

GdSi₂의 자성과 전자적 구조와 관한 제일원리계산 (First Principles Calculations on Electronic structure and Magnetism of GdSi₂)

*윤 원석, 차 기범, 홍 순철

울산 대학교 물리학과

21세기는 나노의 시대라 불리울 만큼 극미세 영역에 큰 관심을 갖게 되면서, 나노소재산업의 중요성이 점점되고 있다. 그 가운데 나노와이어는 근래 수년간 많은 관심을 끌어왔으나 이들의 제조에는 대개 금속전자빔현미경 또는 전자주사현미경과 같은 고가의 장비들을 이용하여 금속의 표면에 나노와이어를 하나씩 하나씩 식각하는 것은 비경제적인 작업이어서 좀 더 개선된 제조방법이 요구되고 있다. 다행히도 최근 실험에서 Si(001) 또는 Si(111)의 표면 위에 희토류 원소인 Gd를 성장시킨 결과 GdSi₂ 나노와이어로 자기회합(self-assembly)이 보고되어[1,2], 쉽게 나노와이어를 제작할 수 있어 대량생산의 가능성을 제시하고 있다.

하지만 실리콘 표면에서의 GdSi₂ 나노와이어의 전기적 자기적 성질에 대한 이해가 매우 부족한 실정이다. 본 연구에서는 먼저 덩치 GdSi₂의 이론적인 연구를 수행하기 위해 자성연구에 가장 적합하다고 알려져 있는 full-potential linearized augmented plane-wave (FLAPW)을 사용하였으며, 교환 상관 포텐셜에 대해서는 general gradient approximation (GGA)를 사용하였다. Gd의 전자배치는 [Xe]4f⁷5d¹6s² 인데, 여기서 4f 상태를 코어(core) 상태로 취급하여야만 실험적인 연구와 잘 맞는 것으로 알려져 있어[3] 5d¹6s²를 제외한 나머지 부분을 모두 코어 상태로 취급하여 계산을 수행하였다. GdSi₂는 3가지 다른 구조를 가지는데, AIB₂ 형의 육방결정구조, ThSi₂ 형의 정방결정구조, GdSi₂ 형의 사방결정구조가 있다[2]. 본 연구에서는 AIB₂ 형과 ThSi₂ 형의 결정구조에 대해서 계산을 수행하였다.

계산한 결과를 아래의 표에 요약하였으며, Gd의 4f 상태의 전자들을 모두 스핀 분극으로 고려하였을 때를 나타낸다. 전자적 계산에 있어서 GdSi₂는 금속적인 성질을 가지는 것으로 확인 되었으며, 두 결정구조 모두의 자기모멘트는 Gd 금속의 이론치(7.75 μ_B)[3] 보다 작은 것으로 계산되었다. 또한 아래의 표에서도 알 수 있듯이 AIB₂의 결정구조는 반강자성 상태가 강자성상태에 비해 에너지적으로 더 안정한 것으로 알 수 있으며, 반면에 ThSi₂의 결정구조는 강자성 상태가 더 안정적이었다. 그리고 본 연구에서는 GdSi₂의 띠구조와 표면에서의 특성에 대해서도 논의할 예정이다.

표1. GdSi₂의 계산 결과값

결정구조	$E_{FM} - E_{AFM}(meV)$	total magnetic moment (μ_B/Gd)	MT magnetic moment (μ_B)
Hexagonal (AIB ₂)	24.9	7.26	7.17
Tetragonal (ThSi ₂)	-10.0	7.56	7.26

참고문헌

- [1] Yong Chen, Douglas A. A. Ohberg, and R. Stanley Williams, J. Appl. Phys. **91**, 3213 (2002).
- [2] B. Z. Liu and J. Nogami, Nanotechnology **14**, 873 (2003).
- [3] O. Eriksson, R. Ahuja, A. Ormeci, J. Trygg, O. Hjortstam, P. Söderlind, B. Johansson and J. M. Wills, J. Phys. B **52**, 4420 (1995).