

자성반도체 FeCr_2Se_4 의 중성자 회절 연구

강주홍*, 강건욱, 김삼진, 김철성
국민대학교 물리학과

1. 서론

Chalcogenide 물질은 도체-부도체 전이, 극저온에서의 스핀-글라스(spin-glass) 현상 등 다양한 물리적 특성으로 인해 주목받고 있다. 이러한 현상들이 나타나는 이유는 기본적으로 AB_2X_4 의 물질들은 사면체와 팔면체 2개의 부격자들을 가지고 있으며 이 두 부격자에 치환되는 금속이온의 다양성에 따라 물리적 성질들이 발현되기 때문이다 [1]. 최근 팔면체 자리에 Cr을 기본으로 하는 물질 중 사면체 자리에 Cd나 Hg등을 치환한 chalcogenide 스피넬 물질에 대하여 multiferroic 성질이 보고되어 관심을 받고 있다 [2, 3]. 본 연구에서는 X선 회절(XRD)과 중성자회절법, 시차주사열분석기(DSC), 뫼스바우어분광기를 이용하여 FeCr_2Se_4 의 결정학적 및 자기적 성질을 규명하였다.

2. 실험방법

99.99 % 이상의 고 순도의 Fe, Cr, Se 분말을 정확한 당량비로 갈아서 섞은 후 석영관에 진공 봉입하였다. 봉입한 시료는 Se의 증기압으로 인한 폭발을 방지하기 위해 $10.5^\circ\text{C}/\text{h}$ 로 온도를 서서히 증가시켜 1000°C 에서 72시간동안 질소가스 분위기에서 열처리 하였으며 온도를 내릴 때도 $14^\circ\text{C}/\text{h}$ 로 서서히 상온까지 내렸다. 시료의 균질성을 위해 시료를 다시 곱게 갈아 2차 열처리를 수행하여 단일상의 FeCr_2Se_4 를 제조하였다. FeCr_2Se_4 의 결정학적 및 자기적 성질을 알아보기 위해 X선 회절 (XRD), 중성자 회절, 시차주사열분석기(DSC), 뫼스바우어 분광기를 이용하여 측정 및 연구하였다.

3. 실험결과 및 고찰

XRD를 이용하여 측정한 FeCr_2Se_4 의 결정구조는 $I2/m$ 의 공간군(space group)을 가지는 단사구조로 분석되었으며 격자상수는 $a_0 = 6.27 \text{ \AA}$, $b_0 = 3.62 \text{ \AA}$, $c_0 = 11.83 \text{ \AA}$, $\beta = 90.68^\circ$ 이다. 물질의 온도에 따른 자기구조를 해석하기 위해 중성자 회절법으로 4 K부터 상온까지 측정하였으며 이를 Fig. 1에 나타내었다. 온도가 증가함에 따라 열진동에 의한 효과로 자기적 질서가 무너져 Néel온도 이상에서는 자기 기여분이 완전히 사라짐을 확인할 수 있었다. 이는 시차주사열분석기(DSC) 측정 결과 흡열 피크가 나타나는 온도 220 K와 일치함을 확인할 수 있었다. 4 K에서는 결정학적 격자에 기여하는 회절선들과 자기구조에 기인한 회절선들이 모두 관측되었다. 또한 동일한 이온의 스핀이 반대로 정렬됨으로써 나타나는 초격자 구조의 회절선 (1 0 1)이 관측 되었다. 4 K에서 Fe와 Cr의 자기모멘트는 각각 $3.698 \mu_B$, $-2.538 \mu_B$ 로 분석되었으며 상온에서 온도가 내려감에 따라 격자상수 a_0 , b_0 는 감소하였고 β 는 증가하고 있다.

미시적 자성을 관찰하기 위해 4.2 K부터 상온 온도 영역까지 뫼스바우어 분광실험을 수행하였다. 뫼스바우어 분석결과, 4.2 K에서 뫼스바우어 초미세 파라미터는 $H_W = 108.8 \text{ kOe}$, $\theta = 72^\circ$, $\phi = 90^\circ$, $\eta = 0$, $\Delta E_Q = -1.65 \text{ mm/s}$ 로 분석되었다. 자기이중극자 상호작용과 전기 사중극자 상호작용 세기의 비를 나타내는 R 값이 -2.25 로 분석 되었으며, 이로부터 자기이중극자 상호작용 보다 전기 사중극자 상호작용이 더 크게 작용하고 있음을 알 수 있었다. 상온에서 Fe 이온의 스펙트럼으로부터 이상질체 이동치는 0.64 mm/s 로 +2가로 결론지어진다. 한편 상온에서 전기 4중극자 분열치는 1.04 mm/s 였으며

이는 단사구조체 내의 Fe 이온 주위의 국부적인 대칭성이 상당히 왜곡되어 있는 결과로 해석된다.

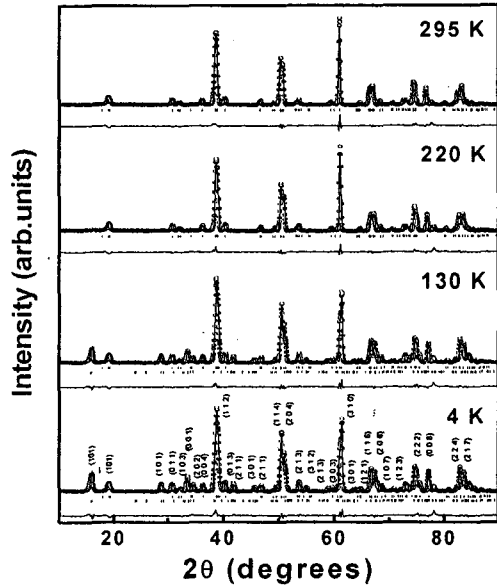


Fig. 1. Neutron diffraction patterns of FeCr_2Se_4 at various temperatures.

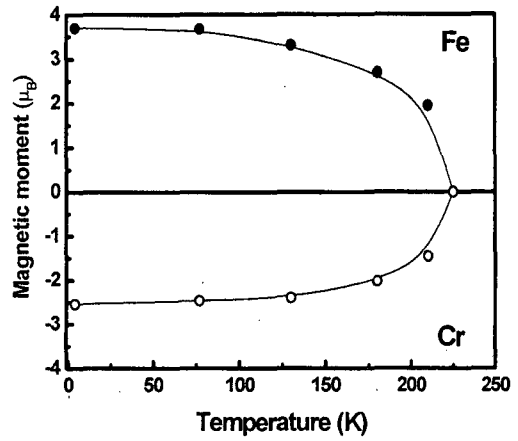


Fig. 2. Magnetic moments of Fe, Cr at various temperatures.

4. 참고문헌

- [1] H. Bakrim, K. Bouslykhane, M. Hamedoun, A. Hourmatallah, and N. Benzakour, *J. Magn. Mater.* **285**, 327 (2005).
- [2] J. Hemberger, P. Lunkenheimer, R. Fichtl, H. -A. Krug von Nidda, V. Tsurkan, and A. Loidl *Nature*, **434**, 364 (2005).
- [3] S. Weber, P. Lunkenheimer, R. Fichtl, J. Hemberger, V. Tsurkan and A. Loidl, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 157202 (2006).