

# 강자성체와 산화막 계면의 자기이방성에 관한 제일원리 계산

이정훈\*, A. Manchon<sup>1</sup>, M. Chshiev<sup>1</sup>, B. Dieny<sup>1</sup>, 신경호

한국과학기술연구원, <sup>1</sup>SPINTEC

## 1. 서론

강자성체와 금속산화막 계면에서 발생하는 수직자기이방성을 제일원리 계산을 통해 규명하였다. Fe와 MgO 계면의 산화 정도에 따른 자기이방성을 계산하여 실험적으로 보인 경향과 일치함을 확인했으며 각 경우의 Partially Occupied Molecular Orbital를 통해 orbital 의 대칭성과 자기이방성과의 연관성을 밝혔다. 이것은 작은 spin orbit interaction (SOI)에도 불구하고 Fe와 O의 orbital hybridization에 의한 전하이동에 기인한 것으로 향후 계면에서의 자기이방성 및 그에 따른 수송현상을 제어하는 새로운 방법이 될 수 있을 것이다.

## 2. 계산 결과

강자성체와 금속산화막 계면에서의 spin orbit interaction (SOI)를 제어하는 것은 수직 터널접합이나 수직자성 자구이동소자와 같은 시스템을 만드는 데 매우 중요한 요소가 된다. 우리는 SOI를 포함하는 제일원리 계산을 통해 Fe/MgO 계면에서 산화가 덜 된 경우, 완전히 산화된 경우, 그리고 과산화 된 경우에 대한 자기이방성을 연구하였다. 그 결과 완전히 산화된 경우의 수직이방성이 가장 크게 나와 실험결과와 경향성이 일치함을 볼 수 있었다. 또한 각 경우에 대한 orbital occupancy를 분석해  $e_g$  orbital과  $t_{2g}$  orbital 중 어느쪽에 전자가 분포하는가에 따른 수직자기이방성의 정도를 확인할 수 있었다. Fe/MgO 계면에 전기장을 추가로 인가하는 시스템에서도 마찬가지로 orbital occupancy에 따른 자기이방성의 변화를 예측할 수 있다.

## 3. 결론

강자성체와 금속산화막 계면의 산화도에 따른 자기이방성 변화를 제일원리로 계산하여 실험과 동일한 경향성을 확인하였다. 또한 각 경우의 orbital occupancy를 분석함으로써 자기이방성이 달라지는 원인을 규명하였다. 마지막으로 전기장을 인가한 경우에 대한 분석을 통해 전하의 이동에 따른 orbital occupation 의 변화가 만드는 자기이방성의 변화를 볼 수 있다. 이러한 계면에서의 orbital hybridization 에 의한 자기이방성 변화는 MgO 기반의 자기터널접합을 이용한 시스템에 널리 적용 가능한 것으로 향후 수직이방성 터널접합 제작과 전하의 수송현상을 제어하는 새로운 방법이 될 수 있을 것으로 기대된다.

## 4. 참고문헌

- [1] I. I. Oleinik et. al., Phys Rev B 62, 3952 (2000).
- [2] G. H. O. Daalderop et. al., Phys. Rev. B 50, 9989 (1994).
- [3] A. Manchon et. al., J. App. Phys. 104, 043914 (2008)
- [4] T. Maruyama et. al., Nat. Nanotech. 4, 158-161 (2008)

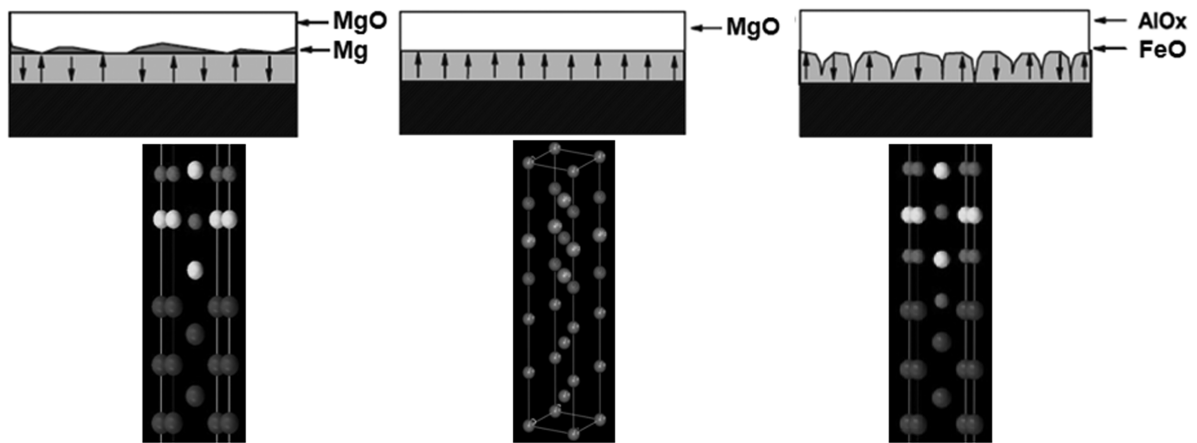


Fig. 1. 계면의 산화정도에 따른 자기이방성

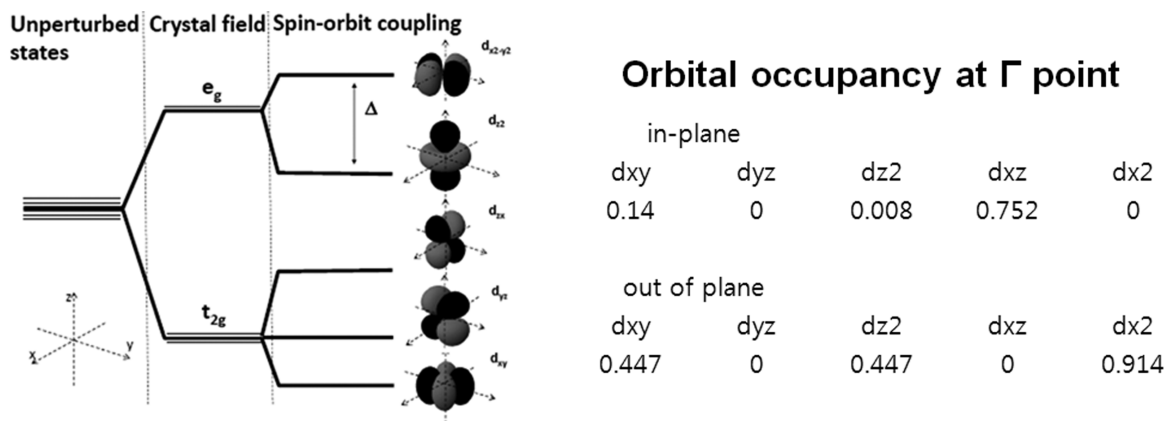


Fig. 2. orbital의 symmetry와 occupancy