Fe monolayer with point defect

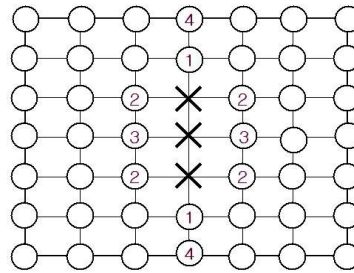


Fig. 2. Fe monolayer with I type defect

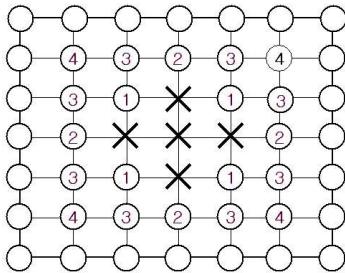


Fig. 3. Fe monolayer with + type defect

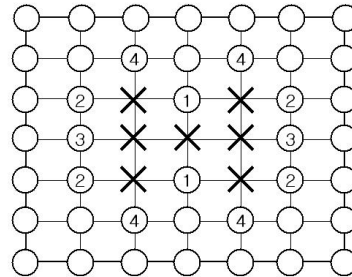


Fig. 4. Fe monolayer with H type defect