

전이금속이 도핑된 GaN의 Valence Band Splitting에 대한 제일원리전자구조 해석

이승철*, 이광렬, 이규환
한국과학기술연구원 미래기술연구본부

1. 서론

Dietl 등 [1] 이 Mn이 도핑된 GaN의 상온강자성을 예측한 이래 많은 실험적, 이론적인 연구들이 GaMnN의 스핀소자 응용가능성에 대해 연구하였다. [2] 연구결과는 아직도 논쟁중이지만 적어도 강자성의 기원이 Dietl 등이 초기에 제안한 캐리어가 매개된 강자성 (carrier mediated ferromagnetism)이 아니라는 것은 확실해 보인다. 최근의 이론적인 계산결과는 이와 같은 결과를 뒷받침한다. Van Schifgaarde와 Mryasov [3]는 제일원리전자구조 계산을 통해 GaMnN에서 Mn은 Mn클러스터를 형성하는 것이 에너지적으로 안정하며 수 개의 원자로 이루어진 Mn클러스터에서 강자성이 나타날 것이라고 보고하였다. 또한, 최근 전자사이의 강한상관관계를 고려한 SIC (Self Interaction Corrected)-LDA계산에 따르면 GaMnN은 전하전달 유형의 절연체이며 큐리온도도 상온보다 낮을 것이라고 보고하였다. [4] 따라서, Mn이 도핑된 GaN는 Dietl 등이 제안한 캐리어가 매개된 자성반도체로 보기 힘들며 스핀소자의 응용을 위한 후보물질이라 할 수 없다고 생각된다.

한편, Mn이 아닌 다른 전이금속이 GaN내에서 어떤 구조를 가지는지에 대해서는 명확히 알려지지 않았는데 Sato 등 [5] 은 KKR-CPA방법을 사용해 3d 전이금속을 도핑하였을 때 전이금속의 농도에 따른 전자구조를 해석하고 V과 Cr이 유력한 후보물질이라고 제안하였지만 실험결과는 이들의 예상결과를 재현할 수 없었다. 또한 Sato 등의 계산결과는 강자성에만 관심이 있었으며 스핀소자로서의 응용에 중요한 캐리어의 스핀 분극 형태 및 스핀소자로서의 응용가능성에 대해서는 고려하지 않았다. 본 연구에서는 제일원리 전자구조 계산기법을 통해 전이금속이 도핑된 GaN의 전자구조를 해석하고 스핀소자로서의 응용가능성을 탐색해 보았다.

2. 계산방법

모든 계산은 ultrasoft pseudopotential[6]과 평면파 기저를 사용한 VASP 코드 [7, 8] 를 사용하였으며 전자들의 교환상관관계 포텐셜(exchange correlation potential)은 Perdew와 Wang이 제안한GGA함수를 사용하였다. [9] 자기 모멘트와 자기에너지를 강화하기 위해 Vosko, Wilk 그리고 Nusair [10]가 제안한 내삽수식을 사용하였다. 수 meV내의 총에너지를 얻기 위해 절삭에너지를 800 eV로 증가했으며8X8X8 Monkhorst-Pack special k point 메쉬를 사용하였다. 원자들의 내부구조는 완전히 수렴되도록 설정하였다. GaN의 Zinc Blende구조를 사용하였으며 계산에 사용된 총 원자의 수는 64개로써 하나의 전이금속이 치환되는 경우 전이금속의 농도는 3.125 %에 해당된다. 계산에 사용된 격자상수는 4.533옹스트롬으로써 실험에서 얻어진 격자상수[11]인 4.5 옹스트롬과 0.7 %의 차이를 보였다. 사용된 전이금속은 V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, 그리고 Cu로써 총 7종류의 전이금속을 GaN의 Ga위치에 치환한 후 자기적 구조의 특성 변화를 관찰하였다.

3. 계산결과

계산에서 사용된 모든 종류의 전이금속은 GaN에 들어갈 경우 자기모멘트를 나타내는 경우가 에너지가 안정했다. 그림 1은 전이금속의 종류에 따른 총 자기모멘트와 원자에 투사된 자기모멘트의

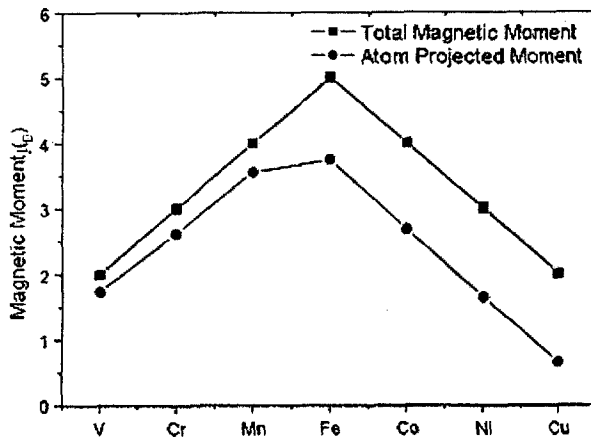


Fig. 1: Total and transition atom projected magnetic moments of transition metals doped GaN

보여준다. 또한, Sato 등이 제안한 V 또는 Cr이 도핑된 GaN는 강자성을 나타낸다 하더라도 스핀소자에 응용할 수 없다는 것을 보여준다. 반면 Fe, Co, Ni, Cu의 경우에는 총 자기모멘트와 원자에 투사된 자기모멘트의 차이가 $1.3 \mu_B$ 정도 얻어지고 Mn등의 원소에 비해 약 $1 \mu_B$ 이상의 자기모멘트가 인접 원자에 넓게 분포되어 있다는 것을 의미한다. 또한, 이와 같은 자기모멘트의 차이는 잘 알려진 자성반도체인 GaMnAs에서의 계산에서 얻어진 $1.4 \mu_B$ 와 유사한 값을 나타낸다. 또한, 음이온의 상태밀도 (density of state)에서도 비슷한 경향이 나타난다는 것을 알 수 있었다.

4. 결론

스핀전자소자로 응용이 가능한 자성반도체가 가져야 할 가장 기본적인 성질은 캐리어가 스핀분극되어 있어야 한다는 것이다. 전이금속 원소의 역할은 강자성 배열을 통해 스핀분극된 캐리어를 안정적으로 공급하는 것이다. 제일원리전자구조 계산기법을 사용해 전이금속이 도핑된 GaN의 전자구조를 해석하고 스핀전자소자로 응용이 가능한 물질을 탐색하였으며 가능한 후보물질은 Co 또는 Cu가 도핑된 GaN라고 예측하였다. 전자구조 해석의 자세한 사항에 대해서는 추후 논의할 예정이다.

5. 참고문헌

- [1] T. Dietl, H. Ohno, F. matsukura, et al., Science **287**, 1019 (2000).
- [2] C. Liu, F. Yun, and H. Morkoc, J. Mater. Sci.:Mater. El. **16**, 555 (2005).
- [3] M. v. Schilfgaarde and O. N. Mryasov, Phys. Rev. B **63**, 233205 (2001).
- [4] T. C. Schulthess, W. M. Temmerman, Z. Szotek, et al., Nature Mater. **5**, 838 (2005).
- [5] K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Jpn. J. Appl. Phys. **40**, L485 (2001).
- [6] D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **41**, 7892 (1990).
- [7] G. Kresse and J. Furthmuller, Comp. Mater. Sci. **6**, 15 (1996).
- [8] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
- [9] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B **45**, 13244 (1992).
- [10] S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. **58**, 1200 (1980).
- [11] T. Lei, T. D. Moustakas, R. J. Graham, et al., J. Appl. Phys. **71**, 4933 (1992).