

## 전이금속이 도핑된 TiN의 강자성 (Ferromagnetism of Transition Metal doped TiN)

이승철<sup>1,\*</sup>, 이광렬<sup>1</sup>, 이규환<sup>1</sup>, W.M. Temmerman<sup>2</sup>

<sup>1</sup>한국과학기술연구원 미래기술연구본부, <sup>2</sup>Daresbury Laboratory, Daresbury, UK

### 1. 서론

전자의 전하량을 제어하여 정보의 저장 및 처리를 수행하는 종래의 정보소자기술과는 달리 스핀전자소자는 전자의 전하량과 함께 전자의 스핀을 동시에 제어하여 정보를 처리하는 소자로써 미래의 새로운 정보처리소자로 각광을 받고 있다. 이러한 스핀전자소자가 구현되기 위해서는 스핀분극된 전자가 소스를 통해 반도체로 주입되어야 하고 주입된 전자는 외부에서 인가된 전기장 또는 자기장에 의해 제어되어야 하며 이후 드레인에서 검출이 가능해야 소자로써 기능할 수 있다.[1]

가장 먼저 제안된 스핀 주입물질은 상온에서 강자성을 나타내는 Co, Ni, Fe과 같은 강자성 금속이었다. 그러나 강자성 금속의 전도도는 반도체의 전도도에 비해 약 천 배에서 백 만 배 이상 크고 전도도 불일치에 의해 효율적인 스핀 주입은 가능하지 않다고 알려져 있다.[2] 전도도 불일치 문제를 해결하기 위해 많은 소자들이 제안되었는데 현재 가장 성공적이라고 알려진 스핀주입물질은 Mn을 GaAs에 MBE (Molecular Beam Epitaxy)방법을 통해 수 %주입하여 제조된 희박자성 반도체(Diluted Magnetic Semiconductor)이다.[3] (GaMn)As의 강자성은 Ga위치에 치환형으로 주입된 Mn의 국소화된 자성 모멘트와 As에 의해 생성된 가전자 밴드와의 상호작용을 통해 가전자 밴드는 스핀 분극이 일어나고 스핀 분극된 홀과 Mn의 자기모멘트가 상호작용하면서 강자성이 나타나기 때문에 전도도 불일치 문제를 해결하면서 높은 효율로 스핀 분극된 전자를 주입할 수 있는 유력한 방법으로 제안되었다. 그러나 이 물질의 가장 큰 문제점은 낮은 큐리온도로서 현재까지 170 K를 넘지 않는 것으로[4] 알려져 있기 때문에 실제적인 소자로써 사용할 수 없다는 문제가 있다. 이후 GaN, ZnO등의 물질에 Mn을 도핑 하여 강자성이 나타났다는 보고가 있지만 아직까지 강자성의 기원 및 큐리온도에 대해서는 논쟁 중인 단계로 실제로 스핀전자소자에 응용이 가능할 지에 대해서는 의심의 여지가 있다.[5]

본 연구에서는 TiN의 강자성의 가능성을 고려하였다. TiN은 반도체 산업에서 Si으로 혼입되는 Cu의 확산을 방지하는 물질로서 광범위하게 사용되고 있다. 또한, TiN은 금속이면서도 전도도가 낮은 semi-metal로 분류되는 데 그 이유는 이 물질의 페르미 준위에는 p-d hybridized 전자만이 존재하기 때문이다. 그 결과 TiN과 반도체 사이의 접합은 통상적인 금속/반도체에서 발견되는 쇼트키 장벽이 형성되지 않으며 옴접합을 이룬다고 알려져 있다.[6] 또한, TiN이 확산 방지 물질로서 반도체 산업에 광범위하게 사용되었기 때문에 균일한 계면을 가진 얇은 박막을 제조하는 기술이 확립된 장점도 있다. 만약 이 물질에 전이금속을 첨가했을 때 강자성을 나타낼 수 있다면 직접 반도체 산업에 응용이 가능하다는 장점이 있다. 본 연구에서는 제일원리 전자구조 계산을 통해 여러 가지 전이금속 원소를 첨가했을 때 전이금속 원소와 인접한 N사이의 상호작용을 살펴보고 강자성 물질로의 가능성을 탐색하고자 한다.

### 2. 계산방법

TiN의 안정된 결정구조는 암염구조로써 단위포에 Ti와 N원자가 각각 두 개씩 존재한다. 전이금속이 첨가된 TiN을 계산하기 위해 2x2x2 supercell을 사용하였으며 첨가된 전이금속은 Ti원자 위치에

차환형으로 존재한다고 가정하였다. 사용된 전이금속은 V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, 그리고 Cu였다. 모든 계산은 평형 격자 위치에서 수행되었으며 전이금속의 주입에 따른 격자의 완화는 고려하지 않았다.

본 계산은 linear muffin-tin orbital (LMTO) 밴드 계산법[7]에 포함되어 있는 self interaction correction-local spin density (SIC-LSD)[8] 접근법을 사용하였다. 전이금속과 Ti에 대해서는 4s, 4p, 3d 상태가 고려되었고 N에 대해서는 2s, 2p 그리고 3d 상태를 고려하였다.

### 3. 계산결과

전이금속이 첨가된 경우 전이금속의 종류에 따라 얻어진 물질의 local moment를 그림 1에 나타내었다. V의 경우 local moment가 나타나지 않았는데 이것은 V이 첨가된 경우 재료는 자성을 띠지 않는다는 것을 말해준다. 그리고, Cr에서 Cu까지 local moment가 나타남을 알 수 있다. 또한, 얻어진 local moment는 정수가 아닌 값을 나타내는 것으로 보아 half-metal이 아니라는 것도 알 수 있다. 가장 큰 local moment를 나타내는 물질은 Mn이 첨가된 TiN으로써 약  $4.5\mu_B$ 의 local moment를 나타낸다는 것을 알 수 있다. 이는 Mn이 첨가된 TiN에서 Mn의 전자 배열은 half full상태로 존재한다는 것을 말해준다. 그러나 정확히 5의 값을 가지지 않는 것은 인접한 N이 Mn과 반강자성 배열을 하기 때문이다. 또한, 원자량이 증가함에 따라 TiN이 가지는 local moment는 점차 감소하는 것을 알 수 있는데 3d 전자가 계속 채워지기 때문이다. 한가지 흥미로운 사실은 비자성 물질인 Cu를 첨가하더라도 약한 local moment를 나타낸다는 것이다.

전이금속이 첨가된 TiN을 스핀전자소자로 이용하기 위해서는 재료가 가지는 local moment뿐만 아니라 페르미 준위 근처에서의 스핀 분극 또한 중요한 매개변수라 할 수 있다. 그림 2에 전이금속이 첨가된 TiN의 스핀 분극을 계산하였다. Mn의 경우 가장 큰 local moment를 가지고 있지만 페르미 준위에서의 스핀 분극은 크지 않고 오히려 Cu의 스핀 분극이 32%로 가장 크다는 것을 알 수 있다. 강자성 금속의 스핀 분극이 40%대라는 것을 고려하면 Cu가 가지는 스핀 분극은 결코 작지 않다는 것을 알 수 있다. 이는 다른 물질과는 달리 Cu의 d 상태가 페르미 준위에 존재하기 때문이다. 전이금속의 TiN 내에 존재할 경우 결합 상태에 대해서는 DOS (density of state) 해석을 통해 이해할 수 있다.

### 4. 결론

전이금속이 첨가된 TiN물질의 강자성의 가능성을 제일원리 전자구조 해석을 통해 알아보았다. 현재까지의 계산결과에 따르면 전이금속이 첨가된 경우 TiN은 local moment를 나타낼 수 있음을 알 수 있었다. 강자성의 가능성을 이해하기 위해서는 더 큰 supercell을 사용해 계산할 필요가 있으며 실험적인 검증도 필요하고 생각된다.

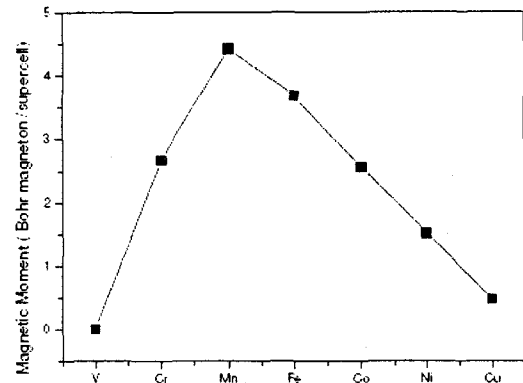


Fig. 1: Variation of local magnetic moment when transition metals substitute Ti site.

5. 참고문헌

- [1] S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. 56, 665 (1990).
- [2] G. Schmidt, D. Ferrand, L.W. Molekamp, A.T. Filip, and B.J. van Wees, Phys. Rev. B 62, R4790 (1999)
- [3] H. Ohno, J. Magn. Magn. Mater. 200, 110(1999).
- [4] K.C. Ku et al., Appl. Phys. Lett. 82, 2302(2003).
- [5] C. Liu, F. Yun, and H. Morkoç, J. Mater. Sci. Mater. Electronics 16, 555(2005).
- [6] P. Rutenara et al., MRS Symp. Proc. F99W11.75 (1999).
- [7] W.M. Temmerman, A. Svane, Z. Szotek, and H. Winter, Electronic Density Functional Theory: Recent Progress and New Directions (Plenum Press, 1998)
- [8] J.P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B 23, 5048(1981)

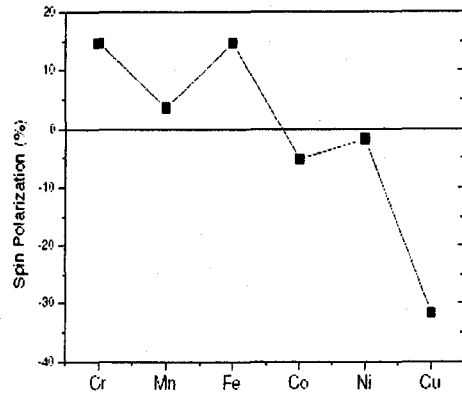


Fig. 2: Spin polarization of TM doped TiN