

철(Fe), 코발트(Co), 니켈(Ni)의 자성과 전자구조

인하대학교 물리학과 박찬현*, 이병찬, 이재일

Magnetism and electronic structure of Fe, Co, and Ni

Inha University C. H. Park*, B. C. LEE and J. I. LEE

1. 서론

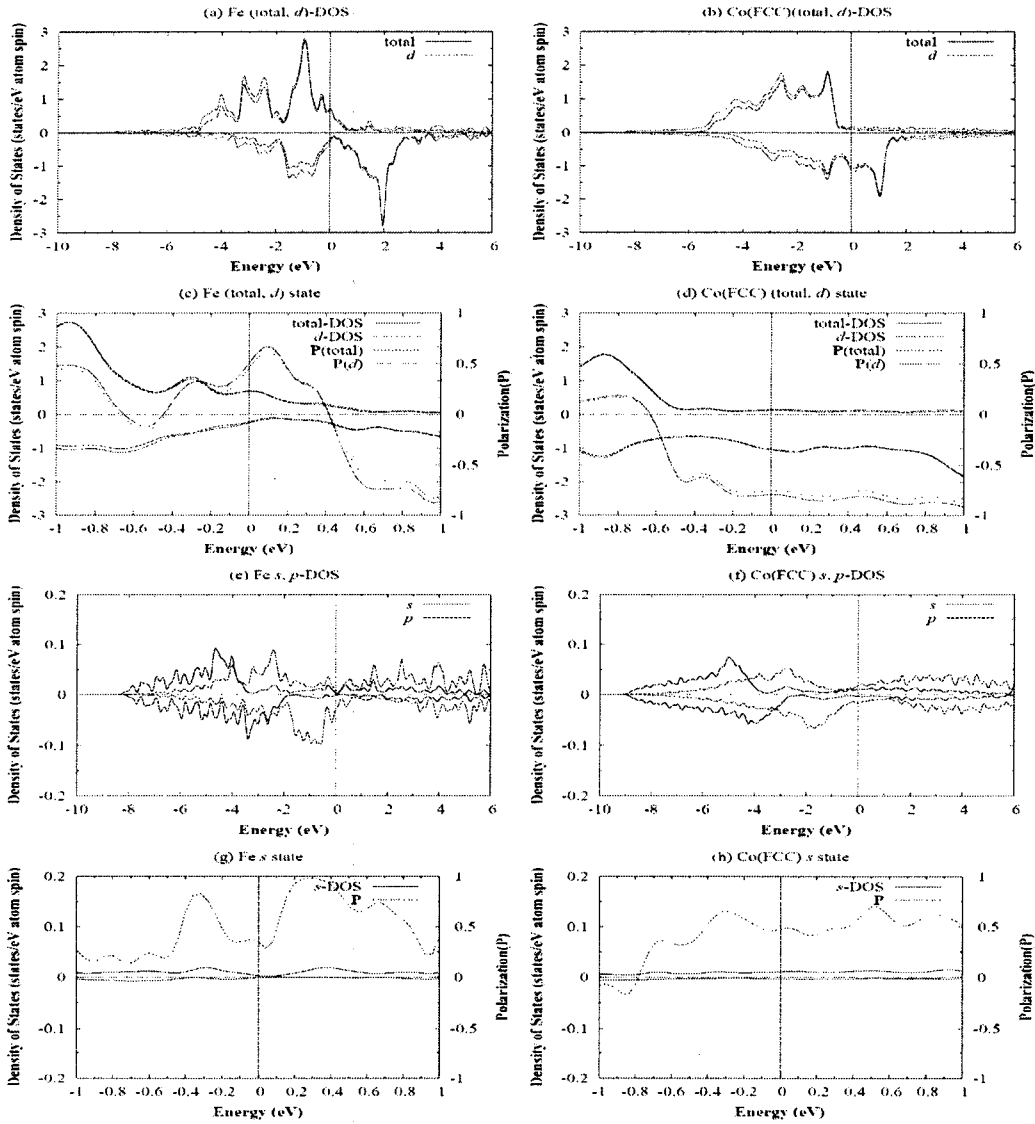
최근에 많이 연구가 되고 있는 전자의 스핀을 이용하려는 스핀트로닉스(spintronics)에서 각 물질들의 스핀 극나뭇(spine polarization)은 중요한 역할을 하는 변수이다. 예를 들어 자기터널접합(magnetic tunnel junction)에서 자성 전극의 스핀 극나뭇이 클수록 큰 자기저항(magnetoresistance)을 얻을 수 있고, 반도체 소자 내에서 전자의 스핀을 활용하기 위해 스핀 극나뭇이 큰 전류를 얻으려는 연구가 활발하게 진행되고 있다. 여기서는 자성물질인 Fe, Co, Ni에서 스핀 극나뭇을 결정하는 중요한 요소인, 페르미 준위(Fermi level)에서의 스핀에 의존하는 상태밀도(density of states)를 이론적으로 분석하였다.

2. 계산 방법

지금까지 Fe, Co, Ni 등은 그 자성과 전자구조에 대하여 연구가 많이 진행된 기본 물질들이다. 우리는 정밀도 면에서 인정 받고 있는 총퍼텐셜 보강 평면파 (FLAPW) 방법[1]을 이용하여 이들 물질의 전자구조를 계산하였다. FLAPW 방법을 이용한 Fe, Co, Ni 의 계산은 이전에도 있었는데, 교환-상관 퍼텐셜(exchange correlation potential)로 국소스핀밀도 근사(local spine density approximation ; LSDA)를 적용한 것이었다[2]. 우리는 LSDA 이후 더 정밀도가 고려된 일반 기울기 근사(generalized gradient approximation ; GGA)[3]를 적용한 FLAPW 방법으로 Fe (bcc), Co (hcp, fcc), Ni (fcc)의 덩치와 필름(7층)에 대하여 연구하였다. 이 때 Fe, Co, Ni의 살창 상수(lattice constant)는 실험값을 취하였다.

3. 결과 및 고찰

그림은 bcc Fe와 fcc Co의 스핀에 의존하는 상태밀도와 그로부터 구해진 스핀 극나뭇을 나타낸 것이다. 여기서 스핀 극나뭇 P는 페르미 준위에서의 상태밀도에 대해서 $P = ((\text{spin-up}) - (\text{spin-down})) / ((\text{spin-up}) + (\text{spin-down}))$ 로 정의하였다. 그림에서 전체 상태밀도는 d-전자의 상태밀도에 의해 대부분 결정됨을 알 수 있고, 여기서 스핀 극나뭇을 구하여 보면, Fe의 경우에는 페르미 준위의 spin-up에 해당되는 상태밀도가 spin-down에 해당되는 부분보다 커서 양(+)의 스핀 극나뭇이 나오고, 반대로 fcc Co의 경우에는 스핀 극나뭇의 부호가 음(-)으로 나온다. 한편 실험에서 측정한 결과에서는 Fe와 Co의 스핀 극나뭇의 부호가 모두 양(+)으로 알려져 있다[4]. 그래서 우리는 각 물질들에 대하여 전자 궤도별로 페르미 준위에서 그 스핀 극나뭇을 구하여 비교하여 보았다. 그 결과, 수송적 성질, 특히 터널링에 크게 기여한다는 s-전자의 경우, Fe 와 Co의 스핀 극나뭇의 부호가 모두 양(+)인 것을 알 수 있었다. 이중자기접합의 경우처럼, 자성 물질이 얇은 막 상태로 있을 때에 생길지도 모르는 스핀 극나뭇의 변화를 조사하기 위해, (001) 방향으로 배열된 7층의 Fe, Co, Ni 필름에 대해서도 연구하였다.



(그림) Fe와 fcc Co의 상태밀도와 스핀 극나뉼; (a, b)는 Fe와 Co의 전체와 *d*-전자의 상태밀도, (c, d)는 Fe와 Co의 전체와 *d*-전자의 스핀 극나뉼, (e, f)는 Fe와 Co의 *s*와 *p*-전자의 상태밀도, (g, h)는 Fe와 Co의 *s*-전자의 스핀 극나뉼

4. 참고 문헌

- [1] 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, Phys. Rev. B **26**, 4571 (1982).
- [2] Li C., A. J. Freeman, and C. L. Fu, J. Magn. Magn. Mater **75**, 53 (1988); Wimmer E., A. J. Freeman, and H. Krakauer, Phys. Rev. B **30**, 3113 (1984).
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996); Phys. Rev. Lett. **78**, 1396(E) (1997).
- [4] R. J. Soulen Jr. et al., science **282**, 85 (1998).