

## 전이금속이 포함된 GaN의 전자구조 및 자기적 특성해석

이승철, 이광렬

한국과학기술연구원 미래기술연구본부

희석자성반도체 (Diluted Magnetic Semiconductor, DMS)는 반도체와 유사한 전도도를 가지며 강자성을 보이는 물질로서 spin field effect transistor (spin-FET)와 같은 스핀전자소자에서 스핀 주입기 (spin injector) 또는 게이트 물질로 사용이 가능하다. DMS물질의 자기적 성질의 기원은 국소화 (localize)된 전이금속의 d 전자와 비국소화된 (delocalized) 음이온의 p 전자사이의 교환상호작용(exchange interaction)이다. 이와 같은 상호작용의 결과 음이온의 홀이 스핀 분극되고 스핀분극된 홀이 스핀의 carrier역할을 하게되어 소자로 응용이 가능하게 된다. 현재까지 성공적인 DMS 물질로 인정받는 시스템은 Mn이 수 % 도핑된 GaAs인데 이 물질의 큐리온도는 160 K로 매우 낮아 실제로 소자로의 응용가능성은 높지 않다. 본 연구에서는 전이금속 (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)이 포함된 GaN의 전자구조 및 자기적 성질을 제일원리 전자구조 기법을 통해 예측하였다. 이제까지의 다른 연구가 전이금속의 전자 및 자기 구조를 해석한 데 반해 본 연구에서는 DMS로의 응용가능성을 염두에 두고 스핀의 carrier인 음이온의 p 전자의 스핀 분극을 중심으로 해석하였다. 해석결과에 따르면 d 전자가 반이 채워지지 않은 V, Cr, Mn의 경우 가전자 밴드의 스핀분극은 관찰되지 않았는데 이것은 이러한 물질을 사용할 경우 강자성이 일어나더라도 다른 메커니즘에 의해 일어날 것임을 의미한다. 그리고 Fe, Co, Ni, Cu의 경우 음이온의 가전자 밴드에서 스핀 분극이 일어났다. 또한 Fe, Ni의 경우 스핀 분극은 일어나지만 magnetic insulator로써 DMS로의 응용이 가능하지 않다고 예측되었다. Co와 Cu를 첨가한 경우에만 전이금속의 자기모멘트와 음이온의 가전자 밴드에서 스핀 분극이 일어났으며 이와 같은 물질만이 DMS로의 응용 가능성이 있다고 예측되었다.