

## $\beta$ -Mn의 전자구조와 자성에 관한 제일원리연구 (First Principles Study on Electronic Structure and Magnetism of $\beta$ -Mn)

윤 원석\*, 차 기범, 조 성래, 홍 순철

울산대학교 물리학과

망간 원소는 최근의 관심의 대상인 상온 자성 반도체 실현에 중요한 역할을 하고 있으며, 제조기술의 발달로 인하여 인공적인 자성물질을 제조하는 데 큰 역할을 하고 있다. 분자선 에피택시(MBE)에 의해 만들어진 새로운 합금인  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}$  박막을 예로 들 수 있는데, 그것의 결정 구조는 격자 상수 ( $a = 6.21 \text{ \AA}$ )를 가지는 입방구조이고  $T_C = 750 \text{ K}$ 인 준강자성(FIM)을 가지는 것으로 보고되었다[1]. 망간 자체의 특성을 간략하게 살펴보면, 망간은 가장 복잡한 금속원소이며, 복잡한 위상 다이어그램을 가지는 4가지 동소체 변형으로 존재하는 것이 알려져 있다[2].  $\alpha$ -Mn은 1000 K 아래의 온도에서 존재하며  $T_N = 95 \text{ K}$  아래에서 단위체 안에 58개의 원자를 갖는 입방구조로 되어있으며 복잡한 반강자성 상태의 자성 구조를 가지고 있다[3]. 그보다 높은 온도(1000 K ~ 1368K)에서  $\beta$ -Mn이 존재하며 단위체 안에 20개의 원자를 가지고, 2가지 비등가의 원자 형태(Wyckoff positions 8c and 12d)를 갖는 단순 입방구조로 되어있다. 게다가  $\beta$ -Mn의 자성 구조는 중성자 회절(neutron diffraction), 핵자기공명(nuclear magnetic resonance)의 실험적인 연구에서 상자성 상태가 안정적인 것이 결정되었다[4,5]. 끝으로 1368 K에서 녹는점인 1517 K까지의 온도범위에서  $\gamma$ -Mn(면심입방구조), 그리고  $\delta$ -Mn(체심입방구조)이 존재한다.

본 연구에서는 새로운 인공적인 자성물질의 결정구조를 확인하고 그것의 물성을 연구하고자 한다. 인공물질 연구에 앞서  $\beta$ -Mn 자체의 전자구조와 자성을 탐색하기 위해 자성연구에서 가장 적합한 방법으로 알려져 있는 full-potential linerized augmented plane wave (FLAPW) 방법을 사용하였고, 교환-상관 전위에 대해서는 general gradient approximation (GGA)를 사용하였다. 여기에 실험적인 격자 상수( $a = 6.29 \text{ \AA}$ )값을 가지고 상자성 상태와 스핀분극 계산을 수행하였다[6].

스핀분극 계산 결과로  $\beta$ -Mn은 위에서 언급한 2가지 비등가의 원자 형태를 갖는 준강자성의 배열을 보이며, 실험적인 격자 상수에서 상자성 상태와 비교 했을 때 에너지적으로 준강자성 상태가 더 안정적인 것을 확인할 수 있었다. 또한 준강자성 상태에서 자기모멘트 값은 Mn I(Wyckoff position 8c)에서는  $-0.39 \mu_B$ 로 계산 되었고, Mn II(Wyckoff position 12d)에서는  $1.91 \mu_B$ 로 계산 되었다.  $\beta$ -Mn의 에너지 띠 구조를 제시하면서 전자구조와 자성 간의 상관관계를 논의할 것이고 나아가 인위적인 물질인  $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}$ 의 자성 특성과 표면 효과에 대해서도 논의할 예정이다.

+ 본 연구는 한국과학재단 목적기초연구(Grant No. R01-2004-000-10957-0)지원으로 수행되었음.

### 참고문헌

- [1] S. Choi et al., Bulletin of the Kor. Phys. Soc. **23**, 133 (2005)
- [2] J. Hafner and D. Hobbs, Phys. Rev. B **68**, 014408 (2003).
- [3] T. Yamada et al., J. Phys. Soc. Jpn. **28**, 615 (1970).
- [4] J. S. Kasper and B. W. Roberts, Phys. Rev. **101**, 537 (1956).
- [5] Y. Masuda, K. Asayama, S. Kobayashi, and J. Itoh, J. Phys. Soc. Jpn. **19**, 460 (1964).
- [6] C.B. Schoemaker et al., Act Crystallogr. Sect. B: Struct. Crystallogr. Cryst. Chem. **34**, 3573 (1978).