ISSN (Print) 1598-5385
ISSN (Online) 2233-6648
≪연구논문≫ Journal of the Korean Magnetics Society 27(2), 41-48 (2017) https://doi.org/10.4283/JKMS.2017.27.2.041

First Principles Calculations on Magnetism of $CrPt_3$(001) Thin Films

Tae Sung Jeong, Soyoung Jekal, S. H. Rhim, and S. C. Hong*
Department of Physics and EHSRC, University of Ulsan, Ulsan 44610 Korea

(Received 17 February 2017, Received in final form 18 April 2017, Accepted 18 April 2017)

Recent study shows that ordered alloy of $L1_2$ XPt_3 (M = V, Cr, Mn, Co, and Fe) exhibits various magnetic phases such as ferromagnetic-to-antiferromagnetic transition at the $MnPt_3$ surface. Moreover, it has been argued that $CrPt_3$, in particular, possess large magnetocrystalline anisotropy and Kerr rotation with possible violation of Hund's rule. As such, we extend our work to thickness dependence of the magnetic structure of $CrPt_3$ thin film using density functional theory. Magnetic ground state of the bulk $CrPt_3$ turns out to be ferromagnetic (FM), where other magnetic phases such as A-type (A-AF), C-type (C-AF), and G-type antiferromagnetic (G-AF) state have higher total energies than FM by 0.517, 0.591, and 0.183 eV, respectively, and magnetic moments of Cr in bulk are respectively 2.807 (FM), 2.805 (A-AF), 2.794 (C-AF) and 2.869 μ_B (G-AF). We extend our study to $CrPt_3$(001) thin films with CrPt- and Pt-termination. The thickness and surface-termination dependences of magnetism are investigated for 3-9 monolayers (ML), where different magnetic phases from bulk emerge: C-AF for CrPt-terminated 3 ML and G-AF for Pt-terminated 5 ML have energy difference relative to FM by 8 and 54 meV, respectively. Furthermore, thickness- and surface-termination-dependent magnetocrystalline anisotropies of the $CrPt_3$(001) films are discussed.

Keywords : magnetocrystalline anisotropy, first principle calculation, magnetism

$CrPt_3$(001) 박막의 자성: 제일원리계산

정태성 · 제갈소영 · 임성현 · 홍순철*
울산대학교 물리학과, 울산시 남구 대학로 93, 44610

(2017년 2월 17일 받음, 2017년 4월 18일 최종수정본 받음, 2017년 4월 18일 게재확정)

$CrPt_3$ 합금은 큰 Kerr 효과를 보여 주는 강한 자기결정 이방성을 가지고 있고 흥미롭게도 훈트 제3법칙을 따르지 않는 것으로 알려져 있다. 본 연구에서는 $CrPt_3$ 합금 박막의 두께의 따른 자성과 자기결정 이방성의 변화를 제일원리계산 방법을 이용하여 연구하였다. 기준 자료로 활용하기 위해 덩치 $CrPt_3$의 다양한 자성 상태, 즉 강자성(FM), A-, C-, G-type 반강자성(A-, C-, G-AF)에 대한 계산을 우선 수행하였는데 덩치 $CrPt_3$은 FM 상태가 안정하였고 이는 실험과 일치하였다. A-, C-, G-AF 상태가 FM 상태일 때 보다 총에너지가 각각 0.517, 0.591, 0.183 eV 만큼 높았고 Cr의 자기모멘트는 FM, A-, C-, G-AF 일 때 각각 2.782, 2.805, 2.794, 2.869 μ_B으로 확인되었다. $CrPt_3$(001) 박막의 표면은 CrPt 표면과 Pt 표면으로 두 종류의 원소 구성을 가질 수 있다. 각각의 표면에 대해 3층에서 9층까지 두께를 변화시켜 가면서 계산을 수행하였다. CrPt 표면의 3층 박막은 덩치와는 다르게 C-AF 상태가 FM 상태에 비해 8 meV 안정하였고 그 보다 두꺼운 5층, 7층, 9층 박막은 덩치처럼 FM 상태가 안정하였다. Pt 표면의 3층 박막은 C-AF 상태가 FM 상태에 비해 37 meV, 5층 박막은 G-AF이 FM 상태에 비해 54 meV 만큼 안정하였고 그 보다 두꺼운 7, 9층 박막은 덩치와 같이 FM 상태가 더 안정하였다.

주제어 : 자기이방성, 제일원리계산, 자성, 전자구조

I. 서 론

자성은 주변 환경에 매우 민감한 물리 현상이어서 원자 수준까지 감지할 수 있는 최신 실험 기술의 발달로 이전에는 규명할 수 없었던 자성을 연구할 수가 있게 되었다[1]. 자성은 표면 등 차원이 감소하면 덩치와는 다른 자성을 보이기도 하고[2, 3], 자성이 없던 물질도 빈 격자 공간에서 자성을 보여 주는 등[4], 덩치에서는 자성이 없던 물질도 특별한 환경에서는 자성이 보이기도 한다[1, 5]. $MnPt_3$(001) 표면 자성에

© The Korean Magnetics Society. All rights reserved.
*Corresponding author: Tel: +82-52-259-2331,
Fax: +82-52-259-1693, e-mail: schong@ulsan.ac.kr

대해 흥미로운 계산 및 실험 연구 결과가 보고된 바 있는데, 덩치에서는 강자성(FM) 상태가 안정한 $MnPt_3$(001) 표면은 덩치와는 다르게 반강자성(AF) 상태가 더 안정하다는 것이 발견되었고[6], 이와는 반대로 덩치에서는 AF 상태가 안정한 $MnAu_3$(001) 표면은 덩치와는 다르게 FM 상태가 안정할 수 있음을 보여 주는 연구 결과도 보고되었다[7].

덩치 XPt_3(X = V, Cr, Mn, Co, Fe) 합금은 각기 다른 다양한 자성을 보여준다. VPt_3, $CrPt_3$는 준강자성 상태, $MnPt_3$, $CoPt_3$는 FM 상태, $FePt_3$는 AF 상태가 안정한 것으로 알려져 있다. 이들 XPt_3 중에서 $CrPt_3$ 합금은 상당히 강한 자기결정 이방성(MCA: magnetocrystalline anisotropy)을 가지는 것으로 보고되었다[8]. $AuCu_3$ ($L1_2$) 결정 구조의 $CrPt_3$ 합금은 (111) 축 방향으로 약 0.3 meV/unit-cell의 MCA 에너지를 갖는 강한 MCA를 갖는다[8, 9]. 강한 MCA의 $CrPt_3$ 합금은 상당한 광자기 커 효과(magneto-optical Kerr effect)를 보여주고 있어 광자기(magneto-optical) 녹음 등에 응용이 가능할 것으로 기대되고 있다[10, 11]. 학문적인 관점에서$CrPt_3$은 훈트 제3법칙을 따르지 않는 것으로 알려져 있어 흥미롭다[12].

XPt_3 결정구조는 $L1_2$, 혹은 층 쌓기가 $L1_2$와 약간 상이한 $D0_{22}$ 인데, $CrPt_3$는 $L1_2$ 구조가 안정하다고 알려져 있어 본 연구에서는 $L1_2$ 구조 $CrPt_3$(001) 박막의 자성을 중심으로 제일원리계산을 수행하였다. 박막의 표면 조성과 박막의 두께에 따른 자성의 변화를 살펴 보았고 박막에서의 MCA 에너지도 계산하였다. 기준 자료를 확보하기 위해 덩치 $CrPt_3$ 자성을 계산하였고 다른 계산 결과와 비교하여 본 연구의 계산의 엄밀성도 동시에 점검하였다.

II. 계산방법

$CrPt_3$ 박막의 표면 조성과 두께의 따른 자기모멘트와 자성을 확인하기 위하여 Vienna ab-initio simulation package (VASP)[13-15]을 이용하여 계산을 수행하였다. 계산에서 사용된 슈도포텐셜은 projected augmented wave(PAW)[16]로 생성하였다. 전자들 사이의 교환상관 작용을 고려하기 위해 Perdew-Burke-Ernzerhof에 의해 정립된 gerneralized gradient approximation(GGA)[17] 방법을 사용하였다. Fig. 1(a)는 $CrPt_3$의 구조인 $L1_2$ 구조를, (b)는 다양한 반강자성을 고려하기 위한 c(2 × 2) × 2 격자를 보여주고 있다. 역격자 영역의 적분을 수행하기 위해 덩치에서는 8 × 8 × 8, 박막에서는 8 × 8 × 1의 Monkhorst-Pack k-점 그물을 사용하였다. 절단 에너지(cutoff energy) 450 eV까지의 평면파를 기저함수로 사용하였다. Fig. 2는 본 연구에서 고려한 A-type(A-AF), C-type (C-AF), G-type(G-AF) AF 상태를 보여주고 있다. 박막 계산에서는 표면 간의 상호작용을 무시하기 위해 표면과 표면 사이에 약 15 Å의 진공 영역을 설정하였다. 박막의 MCA 에너지를 계산하기 위한 2차원 역격자 영역의 적분을 수행하기 위하여 18 × 18 × 1 Monkhorst-Pack k-점 그물을 사용하였다.

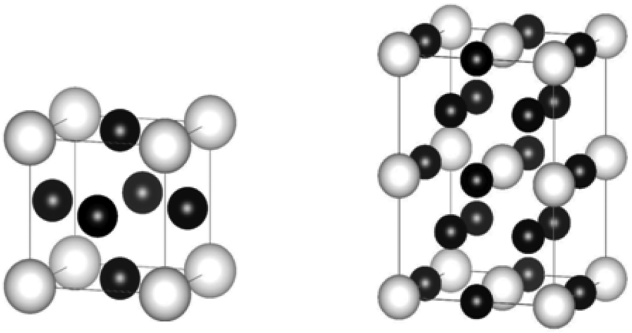

Fig. 1. Crystal structure of $L1_2$ $CrPt_3$ with (a) (1 × 1), and (b) ($a' = b' = \sqrt{2}a$, $c' = 2c$) supercells.

III. 계산결과

1. 덩치 $CrPt_3$

$CrPt_3$의 격자상수를 결정하기 위해서 격자상수의 함수로 FM, A-AF, C-AF, G-AF 상태의 총에너지 계산을 수행하였다. 계산결과에 의하면 $CrPt_3$는 FM 상태가 가장 안정하였으

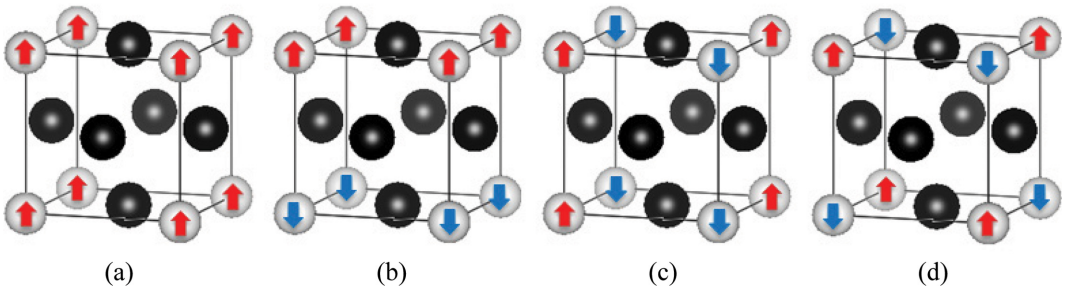

Fig. 2. (Color online) Magnetic configurations of (a) Ferromagnetism (FM) (b) A-type Antiferromagnetism (A-AF) (c) C-type Antiferromagnetism (C-AF) (d) G-type Antiferromagnetism (G-AF).

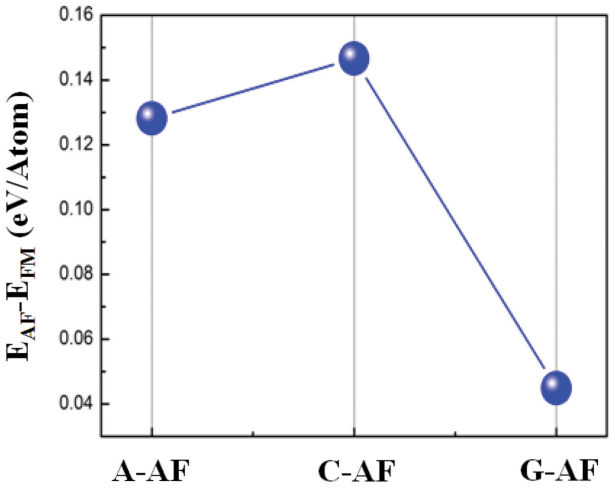

Fig. 3. (Color online) Total energy difference of bulk $CrPt_3$ in the AF state from the FM state.

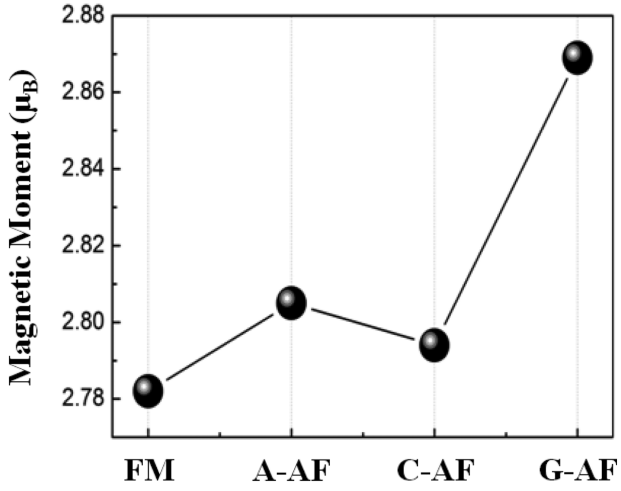

Fig. 4. Calculated magnetic moment of bulk $CrPt_3$.

며 격자상수는 3.925 Å이었다. 이 값은 실험치 3.877 Å보다 0.048 Å 만큼 컸고 교환-상관 상호작용을 GGA로 나타낼 때 보이는 일반적인 효과이다. Fig. 3은 덩치 $CrPt_3$의 각 AF 상태의 총에너지를 FM 상태의 총에너지를 기준으로 표시한 것이다. A-AF, C-AF, G-AF의 에너지는 FM 상태에 비해 0.128 eV, 0.147 eV, 0.045 eV 만큼 높게 계산되어 AF 상태 중에서는 G-AF 상태가 가장 총에너지가 낮음을 알 수 있었다.

Fig. 4는 덩치 $CrPt_3$에서의 Cr의 자기모멘트를 보여주고 있는데 FM은 2.782 μ_B, A-AF은 2.805 μ_B, C-AF은 2.794 μ_B, G-AF은 2.869 μ_B를 가져 AF 상태가 FM 상태보다 조금이나마 큰 자기모멘트를 가짐을 알 수 있었다.

덩치 $CrPt_3$의 전자 상태밀도는 Fig. 5에 나타내었다. 먼저 총 전자 상태 밀도는 검은 실선으로 나타내었고, 고동 실선, 초록 점선은 각각의 Cr, Pt 원자에 투영된 전자 상태밀도를 의미한다. 다음으로는 Cr, Pt 원자의 d 오비탈 별로 투영된 전자 상태밀도를 나타내었다.

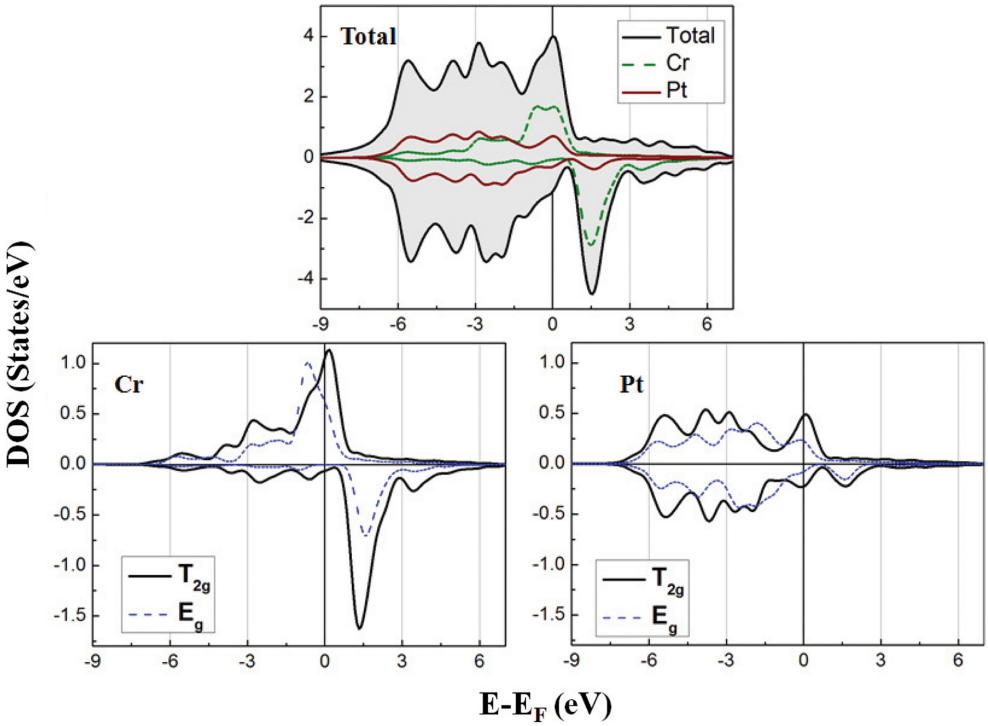

Fig. 5. (Color online) Calculated atom-projected DOS of bulk $CrPt_3$ in the FM statet.

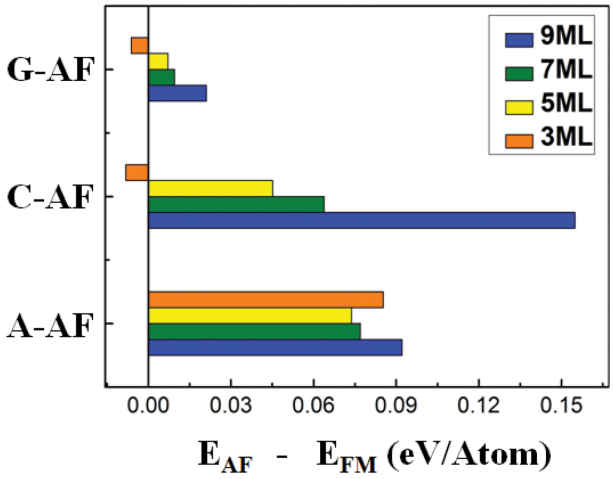

Fig. 6. (Color online) Total energy difference of the CrPt-terminated $CrPt_3$ thin film in the AF state from the FM state.

2. CrPt 표면으로 끝나는 $CrPt_3$(001) 박막

2.1 자성상태

CrPt 표면으로 끝나는 $CrPt_3$(001) 박막의 두께에 따른 자성 변화를 계산하기 위해 본 연구에서는 3, 5, 7, 9층 두께의 박막을 설정하였다. 2차원 격자상수는 덩치 $CrPt_3$에서 얻어진 격자 상수를 그대로 사용하였다. Fig. 6는 각 박막에서의 총 에너지를 FM 상태를 기준으로 나타내고 있다. 5, 7, 9층 박막은 FM 상태일 때 가장 안정하였으나 3층에서는 C-AF 상태가 가장 안정하였다.

9층 박막의 총에너지가 낮은 순이 FM, G-AF, A-AF, C-AF로 덩치와 같은 순이었고 각각의 AF 상태의 총에너지는 FM 상태에 비해 0.021 eV, 0.092 eV, 0.155 eV 만큼 높았다. 7층 박막 경우에는 FM 상태가 가장 안정인 것은 같으나 총 에너지가 낮은 순서가 FM, G-AF, C-AF, A-AF으로 A-AF과 C-AF 상태의 순서가 바뀌는 것으로 계산되었다. FM 상태에 비해 각각의 AF 상태의 총에너지는 0.009 eV, 0.064 eV, 0.077 eV 만큼 높았다. 5층 박막은 7층 박막과 같은 양상을 보여 주고 있는데 G-AF, C-AF의 총에너지가 더욱 낮아져 FM 상태에 비해 각각 0.007 eV, 0.045 eV 만큼만 높아 G-AF 상태가 FM 상태와의 총에너지에서 차이가 거의 없어져 감을 알 수 있다. A-AF 상태는 FM 상태에 비해 0.074 eV 만큼 높았다. 3층 박막은 AF 상태가 FM 상태보다도 더 안정인 것으로 계산되었다. C-AF 상태일 때 가장 안정하였고 A-AF, C-AF, G-AF의 총에너지는 FM 상태를 기준으로 0.085 eV, –0.008 eV, –0.006 eV이었다.

2.2 자기모멘트

Table I은 CrPt 표면으로 끝나는 FM 상태의 $CrPt_3$(001) 박막에서의 Cr의 자기모멘트를 보여 주고 있다. 9층 박막의 중앙층 Cr(C)의 자기모멘트는 2.789 μ_B로 덩치 $CrPt_3$에서의 Cr의 자기모멘트와 거의 같음을 보여 주는데, 9층 박막은 충분히 두꺼워 덩치 표면의 특성을 보여 주는 것임을 암시한다. 표면층 Cr(S)의 자기모멘트는 3.277 μ_B로 덩치에 비해 약 17 % 증가했음을 알 수 있다. 표면 아래층 Cr(S-2)의 자기모멘트는 아주 약간 감소하여 2.758 μ_B이었다. 5, 7층 박막 모두 다 9층 박막과 유사한 경향을 보여 주고 있음을 Table I로부터 알 수 있다. Cr이 표면층 밖에 없는 3층 박막의 Cr(S)의 자기모멘트는 3.291 μ_B으로 두꺼운 박막과 큰 차이가 없음은 주목할 만하다.

Table I. Calculated magnetic moment of Cr in the CrPt-terminated $CrPt_3$ in the FM state.

	CrPt (C)	CrPt (S-2)	CrPt (S)
9ML	2.789 μ_B	2.758 μ_B	3.277 μ_B
7ML	-	2.745 μ_B	3.256 μ_B
5ML	2.761 μ_B	-	3.287 μ_B
3ML	-	-	3.291 μ_B

Table II. Calculated magnetic moment of Cr in the CrPt-terminated $CrPt_3$ in the C-AF state.

	CrPt (C)	CrPt (S-2)	CrPt (S)
9ML	0.008 μ_B	2.943 μ_B	3.416 μ_B
7ML	-	2.784 μ_B	3.451 μ_B
5ML	2.709 μ_B	-	3.457 μ_B
3ML	-	-	3.383 μ_B

Table II에서는 3층 박막일 때 가장 안정된 상태를 보여 주는 C-AF 상태일 때의 Cr의 자기모멘트를 나타낸 것이다. Table II에서 볼 수 있는 바와 같이 9층 박막의 중앙층 Cr(C)의 자기모멘트는 0.008 μ_B으로 거의 없음을 보여 주고 있는데 그 원인에 대해서는 아직 규명하지 못 하였다. 표면층 Cr(S)의 자기모멘트는 3.416 μ_B이었고 표면 아랫층 Cr(S-2)의 자기모멘트는 2.943 μ_B로 FM 상태에 비해 증가돼 있었음을 보여 주고 있다. 7층 박막의 경우에는 Cr(S)는 3.451 μ_B, Cr(S-2)에서는 2.784 μ_B이었고 5층 박막의 Cr(S)과 Cr(C)는 각각 3.457 μ_B와 2.709 μ_B의 자기모멘트를 가졌다. 마지막으로 3층 박막의 Cr(S)의 자기모멘트는 3.383 μ_B으로 모두 FM 상태에 비해서 자기모멘트가 증가했음을 알 수 있었다.

2.3 전자 상태밀도

Fig. 7은 CrPt 표면으로 끝나는 C-AF 상태일 때 $CrPt_3$(001) 박막 3층에서의 전자 상태밀도를 나타낸 것이다. 먼저 총 전자 상태 밀도는 검은 실선으로 나타낸 것이고 파란색 실선은 C-AF 상태에서의 Cr 원자에 투영된 전자 상태밀도를 나타낸 것이고 빨간색, 올리브색 점선은 각각 표면 Pt 원자, 중앙 Pt 원자에 투영된 전자 상태밀도를 나타낸 것이다. 다음으로는 표면의 Cr 원자의 d 오비탈에 따른 전자상태를 확인하였고,

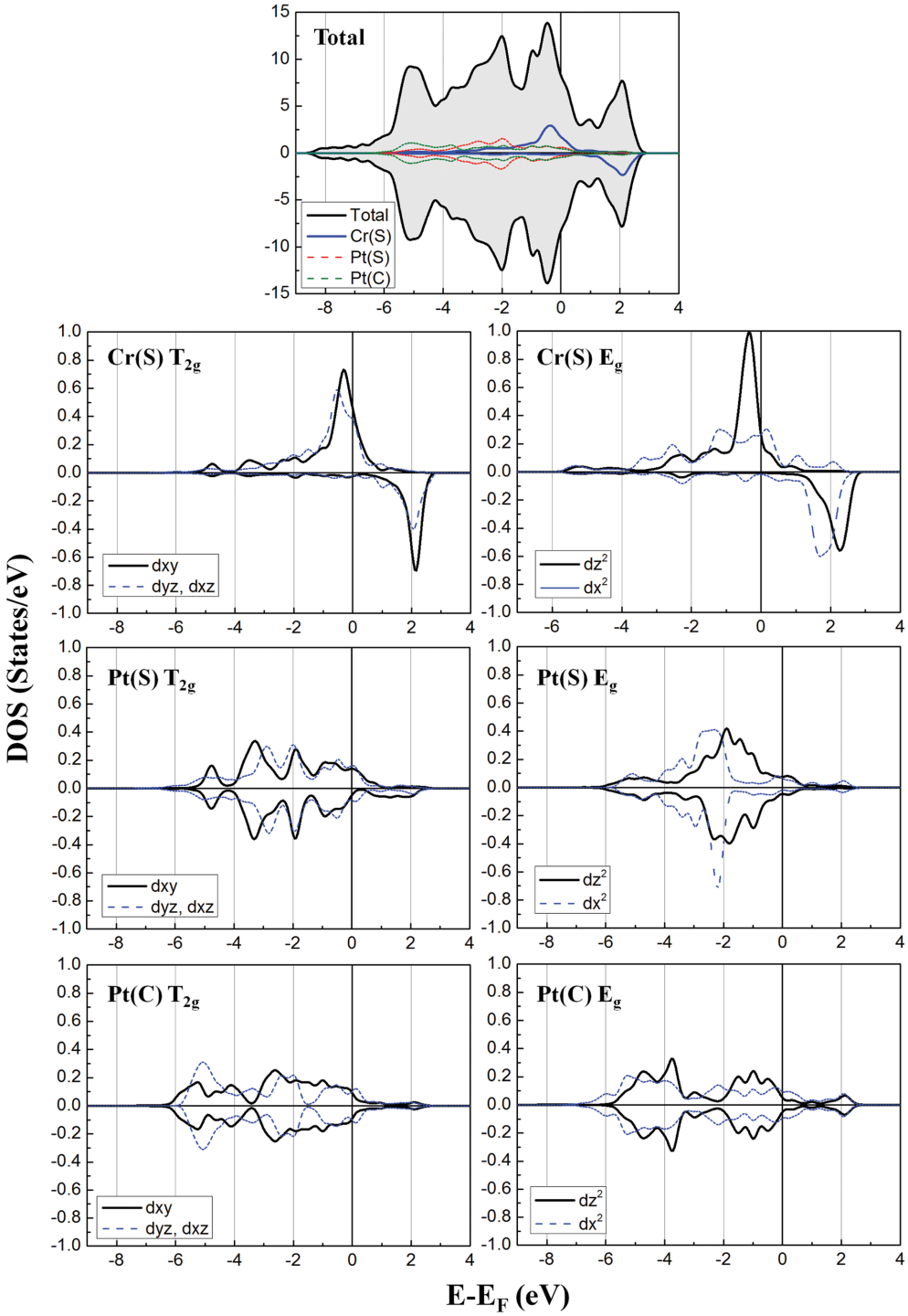

Fig. 7. (Color online) Calculated atom-projected DOS of the CrPt terminated 3ML $CrPt_3$(001) thin film in the C-AF state.

표면과 중앙의 Pt 원자의 d 오비탈에 따른 전자 상태 밀도를 확인할 수 있었다.

3. Pt 표면으로 끝나는 $CrPt_3$ 박막

3.1 자성 상태

Pt 표면으로 끝나는 3, 5, 7, 9층 두께의 $CrPt_3$(001) 박막의 자성을 계산하였다. Fig. 8는 각 박막의 총에너지를 FM 상태를 기준으로 나타내고 있다. 7층과 9층 박막은 덩치와 같이 FM 상태일 때 가장 안정하였으나 3층 박막에서는 Cr을 포함하는 층이 한 층 밖에 없어 G-AF와 C-AF 상태를 구별하는 것이 무의미함을 감안하면 그 보다 얇은 3층과 5층은 G-AF 상태가 가장 안정하였다.

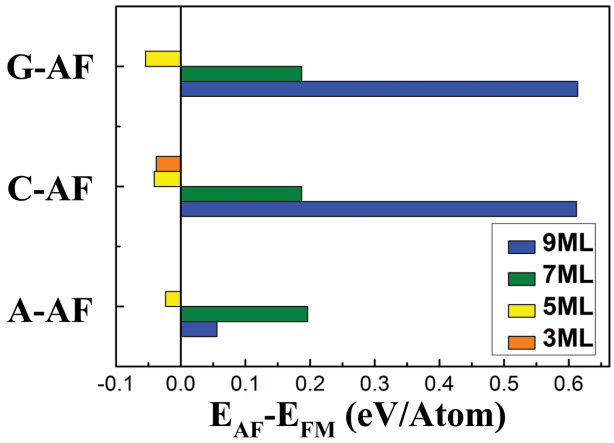

Fig. 8. (Color online) Total energy difference of the Pt-terminated $CrPt_3$ thin film in the AF state from the FM state.

FM 상태가 가장 안정한 Pt로 끝나는 9층 박막의 총에너지가 낮은 순은 A-AF, C-AF, G-AF 상태로 각 AF 상태의 총에너지는 FM 상태에 비해 0.056 eV, 0.612 eV, 0.614 eV 만큼 높았는데 A-AF 상태의 총에너지가 크게 감소한 것은 주목할 만하다. 7층 박막은 각 AF 상태 사이의 총에너지는 무시할 수 있을 정도로 작은 것이 특징인데 가장 안정한 FM에 비해 A-AF, C-AF, G-AF의 총에너지는 각각 0.196 eV, 0.187 eV, 0.186 eV 만큼 높았다. 5층 박막도 7층 박막처럼 각 AF 상태 사이의 총에너지는 무시할 수 있을 정도로 작은데 각 AF 상태가 FM 상태보다도 안정한 것이 특징이다. A-AF, C-AF, G-AF의 총에너지는 FM 상태를 기준으로 –0.023 eV, –0.041 eV, –0.054 eV이었다. Cr을 포함하는 층이 한 층 밖에 없는 3층 박막의 AF 상태는 C-AF 상태만 설정할 수 있는데 C-AF 상태가 FM 상태를 기준으로 비해 –0.037 eV 이었다.

3.2 자기모멘트

Table III은 FM 상태일 때 Pt로 끝나는 $CrPt_3$(001) 박막의 Cr의 자기모멘트를 나타낸 것이다. 9층 박막 중에서 가장 안 쪽에 위치한 Cr(S-3)은 2.819 μ_B, 가장 바깥 쪽에 위치한 Cr(S-1)은 2.655 μ_B을 가짐을 표로부터 알 수 있는데 전반적으로 CrPr로 끝나는 박막에 비해 자기모멘트가 감소하였다. 7층 박막은 9층 박막의 자기모멘트와 유사한 경향을 보여 주는데 Cr(C)는 2.880 μ_B, Cr(S-1)는 2.675 μ_B의 자기모멘트를 가졌다. 5층 박막의 Cr(S-1)는 2.692 μ_B, 3층 박막의 Cr(C)은 2.630 μ_B이었다.

Table III. Calculated magnetic moment of Cr in the Pt-terminated $CrPt_3$ in the FM state.

	CrPt (C)	CrPt (S-3)	CrPt (S-1)
9ML	-	2.819 μ_B	2.655 μ_B
7ML	2.880 μ_B	-	2.675 μ_B
5ML	-	-	2.692 μ_B
3ML	2.630 μ_B	-	-

Table IV. Calculated magnetic moment of Cr in the Pt-terminated $CrPt_3$ in the G-AF state.

	CrPt (C)	CrPt (S-3)	CrPt (S-1)
9ML	-	0.015 μ_B	0.015 μ_B
7ML	0.018 μ_B	-	2.756 μ_B
5ML	-	-	2.793 μ_B
3ML	2.699 μ_B	-	-

Table IV에서는 3, 5층 박막에서 가장 안정된 상태를 보여주는 G-AF 상태일 때 Cr의 자기모멘트를 보여 주는 것이다. 9층 박막의 Cr 자기모멘트가 무시할 수 있을 정도로 작음이 주목할 만 하지만 그 원인에 대해서는 규명하지 못하였다. 7층 박막의 Cr(S-1)의 자기모멘트는 덩치와 유사한 2.756 μ_B이나 Cr(C)의 자기모멘트는 0.018 μ_B으로 무시할 만큼 작았다. 3, 5층 박막의 자기모멘트는 Cr(C)은 2.699 μ_B, Cr(S-1)에서는 2.793 μ_B이었다.

3.3 전자 상태밀도

Fig. 9은 Pt 표면으로 끝나는 C-AF 상태일 때 $CrPt_3$(001) 박막 3층에서의 전자 상태밀도를 나타낸 것이다. 먼저 총 전자 상태 밀도는 검은 실선으로 나타낸 것이고 파란색 실선은 C-AF 상태에서의 Cr 원자에 투영된 전자 상태밀도를 나타낸 것이고 올리브색, 빨간색 점선은 각각 표면 Pt 원자, 중앙 Pt 원자에 투영된 전자상태밀도를 나타낸 것이다. 다음으로는 표면과 중앙의 Pt 원자의 d 오비탈에 따른 전자상태를 확인하였고, 중앙의 Cr 원자의 d 오비탈에 따른 전자 상태 밀도를 확인할 수 있었다.

4. 자기결정이방성 에너지

AF 상태가 안정한 3층 표면 박막의 자기결정이방성 에너지 계산을 수행하였다. k-점에 대한 자기이방성 에너지의 수렴성을 확인하기 위해 Monkhorst-Pack k-점 그물을 12 × 12 × 1부터 20 × 20 × 1 k-점까지 k-점 수를 늘려가며 계산을 수행하였고 그 결과 18 × 18 × 1 Monkhorst-Pack k-점 그물이면 수렴된 자기이방성 에너지를 얻을 수 있음을 알았다. CrPt 표면으로 끝나는 3층 $CrPt_3$(001) 박막은 C-AF 상태의 자기결정이방성 에너지는 +6.34 meV/(unit cell)로 수직 자기이방성을 갖는 데에 비해 Pt 표면으로 끝나는 3층 $CrPt_3$(001) 박막은 C-AF 상태의 자기결정이방성 에너지는 –5.46 meV/(unit cell)로 수평 자기이방성을 가짐을 확인하였다.

IV. 결 론

$CrPt_3$ 합금은 덩치구조일 때 FM 상태가 안정하였고 A-,

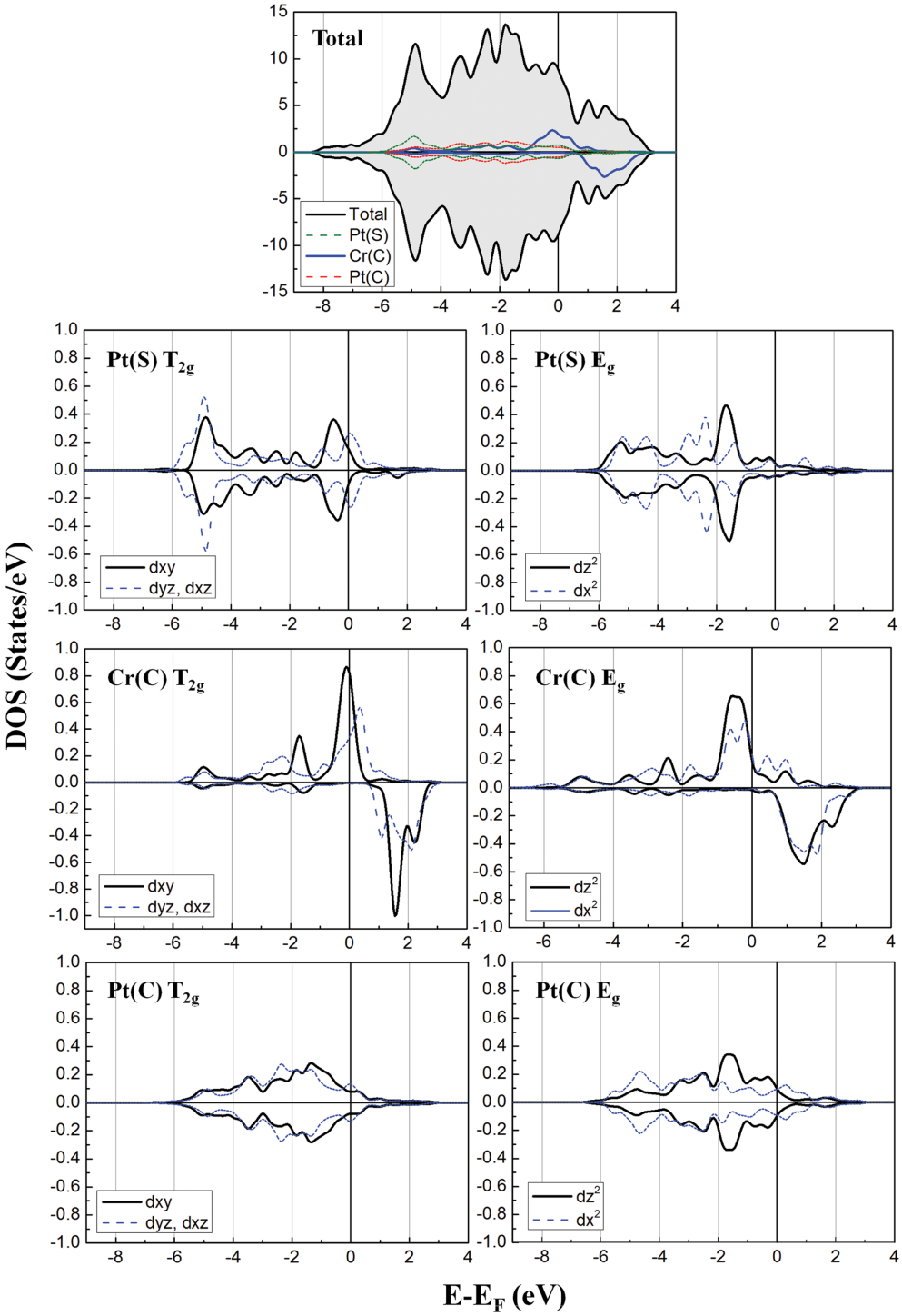

Fig. 9. (Color online) Calculated atom-projected DOS of the Pt terminated 3ML $CrPt_3$(001) film in the C-AF state.

C-, G-AF 상태가 FM 상태일 때 보다 총에너지가 각각 0.517, 0.591, 0.183 eV 만큼 높았다. Cr의 자기모멘트는 FM, A-, C-, G-AF 일 때 각각 2.807, 2.805, 2.794, 2.869 μ_B으로 확인되었다.

$CrPt_3$(001) 박막의 표면은 CrPt 표면과 Pt 표면으로 계산을 진행 하였고, CrPt 표면의 3층 박막은 덩치와는 다르게 C-AF 상태가 FM 상태에 비해 8 meV 안정하였고 그 보다 두꺼운 5층, 7층, 9층 박막은 덩치처럼 FM 상태가 안정하였다. 3층 박막의 Cr의 자기모멘트는 FM 상태일 때 3.291 μ_B 확인하였고, C-AF 상태일 때는 3.383 μ_B으로 확인하였다. Pt 표

면의 3층 박막은 C-AF 상태가 FM 상태에 비해 37 meV, 5층 박막은 G-AF이 FM 상태에 비해 54 meV 만큼 안정하였고 그 보다 두꺼운 7, 9층 박막은 덩치와 같이 FM 상태가 안정하였다. 3층 박막의 Cr의 자기모멘트는 FM 상태일 때 2.630 μ_B 확인하였고, C-AF 상태일 때는 2.699 μ_B으로 확인하였다.

AF 상태가 안정한 3층 표면 박막의 자기결정이방성 에너지 계산을 수행하였다. CrPt 표면으로 끝나는 3층 $CrPt_3$(001) 박막은 C-AF 상태의 자기결정이방성 에너지는 수직 자기이방성을 갖고 Pt 표면으로 끝나는 3층 $CrPt_3$(001) 박막은 C-AF 상태의 자기결정이방성 에너지는 수평 자기이방성을 가짐을 확인하였다.

감사의 글

이 논문은 2009년도 교육부의 중점연구소 지원 사업(NRF-2009-0093818)과 2015년도 미래창조과학부의 기초연구지원 사업(NRF-2015R1A2A2A01003621)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행되었기에 이에 고마움을 표합니다.

References

[1] T. L. Makarova, B. Sundqvist, R. Höhne, P. Esquinazi, Y. Kopelevich, P. Scharff, V. A. Davydov, L. S. Kash-evarova, and A. V. Rakhmanina, Nature (London) **413**, 716 (2001).
[2] W. S. Yun and S. C. Hong, J. Korean Phys. Soc. **53**, 384 (2008).
[3] M.-J. Woo and S. C. Hong, J. Korean Phys. Soc. **48**, 1405 (2006).
[4] J. J. Palacios and J. Fernandex-Rossier, Phys. Rev. B **77**, 195428 (2008).
[5] S. C. Hong, J. I. Lee, and R. Wu, Phys. Rev. B **75**, 172402 (2007).
[6] W. Kim, S. C. Hong, J. Seo, S.-J. Oh, H. G. Min, and J.-S. Kim, Phys. Rev. B **70**, 174453 (2004).
[7] W. Kim, S.-J. Oh, J. Seo, H. G. Min, S. C. Hong, and J.-S. Kim, Phys. Rev. B **65**, 205407 (2002).
[8] T. D. Leonhardt, Y. Chen, M. Rao, D. E. Laughlin, D. N. Lambeth, and M. H. Kryder, J. Appl. Phys. **85**, 4307 (1999).
[9] M. Maret, M. Albrecht, J. Köhler, R. Poinsot, C. Ulhaq-Bouillet, J. M. Tonnerre, J. F. Berar, and E. Bucher, J. Magn. Magn. Mater. **218**, 151 (2000).
[10] M. Vergöhl and J. Schoenes, J. Magn. Soc. Japan **20**, S1, 141 (1996).
[11] J. Cho, M. Park, H.-S. Kim, T. Kato, S. Iwata, and S. Tsunashima, J. Appl. Phys. **86**, 3149 (1999).
[12] I. Galanakis, P. M. Oppeneer, P. Ravindran, L. Nord-ström, P. James, M. Alouani, Dreyssé, and O. Eriksson, Phys. Rev. B **63**, 172405 (2001).
[13] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
[14] G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mater. Sci. **5**, 15 (1996).
[15] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
[16] P. E. Blöchl, Phys. Rev. B **50**, 17953 (1994).
[17] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).