

## 자성 반도체 MnGe의 전자 구조와 자성에 관한 제일원리계산

울산대학교 차기범, 조성래, 홍순철

## First Principles Calculation on Electronic Structure and Magnetism of a Magnetic Semiconductor: MnGe

University of Ulsan G.B. Cha, S. Cho, and S.C. Hong

## 1. 서론

반도체의 전하 자유도와 자성체의 스핀 자유도를 동시에 이용할 수 있는 자성 반도체에 대한 연구가 최근에 활발하게 진행되고 있다. 소위 말하는 'spintronics'에 실제로 응용되기 위해서는 큐리 온도가 상온 이상이어야 하고 결정 구조, 구성 원소 등이 간단하여 제조할 때 결함이 발생할 가능성이 적은 자성반도체의 개발이 요구되고 있다.

III-V 와 II-VI 반도체에 자성 물질을 치환한 자성반도체가 주 연구 대상이었으나, 얻을 수 있었던 최대 큐리 온도가 110 K로 충분히 높은 온도를 얻는 데 실패하였다. [1]

최근에 단원소 반도체 Ge에 Mn을 치환한  $Mn_xGe_{1-x}$ 가 자성반도체라는 두 실험 보고가 있었다. [2, 3] 그러나, 두 실험 결과사이에는 세 가지 크게 다른 점이 있다: 1). 전하 운반자의 수가 한 실험에서는  $10^{16}$  이고[2] 다른 한 실험은  $10^{20}$  이다[3]; 2). 저온에서 한 실험에서 반강자성이었으나[2], 다른 한 실험은 강자성이었다[3]; 3). 한 실험의 큐리온도는 295 K 로 상온이었으나[2] 다른 실험은 최대 116 K 이었다.[3] 본 연구에서는 두 실험 사이의 상이점을 밝히고자 제일원리계산방법으로  $Mn_xGe_{1-x}$  에 대한 제일원리계산을 수행하였다.

## 2. 계산방법

본 연구에서는 제일원리계산방법 중에서 전이금속의 자성 연구에 가장 적합하다고 알려져 있는 Full-potential Linearized Plane Wave (FLAPW) 방법[4]을 사용하였다. 원자가전자는 스핀-궤도 결합을 제외한 모든 상대론적인 항을 포함하여 준상대론적으로 취급하였고 핵심전자는 완전히 상대론적으로 취급하였다. 약 1000 개의 기저함수를 사용하였고 제일영역 브릴루앙 적분을 하기 위해 10 개의 특별  $k$  점을 사용하였다. 교환상관 전위는 General Gradient Approximation(GGA) 사용하였다. 전하밀도, 스핀밀도의 입력과 출력 차이가 각각  $0.1 \times 10^{-4} e/(au)^3$  보다 작을 때 자체충족적이라고 가정하였다.  $Mn_xGe_{1-x}$ 에서  $x=0.125, 0.25, 0.5$ 인 계에 대한 연구를 수행하였다.

### 3. 계산결과

$Mn_{0.125}Ge_{0.875}$  에서 계가 Mn 이 서로 이웃해 있는 경우와 Mn 이 균일하게 분포되어 있는 경우를 설정하고 계산하였다. Mn 이 서로 이웃한 경우에는 Mn 사이가 서로 반강자성 결합을 하였고 Mn 이 균일하게 분포되어 있는 경우는 강자성 결합을 하는 것으로 계산되었고 또한 Mn 이 균일하게 분포되어 있는 경우보다는 Mn 이 서로 이웃한 경우가 더 안정적이었다.

Park 등은 70 K의 아주 낮은 온도에서 Ge 와 GaAs(001) 기판 위에 박막으로  $Mn_xGe_{1-x}$  성장시켰고[3] Cho 등은 고온에서 덩치로  $Mn_xGe_{1-x}$  단결정을 성장시켰다.[2] 이 계산결과는 두 실험 사이의 상이점이 제작 과정의 차이에서 오는 것으로 설명할 수 있다. 즉 Cho 등의 실험은 Mn 원자가 에너지가 낮은 서로 이웃한 상태에 있고 Park 등이 제작한 시료는 제작 시 낮은 온도 때문에 안정한 상태로 찾아가기에는 Mn 원자의 이동성이 충분하지 않아 균일하게 분포되기 때문인 것으로 보인다.

Mn 의 자기모우멘트는 약 3.0 Bohr magneton 이었고 이는 Cho 등이 측정한 값(2.85 Bohr magneton)과 잘 일치하였다.

### 4. 결론

Park 등이 저온에서 발견한 강자성은 낮은 제작 온도로 Mn 원자 사이가 충분히 떨어져 있기 때문이고 Cho 등이 저온에서 발견한 반강자성은 Mn 원자의 이동성이 충분하여 안정된 상태를 찾아갔기 때문인 것으로 판단된다. Mn 원자 당 자기모멘트는 약 3.0 Bohr magneton 이었다.

이 연구는 연세대 초미세표면과학연구센터를 통한 과학재단의 지원에 의해 수행되었으므로 이에 감사드립니다.

### 참고문헌

- [1] H. Ohno, Science **281**, 951(1998).
- [2] S. Cho et al., submitted to Phys. Rev. Lett.
- [3] Y. D. Park et al., Science **295**, 651(2002).
- [4] E. Wimmer et al., Phys. Rev. B**24**, 864(1981).