탄소 도핑에 따른 τ-MnAl의 자성과 자기이방성에 관한 제일원리계산

박진식*, 임성현†, 홍순철†
울산대학교 물리학과, 에너지 하베스트-스토리지 연구센터 울산 44610 대한민국
†sonny@ulsan.ac.kr, †schong@ulsan.ac.kr

현재 널리 사용되고 있는 영구 자석은 희토류 금속을 포함하고 있는데 희토류 금속을 덜 사용하거나 아예 사용하지 않는 영구 자석 개발에 관심이 높다. 그 중에서 τ-MnAl이 상대적으로 높은 자기이방성과 높은 보자력을 가지고 있는 것을 알려져 있어 희토류 영구 자석을 대체 할 가능성이 있다. τ-MnAl은 단위 낱칸당 망간 원자 2개와 실리콘 원자 2개로 이루어진 $L1_0$ 구조를 가지고 있으며 격자상수는 a=3.91 Å, c=3.56 Å이고 망간 당 자기모멘트는 1.94 μ_B으로 실험적으로 알려져 있다. 그러나 실험적으로 τ-MnAl가 불안정하다고 알려 있으며 카본을 도핑 했을 때 안정해지며 보자력 증가하는 것으로 알려져 있다.[1]

본 계산에서는 MnAl의 자성에 대한 제일원리계산을 수행하기 위해VASP을 사용하였으며 교환상관표텐셜로는 PBE를 사용하였다. KPOINTS는 30×30×30를 사용하였으며 끊어버림 에너지는 450 eV로 두고 계산하였다. 먼저 도핑 하기 전 최적화 된 격자상수는 각각 a=3.89 Å, c=3.50 Å이었으며 Mn 당 자기모멘트와 2.36 μ_B과 MCA값은 0.542 meV/ cell로 계산되었다. 본 계산에서의 자기모멘트는 실험치 자기모멘트에 비해 약 21% 크게 나왔다. 그리고 카본 도핑이 된 MnAl에 대한 계산을 위해 2×2×2 슈퍼셀을 만들어 Mn_{16}과 Al_{16}로 이루어진 계를 설정하였다. 먼저 치환하기 전 Mn 당 자기모멘트는 2.301 μ_B MCA는 0.532 meV/cell로 계산되어 작은 계에 대한 계산치와 일치하여 본 계산의 정확성을 확인할 수 있었다. C이 Mn자리를 치환한 경우 Mn 당 자기모멘트는2.167 μ_B와 MCA는 0.500 meV/ cell로 계산되었으며Al자리를 치환한 경우는 Mn 당 자기모멘트는 2.302 μ_B와 MCA는 0.68 meV/ cell으로 계산되었다. C이 Mn자리에 보다 Al 자리에 치환하였을 때 자기모멘트와 보자력이 커질 수 있음을 보여 주고 있다.

Reference

[1] R. Madugundo, O. Koylu-Alkan, and G. C. Hadjipanayis, AIP ADVANCES **6**, 056009 (2016).