

(CrAs)₁(CrP)₁ 초격자의 자성과 반쪽금속성

인하대학교 변영신*, 김영구, 이재일

Magnetism and Half-Metallicity of (CrAs)₁(CrP)₁ Superlattice

Inha University Y. BYUN, Y. J. JIN and J. I. LEE

1. 서론

최근에 들어 스핀트로닉스 소자의 응용가능성으로 인해 반쪽금속물질에 대한 관심이 증대되고 있다. 반쪽금속성은 1980년대에 de Groot 등[1]이 NiMnSb에 대해 예측한 이래 여러 종류의 반쪽금속성 물질이 합성되거나 발견되었다. 최근에 들어 CrAs와 같이 zinc-blende 구조를 가진 반쪽금속이 발견되었는데 이들은 큰 자기모멘트와 높은 큐리온도를 가지고 있다. Pask 등[2]은 제일원리 연구를 통해 CrP, CrAs, MnAs, MnC 등 여섯 가지 zinc-blende 구조에서 평형격자상수와 반쪽금속성이 나타나는 격자상수를 계산하였다. 이들은 CrAs는 5.67Å에서 반쪽금속성이 나타나며 아직 실험적으로 합성되지 않은 CrP는 5.48Å에서 반쪽금속성이 나타난다고 보고하였다.

Fong 등[3]은 제일원리 계산에 의해 (CrAs)₁(MnAs)₁과 (CrAs)₂(MnAs)₂ 초격자도 큰 자기모멘트를 가지면서 반쪽금속성을 가짐을 밝혔다. 이 연구에서는 잘 알려진 반쪽금속인 zinc-blende CrAs와 아직 이론적으로만 예측된 CrP로 이루어진 초격자에 대해, 그 전자구조를 제일원리 방법을 이용하여 계산하고 반쪽금속성과 자성을 고찰한다.

2. 모형 및 계산방법

이 연구에서 고려하는 초격자는 (CrAs)₁(CrP)₁로서 이는 zinc-blende 구조에서 (100)축을 따라 Cr - As - Cr - P 층이 주기적으로 반복되는 구조를 가진다. 격자상수는 CrAs와 CrP가 각기 반쪽금속성을 나타내는 격자상수의 사이값인 5.62Å로 잡았다. 전자구조를 계산하기 위한 방법은 총 퍼텐셜 선형보강 평면파 (full-potential linearized augmented plane wave; FLAPW)[4]이다. 교환상관 퍼텐셜로는 Perdew 등의 일반기울기 근사(GGA)를 이용하였다. 못줄이는 브릴루앙 영역내에서 모두 126개의 k-점에 대해 고유값을 계산하였다. 핵심전자는 완전히 상대론적으로 다루었고 가전자 상태는 준상대론적으로 다루었다. 머핀-틴 구 내의 전하와 퍼텐셜을 기술하기 위해 각운동량 $l = 8$ 까지의 격자조화함수를 이용하였다.

3. 결과 및 고찰

그림 1에는 초격자 (CrAs)₁(CrP)₁의 각 원자에 대해 계산된 국소상태밀도가 주어졌다. 이 그림으로부터 Cr, As, P 원자 모두에 대해 다수 전자는 페르미 에너지에서 상태밀도를 가지고 있고, 소수 전자에 대해서는 에너지 간격이 있으므로 (CrAs)₁(CrP)₁ 초격자가 반쪽금속성을 가짐을 확인하였다. (CrAs)₁(CrP)₁에서 Cr의 소수스핀에 대한 에너지 간격은 1.4eV로서 CrAs나 CrP의 경우와 비슷하였다. 또한, (CrAs)₁(CrP)₁ 초격자에서 Cr의 자기모멘트는 3.07 μ_B 로 이는 같은 격자상수 5.62Å를 갖는 CrAs나 CrP에서 Cr의 자기모멘트 값과 비슷하였다. 이러한 결과로부터 zinc-blende 구조를 가진 CrAs나 CrP 그리고 zinc-blende에 기반을 둔 (CrAs)₁(CrP)₁ 초격자 모두에서 Cr의 자기모멘트나 소수 전자 상태밀도의 에너지 띠 간격을 주로 격자상수에 의존함을 알게 되었다.

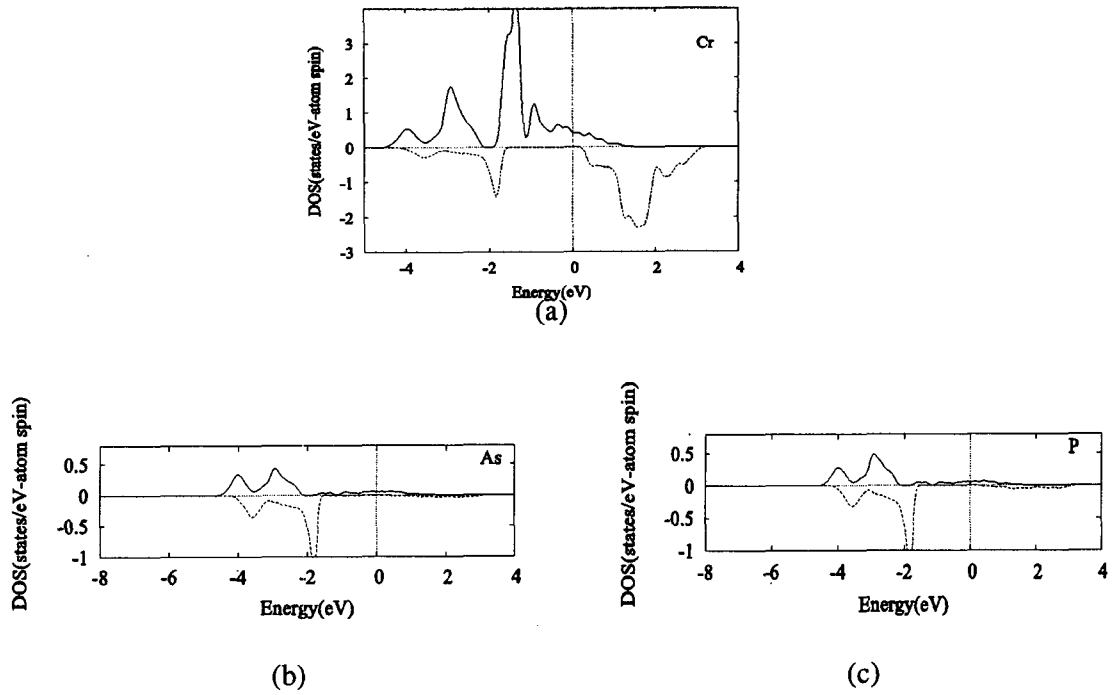


그림 1. $(\text{CrAs})_1(\text{CrP})_1$ 초격자에서 (a) Cr (b)As (c)P 의 국소 상태밀도.
 그림에서 실선은 다수스핀전자, 점선은 소수스핀전자를 나타낸다.

4. 참고문헌

- [1] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett. **50**, 2024 (1983)
- [2] J. E. Pask, L. H. Yang, C. Y. Fong, W. E. Pickett, and S. Dag, Phys. Rev. B **67**, 224420 (2003)
- [3] C. Y. Fong and M. C. Qian, App. Phys. Lett, **84**, 2 (2003).
- [4] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981) and references therein; M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **26**, 1629 (1982).