

LiNbO₃ 단결정에서 외부 DC 전기장에 의한 SHG의 MgO 첨가 특성Characteristics of MgO Doping for SHG of LiNbO₃ Crystals by External DC Fields

강봉훈, 이범구*, 차명식**, 주기태

KIST 복합기능세라믹스센터

*서강대학교 물리학과

**부산대학교 유전체물성센터

LiNbO₃ 단결정에서 MgO 첨가에 따른 제 2고조파 발생(SHG)을 Maker 무늬를 이용하여 조사하였고, 외부 DC 전기장에 의한 제 2고조파 발생의 MgO 첨가에 따른 특성을 연구하였다. 외부 DC 전기장에 의한 공간전하장이 결정내부에 형성되고, 이러한 공간전하장의 변화는 제 2고조파 발생의 변화를 준다. 또한 MgO 첨가량에 따라 공간전하장의 변화가 있을 수 있다. 본 연구에서는 이러한 변화의 특성을 SHG의 실험을 통하여 측정하였다. 반주기 동안 제 2고조파발생의 변화는 $\sin^2 \Psi$ 함수의 형태를 보였으며, 8~14 kV/cm의 외부 DC 전기장에서 발생하는 제 2고조파의 세기가 50%감소하였다. 또한 MgO가 4 mol% 첨가된 LiNbO₃ 단결정에서 외부 DC 전기장에 의한 제 2고조파 발생 특성의 변화가 보였다. 이와같은 외부 DC 전기장에 대한 특성은 LiNbO₃ 단결정의 물성을 규명하는데 큰 도움이 된다.

제일원리를 이용한 묽은자성반도체의 자성특성 연구

Study on the Magnetic Properties of Diluted Magnetic Semiconductor using *Ab Initio* Calculation

김윤석, 김한철*, 정용재

한양대학교 세라믹공학과

*한국표준과학연구원

최근 스핀트로닉스의 중요성이 부각되면서, 전자의 전하뿐만 아니라 스핀 자유도까지 이용하려는 연구들이 활발히 수행되고 있다. 묽은자성반도체(Diluted Magnetic Semiconductor, DMS)는 전자의 스핀을 이용하는 소자에 응용될 가능성이 있는 신 기능재료로서 반도체 물질에 적은 양(~5%)의 자성원소(전이금속)가 치환되어 강자성을 띄는 물질이다. 이 연구에서는 묽은자성반도체의 자성특성에 대한 미시적인 이해를 얻기 위해 전자밀도범함수이론에 기반을 둔 제일원리 계산을 수행하였다. 반도체 물질로는 SiC, Si, Ge를 사용하였고, 치환되는 자성원소로는 V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni를 사용하였다. 전자사이의 교환·상관(exchange-correlation) 상호작용은 Generalized Gradient Approximation(GGA)방법을, 그리고 전자와 이온의 상호작용은 Projector Augmented Wave(PAW)방법을 이용하여 기술하였으며, 평면파기저(planewave basis set)를 이용하여 제일원리계산을 수행하였다. DMS의 모델로는 반도체물질 8원자 셀과 64원자 셀에 하나의 자성원소가 치환되는 구조를 고려하였으며, 각각의 경우 에너지적 안정성과 자성모멘트를 계산하여 서로 비교하였다. 전이금속인 V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni를 치환한 결과, 주로 Cr과 Mn이 치환된 재료에서 강자성이 나타남을 알 수 있었고, V과 Fe이 치환된 재료에서도 경우에 따라 강자성이 나타나는 것을 알 수 있었다. 페르미 준위 근처의 상태밀도와 밴드구조의 분석을 통해, 이러한 자성이 전이금속의 3d 오비탈에 존재하는 전자에 기인한 것임을 확인할 수 있었다.