

## Zinc-blende 구조를 가진 CrTe (001) 표면의 자성과 반쪽금속성

이재일\*, 변영신  
 인하대학교 물리학과

### 1. 서론

한쪽스핀의 전자상태는 금속성을 가지고, 다른 쪽 스핀의 경우는 부도체나 반도체적 성질을 가지는 반쪽금속 물질은 페르미에너지에서 스핀분극률이 100%가 되기 때문에 스핀주입물질 등으로 많은 응용가능성이 있다. 반쪽금속물질은 1980년대 이후 여러 가지 물질이 예측되거나 합성되었는데, 최근에는 CrAs 등과 같이 zinc-blende 구조를 가지는 물질이 관심을 끌고 있다. 이는 zinc-blende 구조의 반쪽금속물질이 큰 자기모멘트와 높은 큐리온도를 가지고 있으며, zinc-blende 구조를 가지는 반도체와 좋은 결합을 접합을 하는 장점을 지니고 있기 때문이다 [1].

반쪽금속물질을 실제로 소자로 이용하기 위해서는 그 표면의 물성을 이해하는 것이 필수적이다. 이와 관련하여 Galanakis는 [2] full-potential screened KKR 방법을 이용하여 CrAs의 (001)표면의 전자구조를 계산한 결과, Cr원자로 끝나는 표면의 경우에는 반쪽금속성이 유지되지만 As원자로 끝나는 경우에는 반쪽금속성이 깨짐을 보였다. 여기서는 또 다른 Cr 화합물 반쪽금속물질 중 하나인 CrTe가 화합물 반도체인 CdTe를 기판으로 이용하여 분자살결쌍기로 성장되었다고 가정할 때, (001)표면에 대해 총 퍼텐셜 선형보강평면파동(FLAPW)방법을[3] 이용하여 전자구조를 계산하고, 반쪽금속성과 자성을 고찰하였다.

### 2. 모형 및 계산방법

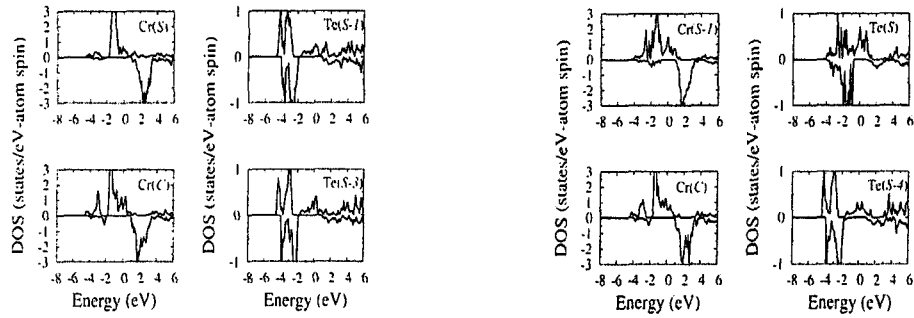
zinc-blende 구조를 가지는 CrTe에서 (001)면은 Cr로 끝나는 경우 (Cr-Term)와 Te로 끝나는 경우 (Te-Term)의 두 가지가 있는데, 본 연구에서는 두 경우 모두 고려하였다. 단일판 FLAPW 방법을 이용하기 위해 Cr-Term의 경우는 9층, Te-Term의 경우는 11층으로 이루어진 얇은 판을 고려하였다. 2차원 격자상수는 기판으로 가정한 CdTe의 격자상수에 해당되는 값인 8.67 a.u.로 잡았으며, 이때 층간 거리는 평형상태의 CrTe의 덩치부피가 유지되도록 하면 2.794 a.u.가 된다.

전자구조를 얻기 위해 단일 입자 방정식인 Kohn-Sham 방정식을 [4] FLAPW방법을 이용하여 자체 충족적으로 풀었다. 교환-상관 퍼텐셜은 Perdew 등의 일반기울기근사(Generalized Gradient Approximation: GGA)를[5] 이용하였다. Cr과 Te 원자 머핀-틴 구의 반지름은 각각 2.20 a.u. 와 2.60 a.u.로 택하였다. 핵심전자는 완전히 상대론적으로 취급하였고 가전자에 대해서는 스핀-궤도결합을 고려하지 않고 준 상대론적으로 취급하였다.

### 3. 결과 및 고찰

그림 1 (a)와 (b)는 각기 Cr-Term과 Te-Term 계에서 총별 스핀분극 상태밀도를 보여주고 있다. 여기에서 볼 수 있듯이 두 경우 모두 덩치상태에 해당하는 가운데층 Cr(C)의 경우 소수스핀 상태밀도가 각각 약 2.7 eV의 에너지 간격을 가지고 있어 확연히 반쪽금속성을 보여주고 있다. 또한 그림에서 볼 수 있듯이 Cr-Term의 Cr(S) 원자나 Te-Term의 Te(S) 원자의 소수상태밀도를 보면 띠간격이 있어 반쪽금속성이 유지됨을 알 수 있다. 그렇지만, 그림 (a)의 Cr(S) 소수스핀상태의 경우 띠간격이 약 2.6 eV로 덩치상태와 비슷하나 그림 (b)의 Te(S)의 경우에는 띠간격이 안쪽 층의 값 (약 2.9 eV)보다 상당히 줄어

은 약 2.0 eV의 값을 가졌다. 이는 CrAs(001)의 As 표면과 마찬가지로[2], 표면에 Te가 나옴으로써. 끊어진 결합으로 인한 표면상태가 생겼기 때문이다.



(a) (b)  
 그림 1. 각기 (a) Cr 과 (b) Te 로 끝나는 CrTe(001) 계의 상태밀도.  
 그림에서 실선은 다수스핀전자, 점선은 소수스핀전자를 나타낸다.

#### 4. 참고문헌

- [1] Ph. Mavropoulos, I. Galanakis, and P. H. Dederichs, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, 4261 (2004).
- [2] I. Galanakis, *Phys. Rev. B* **66**, 012406 (2002).
- [3] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **24**, 864 (1981), and references therein; M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, *ibid.* **26**, 4571 (1982).
- [4] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964); W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
- [5] J. P. Perdew and Y. Wang, *Phys. Rev. B* **45**, 13 244 (1992).