

전이금속 Fe-Pt 나노선의 자기적 성질

장영록*

인천대학교 물리학과, 인천 남구 도화동 177, 인천 402-749

조철수

인하대학교 물리학과, 인천 남구 용현동 253, 인천 402-751

Department of Physics and Astronomy, University of California, Irvine, California 92697, USA

이재일

인하대학교 물리학과, 인천 남구 용현동 253, 인천 402-751

(2005년 12월 2일 받음, 2005년 12월 16일 최종수정본 받음)

전이금속 Fe-Pt 나노선의 자기적 성질을 수도퍼텐셜 및 전전자(all-electron) 제일원리 전자구조 계산 방법으로 연구하였다. 직선 구조와 지그재그 구조에 대해서 결합에너지를 계산함으로써 안정된 구조를 결정했고, 결합거리, 결합각도, 자기모멘트, 스핀밀도, 상태밀도 등을 계산함으로써 전이금속 나노선의 구조적 성질과 자기적 성질을 연구하였다. Fe-Pt 나노선의 경우에 지그재그 구조가 직선 구조보다 더 안정된 것으로 계산되었고, 직선 구조에 비해서 결합길이는 증가하지만 자기모멘트는 감소하였다.

주제어 : Fe-Pt, 나노선, 제일원리 계산, 결합에너지, 결합길이, 자기모멘트

I. 서 론

덩치(bulk) 상태에서 자성을 갖지 않는 전이금속(transition metal)들이 표면(surface)이나 계면(interface) 또는 나노선(nanowire) 등과 같이 차원이 낮아지는 경우에 자성을 가질 가능성과 그 응용성에 대해 많은 연구가 있었다[1]. Pt, Pd, V 등의 전이금속은 덩치 상태에서 자성을 갖지 않지만 차원이 낮아지면서 자성이 생기며, 덩치 상태에서 자성을 갖는 Fe, Co, Ni 등도 차원이 낮아지면 자기모멘트(magnetic moment)가 더 커지고 결합거리(bond length)는 줄어드는 것으로 보고되었다[2].

면심입방(fcc) 구조를 가지는 전이금속과 귀금속(noble metal)들에 대해 덩치 상태와 선형(chain) 구조를 가지는 경우에 각각 결합에너지(binding energy)와 결합거리를 계산한 결과에 의하면[3], 선형 구조에서 결합당(per bond) 결합에너지가 덩치 상태보다 2배 이상 크고 결합거리는 더 줄어드는 것으로 나타났다.

귀금속 중 하나인 Ag에 대해서 직선(linear) 구조와 지그재그(zigzag) 구조에 대한 계산 결과에서는[4], 지그재그 구조가 직선 구조보다 더 낮은 에너지를 가지는 안정된 구조라는 것을 보였고, 그 결합거리가 더 늘어나면서 결합각도가 약 66° 정도 되는 것으로 계산되었다.

역시 귀금속 중 하나인 Au에 대한 계산 결과에 의하면[5], Ag의 경우와 같이 지그재그 구조가 더 안정된 것으로 계산되었지만, 결합거리는 오히려 약간 줄어들면서 결합각도가 131° 정도 되었다. 안정된 지그재그 구조가 되면서 Ag의 경우에는 많이 구부러지지만 Au의 경우에는 조금 구부러진다는 것을 의미한다.

덩치 상태에서 자성을 갖는 전이금속인 Fe로 이루어진 여러 나노선 구조에 대해 계산한 결과에 의하면[6], 귀금속에 대한 계산 결과와 마찬가지로 지그재그 구조가 직선 구조에 비해 더 안정된 것으로 보고되었다.

본 연구에서는 자성 전이금속인 Fe와 비자성 전이금속인 Pt가 교대로 배열된 Fe-Pt 나노선에서, 제일원리 방법을 이용하여 직선 구조와 지그재그 구조에 대해 결합에너지, 결합거리, 결합각도, 자기모멘트, 스핀밀도, 상태밀도 등을 계산함으로써, 구조적 성질과 자기적 성질에 대해서 고찰하였다.

II. 계산방법

자성 전이금속인 Fe와 비자성 금속인 Pt가 교대로 놓인 직선 구조와 지그재그 구조의 구조적 성질과 자기적 성질을 연구하기 위해서, Fig. 1에 나타난 것처럼 일차원 지그재그 구조를 가지는 계에 대해서 결합거리와 결합각도를 변화시키면서 가장 낮은 에너지를 가지는 구조를 결정하고, 그 때의 결합에너지, 결합거리, 결합각도, 자기모멘트를 계산했다. 직선

*Tel: (032) 770-8227, E-mail: yrjang@incheon.ac.kr

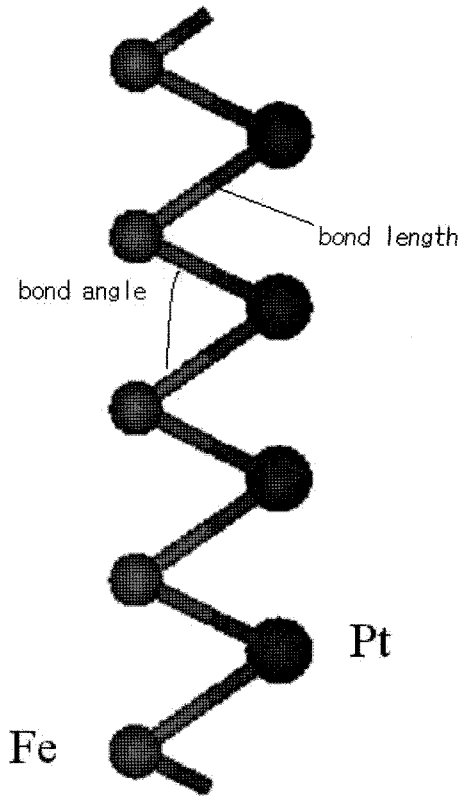


Fig. 1. The zigzag structure of Fe-Pt nanowire. The linear one corresponds to the case with bond angle of 180°.

구조의 경우에는 물론 결합각도가 180°이다.

안정된 구조를 찾고 구조적 성질과 관련된 결합거리와 결합각도를 구할 때는 수도퍼텐셜(pseudopotential) 방법을 이용했고, 자기모멘트, 스핀밀도, 상태밀도 등을 계산할 때는 모든 전자들을 고려하는 FLAPW(full-potential linearized augmented plane wave) 방법을 이용해서 계산했다.

구조 계산에 우리가 사용한 수도퍼텐셜 방법에서[7] 전자들 사이의 교환-상관(exchange-correlation) 퍼텐셜은 PW91(Perdew-Wang 91)의 GGA(generalized gradient approximation)를 이용했고[8], 자체충족 계산 과정에서 총 에너지(total energy)의 차이가 10⁻³ eV보다 작을 때 수렴된 것으로 간주했으며, 원자 위치를 바꾸면서 원자 힘(atomic force)이 0.01 eV/Å보다 작을 때까지 구조를 최적화함으로써 안정된 구조를 계산했다.

자기모멘트 계산에 사용한 FLAPW 방법에서는[9] 전하, 스핀 밀도 그리고 퍼텐셜 등을 계산할 때 형태에 따른 근사를 쓰지 않기 때문에 매우 정확한 결과를 얻을 수 있다. 핵심 전자는 상대적으로 취급하며, 원자가 전자는 스핀-궤도 상호작용을 제외하고 준상대론적으로(semirelativistically) 취급한다. 여기서도 전자들 사이의 교환-상관 퍼텐셜로 수도퍼텐셜의 경우와 같이 PW91을 이용하였고, MT(muffin-tin) 구 안

에서 전하밀도와 퍼텐셜 및 파동함수를 전개하기 위해서 각 운동량 l 값을 8가지 삼각 조화(lattice harmonics) 함수를 이용하였다. 전하밀도와 스핀밀도 각각 입력과 출력값의 제곱-평균-제곱근(root-mean-square) 값 차이가 10⁻⁴ electrons/(a.u.)³ 이하일 때 자체충족적인 계산이 수렴된 것으로 하였다.

III. 결과 및 논의

직선 구조와 지그재그 구조를 가지는 Fe-Pt 나노선에 대해서 수도퍼텐셜 방법으로 계산한 결합에너지, 결합거리, 결합각도와 FLAPW 방법으로 계산한 자기모멘트를 Table I에 나타냈다. 지그재그 구조가 더 안정된다는 것은 계산된 결합에너지 값으로부터 알 수 있으며, 또한 원자간 결합거리가 늘어났다는 것을 보여준다. 자기모멘트는 Fe과 Pt 원자 모두 지그재그 구조의 경우에 직선 구조에 비해 감소했음을 알 수 있다.

귀금속에 대해서 계산한 다른 계산들과[4, 5] 비교하기 위해서, 결합길이에 대한 결과들을 따로 비교하여 Table II에 나타냈다. 이합체(dimer), 직선 구조, 지그재그 구조, 그리고 덩치 상태로 가면서 결합길이가 점점 커지는 것을 보여주고

Table I. Calculated bond length (Å), bond angle (°), binding energy (eV), and magnetic moment (μ_B) for Fe-Pt nanowires with linear and zigzag structures.

chain	bond length (Å)	bond angle (°)	binding energy (eV)	magnetic moment (μ_B)	
				Fe	Pt
linear	2.32	180.	2.64	3.41	0.66
zigzag	2.46	62.5	3.26	3.19	0.51

Table II. Calculated bond length (Å) for noble metal [4, 5], transition metal [6], and Fe-Pt systems with dimer, linear, zigzag, and bulk structures.

X	Ag	Au	Fe	Pt	Fe-Pt
dimer	2.47	2.50	-	-	-
linear	2.65	2.62	2.25	2.39	2.32
zigzag	2.77	2.55	2.32	2.67	2.46
bulk	2.93	2.96	2.48	2.83	2.70

Table III. Calculated magnetic moment (μ_B) for pure Fe, pure Pt, and Fe-Pt nanowires with linear and zigzag structures. The bulk values are also given for comparison.

X	Fe	Pt	Fe-Pt	
			Fe	Pt
linear	3.31	0.39	3.41	0.66
zigzag	3.19	0.00	3.19	0.51
bulk	2.22	0.00	1.48	

있는데, 배위수(coordination number)가 점점 늘어나는 것과 연관있다는 논의가[4] 귀금속은 물론 전이금속에도 적용됨을 알 수 있다. Fe-Pt 나노선의 경우에 결합거리는 순수한 Fe 나노선과 순수한 Pt 나노선의 결합거리의 중간값을 가지는 것을 확인할 수 있다.

자기모멘트에 대한 계산 결과는 별도로 Table III에 정리하였다. 직선 구조, 지그재그 구조, 덩치 상태로 가면서 배위수가 증가함에 따라서 자기모멘트가 줄어드는 것을 알 수 있으며, 특히 Pt 직선 구조는 자성을 가지지만 지그재그 구조가 되면서 자성이 없어지는 것으로 계산되었다. 순수한 Fe 나노선이나 순수한 Pt 나노선과 비교해서 Fe-Pt 나노선에서는 Fe 과 Pt 모두 자기모멘트가 증가하는 것을 알 수 있다.

안정된 지그재그 구조를 가지는 결합거리에서 Fe-Pt 나노선의 스핀밀도(spin density)를 Fig. 2에 나타냈다. Fe와 Pt 사이에 소수스핀(minority spin) 전자들이 모여서 길이 방향으로 띠를 형성한 것을 볼 수 있으며, 안정된 구조를 이루면서 나노선 바깥에서는 전하밀도의 분포가 평평한 모양을 나타내고 있다. Pt 원자의 경우에 원자의 중심 부근에 있는 전자들의 분포 모양은 t_2 상태의 형상을 보여주고 있다.

안정된 Fe-Pt 지그재그 구조에서 상태밀도(density of states; DOS)를 계산하여 Fig. 3에 나타냈다. 페르미 에너지(Fermi energy)는 실선 모양의 세로선으로 나타냈고, 소수스핀의 상태밀도에 -1을 곱해서 표현했다. 덩치 상태와는 달리 뾰족한 선들이 많이 있는 것은 지그재그 구조에서는 원자의 성질을 많이 가지고 있다는 것을 의미하며, 페르미 에너지에서 상태밀도가 작다는 것은 안정된 구조라는 것을 나타낸다. 선형 구조는 페르미 에너지에서 상태밀도가 크기 때문에 불안정하므로 상태밀도가 작게 되는 지그재그 구조로 가는 것이

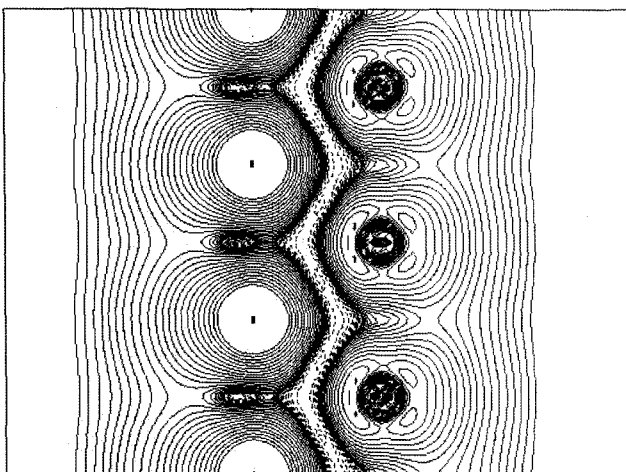


Fig. 2. Electron spin density for the Fe-Pt zigzag structure. The left (right) column represents Fe (Pt) atoms. The solid and dotted lines stand for the majority and minority spins, respectively.

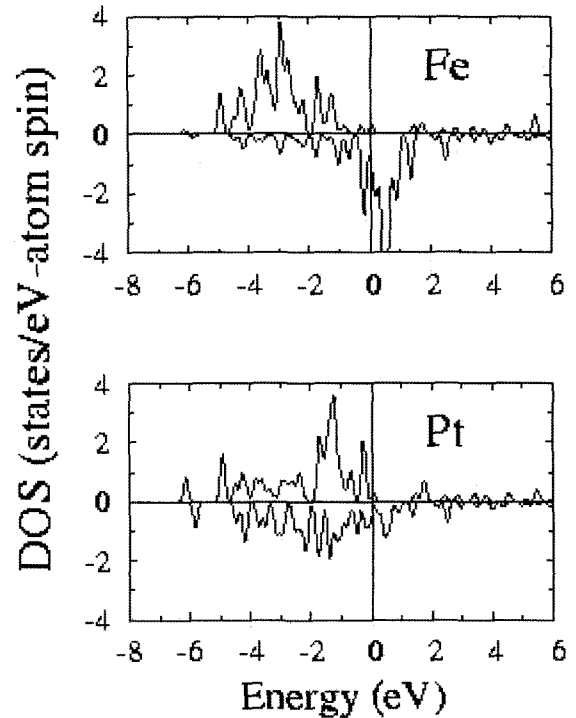


Fig. 3. Spin-polarized density of states (DOS) for the Fe and Pt atoms in the Fe-Pt zigzag nanowire. The Fermi levels are set to zero, and the DOS of minority spins are multiplied by -1.

더 안정된다는 Au 나노선에 대한 계산 결과와[5] 정성적으로 같은 결과를 주는 것을 알 수 있다. 자기모멘트가 큰 Fe와는 달리 Pt의 상태밀도는 다수와 소수 스핀의 교환분리(exchange splitting)가 작은 값을 가지는 것을 볼 수 있고, 결과적으로 Pt의 경우에 작은 자기모멘트를 갖는 것이라고 할 수 있다.

IV. 결론 및 요약

전이금속 Fe-Pt 나노선의 구조적 성질과 자기적 성질을 제일원리 전자구조 계산 방법인 수도퍼텐셜과 FLAPW 방법으로 연구하였다. 직선 구조와 지그재그 구조에 대해서 결합에너지를 계산하여 안정된 구조를 결정했으며, 결합거리, 결합각도, 자기모멘트, 스핀밀도, 상태밀도 등을 계산함으로써 전이금속 나노선의 구조적 성질과 자기적 성질을 연구하였다.

계산 결과 Fe-Pt 나노선의 경우에 지그재그 구조가 직선 구조에 비해 더 안정된 것으로 계산되었고, 그 결합길이는 증가하지만 자기모멘트는 감소하였으며, 이 결과는 귀금속 나노선에 대한 논의와 마찬가지로 배위수의 변화로 설명할 수 있다.

감사의 글

본 연구는 2005년도 인천대학교 학술연구조성비 지원에 의

하여 수행되었습니다.

참고문헌

- [1] A. J. Freeman and R. Wu, *J. Magn. Magn. Mater.* **100**, 497 (1991).
- [2] T. Nautiyal, T. H. Rho, and K. S. Kim, *Phys. Rev. B* **69**, 193404 (2004).
- [3] S. R. Bahn and K. W. Jacobsen, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 266101 (2001).
- [4] M. Springborg and P. Sarkar, *Phys. Rev. B* **68**, 045430 (2003).
- [5] D. Sánchez-Portal, E. Artacho, J. Junquera, P. Ordejón, A. García, and J. M. Soler, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3884 (1999).
- [6] C. Jo and J. I. Lee, *Phys. Stat. Sol. (b)* **241**, 1427 (2004).
- [7] G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
- [8] J. P. Perdew, K. Burke, and Y. Wang, *Phys. Rev. B* **54**, 16533 (1996).
- [9] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **24**, 864 (1981); M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **26**, 4571 (1982).

Magnetic Properties of Fe-Pt Nanowires with Linear and Zigzag Structures

Y.-R. Jang*

Department of Physics, University of Incheon, Incheon 402-749, Korea

Chulsu Jo

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

Department of Physics and Astronomy, University of California, Irvine, California 92697, USA

J. I. Lee

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

(Received 2 December 2005, in final form 16 December 2005)

We investigated the structural and magnetic properties of Fe-Pt nanowires with linear and zigzag structures by using first-principle calculational methods. Structural degrees of freedom are optimized, the bond lengths and bond angles are determined, magnetic moments, spin density, and density of states are calculated. Results show that the zigzag structure is more stable than the linear one, and has a longer bond length and smaller magnetic moments for both Fe and Pt atoms.

Key words : Fe-Pt, nanowire, first-principle calculation, binding energy, bond length, bond angle, magnetic moment