

호이슬러 화합물의 전자구조 : NiMnSb 와 PtMnSb

윤석주*, 민병일
포항공과대학교 물리학과

Electronic structures of the Heusler compounds: NiMnSb and PtMnSb

S. J. Youn*, B. I. Min
Department of Physics, POSTECH.

1 서론

상온에서 가장 큰 광자기 커 효과(MOKE)를 보이는 물질인 호이슬러 화합물(NiMnSb와 PtMnSb)은 이론적인 면에서 half-metal의 가능성 때문에 관심의 대상이 되었다[?]. half-metal이란 다수 스핀 전자의 에너지 띠구조는 금속성인데 반해 소수 스핀 전자의 에너지 띠 구조는 절연체의 성질을 가지는 것을 말한다. 증가된 MOKE를 설명하기 위해서는 스핀-궤도 상호작용을 고려해 주어야만 한다. 본 연구에서는 호이슬러 화합물의 평형상태의 결합특성을 구하고 스핀-궤도 상호작용을 고려하였을 때 전자구조에 미치는 영향을 조사하였다.

2 계산방법 및 결과

자체충족 국재밀도 근사 LMTO(Linear Muffin-Tin Orbital) 에너지 띠 계산 방법을 이용하여 호이슬러 합금들의 상자성 및 강자성 상태의 전자구조에 대하여 연구하였다.

NiMnSb에 대한 전자구조계산 결과는 강자성 상태가 상자성 상태보다 안정하며 스핀-궤도 상호작용을 고려한 강자성 상태계산에서 half-metal이 되는 것을 볼 수 있었다[그림(1)]. NiMnSb의 페르미면 근처에서 스핀-궤도 상호작용에 의한 에너지 분리는 0.02eV로서 작은 양을 가진다.

PtMnSb에 대한 전자구조 계산 결과 강자성상태가 안정한 결과를 얻었고 실험격자상수에서는 일반적인 금속의 전자구조를 가진다[그림(2)]. PtMnSb의 스핀-궤도 상호작용에 의한 에너지 분리는 0.14eV로서 NiMnSb보다 약 7배정도 큰 값을 가진다. 스핀-궤도 상호작용효과에 의해서 페르미 준위 근처 $\vec{k} = \Gamma$ 에서 3개의 축퇴에너지가 분리되어 나타나는데, 이렇게 분리된 3개의 에너지 준위를 이용하여 PtMnSb의 큰 MOKE를 설명할 수 있다. 그림(1)과 그림(2)는 각각 NiMnSb와 PtMnSb의 강자성상태에서 스핀-궤도 상호작용효과를 고려하지 않았을 때의 상태밀도(DOS)를 보여준다.

참고 문헌

- [1] R. A. de Groot and F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett. **50**, 2024 (1983).

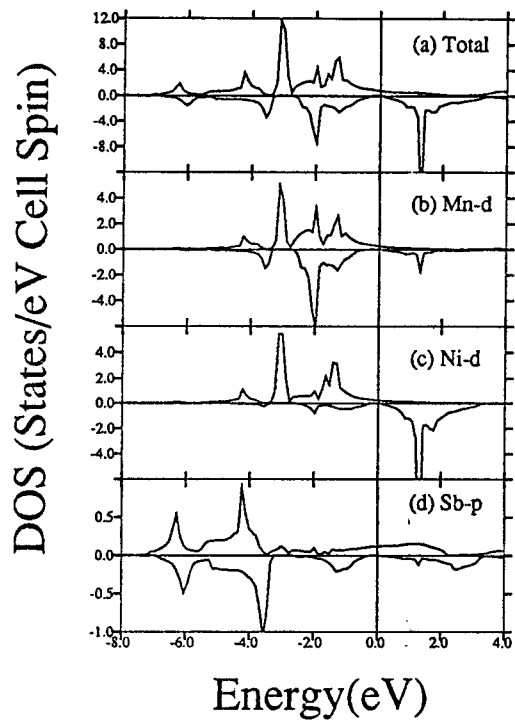


그림1. NiMnSb의 총 상태밀도 및 부분 상태밀도

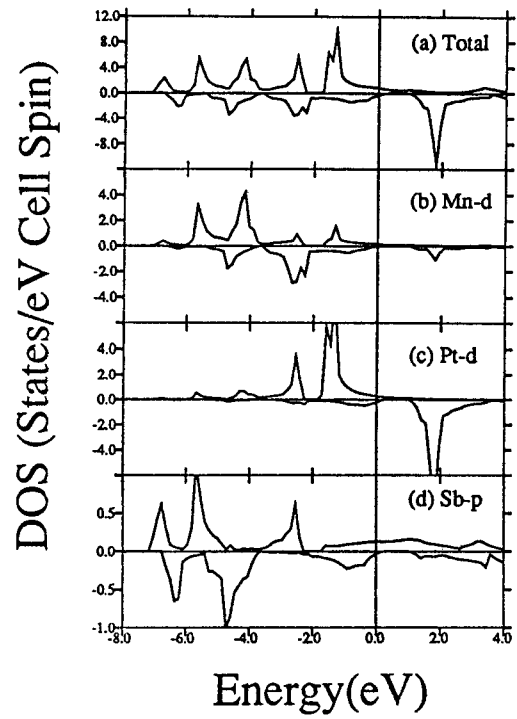


그림2. PtMnSb의 총 상태밀도 및 부분 상태밀도