

암염구조의 반쪽금속 MgN(001) 표면에서 격자늘림에 따른 반쪽금속성 깨짐에 대한 제일원리 연구

Beata Bialek^{1*}, 김동철², 이재일¹

¹인하대학교 물리학과, 인천 남구 용현동 253, 인천 402-751

²한라대학교 전기전자공학과, 강원도 원주시 한라대 1길, 220-712

1. 연구동기

최근 들어, 전이금속을 포함하지 않으면서 반쪽금속성을 나타내는 강자성체가 관심을 끌고 있다. 이러한 물질로는, 알칼리 금속과 V족 또는 VI 족과의 이원화합물이나, 알칼리 토금속과 V/VI족 원소와의 화합물이 있다. 3d 전자를 포함하는 반쪽금속에서는 이중 교환상호작용이나 p-d 교환상호작용에 의해 반쪽금속성이 나타나는데 반해 이들 물질은 sp 원소들만으로 반쪽금속성을 나타내기 때문에 sp 형 반쪽금속이라 불린다. 최근에 Drogetti 등은 전자구조 계산을 통하여 암염 (rocksalt: RS)이나 섬아연광(zinc-blende; ZB) 구조를 가진 MgN 화합물이 반쪽금속성을 가짐을 보였다 [1]. 본 연구자들은 ZB 구조나 RS 구조를 가지는 MgN(001) 표면의 전자구조를 계산하고 이들 표면에서도 반쪽금속성이 유지됨을 보였다 [2]. 반쪽금속 물질은 스핀트로닉스 소자에서 주로 스핀주입물질로 이용되는데 효율적 응용을 위해 다른 물질과 계면을 이룰 때 적절한 격자상수 부합이 필요하다. 여기서는 RS 구조의 MgN(001)계에서 2차원 정사각형 격자상수를 표면층에 평행하도록 늘림에 따라 반쪽금속성의 유지 여부를 제일원리 전자구조 계산방법을 통하여 검토하였다.

2. 연구방법 및 모형

RS 구조를 가지는 MgN이 (001) 표면을 연구하기 위해 얇은 판 모형을 사용하여 각 층에 Mg 와 N 원자가 2차원 단위세포 당 1개씩 포함하도록 구성하였다. 원래 상태에서 2차원 단위세포인 정사각형의 한 변은 5.94 a.u. (격자상수인 8.4 a.u.의 $\sqrt{2}/2$) 로 잡았고, 층간 간격은 8.4 a.u.의 1/2인 4.2 a.u. 로 잡았다. 표면층에 평행한 방향으로 2차원 격자상수를 늘릴 때 전체 부피는 일정하게 되도록 하였기 때문에 층간 간격은 줄어들게 되는데 표 1에 고려한 7개 계의 구조를 정리하였다. 이들 계의 전자구조 및 반쪽금속성 유지 여부를 확인하기 위하여 PBE 형의 GGA 근사 [3]를 도입한 FLAPW (Full-potential Liniarized Augmented Plane Wave) 전자구조 방법[4]을 이용하였다.

3. 결과 및 논의

표 1에 2차원 정사각형 격자의 격자상수를 원래 상태에 비해 1.02, 1.04, 1.06 배 등으로 늘려 가면서 이에 따라 z 축은 0.9612, 0.9246, 0.8900 만큼 줄어드는 7개의 구조에 대해, 총에너지 값과 총 자기모멘트 값, 그리고 가운데 층과 표면층 Mg 와 N 원자의 자기모멘트 값을 정리하였다. 여기에서 보면 총 에너지는 변형되지 않은 원래 형태의 값이 가장 낮았으며 변형의 정도가 클수록 에너지가 높아졌다. 총 자기모멘트를 보면 2차원 격자상수를 8% 가까이 늘릴 때 까지는 그 값이 9.00 μ_B 로서, 계 전체적으로 반쪽금속성을 유지 하였으나 8%로 늘리면 총 자기모멘트 값이 8.99 μ_B 로 반쪽금속성이 깨지기 시작하였다. 2차원 격자상수를 9% 늘린 경우에는 총자기모멘트가 8.90 μ_B , 10% 늘린 경우에는 8.92 μ_B 로서 반쪽금속성이 유지되지 못하였다.

원래 상태에서 가운데 층의 Mg 와 N 원자의 자기모멘트는 각기 0.00 과 0.61 μ_B 로서 덩치상태의 경우와 부합하였으며, 표면 N 원자의 자기모멘트도 0.61 μ_B 이었으나 표면 Mg 원자의 경우는 0.01 μ_B 로서 아주 작은 값을 가졌다. 격자 상수를 늘려도 각 원자의 자기모멘트 값에는 큰 변화가 없었으나 가운데 층 Mg 나 표면

Mg 원자의 자기모멘트는 미세하게 증가하였다. N 원자의 경우는 격자상수를 늘려갈 때 가운데 층 N 원자의 자기모멘트는 다소 증가한 반면 표면 N원자의 자기모멘트 값은 다소 감소하였다.

Table 1. Structures, total energies, and magnetic moments of each structure.

structure (x × y × z)	$\Delta(\text{total E})$ (eV)	magnetic moment (μB)				
		total	Mg(C)	Mg(S)	N(C)	N(S)
1.00 × 1.00 × 1.00	0.000	9.00	0.00	0.01	0.61	0.61
1.02 × 1.02 × 0.9612	0.408	9.00	0.00	0.01	0.61	0.62
1.04 × 1.04 × 0.9246	1.281	9.00	0.00	0.01	0.61	0.62
1.06 × 1.06 × 0.8900	2.905	9.00	0.00	0.01	0.62	0.62
1.08 × 1.08 × 0.8573	5.187	8.99	0.00	0.01	0.62	0.62
1.09 × 1.09 × 0.8417	6.808	8.90	0.00	0.02	0.62	0.61
1.10 × 1.10 × 0.8264	8.650	8.92	0.01	0.02	0.63	0.61

참고문헌

- [1] A. Droghetti, N. Boadji, and S. Sanbitto, Phys. Rev. B **80**, 235310 (2009).
- [2] B. Bialek and Jae Il Lee, Solid State Commun. **150**, 2138 (2010).
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [4] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981).