

철(Fe), 코발트(Co), 니켈(Ni)의 전자구조와 자성 Magnetism and electronic structure of Fe, Co, and Ni

박찬현, 이병찬^{*†}, 이재일^{*}

한국화학연구원, *인하대학교 물리학과

(chan@inha.ac.kr[†])

최근에 많이 연구가 되고 있는 전자의 스핀을 이용하려는 스핀트로닉스(spintronics)에서 각 물질들의 스핀 극나뉘기(spin polarization)은 중요한 역할을 하는 변수이다 예를 들어 자기터널접합(magnetic tunnel junction)에서 자성 전극의 스핀 극나뉘기가 클수록 큰 자기저항(magnetoresistance)을 얻을 수 있다 여기서는 자성물질인 Fe, Co, Ni에서 스핀 극나뉘기를 결정하는 중요한 요소인, 페르미 준위(Fermi level)에서의 스핀에 의존하는 상태밀도(density of states)를 이론적으로 분석하였다 지금까지 Fe, Co, Ni 등은 그 자성과 전자구조에 대하여 연구가 많이 진행된 기본 물질들이다 우리는 정밀도 면에서 인정받고 있는 총퍼텐셜 보강 평면파 (FLAPW) 방법[1]을 이용하여 이들 물질의 전자구조를 계산하였다 FLAPW 방법을 이용한 Fe, Co, Ni의 계산은 이전에도 있었는데, 교환-상관 퍼텐셜(exchange correlation potential)로 국소스핀밀도 근사(local spin 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(7 층)에 대하여 연구하였다 이 때 Fe, Co, Ni의 살창 상수(lattice constant)는 실험값을 취하였다. 여기서 스핀 극나뉘기 P는 페르미 준위에서의 상태밀도에 대해서 $P = \frac{(\text{spin-up}) - (\text{spin-down})}{(\text{spin-up}) + (\text{spin-down})}$ 로 정의하였다 그 결과, 수송적 성질, 특히 터널링에 크게 기여한다는 s-전자의 경우, Fe와 Co의 스핀 극나뉘기의 부호가 모두 양(+)인 것을 알 수 있었다 하지만 전체 상태밀도의 대부분을 결정하는 d-전자의 경우는 스핀 극나뉘기가 Fe를 제외하고 모두 음(-)으로 나온다 이중자기접합의 경우처럼, 자성 물질이 얇은 막 상태로 있을 때에 생길지도 모르는 스핀 극나뉘기의 변화를 조사하기 위해, (001) 방향으로 배열된 7 층의 Fe, Co, Ni 필름에 대해서도 연구하였다

[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)