

Ferromagnetism in Mn-doped Chalcopyrite AlGaAs_2 and $(\text{Al,Ga})\text{As}$ Semiconductors

Byung-Sub Kang and Kie-Moon Song*

Nanotechnology Research Center, Nanoscience & Mechanical Engineering, Konkuk University, Chungju 27478, Korea

Haeng-Ki Lee

Dept. of Radiotechnology, Suseong College, Daegu 42078, Korea

(Received 26 August 2020, Received in final form 23 October 2020, Accepted 26 October 2020)

We investigated the electronic and magnetic properties for a diluted magnetic semiconductor of 3d-metal Mn-doped chalcopyrite (CH) AlAs, GaAs, and AlGaAs_2 semiconductors by using the first-principle calculations. The CH- AlGaAs_2 :Mn without the defects exhibits the ferromagnetic and half-metallic states. For the system of CH- $\text{Al}(\text{Ga,Mn})\text{As}_2$, the ferromagnetism with high magnetic moment of Mn is induced from the exchange couplings between Mn-3d and As-4p bands. The partially unoccupied majority-spin Mn-3d and As-4p states are induced. Thus the Mn moments couple to holes by an on-site exchange interaction due to the overlap of the hole wave-function with the Mn-3d (or As-4p) electrons. The electronic and magnetic properties for Mn-doped CH-AlAs and CH-GaAs systems were compared with that of CH- $\text{Al}(\text{Ga,Mn})\text{As}_2$. It is noticeable that high magnetic moment induces from the characteristics by holes-mediated double-exchange coupling.

Keywords : Chalcopyrite AlGaAs_2 , Half-metallic ferromagnetism, First-principles, Curie temperature, Minority band-gap.

Chalcopyrite AlGaAs_2 , $(\text{Al,Ga})\text{As}$ 반도체내 Mn의 강자성

강병섭 · 송기문*

건국대학교 나노전자기계공학과 나노기술연구소, 충북 충주시 충원대로 268, 27478

이행기

수성대학교 방사선과, 대구시 수성구 달구벌대로 528, 42078

(2020년 8월 26일 받음, 2020년 10월 23일 최종수정본 받음, 2020년 10월 26일 게재확정)

낮은 농도의 3d-금속 Mn이 도핑된 chalcopyrite(CH)-AlAs, CH-GaAs, 그리고 CH- AlGaAs_2 반도체에 대하여 제일 원리 계산법을 사용하여 전자적 구조 및 자기적 성질을 연구하였다. 원자 결합이 없는 CH- AlGaAs_2 :Mn은 강자성 성질을 보이고 반금속의 특성을 나타낸다. Mn 불순물이 Ga 원자와 치환으로 도핑된 CH- $\text{Al}(\text{Ga,Mn})\text{As}_2$ 계 Mn은 높은 자기모멘트를 가진다. 이것은 Mn-3d 밴드와 As-4p 밴드와의 상호 결합 때문으로 유도된다. 부분적으로 채워지지 않은 As-4p 상태가 형성되면서 홀의 파동이 3d 전자와 중첩되어 홀이 Mn 자기 모멘트와 결합된다. 따라서 홀 캐리어가 개입하는 이중-상호교환 결합(double-exchange coupling)의 특성으로 높은 자기모멘트의 강자성 특성을 가지게 된다. CH-AlAs와 CH-GaAs 계에 대한 전자적 구조 및 자기적 성질에 대한 결과를 CH- $\text{Al}(\text{Ga,Mn})\text{As}_2$ 와 비교하였다.

주제어 : Chalcopyrite AlGaAs_2 , 반금속 강자성, 제일원리, 큐리온도, 스핀다운밴드갭

I. 서 론

반도체에 저밀도로 자성 물질이 주입된 diluted magnetic semiconductor(DMS) 재료는 비 자성 반도체의 s와 p 궤도 전자와 도핑 되는 자성 물질의 스핀을 이용하는 스핀트로닉스 소재연구에 많은 노력을 기울이고 있다[1-6]. 반도체에 스핀 주입의 자성연구는 II-VI족[3,7], III-V족[3,8], 그리고 II-IV-V2[9] 합금 계에서 활발히 수행되고 있다. 그러나 현재까지 비 자성 반도체 재료에 자성이온의 주입이 매우 제한적이라 소재제작의 가능성이 매우 어려운 실정이다. 자성 물질이 저 농도로 주입된 DMS 소재 연구의 역사는 오래되었지만 실제적인 응용에는 문제점이 여전히 존재하고 있다. 실은 이상이거나 실은 정도의 DMS를 제작하기 위한 반도체 내부에 스핀주입이 매우 어려운 실정이지만 강자성(ferromagnetic, FM) 반도체 제작을 위한 도전이 주요하게 대두되고 있다. DMS 제작의 어려움은 반도체내 자성원자의 편극이 스핀반전(spin-flip) 산란으로 빠르게 자성이 사라지는 현상으로 그 요인이 있고, 반도체 에너지 갭이 직접(direct)이나 간접(indirect)인가에 따라 스핀 편극의 특성이 크게 달라질 수도 있는 그 요인이 있다. 그리고 무엇보다도 어려운 요인은 효과적인 스핀 주입전극을 사용 가능하도록 하는 반도체와 자성 금속사이에 양질의 계면(high-quality interfaces) 확보에 있다.

320 K와 312 K 온도에서 chalcopyrite(CH) $ZnSnAs_2$ [9]와 $ZnGeP_2$ [10] 합금 계의 실험을 통해 강자성 질서가 있음을 보고하고 있다. 또한, CH-AlGaP 내에 Mn 주입이 실온(300K)에서 강자성의 질서가 있음을 실험결과를 보고하고 있다[11,12]. 본 연구에 앞서 선행된 이론적인 연구에서 CH-AlGaP₂:Mn 계의 Mn은 FM 임을 보여 주고 있다[13,14]. 그리고 (Ga,Mn)As 합금 계에 대한 실험연구에서 Mn은 실온에서 FM 특성을 보여준다[8]. Mn은 Cr과 같은 다른 금속보다 고온 FM의 질서가 확연함을 알 수 있고, CH-AlGaP:Mn 계의 Curie 온도는 상온이상이다. Curie 온도는 재료의 종류(type)와 캐리어 밀도에 강한 의존성을 보인다. 즉, p-type 재료가 n-type 재료보다 Curie 온도가 더 높다. 그리고 주입되는 Mn 농도가 증가함에 따라 Curie 온도가 증가한다.

CH 구조는 ZB 구조와 흡사하며 CH 물질은 비선형 광학 소재에 많이 등장하는 반도체의 한 종류이다. 본 논문은 $AlGaAs_2:Mn$ 4원 합금계의 제일 원리 계산방법을 이용한 자성에 대한 연구이다. 먼저, Mn이 도핑 된 CH-AlAs와 CH-GaAs 계에 대하여 Mn 농도에 따라 FM 특성을 CH-AlGaAs₂:Mn 합금 계와 비교하였다. Mn 금속은 높은 자기모멘트(~3.9 μ_B /Mn)의 FM 질서를 보이고 있다. FM 특성의 원인을 여러 합금계의 비교를 통하여 고찰하였다. CH-AlGaAs₂

직접밴드(direct band) 갭을 가지는 반도체이고 계산된 밴드 갭은 0.358 eV이다. CH-AlGaAs₂:Mn 합금 계는 FM 상태가 에너지 적으로 가장 안정한 상태이고 반금속(half-metal) 특성을 보인다.

II. 계산 방법

제일원리 모사법의 수치해석은 밀도 범함수 체계 하에서 full-potential linear muffin-tin orbital(FP-LMTO) 방법을 사용하였다[15,16]. 원자 퍼텐셜은 구 대칭 원자간 자리영역에서는 비 구형 형태로 전체 전하 밀도를 Fourier 전개 범으로 수행 하였다. 가전자는 스핀-궤도 결합을 고려하지 않았고 스칼라(scalar, 수치적인) 상대론적 효과의 고려로 인하여 자체 층축의 거대단위세포(supercell) 퍼텐셜을 생성해 내고, 전자의 상호교환 퍼텐셜은 Perdew-Burke-Ernzerhof이 제안한 generalized gradient approximation(GGA) 방법을 사용하였다[17]. 전하밀도와 LMTO 기저 함수(파동함수)와 소위 머핀틴(Muffin-tin) 구 내부에 l(궤도 양자수)가 최대 6까지는 구 조화함수로 전개하였고, 가전자의 LMTO 기저는 Mn 원자는 4s와 3d, 그리고 Ga과 As 원자는 4s, 4p, 그리고 3d로 하였다. Mn과 Al 원자의 기저함수의 절댓값 에너지 값은 각각

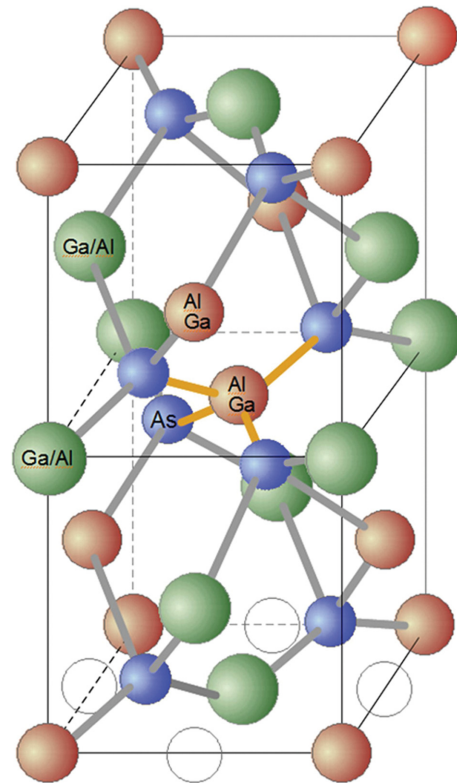


Fig. 1. (Color online) Crystal structure of chalcopyrite (CH) $AlGaAs_2$. Open-circles represent interstitial sites.

159.12 eV, 232.56 eV, 그리고 340.0 eV이다. Mn(or Al, Ga) 그리고 As의 머핀 틸 반지름은 각각 2.4와 2.2 a.u.로 하였다. 평면파동의 잘림(cut-off) 에너지는 596.63 eV이다.

총 에너지 수렴 성을 확인하기 위해 평면파동의 잘림 에너지와 k 벡터 수를 주의 깊게 점점 하였다. Brillouin 영역의 적분 계산에서 4 × 4 × 4 격자망에 해당하는 64k 벡터 수로 계산을 수행하였다. 이 k 벡터 수는 총에너지와 자기모멘트 값이 각각 10 meV/cell와 ±0.01 μ_B/atom의 수렴성을 보였다. 10 meV/cell은 총에너지 입력 및 출력의 차이가 10⁻⁵ eV/cell에 해당되는 자체 충족 수렴 기준의 결과이다. 계산에 사용된 CH 단위 셀은 Fig. 1에서와 같이 원자들 사이의 빈자리를 포함하여 모두 64개 원자구조이고, Zinc-blende(ZB) 구조의 단위세포 2개를 함께 표현한 것과 비슷하다. CH의 최적화 구조를 얻기 위해 불순물이 없는 ZB-GaAs와 ZB-AlAs 격자상수 각각에 대하여 실험값[18] 5.63 Å와 5.66 Å을 a(격자상수)로 최초 계산의 시작으로 하였고, c/a는 2.0로 하였다.

III. 결과 및 토의

1. CH-AlGaAs₂ 안정성

CH-AlGaAs₂은 직접(direct) 갭을 가지는 반도체이다. Ga 원자 조성비가 영일 때 즉 CH-AlAs의 밴드는 직접 갭을 가지며 그 크기는 1.066 eV이다(Table I). CH-AlGaAs₂의 밴드 갭 대한 적절한 실험 결과가 없으므로 비교는 할 수 없으나 밴드 갭에 대한 수치적 계산에 있어서 일반적인 경향을 언급 하려면 제일 원리적인 수치 해석적 방법의 GGA(혹은 LDA; local density approximation)에 의한 결과와 실험결과와 비교 하였을 때 계산결과의 값이 작다. 이것은 수치 해석적 방법이 온도의 영향을 고려되지 않은 이유이다. 그리고 계산되는 계에 따라 차이는 다소 있을 수 있다. GGA와 LDA 두 경우 계산결과에서도 차이가 있다. GGA 결과 1.066 eV는 LDA 결과 1.121 eV보다 약5% 더 낮은 결과를 보인다. 그리고 평형상태에 대한 계산을 통해 CH-AlGaAs₂의 격자상수는 a=5.8601 Å임을 찾았다. 셀의 세로방향 격자상수 c=11.5676 Å이다. 그리고 c/a=1.9739 Å이다. CH-AlGaP₂에 대해 선행된 연구의 결과와 비교하면 약간 큰 격자상수를 보인다[14].

Table I. Energy gap (E_g, eV) and optimal lattice parameter (a, Å) for CH-Al_{2-x}Ga_xAs₂ (with x = 0~1).

Systems	E _g (eV)	(a, Å)
CH-Al ₂ As ₂	1.066	5.8595
Al _{1.75} Ga _{0.25} As ₂	0.856	5.8596
Al _{1.50} Ga _{0.50} As ₂	0.668	5.8598
Al _{1.25} Ga _{0.75} As ₂	0.520	5.8599
AlGaAs ₂	0.358	5.8601

CH-AlGaP₂의 격자상수는 a = 5.6848 Å이고 c = 11.2221 Å이다. 계산에 사용된 계는 원자의 각 위치에 대한 원자의 이완을 고려하였다. 원자들의 기하학적 위치 및 구조는 원자들 사이 작용하는 힘이 1.0 mRy/Bohr 정도 이내에서 평형 위치를 계산하여 얻었다. 그리고 AlGaAs₂ 체적계에 도핑 되는 Mn 원자 주위 이웃하는 모(host) 원자의 찌그러짐 영향은 고려하지 않았다. AlGaAs₂ 합금에 모원자의 공유결합 반지름이나 원자 반지름이 도핑 되는 Mn 원자 그것보다 크므로 Mn 원자에 의한 이웃원자의 찌그러짐의 발생은 충분히 무시할 수 있을 것이다.

Table II는 6.25% Mn 도핑 된 Al(Ga,Mn)As₂ 계에 대한 Al, Ga, As, 그리고 Mn의 자기모멘트와 머핀티넌(Muffin-tin)

Table II. Magnetic moment (M, μ_B) and l-decomposed electrons within muffin-tin spheres for each atoms of Al(Ga,Mn)As₂ at 6.25% Mn.

Sites	M (μ _B)	Populations		
		s (↑/↓)	p (↑/↓)	d (↑/↓)
Al	0.029	0.374	0.386	--
		0.355	0.375	
Ga	0.018	0.465	0.417	4.978
		0.454	0.407	4.978
As	-0.057	0.664	0.942	4.993
		0.664	1.010	4.992
Mn	3.859	0.205	0.196	4.390
		0.157	0.140	0.629

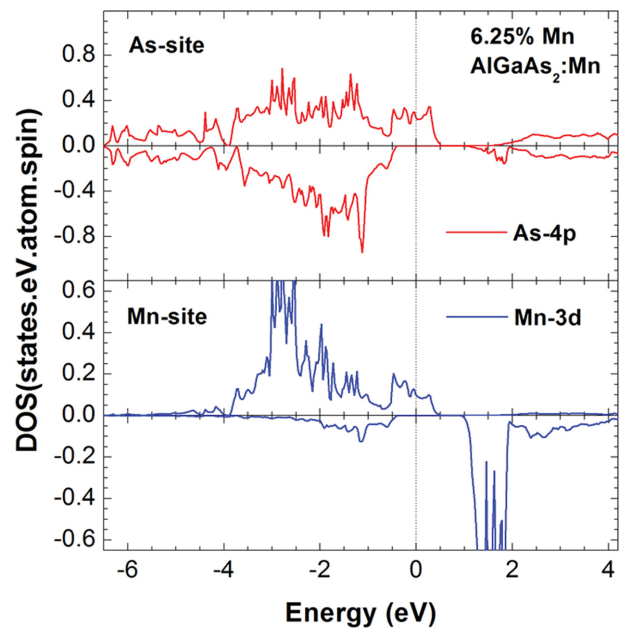


Fig. 2. (Color online) DOS for As and Mn sites of CH-Al(Ga,Mn)As₂ in the FM state with 6.25% Mn concentration. Dotted-line represents the Fermi level.

구내의 각 자리(site)에 대한 s, d 스핀 업/다운 전자점유를 나타낸다. 6.25% Mn 도핑된 계 전체의 자성은 $7.986\mu_B/\text{cell}$ 이다. 온도가 고려되지 않은 결과이고, 실제 측정되어 질수 있는 스핀 편극의 크기는 아니다. Fig. 2는 Mn 원자의 도핑이 있는 CH-AlGaAs₂ 계에 대한 자성과 전자상태 밀도(density of states, DOS)를 표현한 것이다. 6.25% Mn이 Ga 자리에 치환하여 도핑된 CH-Al(Ga,Mn)As₂ 계의 Mn 원자와 Mn 원자에 이웃하는 As 원자의 DOS이다. 다른 자리의 원자에 대한 가전자 대의 전자상태는 불순물 Mn 원자와의 상호작용이 매우 낮아서 As 원자만 고려하였다. 그리고 Al 자리에 치환하는 경우에 비하여 Ga 자리에 치환하는 경우가 에너지 적으로 더 낮은 결과를 보여준다. 이것은 응집에너지(cohesive)를 비교한 결과이고 응집에너지는 다음 절에서 언급할 것이다. 이들 계의 응집에너지 차이는 수 eV 정도이다. CH-AlGaAs₂:Mn은 FM의 성질을 나타낸다. Mn 원자의 자기모멘트는 거의 $4\mu_B/\text{Mn}$ 에 가깝다. CH-AlGaAs₂:Mn에 대한 FM 상태는 반강자성(antiferromagnetic; AFM) 상태보다 계의 총에너지가 낮은 상태로 안정함을 보인다. FM과 AFM 사이의 총 에너지 차이는 $-0.65\text{ eV}/\text{cell}$ 이다. 3.125%의 낮은 Mn 농도의 경우에서도 FM 상태로 높은 자기모멘트를 유지하였다. 이웃하는 As 원자는 음(negative)의 편극을 보이며 자기모멘트는 $-0.057\mu_B$ 로 무시할 수 없는 값의 크기를 보인다. Fig. 2에서 볼 수 있었듯이 페르미 준위 근방의 전자 업과 다운 상태가 서로 다르다. 스핀 업의 밴드는 페르미 준위 위 높은 에너지 쪽으로 이동을 하였고 스핀다운 밴드는 에너지가 낮은 쪽으로 이동하였다. 스핀다운 밴드는 페르미 준위를 중심으로 밴드 갭이 형성되는 반금속 특성을 보이고 있다. 3.125% Mn 농도일 때 보다 스핀다운 밴드 갭 크기는 더 넓다. 따라서 반금속 특성이 3.125% Mn 농도에서 보다 6.25% Mn 농도에서 더 확연하다.

2. FM 반금속

Fig. 3(a)는 Mn 도핑이 없는 CH-GaAs와 CH-AlGaAs₂의 밴드 구조이고, Fig. 3(b)는 Fig. 3(a)와 동일한 계에 대하여 Al 원자와 As 원자의 DOS를 비교하였다. 두 가지 계 모두 페르미 준위는 가전자대 바로 위(top)에 형성하는 p-형 반도체 특성을 보이고 직접(direct) 갭을 가진다. 밴드 갭의 크기는 각각 약 1.066 eV와 0.358 eV이다. Table III은 CH-GaAs 내에 3.125% Mn 농도에서 Mn 원자의 도핑 자리에 대한 자기모멘트, 계산된 격자상수, 그리고 응집에너지를 서로 비교하였다. Ga 자리에 치환되었을 때 Mn의 자기모멘트가 가장 높은 $3.938\mu_B/\text{Mn}$ 이고, 응집에너지가 -5.804 eV 로 가장 안정함을 보인다. 응집에너지, ΔE 는 다음과 같이 정의하였다.

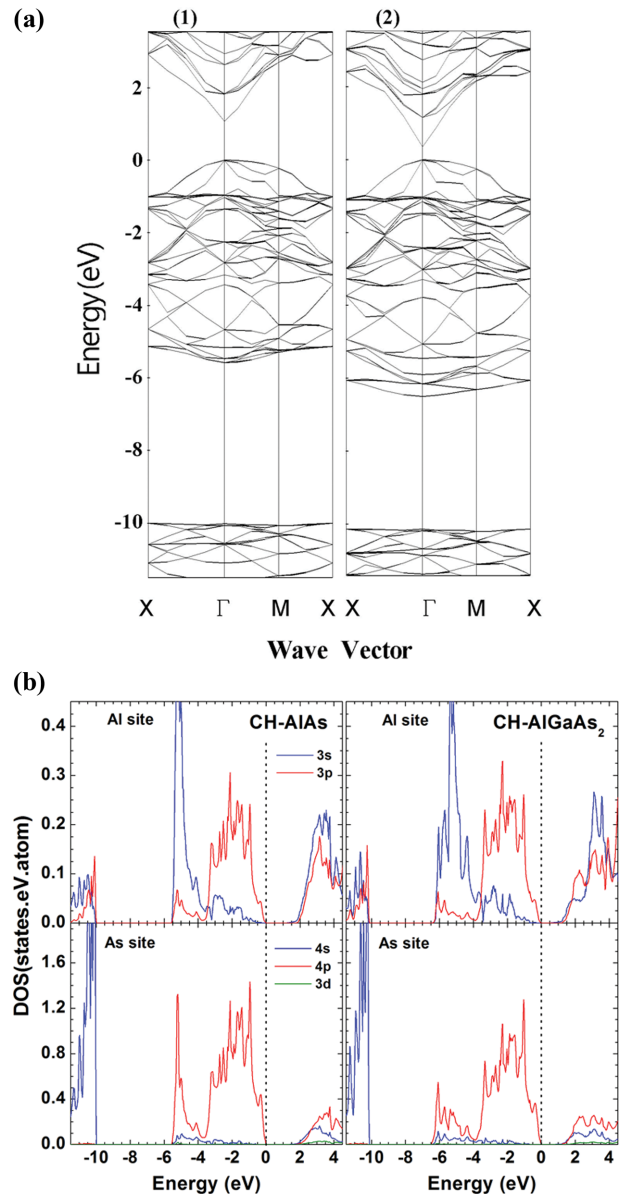


Fig. 3. (Color online) (a) Band structure for (1) CH-AlAs and (2) CH-AlGaAs₂. (b) Projected DOS for Al and As sites of CH-AlAs and CH-AlGaAs₂. The Fermi level is set to zero.

Table III. Magnetic moment (M, μ_B), lattice parameters (a, Å), and cohesive energies (ΔE , eV) for CH-GaAs with 3.125% Mn of the substitutional Mn sites on Ga, As, and interstitial (Int) sites.

	Ga site	As site	Int. site
M	3.938	3.391	3.731
4s (\uparrow/\downarrow)	0.217 0.164	0.213 0.178	0.183 0.146
3d (\uparrow/\downarrow)	0.217 0.164	4.202 0.852	4.511 0.821
a		5.8679	5.8980
ΔE	-5.804	-3.469	-1.504

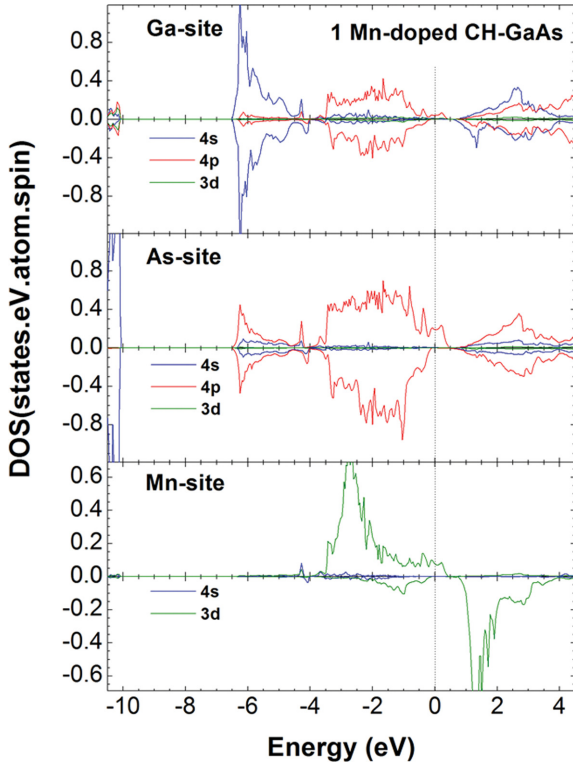


Fig. 4. (Color online) Projected DOS for Ga, As, and Mn sites of CH-GaAs in the FM state with 3.125% Mn concentration. The Fermi level is set to zero.

$$\Delta E = E([\text{AlAs:Mn}], [\text{GaAs:Mn}]) - E([\text{AlAs}], [\text{GaAs}]) - nE(\text{Mn}).$$

여기서 $E([\text{AlAs:Mn}], [\text{GaAs:Mn}])$ 는 Mn이 도핑 된 계의 총에너지이고, $E([\text{AlAs}], [\text{GaAs}])$ 은 Mn이 도핑 되었든 자리에 Mn이 없는 빈자리의 계에 대한 총에너지이다. 그리고 마지막 항 $E(\text{Mn})$ 은 자유(고립된) Mn의 총에너지이고, n 는 도핑된 Mn 원자 수이다.

Fig. 4는 CH-GaAs에 3.125% Mn 도핑의 경우 각 자리에 대한 DOS 그림이다. CH-AlGaAs₂:Mn의 경우와 흡사한 DOS를 보이고 있다. 마찬가지로 스핀다운 전자 밴드 갭 내에 페르미 준위가 형성된 반금속 특성을 보여 주고 있다. 이 계에 대해서도 Ga 원자 보다 As 원자와의 Mn-3d 전자의 상호 작용이 강하게 나타남을 알 수 있다. Mn의 도핑으로 스핀-다운 상태는 페르미 준위 아래 -0.15 eV 정도까지 이동하였다. Mn-4p 전자의 자유캐리어(free carriers)는 나타나지만 매우 적다. Mn 스핀-업 편극은 주로 3d 전자의 영향이 크고 Mn-4s 나 Mn-4p 편극의 영향은 아주 약하다. As-4s 밴드는 페르미 준위 아래 -10.5 eV 영역에서 거의 국지화상태를 형성한다. Fig. 2에서 보았듯이 Fig. 4의 경우에서도 Mn-3d 전자와 As-4p 전자와의 상호 결합이 강하다. 이것은 다수(majority) 캐리어 Mn-3d 밴드가 As-4p 밴드와 강한 혼성결합을 형성하기 때문이다. 스핀 업상태의 Mn-3d 밴드 대

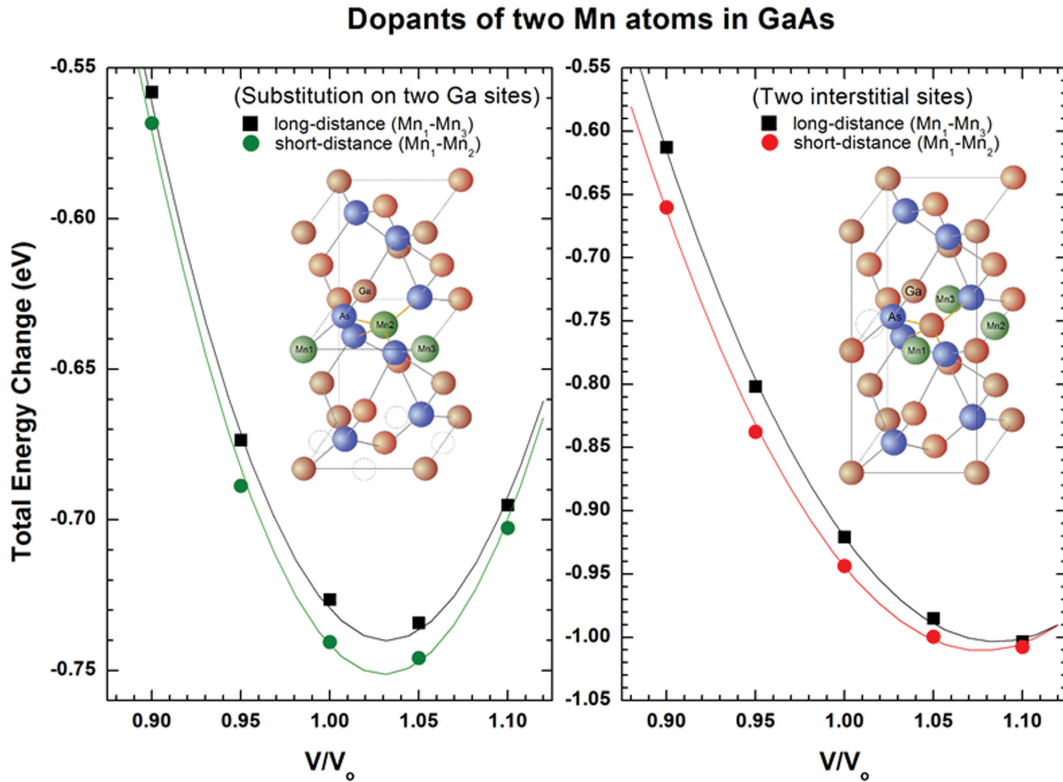


Fig. 5. (Color online) Change of total energy for CH-GaAs of 6.25% Mn as a function of the lattice parameter.

부분은 페르미 준위 아래 -2.7 eV에 위치하고, 부분적으로 채워지지 않은 Mn의 일부 3d 밴드가 페르미 준위 상에 형성된다. 그리고 Mn-3d와 As-4p의 강한 상호작용은 페르미 준위 상의 Mn과 이웃하는 As 원자사이의 홀 캐리어 축적에 기인한다. 따라서 부분적으로 채워지지 않은 As-4p 밴드로 인하여 Mn-3d 밴드의 상호교환 분리(exchange-splitting)가 3d 밴드 폭과 거의 같은 FM 상태를 유도한다. 가전자대 상단부분(페르미 준위 위)의 홀이 페르미 준위 아래 전자와의 자리바꿈이 일어날 수 있는 밴드 구조이다. 이러한 양상은 홀 캐리어가 개입되어 강자성 특성을 보이는 메카니즘이다. 잘 알듯이 Curie 온도는 캐리어 밀도와 반도체가 n-형 혹은 p-형 구조에 강한 의존성을 가지므로 CH-AlGaAs₂:Mn 계의 반금속 성질과 홀 캐리어 밀도의 양상에서 보았듯이 Mn 원자는 Mn-3d 전자와 As-4p 전자 및 홀과의 강한 상호교환 결합(exchange coupling)으로 높은 자기 모멘트가 유도된다. 가전자대 홀을 기반으로 하는 Ga_{1-x}Mn_xAs 계에 대한 실험연구에서 불순물 밴드내의 홀의 농도가 강자성의 질서를 형성하는데 주요한 역할을 한다는 결과를 보여주고 있다[19-21].

Fig. 5는 CH-GaAs 내에 Mn의 여러 도핑 자리 중에서 가장 에너지 적으로 낮은 자리와 가장 높은 자리 두 가지 경우에 대한 그림이다. 두 개의 Mn 원자가 Ga 원자와 치환하여 자리했을 때 긴 거리 도핑 자리의 경우와 짧은 거리 도핑 자리의 경우를 격자상수함수에 대한 총에너지의 변화를 서로 비교하였다. Fig. 5의 왼쪽은 긴 거리 Mn-Mn과 짧은 거리

Mn-Mn에 대한 것으로 응집에너지는 각각 -11.746 eV와 -11.983 eV이다. Fig. 5의 오른쪽은 긴 거리와 짧은 거리의 Mn-Mn에 대한 결과로 응집에너지는 각각 -3.138 eV와 -3.127 eV이다. Mn 원자의 도핑 자리에 대한 위치 정보는 그림 내부의 격자구조로 표현하였다. 3.125% 농도의 CH-GaAs:Mn은 Mn의 가장 안정한 도핑 자리는 Ga 자리에 치환하는 경우이고 6.25% 농도의 CH-AlAs:Mn의 경우에는 짧은 거리의 두 Al 원자에 Mn 원자가 자리했을 때 계의 총 에너지가 가장 낮음을 보여 주었다. 이 결과는 Table IV에서 각각의 계에 대하여 격자 상수와 응집에너지를 서로 비교하였다.

IV. 결 론

CH-AlGaAs₂:Mn의 전자적 구조와 자성을 제일 원리 수치적 해석법인 FP-LMTO 방법을 사용하여 연구하였다. 먼저 도핑이 되지 않은 CH-AlGaAs₂은 CH-AlAs 및 CH-GaAs 계와 서로 비교하여 물성을 확인하였다. CH-AlGaAs₂, CH-AlAs, 그리고 CH-GaAs은 모두 직접 밴드 갭을 가지는 p-형 반도체이다. Ga 자리와 치환된 CH-Al(Ga,Mn)As₂ 계의 Mn은 FM 상태가 에너지 적으로 가장 안정한 상태를 보였다. 3.125% 및 6.25% Mn 농도에서 Mn 원자의 자기모멘트의 크기는 서로 비슷하였고, 반금속 특성은 높은 농도에서 더욱 확연해 짐을 알 수 있었다. 불순물 Mn 원자의 FM 질서는 이웃하는 네 개의 As 원자(주로 사면체 구조)와의 강한 As(4p)-Mn(3d) 결합에 기인되며, 부분적으로 채워지지 않은 Mn(3d) 및 As(4p) 밴드를 형성한다. Mn은 As(4p) 홀(hole)과 전자가 상호 개입을 하는 As(4p)-Mn(3d)-As(4p)의 이중-상호교환(double-exchange) 결합으로 높은 자기모멘트 특성을 가진다. 불순물 농도 극한에 대한 DMS 연구의 결과가 많이 뒷받침되어야 하겠으나 CH-AlGaAs₂:Mn은 스핀트로닉스(spintronics) 응용에 유용하다 할 것이다.

감사의 글

본 연구는 컴퓨터 계산을 원활히 수행 할 수 있도록 건국대학교 글로벌 캠퍼스 나노기계전자공학과와 지원이 있었음에 감사드립니다(2018-2020년).

References

[1] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and D. Ferrand, Science **287**, 1019 (2000).
 [2] K. Iwata, H. Tampo, A. Yamada, P. Fons, K. Matsubara, K. Sakurai, S. Ishizuka, and S. Niki, Appl. Surf. Sci. **244**, 504

Table IV. Magnetic moment (M1, M2, μ_B), lattice parameters (a , Å), and cohesive energies (ΔE , eV) for the substitutional Mn sites of Al, As, and interstitial (Int) sites in CH-AlAs at 6.25% Mn.

Sites	Mn1 Mn2	a (Å)	ΔE
Long-range Al-Al	4.10	5.8815	+11.746
	4.10		
Short-range Al-Al	4.06	5.8796	+4.191
	4.06		
Al-As	-3.09	5.8416	+8.037
	+3.93		
Al-Int	4.05	5.8853	+7.866
	3.65		
As-As	3.35	5.8834	+6.872
	3.35		
As-Int	3.28	5.8891	+9.722
	3.42		
Long-range Int-Int	3.38	5.9060	+14.473
	3.37		
Short-range Int-Int	3.29	5.9022	+13.887
	3.30		

- (2005).
- [3] C. Liu, F. Yun, and H. Morkoç, *J. of Mater. Sci.: Mater. in Electronics* **16**, 555 (2005).
- [4] Y. Zheng, J. C. Boulliard, D. Demaille, Y. Bernard, and J. F. Pétroff, *J. of Cryst. Growth* **274**, 156 (2005).
- [5] P. Gopal and N. A. Spaldin, *Phys. Rev. B* **74**, 094418 (2006).
- [6] T. Dietl, H. Ohno, and F. Matsukura, *Phys. Rev. B* **63**, 195205 (2011).
- [7] B.-S Kang, K.-S Kim, S.-C Yu, and H. Chae, *J. of Solid State Chem.* **198**, 120 (2013).
- [8] S. J. Pearton, C. R. Abernathy, D. P. Norton, A. F. Hebard, Y. D. Park, L. A. Boatner, and J. D. Budai, *Mater. Sci. Eng. R* **40**, 137 (2003).
- [9] S. Choi, G.-B. Cha, S. C. Hong, S. Cho, Y. Kim, J. B. Ketterson, S.-Y. Jeong, and G.-C. Yi, *Solid State Comm.* **122**, 165 (2002).
- [10] S. Choi, S. Choi, G.-B. Cha, S. C. Hong, Y. Kim, Y.-J. Zhao, A. J. Freeman, J. B. Ketterson, B. J. Kim, Y. C. Kim, and B.-C. Choi, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 257203-1 (2002).
- [11] M. E. Overberg, G. T. Thaler, R. M. Frazier, C. R. Abernathy, S. J. Parton, R. Rairigh, J. Kelly, N. A. Theodoropoulou, A. F. Hebard, R. G. Wilson, and J. M. Zavada, *J. Appl. Phys.* **93**, 7861 (2003).
- [12] M. E. Overberg, G. T. Thaler, R. M. Frazier, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, R. Rairigh, J. Kelly, N. A. Theodoropoulou, A. F. Hebard, R. G. Wilson, and J. M. Zavada, *J. Vac. Sci. Technol. B* **21**, 2093 (2003).
- [13] B.-S. Kang, K.-M. Song, and H.-K. Lee, *Phys. Status Solidi C* **14**, 1700219 (2017).
- [14] B.-S. Kang, K.-P. Chae, and H.-K. Lee, *Advanced in Condensed Matter Phys.* **706957**(Article ID), 1 (2015).
- [15] O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **12**, 3060 (1975).
- [16] S. Y. Savrasov, *Phys. Rev. B* **54**, 16470 (1996).
- [17] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [18] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* Seventh ed. (John Wiley & Sons, 1996).
- [19] G. Bouzerar, T. Ziman, and J. Kudrnovky, *Phys. Rev. B.* **72**, 125207 (2005).
- [20] K. S. Burch, D. B. Shrekenhamer, E. J. Sinley, J. Stephens, B. L. Sheu, R. K. Kawakami, P. Schiffer, N. Samarth, D. D. Awschalom, and D. N. Basov, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 87208 (2006).
- [21] J. Okabayashi, A. Kimura, O. Rader, T. Mizokawa, A. Fujimori, T. Hayashi, and M. Tanaka, *Phys. Rev. B* **58**, R4211 (1998).