

전이 금속이 도핑된 ZnO의 자성에 대한 제일 원리 계산 First-principles calculations on magnetism of transition metal doped zinc oxide

윤선영, 차기범, 권영수, 조성래, 홍순철
울산대학교 물리학과 울산시 남구 무거동 산 29. 680-749

전자의 스핀정보를 이용한 spintronics 기술이 발전하면서 상온 강자성 반도체에 대한 연구가 주목을 각광 받고 있다. 자성반도체에 대한 연구는 diluted magnetic semiconductor(DMS)에 대한 연구로 시작되었다 할 수 있다. 과거 DMS는 II-IV족 또는 III-V족 반도체에 Mn, Cr, Co, Fe 원소들을 도핑시켜 제작하여 왔으나, 상온 이상에서 강자성 특성을 가지는 DMS를 제작하는 데는 실패하였다. 최근에 Dietl 팀[1]이 mean field 이론을 이용하여 망간이 도핑된 ZnO가 실온이상의 Tc를 가질 수도 있을 것으로 예측하였다.

본 연구에서는 ZnO에 도핑된 전이금속(TM)의 종류에 따른 자기적 특성을 연구하기 위해서 3d와 4d의 여러 종류의 전이금속(Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Ru, Pd, Ag)이 도핑된 ZnO(TM_{0.25}Zn_{0.75}O)에 대해 제일원리계산을 수행하였다. 자성연구에서 가장 적합한 방법으로 알려져 있는 Full-potential Linearized Augmented Plane Wave (FLAPW) 방법[2]을 사용하여 Kohn-Sham 방정식을 풀었다. 교환-상관 전위는 general gradient approximation(GGA)를 사용하였다. ZnO의 결정구조는 실험치 살창상수 $a=3.2495\text{\AA}$, $c=5.2069\text{\AA}$, $u=0.345$ 인 Wurtzite structure로 가정하였다[3]. 머핀틴 구 내부의 파동함수, 전하밀도, 전위를 $l_{\max}=8$ 까지 살창조화함수로 전개하였으며 기저함수는 원자 당 약 700개를 사용하였고, k-점 수는 108개를 사용하였다. 전이금속(Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Ru, Pd, Ag)이 도핑된 ZnO의 계산된 자기모멘트의 일부를 그림 1에서 보여 주고 있는데 각각 0.83, 3.03, 4.03, 3.48, 2.47, 1.56, 0.43, 0.75, 0.01 μ_B 이고, Ti 원자를 도핑 시킨 경우는 이전에 Sato 등이 Korringa-Kohn-Rostoker(KKR)로 계산한 결과[4]와는 차이가 있었다. KKR 결과에서는 Ti 원자의 ZnO 도핑의 경우 자기모멘트가 0 μ_B 이었으나, 본 연구에서는 1.24 μ_B 로 더 큰 결과를 가져왔다. 또한 본 연구의 결과로 3d와 4d의 전이금속 중에서 3d 전이금속의 도핑결과에서 더 큰 자기모멘트를 가지는 것을 보여주며, 가장 큰 자기모멘트를 가지는 화합물은 Mn_{0.25}Zn_{0.75}O로써 5 μ_B 에 가까웠다. 그림 2는 Mn_{0.25}Zn_{0.75}O 와 Pd_{0.25}Zn_{0.75}O 의 상태 밀도를 보여 주고 있다.

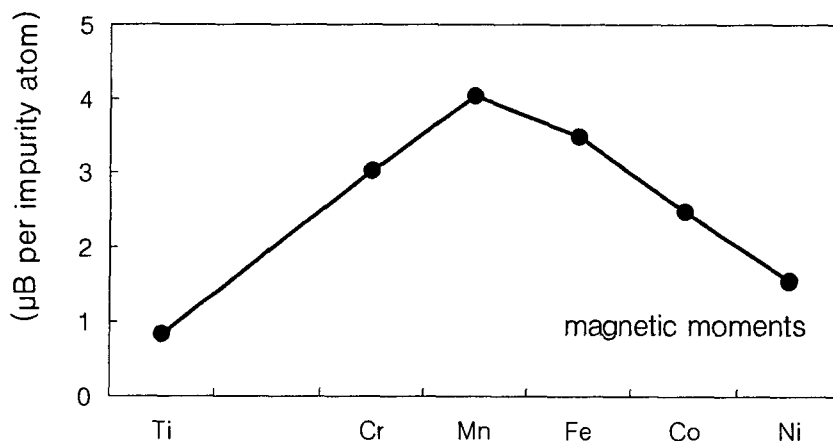


Figure 1. magnetic moment

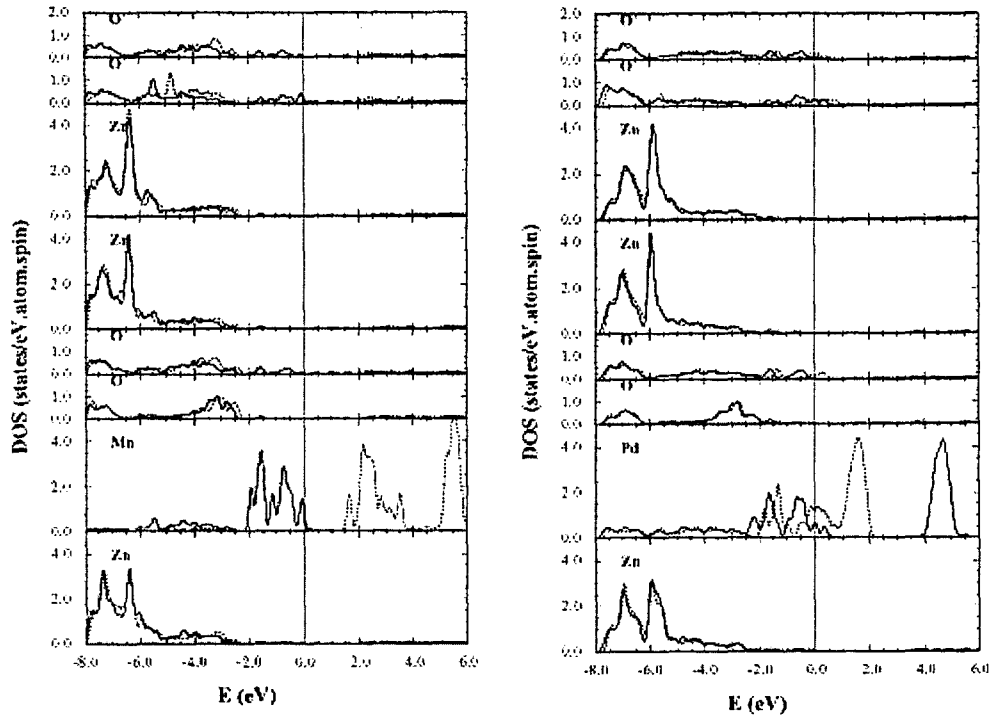


Figure 2. Atom projected density of state of (a) $\text{Mn}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{O}$ and (b) $\text{Pd}_{0.25}\text{Zn}_{0.75}\text{O}$. Solid (dotted) lines represent majority(minority) spin states

1. T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and D. Ferrand, *Science* **287**, 1019(2000).
2. E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **24**, 864 (1981) and references therein.
3. R.W.G. Wyckoff : *Crystal Structures*(Wiley, New York,1986) Vol. 1, 2nd ed., p112
4. K. Sato and H. Katayama-Yoshida, *Physica E* **10**, 251(2001).