

응력이 MnSi의 자성에 미치는 영향에 대한 제일원리계산

박진식*, 임성현, 홍순철

울산대학교 물리학과, 에너지 하베스트-스토리지 연구센터
울산 680-749 대한민국

B20 구조의 MnSi는 29K 이하에서 helical 자성구조를 가지고 있고 나노구조에 대한 최근의 실험에서 skyrmion 격자가 발견되고 있어 주목을 받고 있다. 본 연구에서는 나노구조에 대한 이해하는 기본 자료로 활용하기 위해 덩치 MnSi의 전자구조와 자성에 대한 제일원리계산을 수행하였다. MnSi의 구조는 단위 날칸당 망간 원자 4개와 실리콘 원자 4개로 이루어져 있으며 비대칭구조를 가지고 있다. 실험에서의 MnSi의 덩치 격자 상수는 4.558 \AA 이고 망간의 자기모멘트는 $0.4 \mu_B$ 으로 알려져 있는데 본 계산에서 얻은 격자상수는 4.52 \AA 이 있으며 자기모멘트는 $0.9 \mu_B$ 으로 실험치에 비해 2배 이상 컸다. 박막 등의 나노구조가 가질 수 있는 응력을 고려하기 위해 a, b 방향으로 계산에서 얻은 총에너지 최소의 격자상수를 중심으로 -3%(압축응력)에서 +3%(인장인력)까지 격자상수를 변화시켜 가면 자성을 계산하였는데 a, b방향으로의 -3%의 압축응력 하에서의 Mn 당 자기모멘트 $0.814 \mu_B$ 으로 줄어 들었고 +3%의 인장응력 하에서는 자기모멘트는 이 $1.017 \mu_B$ 로 증가하여 응력에 따라 증가함을 알 수 있었다. 본 연구를 바탕으로 덩치 MnSi의 helical 자성구조와 나노 구조의 skyrmion 격자를 논의할 예정이다.