

# 암염구조를 가지는 반쪽금속 CaN 과 NaN이 (001)계면을 형성할 때의 전자구조

김동철<sup>1\*</sup>, Beata Bialek<sup>2</sup>, 이재일<sup>2</sup>

<sup>1</sup>한라대학교 전기전자공학과, 강원도 원주시 한라대 1길, 220-712

<sup>2</sup>인하대학교 물리학과, 인천 남구 용현동 253, 인천 402-751

## 1. 연구동기

최근 들어, 전이금속을 포함하지 않으면서 반쪽금속성을 나타내는 강자성체가 관심을 끌고 있다. 이러한 물질로는, Kusakabe 등이 이론적으로 발견한 첨아연광 (zinc-blende; ZB)구조의 CaP, CaAs, CaSb 등이 있다 [1]. 3d 전자를 포함하는 반쪽금속에서 이종 교환상호작용이나 p-d 교환상호작용에 의해 반쪽금속성이 나타나는 것과는 달리 이들 물질은 sp 원소들만으로 반쪽금속성을 가지기 때문에 sp 형 반쪽금속이라 불린다. 또한 I-V 원소로 이루어진 질소화합물인 MN ( $M=Na, K$ )도 Slater-Pauling 규칙을 따르는 반쪽금속성을 가진다는 것이 보고되었다 [2,3]. 본 연구에서는 기존에 발견된 II-V 질소화합물인 CaN과 I-V 화합물인 NaN이 (001)면에서 계면을 이루고 있을 때 자성 및 반쪽금속성을 전자구조 계산을 통해 고찰하고자 한다.

## 2. 연구방법 및 모형

RS 구조를 가지는 NaN과 CaN이 (001)면에서 계면을 이룰 때의 전자구조를 연구하기 위해, Fig. 1 (a) 및 Fig. 1 (b)와 같은 2개의 계면구조를 고려하였다. Fig. 1(a)은 RS 구조를 가지는 NaN과 CaN이 단순한 계면을 이룰 때의 구조이고, Fig. 1(b)는 계면에서 Na와 Ca 원자가 반반씩 섞인 혼합면이 계면을 이룰 때의 구조를 나타낸다. 이들 계면계의 전자구조는, FLAPW (Full-potential Linarized Augmented Plane Wave) 방법[4]을 이용하여 계산하였다.

## 3. 결과 및 논의

두 계면 구조계에서 계산된 총 자기모멘트는 각기  $12 \mu_B$  및  $24 \mu_B$ 로 정수 배의 보어마그네톤 값을 가져, 계 전체가 반쪽금속성을 유지함을 확인하였으며, 이는 계면의 존재가 이들 계의 반쪽금속성을 해치지 않는다는 것을 뜻한다.

두 계면 구조에서 각 원자들의 자기모멘트를 보면, 계면으로부터 안쪽으로 놓여 있는 N3, N4 원자 (Fig. 1(a) 참조)의 자기모멘트는 각각  $0.807$  및  $1.690 \mu_B$ 으로 덩치 CaN과 NaN 에서의 값인  $0.843$  및  $1.677 \mu_B$ 로부터 크게 달라지지 않았다. 그러나 계면에 놓여 있는 N1 및 N2원자의 자기모멘트는 안쪽 원자와 비교하여 자기모멘트 값이 다소 변화하였다. 즉, Ca1과 같은 계면에 놓여있는 N1 원자의 자기모멘트는  $0.970 \mu_B$ 로서 안쪽 N3에 비해 다소 증가한 반면 Na1과 같은 계면에 놓여 있는 N2원자의 자기모멘트는  $1.574 \mu_B$ 로 안쪽 N4에 비해 다소 작은 값을 가졌다. 양이온인 Ca의 경우 계면 Ca1의 자기모멘트 ( $0.033 \mu_B$ )는 안쪽 Ca2 원자 ( $0.048 \mu_B$ )에 비해 다소 감소하였다. CaN 쪽 계면에서 N1 원자의 자기모멘트가 안쪽에 비해 증가한 것은 이 N1원자가 NaN 쪽의 Na와 결합하게 되어 안쪽 N3원자에 비해 p 전자수가 감소한 탓이고, NaN 쪽 계면 N2 원자의 경우는 이와 반대의 이유이다. 이러한 상황은 sp 자성체에서 음이온의 자기모멘트는 결합에 참여하지 않는 p 전자에 의해 결정된다는 사실과 부합한다.

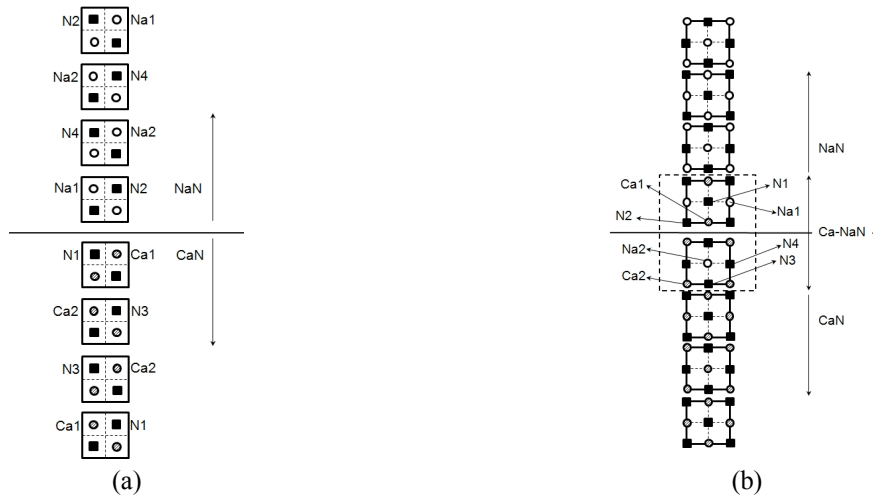


Figure 1. Geometrical structure for the RS NaN-CaN simple interface system and mixed interface system.

혼합 계면계를 보면, 계면에 놓여 있는 4개의 N 원자의 자기모멘트는 CaN과 NaN에서 각기 N 원자의 자기모멘트 값의 평균 정도를 가진다. 구체적으로 N1, N2는 각각 1.264 및 1.387  $\mu_B$ , N3, N4는 각각 1.110 및 1.266  $\mu_B$ 를 가졌다. 위 네 개의 N 원자 중에서 N2가 제일 큰 자기모멘트 값을 가지고 N3가 제일 작은 자기모멘트 값을 가지는데, N2는 아래 위층에서 모두 Na 원자와 접하여 있고 N3 원자는 아래 위층에서 모두 Ca 원자와 접해 있어서 이에 따라 머핀 톨 구 내에 가지고 있는 p 전자수가 서로 다르기 때문이다. Ca 원자와 Na 원자의 경우를 보면 NaN 쪽에 혼합된 Ca1의 자기모멘트가 CaN 쪽에 원래 있는 Ca2 보다 다소 감소하였고, CaN 쪽에 혼합된 Na2의 자기모멘트는 원래 NaN 쪽에 있는 Na 원자의 자기모멘트에 비해 증가하였다. 이러한 경향도 역시 각 원자의 머핀 톨 구내의 p 전자수와 상관이 크다.

## 참고문헌

- [1] K. Kusakabe, M. Geshi, H. Tsukamoto, and N. Suzuki, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, s5639 (2007).
- [2] E. Yan, *Physica B* **407**, 879 (2012).
- [3] Y. Zhang, Y. Qi, and Y. Hu, *J. Magn. Mater.* **324**, 2523 (2012).
- [4] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **24**, 864 (1981).