

Ag(001) 표면 위에 놓인 Fe 선의 자성과 전자구조

김영구 · 이재일*

인하대학교 물리학과, 인천시 남구 용현동 253, 402-751

(2005년 7월 28일 받음, 2005년 8월 5일 최종수정본 받음)

제일원리적 에너지 띠 계산 방법인 전 전자 총 퍼텐셜 선형보강평면파동(all-electron full-potential linearized augmented plane wave) 방법에 일반기울기근사(generalized gradient approximation)를 채용하여 Ag(001) 표면 위에 [110] 방향으로 놓인 Fe 선의 전자구조와 자성을 이론적으로 연구하였다. Fe 선의 원자당 자기모멘트는 3.02 μ_B 로 Cu(001) 위에 놓인 Fe[110] 선의 값(2.99 μ_B) 보다 약간 컸다. Fe 선의 자기모멘트가 상당히 증가한 것은 이웃한 결합수가 줄어들고 그 결과로 Fe-d 전자상태의 띠폭이 줄어들어 국소화 되고 스핀분리가 증가하였기 때문이다. Fe-d 전자상태의 띠 폭은 약 1.6 eV였으며 스핀분리는 약 3.2 eV였다.

주제어 : Fe 선, Ag(001) 표면, 전자구조, 자성

I. 서 론

나노기술이 발전하면서, 기존의 전자소자나 광학소자들이 소형화 되고 있으며[1, 2] 이러한 점에서 매우 가는 나노와이어는 나노크기 소자의 구성요소로서 중요성이 커지고 있다. 특히 자성나노와이어는 고밀도 기억저장소자의 필수 구성요소로 관심을 끌고 있다. 최근에 본뜨기 직접(template direct) 방법을 이용하여 철 나노와이어가 만들어졌는데, 지름이 30에서 500 nm인 원통형 모양을 하고 있으며 길이는 대략 10 μm 이다[3, 4]. 이러한 철 나노와이어는 수직자기기록 장치에 응용이 고려되고 있다. 자성나노와이어를 제작하는 또 다른 중요한 방법은 적절한 금속 밀판을 이용하여 그 위에 나노와이어를 성장시키는 것이다. 이러한 예로 Pt(997) 면 위에 성장시킨 Co 선이나 [5] W(110) 면이나 Cu(111) 위에 성장시킨 철 띠[6, 7]를 들 수 있다.

나노와이어는 될 수 있는 한 가는 것이 바람직하지만 현재로서는 한 원자크기의 지름을 가진 선을 만드는 것은 불가능하다. 그러나 한 원자 지름을 가진 선이나 사슬에 대한 이론적 연구를 통해 나노와이어에 대한 기본적 성질을 이해할 수 있다. 오래 전에 Weinert와 Freeman은[8] 자체충족적인 FLAPW 에너지 띠 계산 방법[9]을 통해 Fe와 Ni 선의 자성을 연구한 결과, 큰 교환분리로 인해 Fe 선은 원자당 3.3 보어 마그네톤(μ_B), Ni 선은 원자당 1.1 μ_B 의 큰 자기모멘트를 가졌다. 최근 들어 Yang 등은 [10] 같은 방법을 통해 세 가지 형태의 Fe 나노와이어, 즉 사슬형태, 면심입방구조(fcc)나 체심입방구조(bcc)를 가진 나노와이어에 대한 전자구조와 자성을 이론적으로 연구하였다. 그 결과 각기 3.30 μ_B (사슬),

3.02 μ_B (bcc 나노와이어), 3.06 μ_B (fcc 나노와이어) 의 자기모멘트를 가졌다. 이러한 결과는 줄어든 차원과 결합수가 자기모멘트를 현저히 증가시킴을 확인시켜 주고 있다.

자유로운 나노와이어 외에 다른 금속표면 위에 놓인 나노와이어에 대한 연구도 행해지고 있다. Spišák과 Hafner는 [11] 수도퍼텐셜 방법을 통해 높은 지수 표면인 Cu(117) 위에 놓인 Fe 나노와이어의 자성을 탐구하였다. 이들은 Fe 나노와이어가 놓일 수 있는 위치로 여섯 가지를 생각하고 이중 안쪽 구석 위치에 놓였을 때가 가장 안정되며 이때의 자기모멘트가 2.8 μ_B 임을 보였다. 또한 Jin 등은[12, 13] FLAPW 방법을 통해 Cu(001) 표면 위에 [010] 방향과 [110] 방향으로 놓인 Fe 선의 전자구조를 계산하고 그 자성을 논의하였다.

이 논문에서는 귀금속인 Ag(001) 표면 위에 Fe 선이 [110] 방향으로 놓여 있을 때 그 자성과 전자구조를 FLAPW 방법을 통하여 이론적으로 연구하였다. 계산방법과 사용된 모형은 II절에서 기술하였으며, III절에서 결과에 대한 논의를 하고 IV절에서 결론을 요약하였다.

II. 계산방법

Ag(001) 위에 놓인 Fe 선 계로서, Fig. 1에서와 같이 Ag 다섯 층으로 이루어진 Ag(001) 판 양쪽에 [110] 축을 따라 Fe 선을 붙인 계 (Fe[110](W)/Ag(001))를 고려하였다. Fig. 1(b)에서와 같이 (001) 면을 따르는 2차원 단위세포로(3×1) 직사각형을 잡았으며, 격자상수는 x-축 쪽으로는 3×5.465 a.u., y-축을 따라서는 5.465 a.u.로 잡았다. 따라서 Fe 선에서 Fe 원자 사이의 거리는 5.465 a.u.이다. Fe 선과 Ag 밀판사이의 거리는 철의 bcc 부피가 유지되도록 2.766 a.u.로 잡았으며, Ag 층 사이의 거리는 fcc Ag의 격자상수의 1/2

*Tel: (032) 860-7654, E-mail: jilce@inha.ac.kr

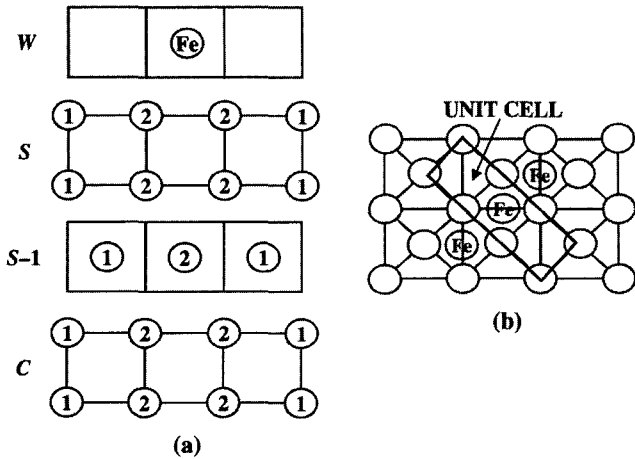


Fig. 1. Schematic representation for (a) side and (b) top view of the Fe chain on Ag(001) surface. Labels of W, S, S-1, and C denote the Fe chain, the Ag surface, subsurface, and center layers, respectively. In each layer, the numbers in the circles represent different atomic sites with different symmetry.

인 3.865 a.u.로 잡았다.

전자구조를 계산하기 위해 단일 입자 방정식인 Kohn-Sham 방정식을[14] FLAPW 방법을 이용하여 [8] 자체 총족적으로 풀었다. 교환-상관 퍼텐셜에는 일반기울기근사(Generalized Gradient Approximation: GGA)[15]를 이용하였다. 제1브릴루앙 영역(Brillouin Zone: BZ) 내의 적분은 대칭성을 고려하여 2차원 브릴루앙 영역 중 1/8에 해당하는 기약 영역 내에서 27개의 특별한 k -점들에 대해 에너지 고유 값을 계산하였다. 각 k -점당 약 2300개의 기저함수를 사용하였다. 머핀-틴(Muffin-tin; MT) 구 내의 전하와 퍼텐셜을 기술하기 위해 각운동량 $l \leq 8$ 까지의 격자조화함수를 이용하였으며, Fe 원자와 Ag 원자의 머핀 틴 구의 반지름은 각각 2.20와 2.40 a.u.로 택하였다. 핵심전자는 완전히 상대론적으로 취급하였고 가전자는 준 상대론적으로 취급하였다[16]. 입력과 출력 전하 밀도와 스핀밀도의 제곱-평균-제곱근(root-mean-square) 값의 차가 1.0×10^{-4} electrons/(a.u.)³ 이하일 때 자체 총족적 조건을 만족하는 것으로 간주하였다.

III. 결과 및 논의

Ag(001) 표면 위에 놓인 Fe 선의 기본적인 전자구조와 자성을 이해하기 위해 Fig. 2에 (310) 평면에서의 스핀밀도 분포를 제시하였다. 실선은 양의 스핀밀도를 표시하고 점선은 음의 스핀밀도를 나타내는데 가장 낮은 등고선은 각기 $\pm 1.0 \times 10^{-4}$ electrons/(a.u.)³을 표시하며 이웃한 등고선들은 계속 $\sqrt{2}$ 배로 증가하는 값을 나타낸다. 여기에서 Fe 선의 양의 스핀밀도가 진공영역 쪽으로 크게 분출하는 모양을 볼 수 있는

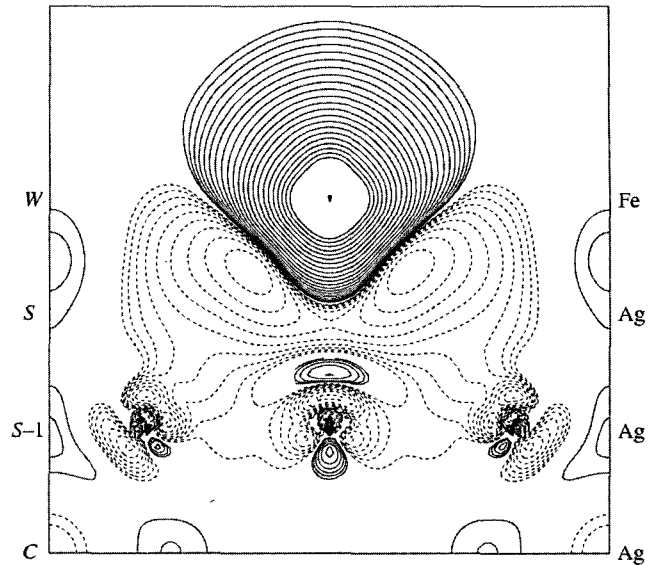


Fig. 2. Spin density contour plot of the Fe nanowire on Ag(001) in the (310) plane. The solid and broken lines represent positively and negatively polarized spin densities, respectively. The lowest contour starts from $\pm 1 \times 10^{-4}$ electrons/(a.u.)³, and the subsequent lines increase successively by a factor of $\sqrt{2}$.

데, 이는 Fe 선의 자기모멘트가 상당히 큼을 나타낸다. Fe 선과 Ag 표면 사이의 영역에서는 약간 음으로 분극되어 있다. 이와 같은 양상은 Cu(001) 위의 Fe[001] 나노선이나 [12] Fe[110] 나노선의 경우와 [13] 매우 유사하다.

Fe[110](W)/Ag(001) 계에 대해 각각의 머핀 틴 구내에서 스핀과 웨도운동량 양자수에 따라 나는 전자수와 각 원자가 가지는 자기모멘트 값을 Table I에 제시하였다. Fe 선의 원자

Table I. l -decomposed majority and minority spin electrons inside the muffin-tin (MT) spheres, and layer-by-layer magnetic moments (in unit of μ_B) for the Fe nanowire and Ag substrate.

atoms	spins	s	p	d	M
Fe(W)	↑	0.18	0.09	4.47	
	↓	0.15	0.08	1.49	
	total	0.33	0.17	5.96	3.02
Ag(S)-1	↑	0.17	0.07	4.50	
	↓	0.17	0.07	4.50	
	total	0.34	0.15	8.99	0.00
Ag(S)-2	↑	0.19	0.12	4.49	
	↓	0.21	0.14	4.42	
	total	0.40	0.25	8.92	0.03
Ag(S-1)-1	↑	0.17	0.11	4.47	
	↓	0.17	0.11	4.48	
	total	0.34	0.22	8.95	-0.01
Ag(C)-1	↑	0.17	0.11	4.47	
	↓	0.17	0.11	4.47	
	total	0.34	0.22	8.95	0.00

당 자기모멘트는 $3.02 \mu_B$ 로 Cu(001) 위의 Fe[110] 선의 값인 $2.99 \mu_B$ [13]보다 약간 컸으나, Cu(001) 위의 Fe[010] 선의 값인 $3.11 \mu_B$ [12]보다 작았다. 이는 Ag(001) 표면 위의 Fe[110] 선에서 원자사이의 간격(5.465 a.u.)이 Cu(001) 위의 Fe[010]선의 값(6.83 a.u.) 보다는 작고, Cu(001)위의 Fe[110]의 경우(4.83 a.u.) 보다는 크기 때문이다.

각운동량에 따른 전자수를 보면, 깨끗한 Fe 표면이나 Cu 위의 Fe 나노선의 경우와 마찬가지로 p -전자 중 상당수가 진공영역 쪽으로 빠져 나감을 알 수 있다. Ag 밀층의 경우를 보면 Fe 원자에서 먼 Ag(S)-1 원자는 s, p 전자를 상당히 잃고 약간의 d -전자를 얻은 반면, Fe 원자 바로 아래의 Ag(S)-2 원자는 약간의 s, p 전자를 얻는 대신 d -전자를 잃는다.

Fe 나노선에서 자기모멘트가 증가하는 이유와 전자상태들의 혼성 등을 Fig. 3에 주어진 층별 상태밀도(layer-projected density of states: LDOS)로부터 이해할 수 있다. 여기에서 소수전자 스핀 상태 값에는 -1을 곱하였고 s, p -전자상태에는 20을 곱하였으며, Fermi 에너지는 0으로 잡았다. Ag(001) 표면 위의 Fe[110] 선의 다수스핀 d -전자 상태의 주된 봉우리의 폭은 약 1.7 eV로 Cu(001) 위의 Fe[110] 선의 경우나(약 3.2 eV) [13] Fe[010] 선의 경우(약 2.5 eV)[12] 보다 상당히 작고 국소화되어 있음을 볼 수 있다. 그러나 s, p 전자상태는 Fermi 에너지로부터 -7.5 eV까지 넓게 퍼져 있는데, 이것은 Ag 표면의 $4d$ -상태가 Cu의 $3d$ -상태에 비해 낮은 에너지 상

태에 있어서 이 d -전자와 Fe의 s, p 전자상태가 혼성을 하기 때문이다. 이러한 사실은 Fe[110](W)/Ag(001)의 경우, p 전자상태의 작은 봉우리가 -6.2 eV에 위치하고 있는데 반해, Fe[110](W)/Cu(001)의 경우는 -4.0 eV 정도에 놓여 있다는 것으로부터도 확인할 수 있다. 소수전자의 d -상태도 상당히 국소화되어 있으며 여기에서도 s, p 상태가 Ag의 $4d$ -상태와 혼성을 이루고 있음을 알 수 있다. 다수스핀 상태밀도의 봉우리 꼭대기는 -2.5 eV에 놓여 있고, 소수스핀의 경우는 0.7 eV에 놓여 있어 스핀분리는 약 3.2 eV로 볼 수 있다. 이러한 스핀분리 값은 Fe[110](W)/Cu(001)의 값(2.9 eV)과 Fe[010](W)/Cu(001)의 값(3.5 eV)의 사이에 놓여 있으며, 이 역시 본 연구에서의 Fe[110](W)/Ag(001)의 자기모멘트 값이 위 두 경우 사이의 값을 갖는다는 사실과 부합한다.

IV. 결 론

Ag(001) 위에 [110] 방향으로 놓인 Fe 선의 전자구조와 자성을 일반기울기근사를 채용한 전 전자 FLAPW 에너지 방법을 이용하여 이론적으로 연구하였다. 계산된 스핀밀도는 Fe 선으로부터 진공영역 쪽으로 다수 스핀밀도가 분출하는 것을 보이고 있으며 이는 Fe 원자가 큰 자기모멘트를 가진다는 것과 부합한다. 계산된 Fe 원자의 자기모멘트는 $3.02 \mu_B$ 로 Cu(001) 위에 [010] 방향으로 놓인 Fe 선의 자기모멘트 값인 $3.11 \mu_B$ 보다 작았으며, [110] 방향으로 놓인 Fe 나노선의 값인 $2.99 \mu_B$ 에 가까운 값이다. Fe 원자의 머핀 톱 구 내에서 각운동량 별로 분리한 전자수로부터, 다른 금속 표면이나 나노선의 경우와 마찬가지로 Fe 원자도 p -전자를 상당히 많이 잃는다는 것을 확인하였다. 계산된 원자별 상태밀도에 의하면, Fe 선의 경우 d -전자 띠 폭이 상당히 줄어들었으며, 다수전자와 소수전자 간 스핀분리는 약 3.2 eV 였다. 또한 약 -6.2 eV 에 놓인 Fe 원자의 s, p 전자의 봉우리는 이들 전자가 밀층 Ag의 d -전자와 강하게 혼성을 하고 있음을 나타낸다.

감사의 글

본 연구는 2004년도 인하대학교 연구비 지원(과제번호: 31602)에 의하여 수행 되었습니다.

참고문헌

[1] L. Samuelson, Materials Today, **6**, 22(2003).
 [2] H. Morkoc and Y. Taur, J. Korean Phys. Soc., **42**, S555(2003).
 [3] A. Fert and L. Piraux, J. Magn. Magn. Mater., **200**, 338(1999).
 [4] S. G. Yang, H. Zhu, D. L. Yu, Z. Q. Jin, S. L. Tang, and Y. W. Du, J. Magn. Magn. Mater., **222**, 97(2000).

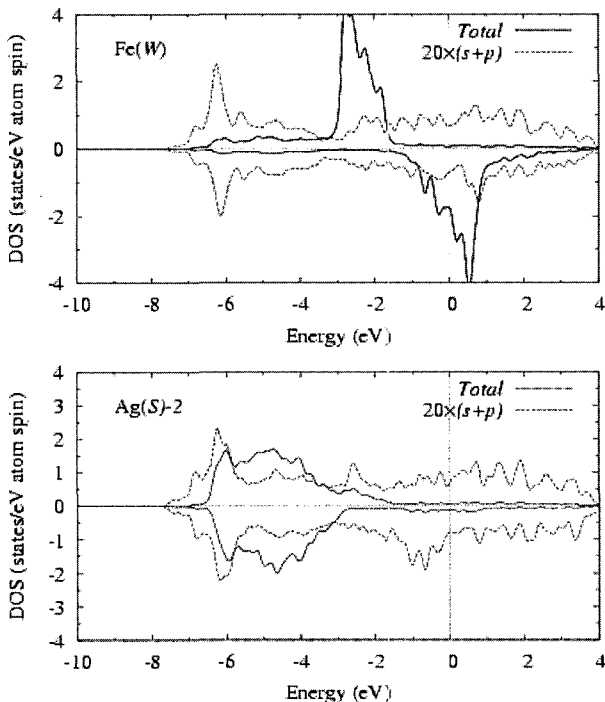


Fig. 3. Layer-projected spin-polarized density of states (LDOS) of Fe chain and Ag substrate. Fermi levels are set to zero.

- [5] P. Gambardella, M. Blanc, L. Bürgi, K. Kuhnke, and K. Kern, *Surf. Sci.*, **449**, 93(2000).
- [6] J. Hauschild, H. J. Elmer, and U. Gradmann, *Phys. Rev. B*, **57**, R677(1998).
- [7] J. Shen, R. Skomski, M. Klaua, H. Jenniches, S. S. Manoharan, and J. Kirschner, *Phys. Rev. B*, **56**, 2340(1997).
- [8] M. Weinert and A. J. Freeman, *J. Magn. Magn. Mater.*, **38**, 23(1983).
- [9] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B*, **24**, 864(1981), and references therein; M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, *ibid.*, **26**, 4571(1982).
- [10] T. J. Yang, Y. J. Zhao, and A. J. Freeman, *J. Magn. Magn. Mater.*, **272**, 1648(2004).
- [11] D. Spišák and J. Hafner, *Phys. Rev. B*, **65**, 235405(2002).
- [12] Y. J. Jin, I. G. Kim, and J. I. Lee, *J. Korean Phys. Soc.*, **43**, 1071(2003).
- [13] Y. J. Jin, I. G. Kim, and J. I. Lee, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **241**, 1431(2004).
- [14] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.*, **136**, B864(1964); W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **140**, A1133(1965).
- [15] J. P. Perdew and Y. Wang, *Phys. Rev. B*, **45**, 13 244(1992).
- [16] D. D. Koelling and B. N. Harmon, *J. Phys. C*, **10**, 3107(1977).

First-principles Study on Magnetism and Electronic Structure of Fe Chain on Ag(001)

Y. J. Jin and J. I. Lee*

Department of Physics, Inha University, Incheon 402-751, Korea

(Received 28 July 2005, in final form 5 August 2005)

The electronic structure and magnetism of Fe chain along the [110] direction on Ag(001) were investigated by using the all-electron full-potential linearized augmented plane wave (FLAPW) method within generalized gradient approximation (GGA). The magnetic moment of Fe atom in Fe chain is calculated to be $3.02 \mu_B$, which is slightly larger than that ($2.99 \mu_B$) of the Fe[110] chain on Cu(001). The reduced coordination number for the Fe chain induced the Fe-*d* band narrowing and exchange-splitting enhancement, which are responsible for the large magnetic moment of the Fe chain. The calculated band width of the Fe-*d* band and the exchange-splitting are 1.7 eV and 3.2 eV, respectively.

Key words : Fe chain, Ag(001) surface, Electronic structure, Magnetism