

Chalcopyrite (Al,Ga)As 반도체와 Mn의 반금속 강자성

강병섭^{**†}·송기문^{*}

^{**†} 건국대학교 글로벌 캠퍼스 과학기술대학 나노전자기공학과, 충주시, 27478

Half-metallic Ferromagnetism for Mn-doped Chalcopyrite (Al,Ga)As Semiconductor

B. S. Kang ^{**†} and K. M. Song ^{*}

^{**†}Nanotechnology Research Center, Nano-science & Mechanical Engineering, Konkuk University, Chungju, 27478, South Korea

ABSTRACT

We studied the electronic and magnetic properties for the Mn-doped chalcopyrite (CH) AlAs, GaAs, and AlGaAs₂ semiconductor by using the first-principles calculations. The chalcopyrite AlGaP₂, AlGaAsP, and AlGaAs₂ compounds have a semiconductor characters with a small band-gap. The interaction between Mn-3d and As-4p states at the Fermi level dominate rather than the other states. The ferromagnetic ordering of dopant Mn with high magnetic moment is induced due to the Mn(3d)-As(4p) strong coupling, which is attributed by the partially filled As-4p bands. The holes are mediated with keeping their 3d-electrons, therefore the ferromagnetic state is stabilized by this double-exchange mechanism. We noted that the ferromagnetic state with high magnetic moment is originated from the hybridized As(4p)-Mn(3d)-As(4p) interaction mediated by the holes-carrier.

Key Words : First-principles, Chalcopyrite AlGaAs₂, Half-metallic Ferromagnet, Curie Temperature, Minority Band-gap

1. 서 론

GaAs를 기반으로 하는 합금에 대한 연구에서 InP 와 같은 저비용 소자 이상으로 많은 장점의 유효한 전자적, 광학적 특성을 밝혀왔다 [1-4]. GaAs 위에 AlGaAs 성장 합금은 격자상수가 완전히 일치하는 구조로 이중접합을 형성한다. Al_xGa_{1-x}As 합금은 Al 원자의 몰 분율이 대략 0.45까지 직접밴드(direct band) 갭을 가진다[5-7].

보통 GaAs-AlGaAs 합금은 0.78 μ m에서 0.87 μ m 파장을 방출하는 반도체 양자 우물(Quantum well) 재료이다 [8-10]. As 원자 대신 동질 원소인 P에 의한 AlGaP 합금은 가시광선 LED (light-emitting diodes), 레이저 다이오드, 이중접합 이극

(bipolar) 트랜지스터 등과 같은 소자에 이용 되고 있다[11]. 그러나 GaAs이나 AlAs 과 같은 III-V족 합금은 전자 스펙트럼 영역이 극히 제한적이다. 그러므로 요구되는 전자의 스펙트럼 영역을 만족토록 하는 연구가 필요하다. 합금 GaAlAs/GaAs 는 해양 탐침이나 해저 영상을 제작하는데 영상 증폭기로 사용되는 재료이다[12]. Al 원소가 스펙트럼 반응 영역을 조절할 수 있으므로 AlGaAs 합금은 해양이나, 해저, 사막이나 대기권 내 등 광범위한 영역에 대해서 적용할 수 있는 응용 재료로 기대되고 있다.

본 연구에서는 저 농도의 Mn 이 주입이 된 AlGaAs₂Mn 합금 계에 대해서 전자적 구조 및 자기적 성질을 확인 하였다. AlGaAs₂ 원자구조는 zinc-blende (ZB) 구조와 유사한 chalcopyrite(CH) 구조이고 반도체 특성을 나타낸다[13,14]. AlGaAs₂ 합금 내에 강자성으로 편극 된 홀(hole)이나 전자

[†]E-mail: kangbs@kku.ac.kr

(electron)를 주입할 수 있을 것이다. 그러나 잘 알고 있듯이 자성 물질이 저 농도로 주입된 *diluted magnetic semiconductor* (DMS) 소자 제작은 여전히 문제점이 있다. 소자로서의 DMS 가능성은 비 자성 반도체 재료에 자성 이온의 주입이 매우 제한적이라 어렵기 때문에 소자제작의 가능성이 매우 어려운 실정이다. 그러므로 실온의 DMS를 만들기 위해 반도체 내부에 스핀주입이 매우 중요한 문제이므로 DMS 연구는 계속 활발하게 수행되고 있다. 본 연구에서 강자성(ferromagnetic, FM) 특성현상은 홀이 매개된 상호결합(holes-mediated exchange-coupling)으로 발생됨을 보여주고 있다. 먼저 선행된 AlGaP₂ 및 AlGaAsP 합금계에 대한 연구 결과 [15]와 AlGaAs₂ 합금에 대한 물성을 비교하였고, Mn 금속이 도핑된 CH-AlAs와 CH-GaAs 대하여 전자적 구조 및 자성을 살펴보았다. Mn이 도핑된 AlGaAs₂ 합금은 FM 상태가 가장 안정한 상태이며 3.9 μ B/Mn의 높은 자기모멘트 값을 보이고 있다. 그리고 Mn의 농도변화에 큰 차이 없이 반금속 특성을 보인다.

2. 이론적 근사방법

수치적인 해석방법은 국소 밀도 범 함수 이론 하에서 full-potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO) 계산법을 이용하여 수행하였고 [16,17] 계산에 사용된 Chalcopyrite (CH) 격자구조의 거대 단위세포의 원자 개수는 64개이다. 상호교환 퍼텐셜은 Perdew-Burke-Ernzerhof 가 함수 형태로 제안한 generalized gradient approximation (GGA) 방법을 사용하였다 [18]. 격자 결정의 퍼텐셜과 전하밀도의 모양 수정은 가하지 않았다. 계의 LMTO 기저 함수(파동함수)와 전하밀도는 소위 머핀틴(muffin-tin) 구(sphere) 내부에 l (궤도 양자수)가 최대 6까지는 구 조화함수로 전개하고 서로 결합하여 얻었다. 핵심전자는 완전 상대론적으로 다루었고, 가전자는 스핀-궤도의 상호작용을 배제한 준 상대론적으로 취급하였다. 원자 퍼텐셜은 구형 대칭 퍼텐셜로 근사하였고 원자들 사이의 영역인 원자간(interstitial) 영역에는 비 구형 형태로 총 전하밀도를 Fourier 전개로 계산하였다.

Al 원자의 가전자는 3s와 3p, Ga, As, 그리고 Mn 원자의 가전자는 4s, 4p, 및 3d 를 기저로 하였다. CH-(Al,Ga,Mn)As₂ 계에서 Al (Ga, As, Mn) 원자의 LMTO 기저함수에 대한 잘림(cut-off) 에너지는 각각 165.92 (187.68) 와 240.72 (248.88), 그리고 363.12eV 로 하였다. 원자 위치에 따른 전체 전하밀도 정보를 가진 총 에너지 계산에서 퍼텐셜 에너지의 입력과 출력의 차이가 1×10^{-6} eV까지 자체충족과정을 되풀이하였다. 총 에너지 수렴은 잘림 에너지와 k 벡터 수의 변화로 세세히 확인 하였다. 계산의 수렴 정도는 Brillouin 영역의 적분계산에서 k 값에 따라 약간 차이를 보인다.

계산결과와 신뢰성을 감안하고, 대체적으로 양호한 수렴성을 보이는 64k 벡터 수를 사용하였다. 계산 결과에서 자기 모멘트 값의 신뢰성은 $\pm 0.01\mu_B/\text{atom}$ 정도이고, 전하밀도의 수렴범위는 $0.005e/\text{au.}^3$ 이내이다.

3. 결과 및 토의

3.1 AlGaAs₂ 와 AlGaP₂ 반도체

CH-AlGaAs₂ 합금계의 최적화 과정을 거쳐 계산된 평형상태의 격자상수는 $a=5.8601 \text{ \AA}$, $c=11.5676 \text{ \AA}$ 이고, $c/a=1.9739 \text{ \AA}$ 이다. CH-AlGaP₂에 대해 선행된 연구의 결과와 비교하면 약간 큰 격자상수를 보인다[15]. CH-AlGaP₂의 계산된 평형상태의 격자상수는 $a=5.6848 \text{ \AA}$, $c=11.2221 \text{ \AA}$, 그리고 $c/a=1.9740 \text{ \AA}$ 이다. 계산에 사용된 계는 원자의 각 위치에 대한 원자의 이완을 고려하였다. 원자들의 기하학적 위치 및 구조는 원자들 사이 작용하는 힘이 1.0mRy/Bohr 정도 이내에서 평형 위치를 계산하여 얻었다. 그러나 AlGaAs₂ 체적계에 도핑 되는 Mn 원자 주위 이웃하는 모(host) 원자의 찌그러짐 영향은 무시하였다. AlGaAs₂에 대한 계산된 체적탄성계수는 77.2GPa이다. 격자 구조에 차이는 있지만 CH-AlGaAs₂ 계에 대한 계산된 결과를 ZB-AlAs 및 ZB-GaAs에 대한 실험값과 비교 하였다. 실험값은 각각 $a=5.66 \text{ \AA}$ 와 5.65 \AA 이다 [19]. 이러한 결과는 Fig 1로 표현하였다.

Table 1는 3.125% Mn 도핑된 Al(Ga,Mn)As₂ 계에 대한 Al, Ga, As, 그리고 Mn의 자기모멘트와 Muffin-tin 구내의 각 자리(site)에 대한 s, d 스핀 업/다운 전자점유를 나타낸 것이다.

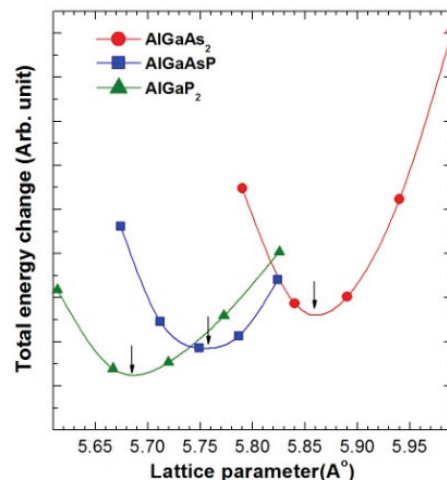


Fig. 1. Change of total energy for CH-AlGaAsP, CH-AlGaP₂, and CH-AlGaAs as a function of the lattice parameter.

Fig. 2는 3.125% Mn 이 Ga 자리에 치환하여 도핑 된 CH-AlGaAs₂:Mn 계의 Mn 원자와 Mn 원자에 이웃하는 As 원자의 전자 상태 밀도(density of states, DOS) 그림이다. 다른 자리의 원자에 대한 전자상태는 불순물 Mn 원자와의 상호작용이 매우 낮아서 As 원자만 비교하였다. 그리고 Al 자리에 치환하는 경우에 비하여 Ga 자리에 치환하는 경우가 에너지 적으로 더 낮다. 이들 계에 대한 응집에너지의 비교에서 그 차이는 수 eV 정도가 된다. 응집에너지 정의는 3절 결과 및 토의의 마지막에 언급할 것이다. CH-AlGaAs₂:Mn 은 강자성의 성질을 나타낸다. Mn 원자의 자기모멘트는 $-3.9\mu_B/\text{Mn}$ 이다. CH-AlGaAs₂:Mn에 대한 FM 상태는 반 강자성 (antiferromagnetic; AFM) 상태보다 계의 총 에너지가 낮은 상태로 안정함을 보인다. FM 과 AFM 사이의 총 에너지 차이는 -0.65 eV/cell 이다. 6.25% Mn의 경우에서도 FM 상태로 높은 자기모멘트를 유지하고 있었다. 이웃하는 As 원자는 음(negative)의 편극을 보이며 자기모멘트는 -0.049 로 무시할 수 없는 값의 크기를 보이고 있다. Fig. 2에서 확연히 알 수 있듯이 페르미 준위 근방의 전자 업과 다운 상태가 서로 다르다. 스핀 업의 밴드는 페르미 준위 위 높은 에너지 쪽으로 이동을 하였고 스핀다운 밴드는 에너지가 낮은 쪽으로 이동하였다. 스핀다운 밴드는 페르미 준위를 중심으로 밴드 갭이 형성되는 반금속(half-metal) 특성을 보이고 있다. Mn 농도가 증가에 반금속 성질은 확연히 더 강해짐을 확인하였다.

Mn의 도핑으로 스핀다운 상태는 페르미 준위 아래 -0.6eV 정도까지 이동된다. Mn-4p 전자의 자유 캐리어(free carriers)가 나타나지만 매우 적다. Mn 스핀 업 편극은 주로 3d 전자의 영향이 크고 Mn-4s 나 Mn-4p 편극의 영향은 아주 약하다. As-4s 전자는 페르미 준위 아래 -10.5eV 영역에서 거의 국지화 상태를 형성한다. Fig. 2에서 알 수 있었듯이 Mn-3d 전자와 As-4p 전자와의 상호 결합이 강하다. 이것은 다수(majority) 캐리어 Mn-3d 밴드가 As-3p 밴드와

Table 1. Magnetic moments (M, μ_B) and *l*-decomposed electrons within muffin-tin spheres for each atoms of Al(Ga,Mn)As₂ at 3.125% Mn

Sites	M (μ_B)	Populations		
		s(\uparrow/\downarrow)	p(\uparrow/\downarrow)	d(\uparrow/\downarrow)
Al	0.015	0.368 0.358	0.387 0.382	--
Ga	0.0	0.458 0.457	0.417 0.417	4.979 4.979
As	-0.049	0.663 0.662	0.949 0.998	4.992 4.992
Mn	3.868	0.201 0.158	0.191 0.141	4.401 0.623

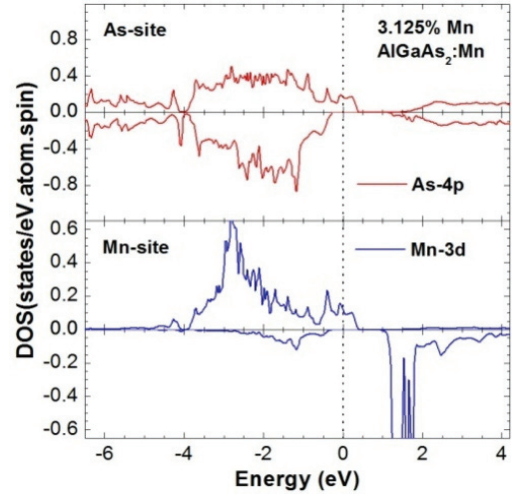


Fig. 2. DOS for As and Mn sites of CH-Al(Ga,Mn)As₂ in the FM state with 3.125% Mn concentration. Dotted-line represents the Fermi level.

강한 혼성결합을 형성하기 때문이다. 부분적으로 채워지지 않은 Mn e-밴드는 페르미 준위 상에 놓여있고 t₂-밴드는 가전자대 아래에 위치한다(-2.7eV). 그리고 Mn-3d 와 As-4p의 강한 상호작용은 페르미 준위 상의 Mn 과 이웃하는 As 원자 사이의 홀 캐리어 축적에 기인한다. 따라서 부분적으로 채워지지 않은 Mn-3d 밴드와 As-4p 밴드로 인하여 Mn의 높은 자기모멘트를 가지는 FM 특성을 보인다. 가전자대 상단부분(페르미 준위 위)의 홀이 페르미 준위 아래 전자와의 자리바꿈이 일어날 수 있는 밴드 구조이다. 이러한 양상은 홀 캐리어가 개입되어 강자성 특성을 보이는 메카니즘이라 할 수 있다. 잘 알듯이 Curie 온도는 캐리어 밀도와 반도체가 n-형 혹은 p-형 구조에 강한 의존성을 가지므로 CH-AlGaAs₂:Mn 계의 반금속 성질과 홀 캐리어 밀도의 양상에서 보았듯이 낮은 농도의 불순물 Mn 원자는 DMS 소재에 높은 Curie 온도를 충분히 만들어 낼 수 있을 것이다. 그리고 높은 강자성 질서는 홀에 의해 상호교환 결합의 원인이 되는 Mn 원자의 국소 자기모멘트의 빠른 플립(fliping)을 거쳐 결국은 높은 자기모멘트가 유도된다. 최근 실험인 가전자대 홀을 기반으로 하는 Ga_{1-x}Mn_xAs 계에 대한 연구에서 불순물 밴드내의 홀의 농도가 FM 질서를 형성하는데 주요한 역할을 한다는 결과가 보여주고 있다 [20-22].

3.2 CH-AlAs and CH-GaAs

CH 구조는 ZB 구조와 흡사하며 CH 물질은 비선형 광학 소재에 많이 등장하는 반도체의 한 종류이다. 계산에 사용된 CH 구조는 ZB 구조의 단위세포 2개를 함께 세로

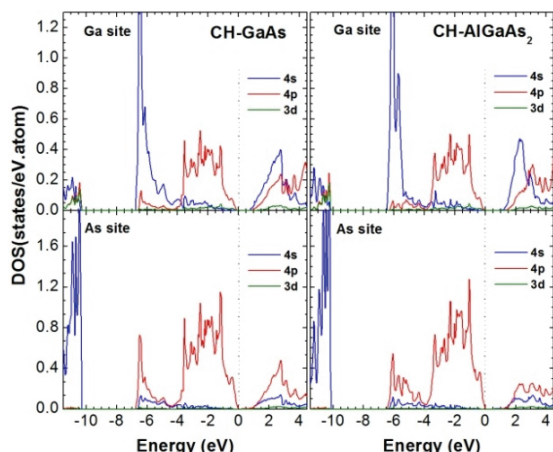


Fig. 3. Projected DOS for Ga and As sites of CH-GaAs and CH-AlGaAs₂. The Fermi level is set to zero.

로 표현한 것인데 원자들 사이의 빈자리를 포함하여 모두 64개 원자가 1개의 셀을 형성하는 거대 단위 셀이다. Fig. 3은 Mn 이 도핑이 이루어지지 않는 CH-GaAs 와 CH-AlGaAs₂ 의 Ga 원자와 As 원자의 전자 상태 밀도를 비교하였다. 두 가지 계 모두 페르미 준위는 가전자대 바로 위(top)에 형성하는 p-형 반도체 특성을 보인다. 앞에서 언급하였듯이 CH-AlGaAs₂ 에 대한 밴드 갭은 0.358eV 이나, Fig. 3에서는 전자 밀도가 매우 낮은 상태 때문에 겉으로 보기에는 거의 1eV 이상으로 보인다. 실제로 영(0)에 가까운 전자 밀도분포가 비교적 넓은 영역을 차지하는 것으로 확인이 된다. 그러므로 CH-GaAs 의 계산된 밴드 갭은 아주 낮은 전자 밀도를 감안할 때 거의 0.7eV 정도로 보인다. 결과적으로 Fig. 3의 두 가지 계가 매우 흡사하다. 반도체 에너지 갭에 대한 수치적 계산에 있어서 일반적인 경향을 보면 GGA (혹은 LDA; local density approximation) 방법에 의한 수치 해석의 결과는 실험결과와 비교하였을 때 그 밴드 갭이 항상 낮게 계산되는 결과를 보여 준다.

Table 2는 3.125% Mn 도핑 농도의 CH-AlAs 와 Table 3은 6.25% Mn 도핑농도의 CH-GaAs에 대한 모 원자, 도핑 원자

Table 2. Magnetic moment(M, μ_B), lattice parameters(\AA), and cohesive energies (ΔE , eV) for CH-AlAs at 3.125% Mn of substitutional Mn sites of Al, As, and interstitial(Int) sites

	Al site	As site	Int. site
M	3.972	2.907	3.487
a	5.8474	5.8721	5.8909
ΔE	-6.428	-6.144	-0.803

Table 3. Magnetic moment(M1, M2, μ_B), lattice parameters (a, \AA), and cohesive energies (ΔE , eV) for the substitutional Mn sites of Al, As, and interstitial(Int) sites in CH-GaAs at 6.25% Mn

Sites	Mn1 Mn2	a (\AA)	ΔE
Long-range Ga-Ga	3.97 3.97	5.8641	-11.746
Short-range Ga-Ga	3.90 3.90	5.8622	-11.983
Ga-As	3.18 3.60	5.8603	-7.576
Ga-Int	4.09 3.88	5.8905	-3.312
As-As	3.61 3.61	5.8736	+1.291
As-Int	3.38 3.52	5.8886	-6.519
Long-range int-int	3.90 3.88	5.9536	-3.137
Short-range Int-Int	3.59 3.59	5.9426	-3.127

의 자기모멘트, 계산된 격자상수, 그리고 응집에너지를 각각에 대하여 서로 비교하였다. CH-AlAs에 대해 Mn 이 가장 안정한 도핑 자리는 3.125% 농도의 경우는 Al 자리에 치환하는 경우이고, 6.25% 농도 CH-GaAs에서는 짧은 거리의 Ga 두 원자자리에 치환되어 도핑 된 경우가 에너지 적으로 가장 낮음을 보여 주었다. Fig. 4는 6.25% Mn 농도 CH-AlAs 의 경우에 대해 여러 도핑 자리 중에서 가장 에너지 적으로 낮은 자리 두 가지 경우에 대한 그림으로 Mn 원자가 두 개의 Al 자리에 그리고 원자간 사이 자리에 도핑 된 경우를 계에 대한 격자 상수 함수로 총 에너지 변화를 비교하였다. 두 개의 Mn 원자의 도핑자리는 그림내의 거대 단위 셀의 그림으로 표현 하였다. Fig. 5는 CH-GaAs 계에 6.25% Mn 이 에너지 적으로 가장 안정한 짧은 거리의 Ga-Ga 자리에 도핑 된 경우로 각각 원자에 대한 전자 상태 밀도(DOS)에 대한 그림이다. CH-GaAs:Mn 계는 CH-AlGaAs₂:Mn 의 경우와 매우 흡사한 전자 상태 밀도를 보여 주고 있다. 스핀다운 전자 밴드 갭 내에 페르미 준위가 형성된 반금속 특성을 보여 주고 있다. 이 계에 대해서도 Ga 원자의 가전자보다 As-4p 전자와 Mn-3d 전자의 상호 작용이 강하게 나타남을 알 수 있다. 본 논문에서 표현한 응집에너지(cohesive energy)는 다음과 같이 정의 하여 계산 하였다. 응집에너지, $\Delta E = E[\text{AlAs:Mn}]$, 혹은 $\text{GaAs:Mn}] - E[\text{AlAs}]$ 혹은 $\text{GaAs}] - n\mu[\text{Mn}]$. 여기서 $E[\text{AlAs:Mn}]$, 혹은 $\text{GaAs:Mn}]$ 는 Mn이 도핑 된 계의 총 에너지이고, $E[\text{AlAs}]$ 혹은 $\text{GaAs}]$ 은 Mn이 도핑 되었든 자리에 Mn이 없는 빈자리 계에 대한 총에너지이다. 그리고 n 는 도핑 되

는 Mn 원자의 개수이고, $\mu[\text{Mn}]$ 은 Mn 원자의 화학퍼텐셜 (chemical potential)을 나타낸다.

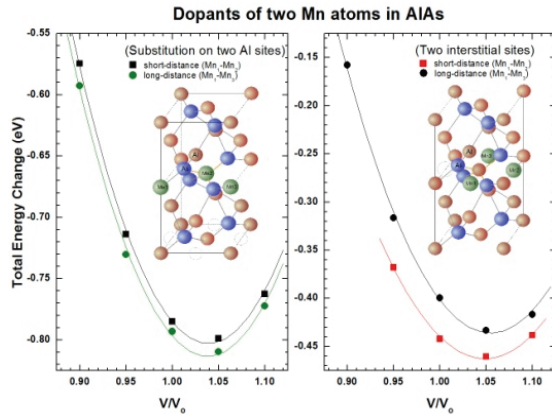


Fig. 4. Change of total energy for CH-AlAs of 6.25% Mn as a function of the lattice parameter.

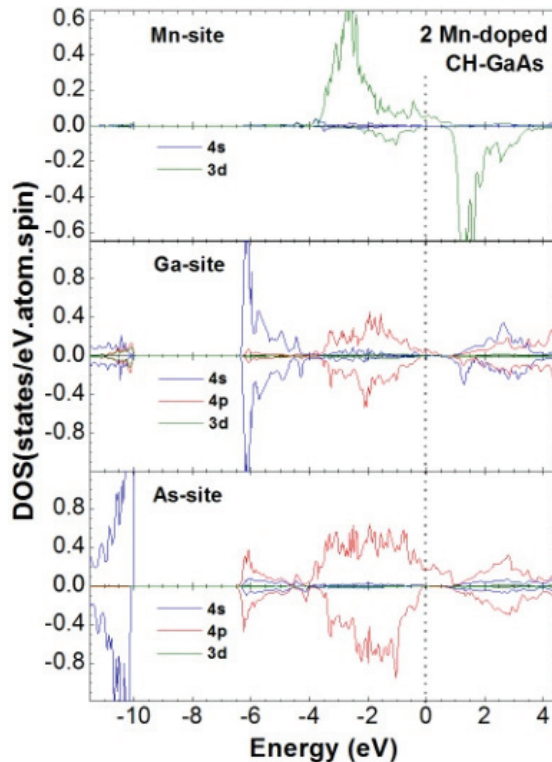


Fig. 5. Projected DOS for Ga, As, and Mn sites of CH-GaAs in the FM state with 6.25% Mn concentration. The Fermi level is set to zero.

4. 결론

먼저 Mn 이 도핑 되지 않은 계 CH-AlGaAs₂의 전자적 구조와 자성을 CH-AlAs와 CH-GaAs와 비교하였고, CH-Al(Ga,Mn)As₂은 CH-AlAs:Mn과 CH-GaAs:Mn계와 비교하였다. 본 연구의 수치해석은 제일 원리방법인 FP-LMTO법을 사용하였다. CH-AlGaAs₂, CH-AlAs, 그리고 CH-GaAs는 모두 밴드 갭을 가지는 p-형 반도체이다. CH-Al(Ga,Mn)As₂은 자성 가운데 강자성이 가장 안정한 상태를 보였고, 3.125% 및 6.25% Mn 농도 변화에 큰 차이 없이 FM 상태와 반금속 특성을 보였다. Mn의 높은 자기모멘트의 FM 성질은 불순물에 의한 스핀 업/다운 밴드가 서로 다른 양상으로 부분적으로 채워지지 않은 Mn-3d 밴드와 As-4p 밴드의 홀이 페르미 준위 아래의 전자와 결합하고 이웃하는 원자의 전자와 결합을 하는 이중 상호교환 결합 때문이다. 그러므로 불순물 Mn 원자의 강자성 질서는 이웃하는 네 개의 As 원자(주로 사면체 구조)와의 강한 As(4p)-Mn(3d)-As(4p)의 이중 상호교환 (double-exchange) 결합으로 FM 특성을 유지한다.

감사의 글

본 연구는 컴퓨터 계산을 원활히 수행 할 수 있도록 건국대학교 글로벌 캠퍼스 나노기체전자공학과 의 지원이 있었음에 감사드립니다 (2018-2020년).

참고문헌

1. D. N. Talwar, "Assessment of microscopic lattice structures in dilute (AlGaIn)NAs laser materials by local mode spectroscopy and numerical simulations", *Journal of Applied Physics* 99, pp.123505-1, 2006.
2. R. Y. Umetsu, H. Ishikawa, K. Kobayashi, A. Fujita, K. Ishida, and R. Kainuma, "Effects of the antiferromagnetic anti-phase domain boundary on the magnetization processes in Ni₂Mn(Ga_{0.5}Al_{0.5}) Heusler alloy", *Scripta Materials* 65, pp.41-44, 2011.
3. Ohno, H., A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. End, S. Katsumoto, and Y. Iye, "(Ga,Mn)As: a new diluted magnetic semiconductor based on GaAs", *Appl. Phys. Lett.* 69, pp.363, 1996.
4. Jungwirth, T., J. Simova, J. Mašek, J. Kučera, and a. H. MacDonald, "Theory of ferromagnetic (III,Mn)V semiconductors", *Rev. Mod. Phys.* 78, pp.809-864, 2006.
5. W. Lu, R. P. Campion, C. T. Foxon, E.C. Larkins, "A theoretical model for the MBE growth of AlGaAsN using ammonia as the N source", *Journal of Crystal Growth* 312, pp.1029-1035, 2010.

6. König, I., J. Schliemann, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald, "Electronic Structure and Magnetism of Complex Materials", edited by D. J. Singh and D. A. Papaconstantopoulos (Springer Verlag, Berlin), pp.163, 2003.
7. S Dietl, T., "Modern Aspects of Spin Physics", edited by W. Pötz, J. Fabian, and U. Hohenester (Springer, Berlin), pp.1-46, 2007.
8. Weng W. Chow, Kent D. Choquette, Mary H. Crawford, Kevin L. Lear, G. Ronald Hadley, "Design, fabrication, and performance of infrared and visible vertical-cavity surface-emitting lasers", IEEE Journal of Quantum Electronics 33, pp.1810-1824, 1997.
9. Thodoropoulou, N., A. F. Hebard, M. E. Overberg, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, S. N. G. Chu, and R. G. Wilson, "Unconventional Carrier-Mediated Ferromagnetism above Room Temperature in Ion-Implanted (Ga, Mn)P:C", Phys. Rev. Lett. 89, pp.107203, 2002.
10. S. Adachi, "Physical Properties of III-V Semiconductor Compound: InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP", Wiley, New York, 1992.
11. M. E. Overberg, G. T. Thaler, R. M. Frazier, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, R. Rairigh, J. Kelly, N. A. Theodoropoulou, A. F. Hebard, R. G. Wilson, and J. M. Zavada, "Magnetic properties of Mn-implanted AlGaP alloys", J. Vac. Sc. Technol. B 21, pp.2093, 2003.
12. F. Shi, J. Zhan, H.C. Cheng, "Photoemission Characteristic of Transmission-Mode Extended Blue GaAs Photocathodes", Spectrosc. and Spectral. Anal. 32, pp.297-301, 2012.
13. Byung-Sub Kang, Kie-Moon Song, and Haeng-Ki Lee, "Ab Initio Study of Ferromagnetism in Mn-doped AlGaP₂", Phys. Status Solidi C 14, pp.1700219-1700224, 2017.
14. F. El Haj Hassan, A. Breidi, S. Ghemid, B. Amrani, H. Meradji, and O. Pages, "First-principles study of the ternary semiconductor alloy (Ga,Al)(As,Sb)", J. of Alloys and Comp. 499, pp.80-89, 2010.
15. Byung-Sub Kang, Kwang-Pyo Chae, and Haeng-Ki Lee, "Half-Metallic Ferromagnetism in Chalcopyrite (AlGaMn)P₂", Advanced in Condensed Matter Phys., 706957(Article ID), pp.1-7, 2015.
16. O. K. Andersen, "Linear methods in band theory", Phys. Rev. B 12, pp.3060, 1975.
17. S. Y. Savrasov, "Linear-response theory and lattice dynamics: A muffin-tin-orbital approach", Phys. Rev. B 54, pp.16470, 1996, and references therein.
18. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple", Phys. Rev. Lett. 77, pp.3865-3868, 1996.
19. C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics", Seventh ed. (John Wiley & Sons, 1996).
20. J. Okabayashi, A. Kimura, O. Rader, T. Mizokawa, A. Fujimori, T. Hayashi, and M. Tanaka, "Core-level photoemission study of Ga_{1-x}Mn_xAs", Phys. Rev. B 58, pp.R4211, 1998.
21. Bouzerar, G. T. Ziman, and J. Kudrnovky, "Compensation, interstitial defects, and ferromagnetism in diluted ferromagnetic semiconductors", Phys. Rev. B. 72, pp.125207, 2005.
22. Burch, K. S., D. B. Shrekenhamer, E. J. Sinley, J. Stephens, B. L. Sheu, R. K. Kawakami, P. Schiffer, N. Samarth, D. D. Awschalom, and D. N. Basov, "Impurity Band Conduction in a High Temperature Ferromagnetic Semiconductor", Phys. Rev. Lett. 97, pp.87208, 2006.

접수일: 2020년 8월 26일, 심사일: 2020년 9월 8일,
 게재확정일: 2020년 9월 11일