

A11

4d 전이금속 단층의 전자구조와 자기적 성질: Mo/MgO(001) 와 Mo/CaO(001)*

울산대학교 홍순철* 노태환
인하대학교 이재일

Electronic Structure and Magnetism of 4d Transition Metal Monolayers: Mo/MgO(001) and Mo/CaO(001)

University of Ulsan S.C. Hong* T. H. Rho
Inha University J.I. Lee

1. 서론

3d 전이금속에 대한 표면 및 계면의 자성에 대한 연구에 이어 4d 전이금속의 표면 및 계면 자성에 대해서도 이론적으로, 실험적으로 활발하게 연구가 진행되고 있다¹⁻³. Au 사이에 끼워진 Pd 원자층이 약 $0.02 \mu_B$ 의 작은 자기모멘트를 갖는다는 것이 이론적으로 계산되었고 실험에서도 관찰된 바 있다. 최근에 본연구원들이 Full Potential Linearized Augmented Plane Wave (FLAPW) 방법을 사용하여 원자번호 39의 Y에서 46의 Pd까지의 4d 전이금속 단층의 자성에 대해 연구하였다. 이 계산 결과에 의하면 적절한 하지 (substrate) 를 생각하지 않은 순수한 4d 단층은 Y 을 제외하고 모두 강자성 상태 혹은 반강자성 상태가 안정하였다. 특히 Mo 단층은 강자성 상태와 반강자성 상태에서 각각 $3.0 \mu_B$, $3.36 \mu_B$ 의 자기모멘트를 갖는 것으로 계산되었다. 최근의 pseudopotential 계산에서 Rh(001) 의 표면 원자층과 바로 아래층이 총 약 $1.7 \mu_B$ 의 자기모멘트를 가지는 것으로 계산되었다³.

본연구에서는 적절한 하지로 MgO(001) 와 CaO(001) 표면을 선택하여 이들 표면 위에 성장한 Mo 단층의 전자구조와 자기적 성질을 LDA 을 근거로 한 FLAPW 방법⁴을 이용하여 스핀분극 계산을 수행함으로써 실험가능한 4d 전이금속 단층의 자성을 이론적으로 예측하고자 하였다.

2. 계산방법 및 결과

Ag/MgO(001)⁵ 와 Fe/MgO(001)⁶ 에 대한 총에너지 계산에서 Ag 와 Fe 원자는 O 위에 흡착되는 것이 안정하다는 것을 발견하였다. 본연구에서는 Mo 원자의 흡착 위치에 대한 총에너지 계산 없이 Mo 원자가 MgO(001) 와 CaO(001) 의 O 위에 흡착될 것으로 가정하고 계산하였다. 교환상관 전위는 von Barth-Hedin 의 공식을 도입하였고 핵심전자는 완전히 상대론적으로 취급하였고 가전자는 스핀-궤도 상호작용을 제외한 Dirac 방정식의 모든 항을 고려하여 준상대론적으로 취급하였다. FLAPW 방법에서는 Poisson 방정식의 해를 구하는 데 있어 포텐셜이나 전하밀도에 대해 아무런 형태근사를 취하지 않았다. k 공간 적분에서 $1/8$ 기약 2차원 Brillouin 영역 내에 15개의 k-points 를 사용하였고 기저함수는 약 2×450 개를 사용하였다.

그림 1a와 b는 각각 상자성 상태의 Mo/MgO(001) 와 Mo/CaO(001) 에서 Mo 원자층의 상태밀도를 보여주고 있다. Mo/MgO(001) 의 경우 Mo 원자 상호간의 결합이 강하여 결합상태와 반결합상태가 꼴짜기를 경계로 뚜렷이 나뉘어져 있으나 Mo/CaO(001) 의 경우는 그렇지 않았다. 이는 MgO(001)의 2차원 격자가 CaO(001)에 비해 약 12.6% 작기 때문인 것으로 보인다.

스핀분극 계산에서 시초에 $2.0 \mu_B$ 의 자기 모멘트를 Mo 원자가 갖도록 강제로 조정한 후 자체충족과정을 반복적으로 수행하였다. 반복과정이 진행됨에 따라 MgO(001) 와 CaO(001) 의 Mo 원자의 자기모멘트는 각각 0 과 약 $0.25 \mu_B$ 에 접근하였다.

3. 결론

Mo/MgO(001) 와 Mo/CaO(001) 의 전자구조와 자기적 성질을 FLAPW 방법을 이용하여 연구하

였다. Mo/MgO(001) 에서의 Mo 의 자기모우멘트는 0 에 가까웠으나 Mo/CaO(001) 의 Mo 는 약 $0.25 \mu_B$ 의 자기 모우멘트를 가지는 것으로 계산되었다.

4. 참고문헌

① Soon C. Hong, C.L. Fu, and A.J. Freeman, J. Appl. Phys. 63, 3655 (1988); M.J. Zhu, D.M. Bylander, and L. Kleinman, Phys. Rev. B43, 4007 (1991); S. Bluegel, Phys. Rev. Lett. 68, 851(1992).

② M.B. Brodsky, J.Phys. (Paris) C5, 349 (1984); E.R. Moog and S.D. Bader, Superlatt. Microstruct. 1, 543(1985); C. Liu, E.R. Moog and S.D. Bader, Phys. Rev. Lett. 60, 2422(1988); J. Appl. Phys. 64, 5325 (1988).

③ Ian Morrison, D.M. Bylander, and L. Kleinman, Phys. Rev. Lett. 71, 1083 (1993).

④ E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A.J. Freeman, Phys. Rev. B24, 864 (1981).

⑤ R. Wu, C. Li and A.J. Freeman, unpublished.

⑥ C. Li and A.J. Freeman, Phys. Rev. B43, 780 (1991).

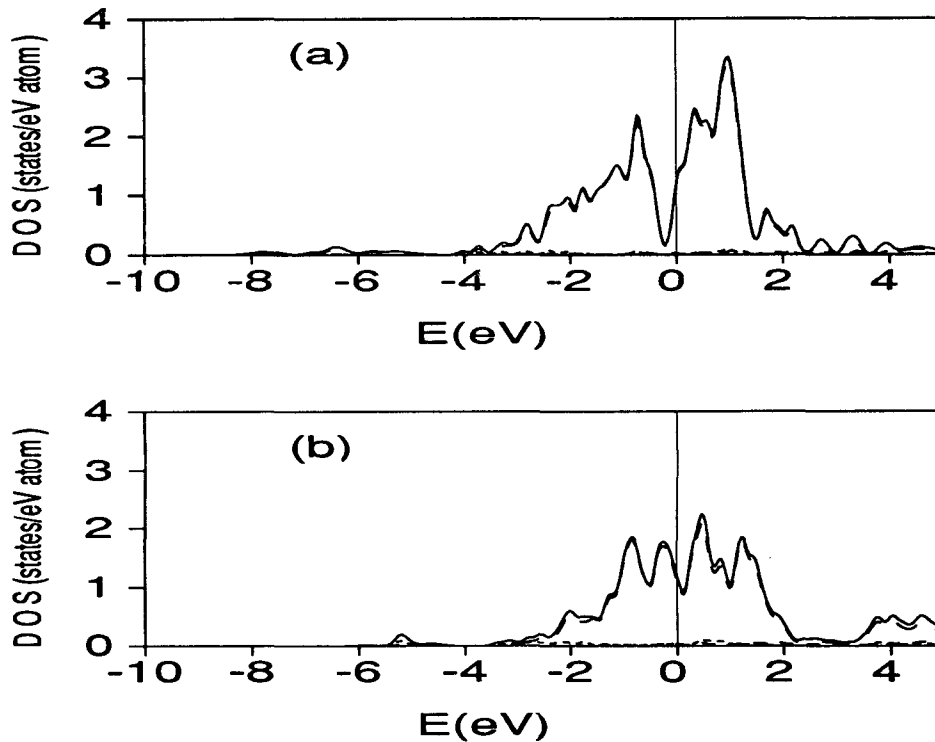


Fig.1 Density of States of Mo Layer on (a) MgO(001) and CaO(001)

+ 본연구는 한국과학재단의 핵심전문과제의 연구비 (과제번호 931-0200-031-2) 지원을 받아 수행 되었기에 이에 감사드립니다.