

Fe/Ni(001)의 자성에 대한 제일원리계산

이주은*, 제갈소영, 홍순철

Department of Physics and EHSRC, University of Ulsan, Ulsan, Republic of Korea

강한 수직 자기이방성을 가지는 물질은 고밀도의 저장정보매체를 구현할 수 있다고 알려져 있다. 본 연구에서는 비교적 가격이 저렴한 3d 전이금속인 Fe, Ni 원소만으로 강한 수직 자기이방성을 구현할 수 있는지를 제일원리계산 방법으로 탐색하고자 하였다. 제일원리계산 방법으로는 Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)을 이용하였고 generalized gradient approximation (GGA)으로 교환-상관 전위를 나타내었다. k-점수는 12X12X1 격자를 사용하였으며 그 이상의 k-점수를 사용하여도 0.001 eV 이하에서 총에너지 차이가 보였기에 효율적인 계산을 위해 12X12X1을 택하였다. 박막은 총 7층으로 이루어져 있는데, Ni 5층의 양면에 Fe 단층이 부착된 구조를 이루고 있다. 격자상수에 따른 총에너지 계산결과로부터 안정된 격자상수는 1.78 Å임을 얻었고 계산된 각 층별 자기모멘트는 표 1에 나타내었다. Fe 표면은 2.747 μ_B 으로 덩치 Fe의 자기모멘트인 2.20 μ_B 보다 상당히 증가한 것을 알 수 있다. Ni의 경우 덩치 Ni의 자기모멘트 0.7 μ_B 에서 큰 차이가 없었으나 계면에서 박막의 중심으로 가면서 자기모멘트 값의 증가하는 것을 볼 수 있다. 기체 흡착이 자성과 자기이방성에 미치는 영향도 논의할 계획이다.

표 1. Fe/Ni(001)의 각 층별 자기모멘트

Magnetic moment(μ_B)	
Fe (S)	2.747
Ni (S-1)	0.587
Ni (S-2)	0.594
Ni (C)	0.635