

제일원리계산에 의한 MnSi의 전자적 구조와 자성
(Electronic Structure and Magnetism of MnSi by First Principles Calculations)

*이 승현, 홍 순철
울산대학교 물리학과

최근 자성체의 스핀현상을 이용하여 센서, 정보저장, 정보처리 등에 이용하려는 스핀트로닉스 분야에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 고진공 증착기술과 표면, 계면 과학의 급속한 발전으로 자성체의 자기적 특성을 좌우하는 원자 스핀간의 상관 거리인 나노미터(nm) 이하로 자성박막을 인위적으로 조절하여 제조할 수 있게 된 것이 연구가 활발하게 된 주요 원인 중에 하나이다. 이들 인위적 제조물질에서 기존의 자성체의 10 배 이상의 수직자기이방성이나 100 배 이상의 거대자기저항(GMR) 등 흥미로운 물리적 현상들이 발견되었다. 스핀트로닉스 중 스핀 분극된 전류를 이용하여 정보처리에 이용하려는 시도가 DMS(diluted magnetic semiconductor)를 중심으로 연구되고 있다. 일반적으로 DMS는 II-IV, III-V 반도체를 중심으로 연구되고 있으나 최근에는 보다 간단한 IV 족 반도체 (Ge, Si)에서도 DMS 물질이 보고되었다^[1,2,3,4].

자성은 결정 구조에 민감하므로 본 연구에서는 실리사이드의 결정구조를 조절하여 새로운 자성 반도체의 가능성 탐색하기 위해 우선적으로 MnSi에 대한 제일원리계산을 수행하였다. 그 방법으로는 full-potential linearized augmented plan wave(FLAPW)을 사용하였으며 교환 상관 포텐셜에 대해서 general gradient approximation(GGA)를 사용하였다.

MnSi 는 자연 상태에서 Cubic B20 구조를 가지고^[5] 있다. 본 연구에서는 우선 Si에 Mn을 도핑한 계의 전자적, 자기적 성질을 알아보았다. 기본 자료로 활용하여 하기 위해 자연 결정 구조인 B20 구조에 대해 전자적, 자기적 특성에 대해 먼저 논의한 후, Si에 Mn을 도핑 한 구조에 불순물을 첨가하거나 z축의 길이를 변화시켜서 그 물질의 전자적 구조와 자기적 성질에 대해서도 논의함으로써 새로운 자성 반도체로서의 활용 가능성에 대해 논의하고자 한다.

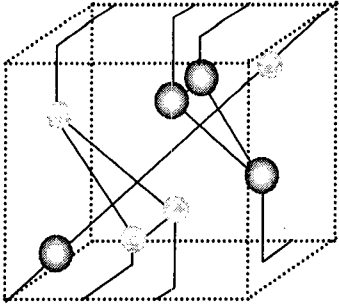




Figure 1. MnSi 결정구조

$$(u, u, u), (\frac{1}{2} + u, \frac{1}{2} - u, -u)$$

$$(-u, \frac{1}{2} + u, \frac{1}{2} - u), (\frac{1}{2} - u, -u, \frac{1}{2} + u)$$

$u_{Mn} = 0.137$
 $u_{Si} = 0.845$

 Mn
 Si

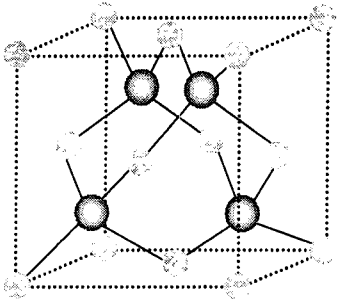


Figure 2. Mn - doped Si의 결정구조

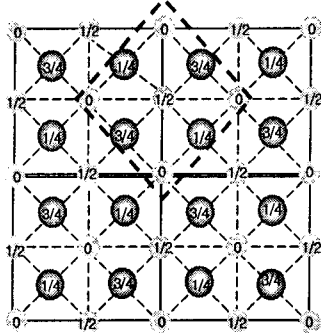


Figure 3. Top of Unit Cell

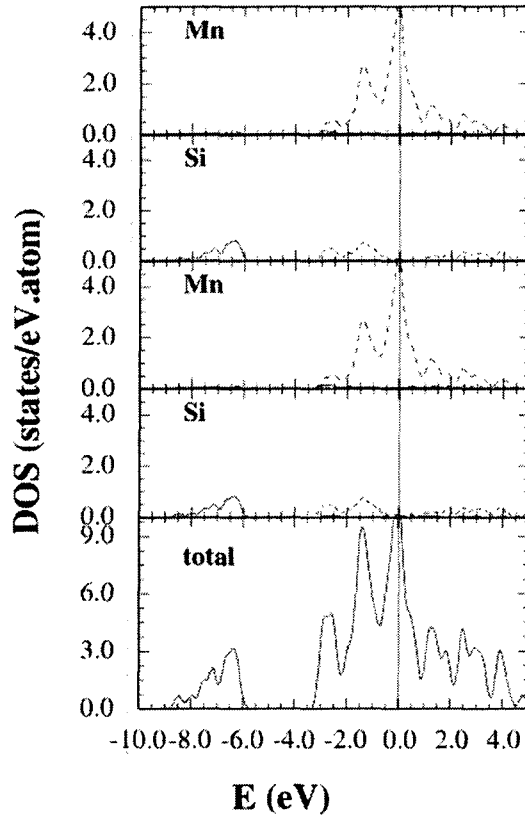


Figure 4. Mn - doped Si의 Paramagnetic DOS

References

- [1] S. Cho, S. Choi, S. C. Hong et al., Phys. Rev. B **66**, 033303(2002).
- [2] S. Choi, S. C. Hong, S. Cho et al., J. Appl. Phys. **93**, 7670(2003).
- [3] S. Choi, S. C. Hong, S. Cho et al., Appl. Phys. Lett. **81**, 3067(2002).
- [4] Y.D. Park, A. T. Hanbicki et al., Science **295**, 651 (2002).
- [5] T. Jeong, W. E .Pickett. Phys. Rev. B **70**, 075114 (2004).