

## Co<sub>2</sub>ZrSi/ZnTe(001)계면의 자성과 반쪽금속성에 대한 제일원리 연구

김영구 · 이재일\*

인하대학교 물리학과, 인천 남구 용현동 253, 402-751

(2007년 7월 23일 받음, 2007년 8월 14일 최종수정본 받음)

호이슬러 구조를 가진 반쪽금속 Co<sub>2</sub>ZrSi와 반도체인 ZnTe이 (001)면을 따라 계면을 이루었을 때 전자구조, 자성 및 반쪽금속성을 총 퍼텐셜 선형보강평면파동(FLAPW) 방법을 이용하여 이론적으로 연구하였다. 모두 4가지 가능한 계면, 즉 ZrSi/Zn, ZrSi/Te, Co/Zn와 Co/Te을 고려하였다. 계산된 상태밀도로부터 4가지 계면에서 모두 반쪽금속성이 깨어졌음을 알 수 있었으나 Co/Te의 경우 페르미에너지에서 소수 스핀 상태밀도의 값은 영에 가까웠다. 계면에서 반쪽금속성이 파괴되는 것은 계면에서 원자들의 좌표수와 대칭성이 덩치상태와 달라지고 계면전자들 사이의 띠 혼성에 의해 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 소수 스핀 띠간격에 계면상태들이 나타났기 때문이다. Co/Te의 계면에서 Co원자의 자기모멘트의 값은 “bridge”와 “antibridge” 위치에서 각각 0.68과 0.78  $\mu_B$ 로서 이는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi 경우의 값(1.15  $\mu_B$ )에 비하여 크게 감소한 것이다. Co/Zn에서 “bridge”와 “antibridge” 위치에 있는 Co원자의 자기모멘트는 각각 1.16과 0.93  $\mu_B$ 의 값을 가졌다. 반면 ZrSi/Zn와 ZrSi/Te의 경우 계면 바로 밑층의 Co원자들은 1.13~1.30  $\mu_B$  사이의 자기모멘트를 가졌는데 이는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에서의 값과 비슷하거나 약간 증가한 값이다.

주제어 : 반쪽금속/반도체접합, Co<sub>2</sub>ZrSi, 반쪽금속성, 자성

### I. 서 론

전자의 스핀을 이용하여 정보를 저장하고 전달하는 스핀트로닉스기술은 전자의 전하 제어에 기초한 기존 전자소자의 한계를 극복할 수 있는 나노기술의 중요한 한 분야이다[1, 2]. 스핀트로닉스소자의 개발을 위해서는 자성체로부터 반도체쪽으로의 효율적인 스핀주입이 중요한 요소이다. 따라서 페르미에너지에서 100%의 스핀 분극율을 지닌 반쪽금속자성체가 촉망받는 스핀주입물질로 떠오르고 있다.

반쪽금속성은 de Groot 등에[3] 의해 반 호이슬러 화합물인 NiMnSb와 PtMnSb에서 제일원리계산에 의해 처음 발견되었다. 반쪽금속물질에서는 한쪽 스핀 전자상태는 금속성을 보이고 다른 한 쪽 스핀의 전자상태는 반도체의 특성을 갖고 있다. NiMnSb 외에도 CrO<sub>2</sub> 산화물[4], pyrite 구조의 CoS<sub>2</sub> [5], 도핑된 페로프스카이트 La<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub> 망간산화물[6], 호이슬러 화합물 X<sub>2</sub>YZ(X = Co, Mn; Y = 전이금속원자; Z = III, IV, V족 원자)[7-9] 등과 같은 많은 물질들에서 반쪽금속성이 예측되거나 실제로 합성되었다. 그중 Co<sub>2</sub>에 기반한 호이슬러 화합물 Co<sub>2</sub>YZ(Y = 3d 전이금속; Z = Si, Ge)이 매우 큰 관심을 끌고 있는데 그 이유는 이들이 실온보다 높은 큐리온도와 큰 자기모멘트를 갖는 등 장점을 갖고 있기 때문이다[7, 8]. 호이슬러 화합물 Co<sub>2</sub>YZ(Y = 3d 전이금속; Z = Si, Ge)은 L<sub>21</sub> 구조를 갖고 있는데, 이 구조는 CoY로 이루어진 zinc-blende 구조에 CoZ로 이루어진 다른 zinc-blende 구조가

1/2 a(1, 1, 1) (a는 살창상수) 만큼 이동시킨 상태로 겹쳐진 구조이다. 최근에 Jin and Lee[10]는 제일원리 전자구조계산으로부터 4d 전이금속원소인 Zr을 포함한 호이슬러 화합물인 Co<sub>2</sub>ZrSi도 반쪽금속성을 나타냄을 보였다. 계산에 따르면 Co<sub>2</sub>ZrSi는 0.94 eV 정도의 소수 스핀 띠간격을 가지며 평형 상태에서의 살창상수는 6.01 Å으로 ZnTe 반도체의 살창상수보다 약 1.5% 정도 작다.

자성체/반도체 이종접합은 스핀트로닉스소자를 구성하는 중요한 요소의 하나인데, 실제로 반쪽금속자성체를 스핀트로닉스소자에 응용하기 위해서는 반쪽금속자성체와 반도체로 이루어진 이종접합계면의 전자구조에 대한 포괄적 이해가 필수적이다. Picozzi 등은[11] 총 퍼텐셜 선형보강평면파동(FLAPW)방법을 이용하여 호이슬러 화합물 Co<sub>2</sub>MnGe과 반도체 GaAs의 (001)계면에서의 전자구조를 연구하였으며 모든 계면에서 Co<sub>2</sub>MnGe의 반쪽금속성이 깨짐을 보였다. 또한 계면에서 Co원자가 반도체의 zinc-blende구조를 유지하는 위치(“bridge” 위치)에 있을 경우 다른 위치(“antibridge” 위치)에 있는 Co 원자보다 자기모멘트가 많이 감소함을 보였다. 이와 같이 계면에서 반쪽금속성이 깨지는 현상은 screened Korringa-Kohn-Rostoker(KKR)방법을 이용한 Co<sub>2</sub>CrAl/InP(001)계면에 관한 연구에서도 보고되었는데 비록 계면에서 반쪽금속성은 파괴되었지만 계면의 스핀분극률은 56%~74%로 여전히 높은 스핀분극률을 갖고 있었다[12].

이 논문에서는 4d 전이금속을 함유한 반쪽금속자성체인 호이슬러 화합물 Co<sub>2</sub>ZrSi와 넓은 띠 간격을 갖고 있는 ZnTe 반도체로 형성된 (001)계면에서의 반쪽금속성과 자성을

\*Tel: (032) 860-7654, E-mail: jilee@inha.ac.kr

FLAPW 에너지띠 방법을 이용한 전자구조계산을 통하여 연구하였다. 논문의 II절에서는 사용된 모형과 계산방법을 기술하였고 III절에서는 결과를 제시하고 논의를 하였으며 IV절에서 결론을 요약하였다.

### II. 모형과 계산방법

Co<sub>2</sub>ZrSi에서 (001)면은 ZrSi와 Co로 끝나는 두 가지 경우가 있고, ZnTe는 각기 Zn와 Te로 끝나는 (001)면을 갖고 있기 때문에 모두 4가지 경우의 계면, 즉 ZrSi/Zn, ZrSi/Te, Co/Zn, Co/Te 계면 형성이 가능하다. 우리는 각기 10층의 Co<sub>2</sub>ZrSi와 6층의 ZnTe로 이루어진 2가지 초격자계를 고려함으로써 이들 각각의 계에서 서로 다른 두 가지 계면을 기술할 수 있도록 하였다. 즉 한 계에서는 ZrSi/Te, Co/Zn 계면을 기술하고 다른 한 계에서는 ZrSi/Zn, Co/Te 계면을 기술하였다. Co<sub>2</sub>ZrSi의 격자상수는 11.357 a.u.[10]이고 ZnTe의 격자상수는 11.527 a.u.[13]으로 매우 비슷하여 초격자구조에서 모든 원자 층들의 층간거리 즉, Co<sub>2</sub>ZrSi 반쪽금속 및 ZnTe 반도체계면사이의 간격 및 반쪽금속과 반도체 원자 층들 사이의 거리는 ZnTe 반도체의 격자상수의 1/4에 해당하는 2.884 a.u.로 잡았다. 또한 초격자의 각 층에서 정사각형 모양의 2차원 단위세포의 살창상수는 ZnTe 반도체의 격자상수 [13]에  $\sqrt{2}/2$ 를 곱한 8.156 a.u.로 택하였다.

전자구조의 계산을 위해 단일 입자 방정식인 Kohn-Sham 방정식[14]을 QMD-FLAPW 방법[15]을 이용하여 자체 총족적으로 풀었으며 교환-상관 퍼텐셜에 대해서는 일반기울기근사(Generalized Gradient Approximation-GGA)[16]를 이용하였다. 제1브릴루앙 영역내의 적분은 기약영역 내에서 72개의 k-점들에 대해 에너지 고유값을 계산하였다. 각각의 계에서 k-점당 약 2400개의 기저함수를 사용하였다. 머핀-틴(Muffin-tin: MT) 구내의 전하와 퍼텐셜을 기술하기 위해 각 운동량  $l \leq 8$ 까지의 격자조화함수를 이용하였으며, 머핀-틴(MT) 구의 반지름으로는 각기, Co 원자는 2.20 a.u., Zr 원자는 2.50 a.u., Si 원자는 2.00 a.u., Zn과 Te 원자는 2.40 a.u.로 선택하였다. 핵심전자는 완전히 상대론적으로 취급하였고 가전자는 준 상대론적으로 취급하였다[17]. 입력과 출력의 전하 밀도와 스핀밀도의 제곱-평균-제곱근값의 차가  $1.0 \times 10^{-4}$  electrons/(a.u.)<sup>3</sup> 이하일 때 자체 총족적 조건을 만족하는 것으로 간주하였다.

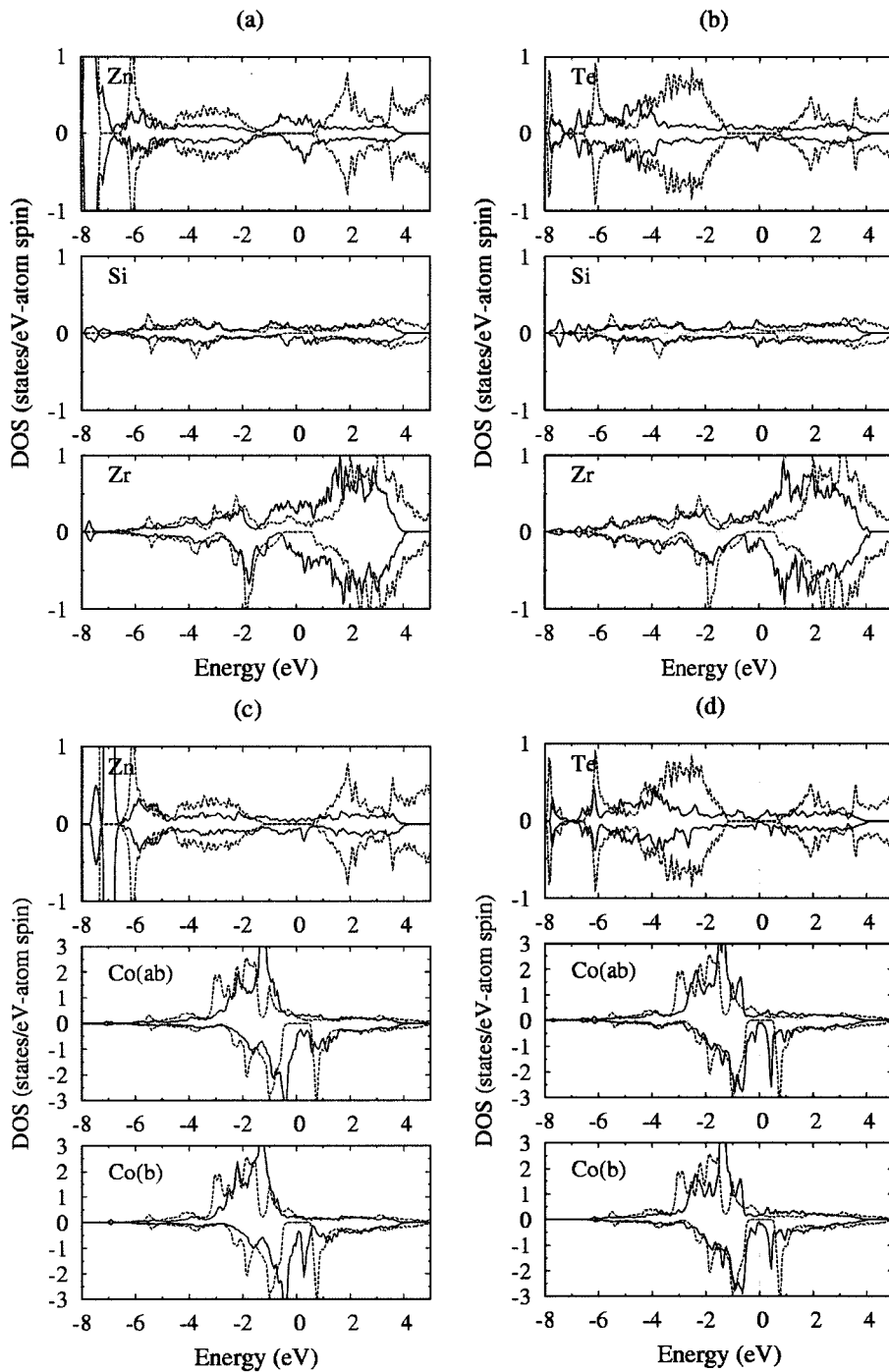
### III. 결과 및 논의

Co<sub>2</sub>ZrSi/ZnTe(001)계면의 반쪽금속성을 이해하기 위하여 Fig. 1에 (a) ZrSi/Zn, (b) ZrSi/Te, (c) Co/Zn와 (d) Co/Te

등 4가지 계면에서의 원자별 스핀분극된 상태밀도를 제시하였다. 실선은 계면에서의 상태밀도를, 점선은 ZnTe 반도체와 이것과 같은 살창상수를 가진 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에서 상응하는 원자들의 상태밀도를 나타낸다. 소수 스핀 상태의 값에는 -1을 곱하였고 페르미에너지는 영으로 잡았다. 괄호안의 b와 ab는 각각 “bridge” 위치와 “antibridge” 위치를 뜻한다. 그림으로부터 계면원자들의 상태밀도는 덩치상태의 경우에 비해 많이 변하여 있음을 알 수 있다. 즉 모든 계면에서 다수 및 소수 스핀 상태가 함께 페르미에너지에 있어 반쪽금속성이 깨지는 것이다.

Fig. 1(a)에 주어진 ZrSi/Zn 계면 원자들의 상태밀도로 부터 알 수 있듯이 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에 있던 소수 스핀의 띠간격에 계면상태들이 나타나 반쪽금속성이 깨진다. 계면층 Zr와 Si원자들에서 -1.0 eV 아래에 있는 상태들은 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 경우와 비슷한 모양을 보이고 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에서 페르미에너지 위쪽으로 0.8 eV에 위치한 비어있던 상태들이 계면에서는 낮은 에너지 영역으로 이동하였다. 이는 계면에서 Zr, Si원자들의 좌표수와 대칭성이 달라질 뿐만 아니라 Zr d와 Si sp-상태가 계면의 Zn sp-상태와 혼성을 하기 때문이다. 이러한 혼성은 페르미에너지 근처에서 계면원자들의 상태밀도 분포가 비슷한 것으로부터 알 수 있다. ZrSi/Te 계면도 ZrSi/Zn 계면의 경우와 대체로 비슷한 양상을 보이고 있다(Fig. 1(b)). 그러나 ZrSi/Zn의 계면에서 -2 eV에 있던 Zr원자의 소수 스핀 d-상태의 예리한 봉우리가 ZrSi/Te의 계면에서는 높이가 낮아지고 넓게 퍼졌다.

Co/Zn나 Co/Te의 경우는 ZrSi/Zn(Te)보다 더 복잡하다. 이는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에서 Co원자의 전자상태가 최인접원자 뿐만 아니라 차인접한 원자와의 상호작용과도 밀접한 연관이 있기 때문이다[18, 19]. Co/Zn(혹은 Te)계면에서 Co원자는 “bridge” 또는 “antibridge” 위치에 자리할 수 있는데 “bridge” 위치에 있을 경우 4개의 최인접 (두개의 Zr과 두개의 Si) 원자와 1개의 차인접한 Co원자를 잃는 반면 2개의 최인접한 Zn (혹은 Te) 원자를 얻는다. Co원자가 “antibridge” 위치에 자리했을 경우에는 4개의 최인접 (각각 두 개의 Zr과 Si) 원자와 1개의 차인접한 Co원자를 잃는 반면 2개의 최인접한 Zn (혹은 Te)원자와 하나의 차인접한 Te (혹은 Zn)원자를 얻는다. 따라서 “bridge” 위치에 있는 Co원자와 “antibridge” 위치에 있는 Co원자는 서로 다른 주변환경을 갖고 있다. Fig. 1(c) Co/Zn계면의 상태밀도를 살펴보면 페르미에너지보다 낮은 영역에서 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 채워진 Co 소수 스핀 d-상태가 계면에서 국소화되고 높은 에너지영역으로 이동하는 반면 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에서 페르미에너지 위 약 0.8 eV에 위치한 비어있던 소수 스핀 Co  $e_u$  봉우리는 계면에서 낮은 에너지 영역으로 이동하여 페르미에너지에 걸치면서 반쪽금속성이 깨진다. 이



**Fig. 1.** Density of states (DOS) of the interface atoms in the (a) ZrSi/Zn, (b) ZrSi/Te, (c) Co/Zn, and (d) Co/Te systems. The solid line denotes the interface DOS, whereas the dotted line denotes the DOS in their respective bulk phase.

때 소수 스핀 Co  $e_u$  봉우리는 “antibridge” 위치의 Co원자에서는 넓게 퍼져 있는데 이것은 “antibridge” 위치에 있는 Co d-상태가 차인접한 Te원자의 p-상태와도 혼성을 하기 때문이다. Co/Te의 경우 (Fig. 1(d)) 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에서 -3.0~-0.5 eV 사이에 놓인 Co d-상태들은 Co/Zn에서보다 덜 국소화되었고 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에서 채워진(비어있던) Co d-상태들이

계면에서 높은 (낮은) 에너지영역으로 이동하는 정도도 Co/Zn의 경우에 비하여 작았다. 또한 Co/Te계면에서 소수 스핀 Co d와 Te p-상태사이의 강한 혼성에 의해 페르미에너지 바로 밑에 작은 봉우리의 계면상태가 나타나 반쪽금속성이 파괴되었으나 페르미에너지에서 소수 스핀 상태밀도의 값은 영에 가까웠다.

**Table I.** *l*-decomposed majority and minority spin electrons inside the MT spheres, and magnetic moments (in unit of  $\mu_B$ ) for the interface and subinterface atoms of the ZrSi/Zn, ZrSi/Te, Co/Zn and Co/Te systems as well as the bulks of Co<sub>2</sub>ZrSi and ZnTe.

| (a) ZrSi/Zn              |                |                |                |          |
|--------------------------|----------------|----------------|----------------|----------|
|                          | <i>s</i> (↑/↓) | <i>p</i> (↑/↓) | <i>d</i> (↑/↓) | <i>M</i> |
| Zr(I)                    | 0.10/0.10      | 0.11/0.10      | 0.76/0.73      | 0.03     |
| Si(I)                    | 0.38/0.37      | 0.41/0.39      | 0.03/0.04      | 0.02     |
| Co <sup>b</sup> (I-1)    | 0.18/0.16      | 0.15/0.15      | 4.15/2.94      | 1.23     |
| Co <sup>ab</sup> (I-1)   | 0.18/0.16      | 0.15/0.15      | 4.19/2.90      | 1.30     |
| Zn(I)                    | 0.35/0.32      | 0.32/0.28      | 4.88/4.87      | 0.08     |
| (b) ZrSi/Te              |                |                |                |          |
|                          | <i>s</i> (↑/↓) | <i>p</i> (↑/↓) | <i>d</i> (↑/↓) | <i>M</i> |
| Zr(I)                    | 0.09/0.10      | 0.13/0.13      | 0.76/0.82      | -0.08    |
| Si(I)                    | 0.39/0.38      | 0.41/0.40      | 0.04/0.05      | 0.02     |
| Co <sup>b</sup> (I-1)    | 0.18/0.16      | 0.15/0.15      | 4.14/2.96      | 1.20     |
| Co <sup>ab</sup> (I-1)   | 0.19/0.17      | 0.15/0.15      | 4.12/3.00      | 1.13     |
| Te(I)                    | 0.69/0.69      | 1.05/1.05      | 5.00/5.00      | 0.00     |
| (c) Co/Zn                |                |                |                |          |
|                          | <i>s</i> (↑/↓) | <i>p</i> (↑/↓) | <i>d</i> (↑/↓) | <i>M</i> |
| Co <sup>b</sup> (I)      | 0.17/0.15      | 0.10/0.11      | 4.11/2.96      | 1.16     |
| Co <sup>ab</sup> (I)     | 0.15/0.15      | 0.10/0.12      | 4.02/3.08      | 0.93     |
| Zn(I)                    | 0.30/0.31      | 0.24/0.24      | 4.89/4.89      | -0.02    |
| (d) Co/Te                |                |                |                |          |
|                          | <i>s</i> (↑/↓) | <i>p</i> (↑/↓) | <i>d</i> (↑/↓) | <i>M</i> |
| Co <sup>b</sup> (I)      | 0.15/0.14      | 0.12/0.13      | 3.92/3.22      | 0.68     |
| Co <sup>ab</sup> (I)     | 0.15/0.14      | 0.12/0.13      | 3.97/3.18      | 0.78     |
| Te(I)                    | 0.67/0.66      | 0.98/0.98      | 4.99/4.99      | 0.00     |
| (e) Co <sub>2</sub> ZrSi |                |                |                |          |
|                          | <i>s</i> (↑/↓) | <i>p</i> (↑/↓) | <i>d</i> (↑/↓) | <i>M</i> |
| Co                       | 0.17/0.15      | 0.15/0.16      | 4.12/2.98      | 1.15     |
| Zr                       | 0.10/0.11      | 0.13/0.14      | 0.69/0.80      | -0.14    |
| Si                       | 0.35/0.34      | 0.42/0.40      | 0.04/0.05      | 0.02     |
| (f) ZnTe                 |                |                |                |          |
|                          | <i>s</i> (↑/↓) | <i>p</i> (↑/↓) | <i>d</i> (↑/↓) | <i>M</i> |
| Zn                       | 0.59           | 0.48           | 9.79           | -        |
| Te                       | 1.33           | 2.04           | 9.96           | -        |

계면에서의 자성을 정량적으로 살펴보기 위해 Table I에 ZrSi/Zn, ZrSi/Te, Co/Zn와 Co/Te 계에서 계면과 계면 바로 밑층 원자들의 머핀-틴 구내에서 케도 각운동량과 스핀에 따라 나는 전자수와 자기모멘트 값을 정리하였다. 비교를 위하여 덩치상태의 Co<sub>2</sub>ZrSi와 ZnTe의 값도 함께 제시하였다. ZrSi/Zn의 계면에서 Zr원자의 총 *d*-전자수는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 값과 비슷한 반면 ZrSi/Te에서는 0.1 정도 증가하였다. 위의 두 계면에서 반도체 쪽 계면원자의 총 *sp*-전자수는 ZnTe의 값에 비해 Zn원자에서는 0.2, Te원자에서는 0.1 정도 증가하였다. ZrSi/Zn(Te)의 계면 바로 밑층에 있는 Co원자들의 총

*d*-전자수는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 값과 비슷하였으나 다수 (소수) 스핀 *d*-전자수는 증가 (감소)하여 자기모멘트는 1.13~1.30  $\mu_B$  사이의 값을 가지는데 이는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에서의 값(1.15  $\mu_B$ )과 비슷하거나 약간 증가한 것이다. Co/Zn의 경우 계면 Co 원자들의 총 *d*-전자수는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 값과 비슷하였으나 Co/Te계면에서는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 값보다 0.05 정도 증가하였다. Co/Zn에서 “bridge” 위치에 있는 Co원자의 자기모멘트는 1.16  $\mu_B$ 로 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi 경우의 값과 비슷하였고 “antibrige” 위치에 있는 Co원자에서는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi 경우의 값보다 0.22  $\mu_B$  정도 감소되었다. Co 원자들의 자기모멘트 감소는 Co/Te 계면에서 뚜렷이 나타나고 있다. “bridge”와 “antibrige” 위치에서 Co원자의 자기모멘트는 각각 0.68과 0.78  $\mu_B$ 로서 이는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에서의 값(1.15  $\mu_B$ )에 비하여 크게 감소한 값이다. Co<sub>2</sub>CrAl/InP(001)[11], Co<sub>2</sub>MnGe/GaAs(001)[12] 등 접합에서도 Co원자로 끝나는 면과 반도체가 접합하는 계면에서 Co원자의 자기모멘트가 감소하는 것을 볼 수 있다. Co<sub>2</sub>CrAl에서 Co원자의 자기모멘트 값은 0.75  $\mu_B$ 인데 Co/In계면에서 “bridge” 위치에 있는 Co원자의 자기모멘트는 영에 가깝게 감소하였고 “antibrige” 위치에 있는 Co원자의 경우에는 약 0.20  $\mu_B$ 이 줄어든 0.55  $\mu_B$  정도의 값을 가졌다. As가 capping된 Fe/GaAs(001)계면에서도 Fe원자의 자기모멘트가 감소하는 것을 발견하였는데 이는 As와 Fe 원자사이의 강한 공유결합 때문이다[20, 21].

#### IV. 결 론

본 연구에서는 Co<sub>2</sub>ZrSi/ZnTe(001)계면의 전자구조, 반쪽금속속성 및 자성을 FLAPW 방법을 이용하여 연구하였다. Co<sub>2</sub>ZrSi에서 (001)면은 ZrSi와 Co로 끝나는 두 가지 경우가 있고, ZnTe는 Zn와 Te로 끝나는 (001)면을 갖고 있기 때문에 총 4가지 계면, 즉 ZrSi/Zn, ZrSi/Te, Co/Zn, Co/Te 계면을 고려하였다. 계산으로부터 얻은 상태밀도로부터 4가지 계면에서 모두 반쪽금속속성이 깨어짐을 알았다. ZrSi/Zn(Te)의 경우 계면에서 Zr *d*-과 Si *sp*-상태가 반도체 쪽 Zn (Te) *p*-상태와 혼성을 하여 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi가 가지고 있는 소수 스핀의 띠간격에 계면상태들이 나타나 반쪽금속속성이 깨진다.

Co/Zn(Te)의 경우 페르미에너지보다 낮은 영역에서 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 채워진 Co 소수 스핀 *d*-상태가 계면에서 국소화되고 높은 에너지영역으로 이동하는 반면 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi에서 페르미에너지 위쪽으로 약 0.8 eV에 위치한 소수 스핀 Co *e<sub>u</sub>* 봉우리가 계면에서 낮은 에너지 영역으로 이동하여 페르미에너지에 다수 및 소수스핀이 함께 있어 반쪽금속속성이 깨어졌으나 Co/Te의 경우 페르미에너지에서 소수 스핀 상태밀도의 값은 영에 가까웠다. Co/Te계면에서 Co원자의 자기모멘트의

값은 “bridge”와 “antibridge” 위치에서 각각 0.68과 0.78  $\mu_B$ 로서 이는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 값(1.15  $\mu_B$ )에 비하여 크게 감소하였는데 이는 Co d와 Te p-상태사이의 강한 혼성때문이다. Co/Zn계면에서 “bridge”와 “antibridge” 위치에 있는 Co원자의 자기모멘트는 각각 1.16과 0.93  $\mu_B$ 로 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 값과 비슷하거나 약간 줄어들었다. 반면 ZrSi/Te(Zn)의 경우 계면 바로 밑층의 Co원자들은 1.13~1.30  $\mu_B$  사이의 자기모멘트를 가지며 이는 덩치 Co<sub>2</sub>ZrSi의 값과 비슷하거나 약간 증가한 값이다.

### 참고문헌

[1] G. Prinz and K. Hathaway, *Physics Today*, **48**, 24 (1995).  
 [2] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, *Science*, **294**, 1488 (2001).  
 [3] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 2024 (1983).  
 [4] S. P. Lewis, P. B. Allen, and T. Sasaki, *Phys. Rev. B*, **55**, 10253 (1997).  
 [5] T. Shishidou, A. J. Freeman, and R. Asahi, *Phys. Rev. B*, **64**, 180401(R) (2001).  
 [6] J.-H. Park, E. Vescovo, H.-J. Kim, C. Kwon, R. Ramesh, and T. Venkatesan, *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 1953 (1998).

[7] X. Q. Chen, R. Podloucky, and P. Rogl, *J. Appl. Phys.*, **100**, 113901 (2006).  
 [8] S. C. Lee, T. D. Lee, P. Blaha, and K. Schwarz, *J. Appl. Phys.*, **97**, 10C307 (2005).  
 [9] I. Galanakis, K. Ozdogan, E. Sasioglu, and B. Aktas, *Rev. B*, **75**, 092407 (2007).  
 [10] Y. J. Jin and J. I. Lee, *J. Korean Phys. Soc.*, **51**, 155 (2007).  
 [11] S. Picozzi, A. Continenza, and A. J. Freeman, *J. Phys. Chem. Solids*, **64**, 1697 (2003).  
 [12] I. Galanakis, *J. Phys.: Condens. Matter*, **16**, 8007 (2004).  
 [13] R. Amutha, A. Subbarayan, and R. Sathyamoorthy, *Cryst. Res. Technol.*, **41**, 1174 (2006).  
 [14] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **140**, A1133 (1965).  
 [15] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B*, **24**, 864 (1981), and references therein; M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, *ibid.*, **26**, 4571 (1982).  
 [16] J. P. Perdew and Y. Wang, *Phys. Rev. B*, **45**, 13244 (1992).  
 [17] D. D. Koelling and B. N. Harmon, *J. Phys. C*, **10**, 3107 (1977).  
 [18] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, *Phys. Rev. B*, **66**, 174429 (2002).  
 [19] I. Galanakis, Ph. Mavropoulos, and P. H. Dederichs, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **39**, 765 (2006).  
 [20] S. C. Erwin, S. H. Lee, and M. Scheffler, *Phys. Rev. B*, **65**, 205422 (2002).  
 [21] S. S. Kim, S. C. Hong, and J. I. Lee, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **189**, 643 (2002).

## Half-metallicity and Magnetism of Co<sub>2</sub>ZrSi/ZnTe(001) Interface: A First-principles Study

Y. J. Jin and J. I. Lee\*

*Department of Physics, Inha University, Incheon 402-751, Korea*

(Received 23 July 2007, in final form 14 August 2007)

We have investigated the half-metallicity and magnetism for the Heusler ferromagnet Co<sub>2</sub>ZrSi interfaced with semiconductor ZnTe along the (001) plane by using the full-potential linearized augmented plane wave (FLAPW) method. We considered four types of possible interfaces: ZrSi/Zn, ZrSi/Te, Co/Zn, and Co/Te, respectively. From the calculated density of states, it was found that the half-metallicity was lost at all the interfaces, however for the Co/Te system the value of minority spin density of states was close to zero at the Fermi level. These facts are due to the interface states, appeared in the minority spin gap in bulk Co<sub>2</sub>ZrSi, caused by the changes of the coordination and symmetry and the hybridizations between the interface atoms. At the Co/Te interface, the magnetic moments of Co atoms are 0.68 and 0.78  $\mu_B$  for the “bridge” and “antibridge” sites, respectively, which are much reduced with respect to that (1.15  $\mu_B$ ) of the bulk Co<sub>2</sub>ZrSi. In the case of Co/Zn, Co atoms at the “bridge” and “antibridge” sites have magnetic moments of 1.16 and 0.93  $\mu_B$ , respectively, which are almost same or slightly decreased compared to that of the bulk Co<sub>2</sub>ZrSi. On the other hand, for the ZrSi/Zn and ZrSi/Te systems, the magnetic moments of Co atoms at the sub-interface layers are in the range of 1.13~1.30  $\mu_B$ , which are almost same or slightly increased than that of the bulk Co<sub>2</sub>ZrSi.

**Keywords** : half metal/semiconductor, Co<sub>2</sub>ZrSi, half-metallic, magnetism