

## 【N-14】

# 제일원리를 이용한 탄화규소(SiC) 묽은자성반도체의 치환 전이금속에 따른 자기적특성 전산모사

김윤석\*,\*\*, 김한철\*\*, 정용재\*

\*한양대학교 세라믹공학과, \*\*한국표준과학연구원 나노표면그룹

오늘날 반도체 산업에서 소자의 집적도 및 동작속도를 증가시키기 위한 방법으로 전자의 스핀을 이용한 스핀트로닉스(spintronics)가 주목을 받고 있다. 묽은자성반도체(diluted magnetic semiconductor)는 스핀트로닉스 소자에 응용될 가능성이 있는 신기능재료(new functional material)로서, 반도체에 소량의 자성물질을 치환시켜 전자의 스핀분극 특성을 이용하는 재료이다. 현재 많은 연구원들에 의해 묽은자성반도체에 대한 연구가 수행되고 있으며, 특히 다양한 반도체 물질에 전이금속을 첨가하여 이들이 강자성(ferromagnetic phase)일 때 발현되는 스핀분극특성을 이용하려는 연구가 다각도로 진행 중이다. 묽은자성반도체는 III-V 혹은 II-VI 화합물 반도체를 반도체 물질로 이용하는 연구가 대부분을 이루고 있지만, 최근 IV 화합물 반도체인 탄화규소에 Mn을 5~25% 치환하였을 때 실험적으로 약 250K의 큐리온도를 가지며 강자성의 발현이 보고되었다.

본 연구는 탄화규소(SiC)를 기반으로 하는 묽은자성반도체의 자기적특성 및 전자스핀구조에 대한 양자역학적 이해를 얻기 위하여 제일원리 계산을 수행하였다. 전자와 이온의 포텐셜에는 ultrasoft-pseudopotential을 사용하였고, 전자와 전자의 exchange-correlation을 고려하기 위한 방법으로 generalized gradient approximation을 적용하여 계산을 수행하였다. 반도체인  $\beta$ -SiC에 각 전이금속(V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni)이 치환될 경우에 강자성일 때와 상자성일 때의 총에너지(total energy)를 비교하여 자화에너지(magnetization energy)를 확인하였고, 각각에 대한 자기모멘트(magnetic moment)를 계산하여 보았다. 강자성일 때 안정적인 물질은 V, Cr, Mn이 치환된  $\beta$ -SiC DMS임을 확인하였고, 치환될 경우 자기모멘트가 가장 크게 발현되는 물질은 Mn임을 알 수 있었다. 또한 Fe, Co 그리고 Ni이 치환된 경우에는 상자성일 때가 에너지적으로 안정함을 확인하였고, 자기모멘트는 나타나지 않았다. 전자상태밀도(density of states)를 그려본 결과 V, Cr, Mn이 실리콘 위치에 치환된  $\beta$ -SiC DMS에서 스핀트로닉스 소자에 필요한 반금속(half-metal) 특성이 나타나는 것을 확인할 수 있었다.