

## 계단을 형성한 Ni(001) 표면의 자성

인하대학교 김인기 조이현 이재일

## Magnetism of Stepped Ni(001) Surface

Inha University I. G. KIM, L. H. Cho, and J. I. LEE

## 1. 서론

결정 성장과 관련하여 흡착원자와 결정표면의 상호작용에 대해 많은 연구가 행해지고 있다. 특히, 결정표면에 계단과 같은 거친 표면이 형성되면 그 전위의 변화가 있어 흡착원자에 영향을 주는 것으로 알려져 있다. Yu 등 [1]의 연구에서는 Ag 원자가 계단을 형성하였을 경우 그 위를 확산(diffusion) 하는 원자가 계단에서 전위장벽의 영향을 받는 상황을 논의하고 있다. 본 연구에서는 자성물질인 Ni 표면에 계단이 형성되었을 경우 표면자성을 이론적으로 탐구하였다. 자성물질이 계단을 형성한 경우에 대해서는 거의 연구가 이루어지지 않은 상황으로, 본 연구는 자성물질의 결정성장연구에 많은 도움이 될 것으로 예상된다. 본 연구에서는 총 퍼텐셜 보강 평면파(full-potential linearized augmented plane wave) 에너지 띠 방법 [2,3]을 이용하여 전자구조와 자성을 연구하였다.

## 2. 계산 방법

계단을 형성한 Ni(001) 표면 (Fig. 1)의 전자구조를 총 퍼텐셜 보강 평면파 방법에 의해 계산하였는데, 이를 위해 총 26 개의 원자로 구성된 얇은 판 모형을 채택하였다. 각 원자당 약 70 개의 기저함수를 사용하여 못줄이는 2 차원 브릴루앙영역에서 32 개의 k-점에 대해 계산을 수행하였다. 핵심전자는 완전히 상대론적으로 다루었으며 가전자상태는 준상대론적으로 다루었다. 머핀-틴 구 내의 전하와 퍼텐셜을 기술하기 위해 각운동량이  $l \leq 8$  인 격자조화함수를 사용하였다. 입력과 출력의 전하밀도와 스핀밀도의 차가  $2 \times 10^{-4} e/(a.u.)^3$  이하일 때 수렴된 것으로 간주하였다.

## 3. 결과 및 고찰

각 원자에 대해 계산된 자기모멘트 값을 Table 1에 정리하였다. 이 표를 보면 계단 위 가장자리 [Ni(S)II]에 위치한 Ni 원자의 자기모멘트는  $0.80 \mu_B$ 로 상당히 크게 나타났고, 계단 아래의 표면에 노출된 원자 [Ni(S-1)III]는  $0.73 \mu_B$ 로 그 아

래층 보다 큰 자성을 가졌다. 위 값은 순수한 Ni(001) 표면의 경우 ( $0.68 \mu_B$ )보다 [4] 상당히 큰 값이다. 표면에서 가운데 층으로 갈수록 자기모멘트 값이 줄어들어 가운데 층은  $0.65 \mu_B$  를 가졌다.

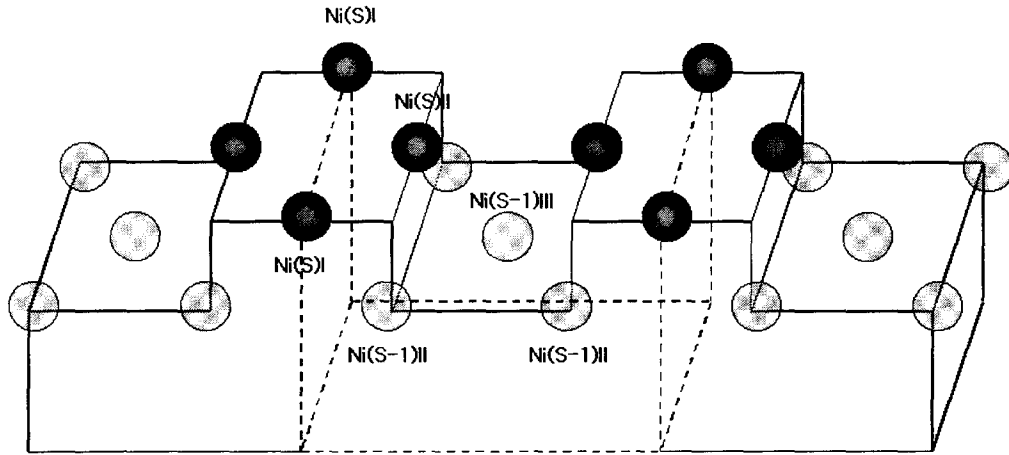


Fig. 1. Crystal structure of the Ni(001) step. The dashed line defines the considered unit cell in our FLAPW calculation.

Table I. The magnetic moments on Ni(001) step.

	Ni(S)I	Ni(S)II	Ni(S-1)I	Ni(S-1)II	Ni(S-1)III	Ni(S-2)	Ni(C)
magnetic moment( $\mu_B$ )	0.73	0.80	0.66	0.70	0.73	0.67	0.65

#### 4. 참고 문헌

- [1] B. D. Yu and M. Scheffler, Phys. Rev. **B 55**, 13916 (1997).
- [2] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981).
- [3] M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **26**, 1629 (1982).
- [4] A. J. Freeman and R. Wu, J. Magn. Mater. **100**, 497 (1991).