

4원 호이슬러 합금 CoFeCrGa(001)표면에서 자성과 반쪽금속성에 대한 제일원리 계산 연구

이재일^{1,*}, 김동철²

¹인하대학교 물리학과, 인천광역시 남구 인화로 100, 인천 402-751

²한라대학교 전기전자공학과, 강원도 원주시 한라대 1길, 220-712

I. 연구동기

페르미 에너지에서 10%의 스핀분극율을 가지는 반쪽금속은 스핀트로닉스 소자에 응용 가능성이 크기 때문에 많은 관심을 받아 왔다. 1983년에 de Groot가 반호이슬러 화합물인 NiNbSn에서 반쪽금속성을 처음 발견한 이래 [1], 여러 연구자에 의해 다양한 구조와 화학 조성을 가지는 물질에서 반쪽금속성이 발견되었고 실제로 합성도 되었다. 이 중 호이슬러 화합물은 실용적 면에서 많은 관심을 받아 왔는데 이는 호이슬러 구조가 주로 첨가연광 (zinc-blende) 구조를 가지는 반도체와 구조적으로 잘 부합될 수 있기 때문이었다. 호이슬러 구조를 가진 화합물 중 Co_2FeZ 나 Co_2CrZ (Z=Al, Si, Ga, Ge) 등 코발트계 화합물이 높은 큐리 온도와 큰 자기모멘트로 각광을 받고 있다. 최근에 Gao 등 [2]은 제일원리 계산에 의해, 4원 화합물인 CoFeCrZ (Z=Al, Si, Ga, Ge) 들이 $2\mu_B$ (CoFeCrAl 및 CoFeCrGa) 또는 $3\mu_B$ (CoFeCrSi 및 CoFeCrGe)의 자기모멘트를 가지는 반쪽금속이 됨을 보였다. 본 연구에서는 CoFeCrGa 에서 (001)표면의 전자구조를 계산하여 표면의 자성과 반쪽금속성 유지 여부를 검토하고자 한다.

II. 연구방법 및 모형

4원 호이슬러 합금인 CoFeCrGa 에서 (001)면을 표면으로 하면, Co와 Fe 원자로 끝나는 표면과 Cr과 Ga 원자로 끝나는 두 종류의 표면이 있을 수 있다. 본 연구에서는 표면의 전자구조를 계산하기 위해 각기 9층으로 이루어진 판 모형을 채택하였고, 이 두 가지 표면을 모두 고려하였다. 전자구조를 계산하기 위한 방법으로는 FLAPW 방법[3]을 이용하였으며, 교환상관 퍼텐셜에 대해서는 PBE형[4]의 일반기울기 근사 (GGA)를 채택하였다.

III. 결과 및 논의

Fig. 1(a),(b)에 CoFeCrGa 에서 CrGa 원자로 끝나는 표면계 (CrGa-term으로 나타내기로 한다)와 CoFe 원자로 끝나는 표면계 (CoFe-term)에 대한 원자별 상태밀도가 주어져 있다. Fig. 1(a)의 CrGa-term 계를 보면 오른쪽 패널에서 내부 층 원자들의 경우 모두 소수스핀 상태밀도에서 페르미 에너지를 중심으로 띠간격이 존재하는데, 이는 덩치 CoFeCrGa 가 반쪽금속인 것과 부합하는 것이다. 왼쪽 패널에서 표면층의 Cr(S)이나 Ga(S)원자, 표면 밑층의 Co(S-1)이나 Fe(S-1)원자에 대한 상태밀도를 보면 오른쪽 패널의 내부층 원자에 비해 가전자의 상태밀도가 낮은 에너지 쪽으로 조금 이동하여 페르미 에너지에 다소 걸쳐 있는 것을 볼 수 있는데, 이는 CrGa-term 표면계에서는 반쪽금속성이 살짝 깨지는 것을 나타낸다. 실제로 이 계의 총 자기모멘트는 $12.98\mu_B$ 로 반쪽금속의 특성이라 할 수 있는 정수배에 가까운 값을 가지고 있다. 또한 이 계에 표면층 Cr원자의 자기모멘트가 $3.05\mu_B$ 로서 가운데 층 Cr 원자의 $1.83\mu_B$ 보다 훨씬 증가하였는데 이는 자성전이금속 표면에서 전형적으로 나타나는 표면 효과, 즉 띠좁힘 효과와 교환분리의 증가로 인한 것이다. Fig. 1(b)에 주어졌던 CoFe-term 표면계에 대한 상태밀도를 보면 오른쪽 패널에 주어졌던 내부 층의 상태밀도는 거의 반쪽금속성을 유지하고 있으나, 왼쪽 패널의 표면층이나 표면 밑층 원자를 보면 반쪽금속성이 유지되지 못함을 알 수 있다. 실제로 이 계의 총 자기모멘트는 $9.81\mu_B$ 로 정수와의 거리가 있다. 이 계에서 표면 Co(S)원자는 가운데층 Co(C)원자에 비해 자기모멘트가 1.5배 가까이 증가하여 $1.47\mu_B$ 의 값을 가졌는데 이 또한 띠좁힘과 교환분리가 증가하였기 때문이다. 특이한 점으로는 이 계에서 표면 Fe(S) 원자의 자기모멘트가 $-0.05\mu_B$ 로서 거의 자성이 없

어졌다는 것이다.

- [1] R. A. de Groot, F. M. Müller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett. 50, 2024 (1983).
- [2] G. Y. Gao, L. Hu, K. L. Yao, B. Luo, and N. Liu, J. Alloy. Compd. **551**, 539 (2013).
- [3] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981).
- [4] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

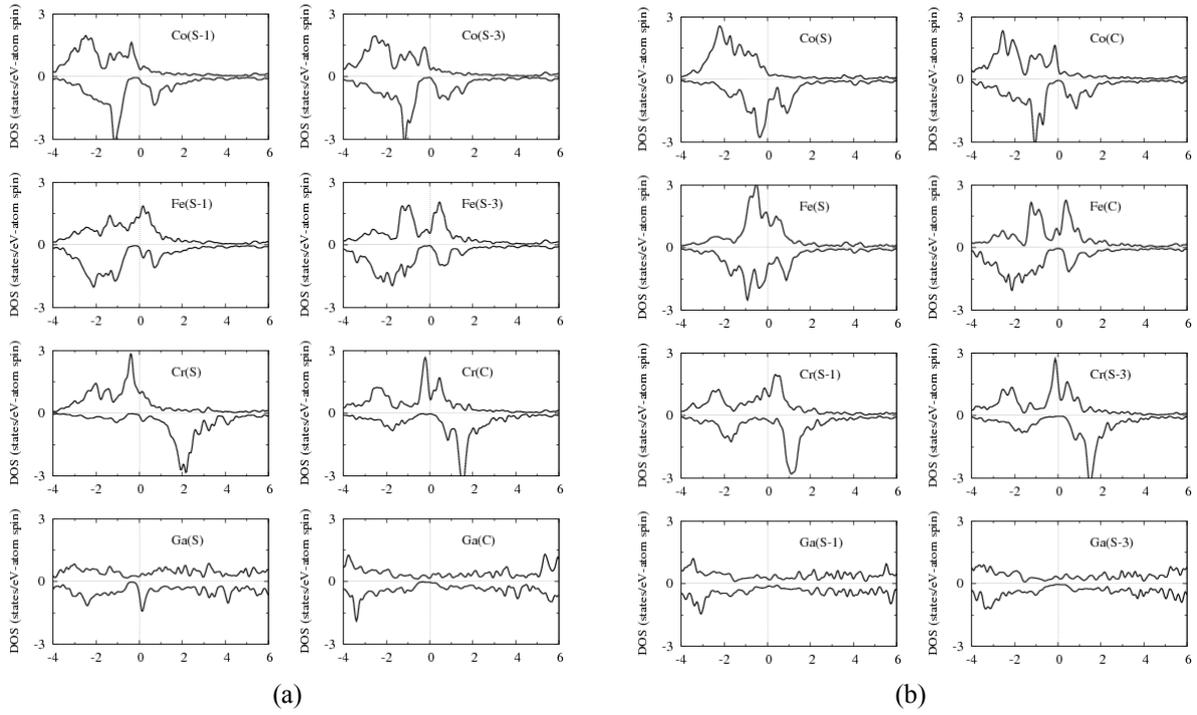


Fig. 1. Atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the chosen atoms of the (a) CrGa-term and (b) CoFe-term of the CoFeCrGa(001) surface system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.