

반 호이슬러 구조 화합물 $CCsBa(001)$ 표면의 전자구조와 반쪽금속성

이재일^{1*}, Beata Bialek¹, 장영록²

¹인하대학교 물리학과, 인천 남구 인하로 100, 인천 402-751

²인천대학교 물리학과, 인천 연수구 아카데미로 119, 인천 406-772

I. 연구동기

최근 들어, 전자구조 계산을 통해 전이금속을 포함하지 않으면서 반쪽금속성을 나타내는 화합물, 즉 sp-반쪽금속이 소개되고 있다. 이러한 화합물 중 첨아연광 (zinc-blende; ZB) 구조나 암염 (rocksalt; RS) 구조를 가지는 물질들이 2007년 이후로 다양하게 제시되어 왔다 [1, 2]. 근년 들어, 최초로 발견된 반쪽금속인 NiMnSb와 같이 반 호이슬러 (half-Heusler) 구조를 가지는 sp-반쪽금속이 제시되고 있다. 이 중 Lakdja 등 [3]은 밀도범함수 전자구조 계산을 통해 반 호이슬러 구조의 $XCsBa$ ($X=C, Si, Ge$) 화합물이 반쪽금속성을 가짐을 보였다. 이들의 계산 결과를 보면, 이들 화합물의 단위세포 당 자기모멘트는 $1.00 \mu_B$ 으로 반쪽금속의 특징인 정수의 자기모멘트를 가졌으며, 주로 자성에 기여하는 것은 X 원자의 p-전자들이었다. 본 연구에서는 이 중 $CCsBa$ 화합물에서 (001) 표면에 대한 전자구조 계산을 통해 표면에서의 반쪽금속성 유지 여부를 고찰하고자 한다.

II. 연구방법 및 모형

XYZ 의 세가지 원소로 이루어진 반 호이슬러 구조의 (001) 표면은 두 가지 절단면으로 구분되는데, 하나는 X 원소로만 이루어진 표면이고 다른 하나는 Y 와 Z 의 두 가지 원소로 이루어진 표면이다. 즉, 고찰 대상인 $CCsBa$ 의 경우, C 원소로만 이루어진 (001) 표면과 Cs 와 Ba 원소로 이루어진 (001) 표면이 있다. 이들 두 가지 표면의 전자구조 계산을 위해 각기 13층으로 이루어진 얇은 판 모형을 채택하였다. 이들 표면계의 대한 전자구조 계산을 위해 FLAPW(Full-potential Liniarized Augmented Plane Wave) 방법[4]을 이용하였다.

III. 결과 및 논의

먼저 각기 13층으로 이루어진 두 표면 계, 즉 C 원소만으로 이루어진 표면계와 Cs 와 Ba 원소로 이루어진 표면계에 대해 계산된 총 자기모멘트 값을 보면, 전자의 경우는 $10.00 \mu_B$ 이고 후자의 경우는 $6.41 \mu_B$ 로서, 전자의 경우 즉 C 원소만으로 이루어진 (001) 표면계가 반쪽금속성을 유지함을 알 수 있다. C 원소만으로 이루어진 (001) 표면계에서 가운데 층의 C 원소, 즉 $C(C)$ 원자의 자기모멘트는 $0.82 \mu_B$ 로 덩치 상태에 대한 계산 결과와 일치하였으며, 표면 $C(S)$ 원자의 자기모멘트는 $0.85 \mu_B$ 으로 덩치 값에 비해 다소 증가하였다. 이러한 결과는 Fig. 1(a)에 주어진 층별 C 원자의 상태 밀도의 모양에도 부합한다고 할 수 있는데, 표면 $C(S)$ 원자의 상태밀도를 보면 가운데 층에 비해 스핀분리가 증가함을 알 수 있다. Cs 와 Ba 로 이루어진 표면계에서도 가운데 층에 가까운 $C(S-5)$ 원자의 자기모멘트는 $0.83 \mu_B$ 으로 덩치 상태의 경우와 비슷하나 표면 바로 밑층의 $C(S-1)$ 원자의 자기모멘트는 $0.39 \mu_B$ 으로 상당히 감소하였으며 이러한 결과는 Fig. 1(b)에 보여준 상태밀도 그림과도 부합한다.

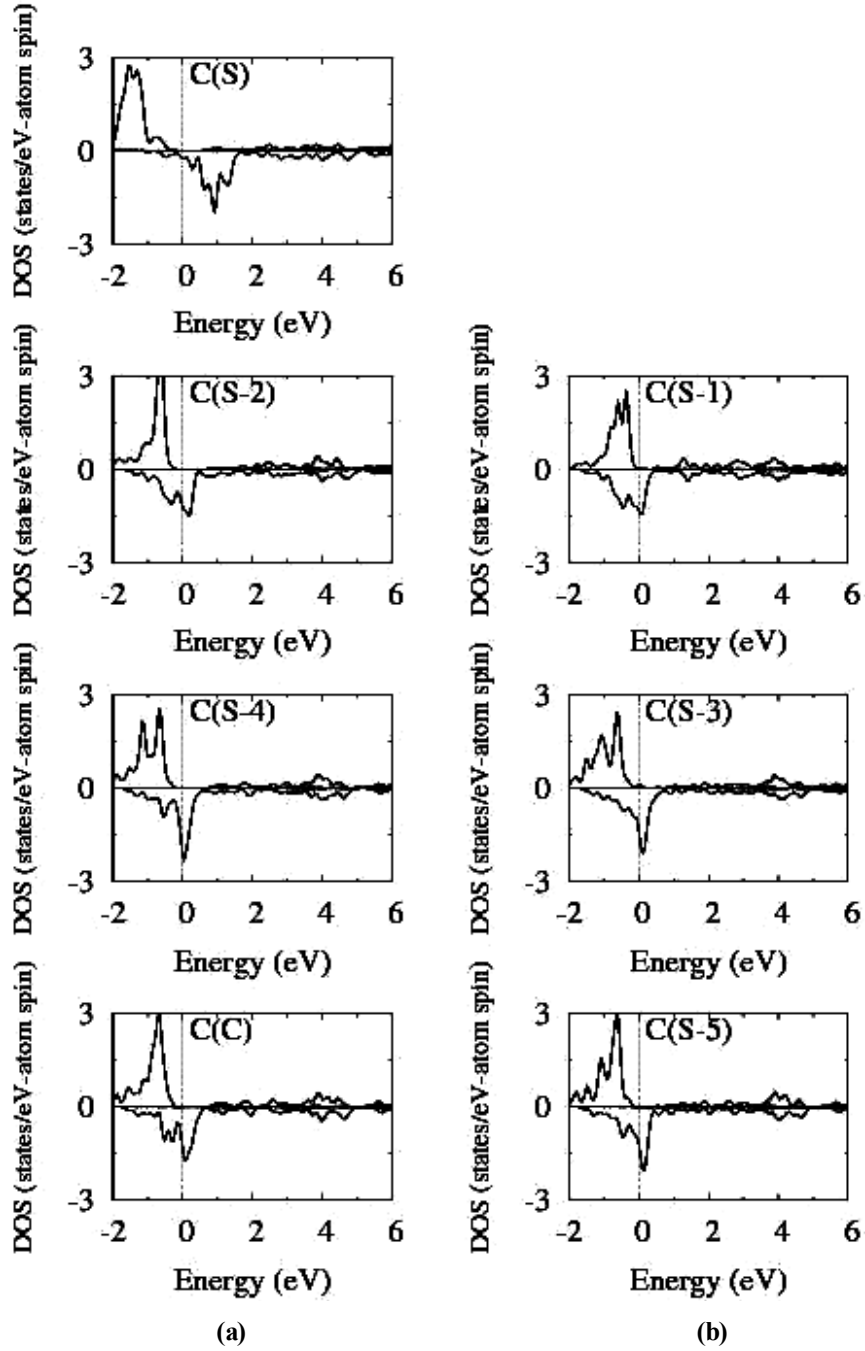


Fig 1. Atom-projected density of states of C atoms in C-terminated (001) surface (a) and CsBa-terminated (001) surface (b) of half-Heusler CCsBa compound.

- [1] K. Kusakabe, M. Geshi, H. Tsukamoto, and N. Suzuki, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, s5639 (2007).
- [2] E. Yan, *Physica B* **407**, 879 (2012).
- [3] A. Lakdja, H. Rozale, A. Chahed, and O. Benhelal, *J. Alloy. Compd.* **564**, 8 (2013).
- [4] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **24**, 864 (1981).