ISSN (Print) 1598-5385
ISSN (Online) 2233-6648
≪연구논문≫ Journal of the Korean Magnetics Society 26(6), 179-184 (2016) https://doi.org/10.4283/JKMS.2016.26.6.179

First Principle Studies on Magnetism and Electronic Structure of Perovskite Structured $CoFeX_3$ (X = O, F, S, Cl)

Soyoung Jekal and Soon Cheol Hong*
Department of Physics and EHSRC, University of Ulsan, Ulsan 44610, Korea

(Received 30 November 2016, Received in final form 19 December 2016, Accepted 20 December 2016)

For an industrial spin-transfer torque (STT) MRAM, low switching current and high thermal stability are required, simultaneously. For this point of view, it is essential to find magnetic materials which satisfy high spin polarization and strong perpendicular magnetocrystalline anisotropy (MCA). In this paper, we investigate electronic structures and MCA energies of perovskite $CoFeX_3$ (X = O, F, S, Cl). For X = F and Cl, spin polarization at the Fermi level are 97 % and 96 %, respectively, which are close to a half metal. Furthermore, Co-terminated 5-monolayer (ML) $CoFeX_3$ (X = O, F, S, Cl) films show perpendicular MCA. In particular, the MCA energy of the Co-terminated $CoFeCl_3$ is about 1.0 meV/cell which is three times larger than that of a 5-ML CoFe film. Therefore, we expect to realize a magnetic material with high spin polarization and strong perpendicular MCA energy by utilizing group 6 and 7 elements in the periodic table, and to contribute to commercializing of the STT-MRAM.

Keywords : first-principles calculation, magnetism, magnetocrystalline anisotropy, perovskite, electronic structure

페로브스카이트 구조를 가지는 $CoFeX_3$(X = O, F, S, Cl) 합금의 자성과 전자구조에 대한 제일원리계산

제갈소영 · 홍순철*
울산대학교 물리학과, 울산시 남구 대학로 93, 44610

(2016년 11월 30일 받음, 2016년 12월 19일 최종수정본 받음, 2016년 12월 20일 게재확정)

스핀전달토크(Spin-Transfer Torque: STT) MRAM의 상용화를 위해서는 낮은 반전전류와 높은 열적 안정성을 동시에 만족해야 하고, 이를 위해서는 큰 스핀 분극, 강한 수직자기이방성 에너지을 가지는 물질이 요구된다. 본 연구에서는 STT-MRAM에 적합한 물질로 알려진 *B2* CoFe 면심에 X(O, F, S, Cl) 원자가 위치한 $CoFeX_3$ 합금의 전자구조와 자기결정이방성(Magnetocrystalline anisotropy: MCA) 에너지를 계산하였다. X 원자가 F나 Cl일 때는 페르미 준위에서의 스핀 분극율이 각각 97 %, 96 %로, 반쪽 금속에 근접한 전자구조를 가짐을 확인할 수 있었다. 뿐만 아니라 표면이 Co 원자로 끝나는 5층 박막은 모든 X에 대해 수직 자기이방성를 가졌으며, 특히 $CoFeCl_3$의 자기이방성 에너지는 약 1.0 meV/cell로 상당히 컸다. 따라서 6, 7 족 원소를 잘 활용하면 높은 스핀 분극율과 강한 수직 자기이방성를 동시에 가지는 물질을 제조할 수 있게 되어 STT-MRAM의 상용화에 기여를 할 수 있을 것으로 기대한다.

주제어 : 제일원리계산, 자성, 자기이방성, 페로브스카이트, 전자구조

I. 서 론

통상적으로 사용되고 있는 자기저항 메모리(magnetoresistive random access memory(MRAM))는 외부에서 자기장을 가해줌으로써 자성체의 스핀의 방향을 조절하고, 그로부터 정보를 저장한다[1]. 하지만 외부자기장을 가하게 되면 누설 자기장(stray magnetic field)을 발생시키기 때문에 메모리의 크기가 작아지고 밀도가 높아질수록 원치 않는 정보의 손실을 가져올 가능성이 높아진다[2]. 최근에는 이러한 문제를 해결하기 위한 방법으로써 스핀전달토크(spin transfer torque(STT)) 현상이 주목 받고 있다. STT-MRAM의 경우, 정보를 읽는 방식은 기존의 MRAM과 같지만 정보를 기록할 때는 외부자기장 대신 국소적으로 스핀 전류를 흘려주는 방법을 택하기 때

© The Korean Magnetics Society. All rights reserved.
*Corresponding author: Tel: +82-52-259-2331,
Fax: +82-52-259-1693, e-mail: schong@ulsan.ac.kr

문에 누설자기장에 의한 정보손실을 막을 수 있다. 또한 통상적인 MRAM에 비해 높은 확장성과 저전력 소모를 보일 뿐만 아니라 구조가 비교적 단순하여 산업적인 측면에서 많은 장점을 가지고 있다[3-7].

하지만 이러한 장점에도 불구하고 STT-MRAM에는 여전히 극복해야하는 문제점이 있는데, 첫 번째는 자화 반전을 위해 흘려주어야 하는 반전 전류(I_c)가 높다는 것이고 두 번째는 메모리의 크기가 작아질수록 열적 안정성이 낮아진다는 것이다. 식(1)과 식(2)는 각각 반전 전류[8]와 열적 안정성[9]을 표현하고 있다.

$$I_c = \frac{2e\alpha}{\hbar g} M_s V (H_K + 2\pi M_S). \quad (1)$$

α는 고유 감쇠 상수, g는 스핀 분극화 인자, M_s는 포화 자화량, V는 자기단위의 부피, 그리고 H_K는 이방성 자기장을 의미한다.

$$\Delta = \frac{KV}{k_B T}, \quad (2)$$

여기서 K는 자기이방성 에너지이고 k_B는 볼츠만 상수이다.

식(1)과 (2)를 종합해보면 낮은 반전전류와 높은 열적 안정성을 동시에 만족시키기 위해서는 큰 스핀 분극, 적은 포화자화량 그리고 강한 수직자기이방성 에너지를 가지는 물질이 요구된다. 스핀 분극을 높이기 위한 방법으로는 반쪽금속(half metal)이 제안되기도 하지만 많은 경우의 반쪽금속은 자기이방성 에너지가 크지 않을 뿐만 아니라 실온에서는 그 특성을 잃는다는 문제가 있다[1, 10-13].

강한 수직 자기이방성 에너지를 가지는 물질로는 CoFe[14], CoPt[15], Co/Pd[16, 17], Ni/Fe[18] 박막 등이 보고되고 있다. 특히 CoFe은 비교적 가격이 저렴한 원자로 이루어져 있고, 상온에서도 높은 자기저항비를 가지며, 비교적 낮은 전류로 자화 방향을 반전시킬 수 있음이 확인되어 많은 주목을 받고 있다[19-21].

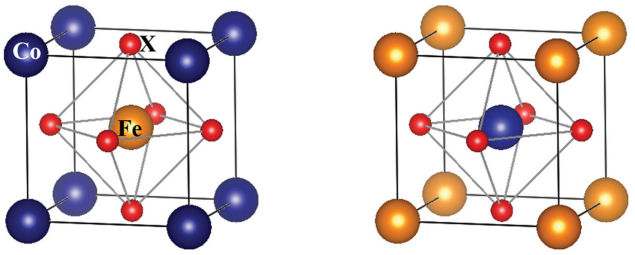
본 연구에서는 수직 자기이방성 에너지를 가지는 것으로 알려진 CoFe의 전자구조(electronic structure)를 조율(tuning)하여 반쪽금속에 근접한 큰 스핀 분극을 만들기 위한 방법으로써 페로브스카이트(perovskite) 구조를 가지는 $CoFeX_3$(X = O, F, S, Cl) 합금을 고안하였다. 2가의 전자배치를 가지는 6족 원소(O, S)와 1가의 전자배치를 가지는 7족 원소(F, Cl)는 다른 원자의 전자를 끌어당겨 더 안정해지려는 경향이 있기 때문에 이는 CoFe의 전자구조를 조율하는 한가지 방법이 될 수 있다. *B2* CoFe 면심에 O, F, S, Cl 원자가 위치하게 되면 페르미 준위에서의 스핀 분극이 각각 78 %, 97 %, 66 %, 96 %로, 7족 원소에 의해서는 거의 100 %에 가까운 스핀 분극을 만들 수 있다. 뿐만 아니라 5층 박막에서의 자기결정이방성(Magnetocrystalline anisotropy: MCA) 에너지를 계산해본 결과, 표면이 Co원자로 끝나게 되면 X가 O, F, S, Cl일 때 모두 수직 자기결정이방성을 가졌다. 특히 $CoFeCl_3$의 자기결정이방성은 약 1.0 meV/cell로써 Co 표면을 가지는 CoFe 5층 박막의 결과보다 약 3배 정도 큰 값을 가지는 것으로 나타났다.

III. 계산방법 및 구조적 모형화

$CoFeX_3$(X = O, F, S, Cl)의 전자구조와 자성을 조사하기 위하여 Vienna *ab-initio* simulation package(VASP)[22]을 사용하여 스핀-분극 총에너지 계산을 수행하였다. 교환상관 퍼텐셜은 일반 물매 근사(general gradient approximation: GGA)를 취하였고, Projector augmented wave(PAW) 방법으로 슈도포텐셜을 생성하였다[23, 24]. 기저함수 절단에너지(cutoff energy)는 400 eV까지 전개한 평면파를 채택하였으며, *k*-점은 Monkhorst-pack[25]을 이용하여 덩치와 박막에서 각각 8 × 8 × 8, 8 × 8 × 1을 사용하였다.

페로브스카이트 구조는 Fig. 1에 보여지는 것처럼 두가지 경우를 고려하였는데, X 원자가 만드는 팔면체 자리(octahedral site) 가운데에 Fe 원자가 위치하는 $CoFeX_3$와 Co 원자가 중앙에 위치하는 $FeCoX_3$이다. 파란색, 주황색, 빨간색 구는 각각 Co, Fe, X(O, F, S, Cl) 원자를 의미하며, X 원자를 연결하는 회색 선은 팔면체 자리를 표현한 것이다. 박막을 계산할 때는 표면이 Co로 끝나는 경우와 Fe로 끝나는 경우를 모두 다 고려하였다. 2차원 격자상수는 계산된 덩치 값을 사용하였고, 층간 거리는 힘과 총에너지 계산을 통해 완전히 이완시켰다. 진공영역은 15 Å으로 하여 떨어진 표면과 표면이 상호 영향을 미치지 못하도록 하였다.

자기결정이방성 에너지는 자화 방향이 표면에 수평일 때와 수직일 때의 총 에너지 차이를 통해 구하였다: $E_{MCA} = E_{\rightarrow} -$



(a) $CoFeX_3$ (b) $FeCoX_3$

Fig. 1. (Color online) Perovskite structures of $CoFeX_3$ and $FeCoX_3$. Blue, orange and red spheres correspond to Co, Fe and X, respectively. Gray line connects X atoms denotes octahedral site.

$E_{\uparrow}$. 자기결정이방성 에너지 계산의 경우, 절단에너지와 *k*-점의 수를 점차 증가시킴으로써 그 값이 수렴하는 것을 확인하였고, 최종적으로 각각 450 eV와 15 × 15 × 1이 사용되었다.

III. 결과 및 토의

Fig. 2는 격자상수에 따른 $CoFeX_3$와 $FeCoX_3$의 총에너지를 보여주고 있다. 네모꼴은 $CoFeX_3$ 구조를, 원꼴은 $FeCoX_3$ 구조를 의미한다. 곡선은 계산 결과를 포물선으로 적합한(fitting) 것이다. X 원자가 O나 Cl일 때는 $CoFeX_3$가 $FeCoX_3$보다 각각 0.020, 0.140 Å 더 큰 격자상수를 가지는 것으로 계산된 반면, F나 S가 위치하게 되면 $FeCoX_3$의 격자상수가 $CoFeX_3$보다 각각 0.030, 0.055 Å 만큼 더 크다. 총에너지를 비교해보면 X 원자가 O, S, Cl일 때는 Fe이 X 팔면체 가운데 갇혀 있는 $CoFeX_3$ 구조를 가지는 것으로 나타났지만 X = F만은 특별히 $FeCoF_3$ 구조를 가지는 것이 $CoFeF_3$ 구조에 비해 에너지적으로 약 1.63 eV 더 안정되었다. $CoFeO_3$, $FeCoF_3$, $CoFeS_3$, $CoFeCl_3$ 각각의 격자상수와 원자당 자기 모멘트는 Table I에 나타내었다.

흥미롭게도 $FeCoF_3$을 제외하면 모든 경우에서 Co 원자가 Fe 원자보다 더 큰 자기 모멘트를 가진다. 즉, X 팔면체 내에 있는 원자보다 바깥에 위치한 원자의 자기모멘트가 더 크다. *B2* CoFe에서는 Co와 Fe 원자의 모멘트가 각각 1.755, 2.763 μ_B로 Fe 원자가 Co 원자에 비해 약 1.0 μ_B 정도 더 큰 값을 가졌었다[26]. *d*-전자가 전혀 없는 X 원자들의 자기모멘트도 0.1 μ_B 이상이며, 특히 6족 원소인 O와 S는 0.2 μ_B이 넘는 큰 모멘트를 보이고 있다. 격자 상수의 경우, X 원자가 포함됨으로써 *B2* CoFe의 2.84 Å[26]보다 크게 늘어나는 것을 알 수 있는데, X 원자가 O, F, S, Cl 일 때 각각 30 %, 43 %, 55 %, 69 % 증가하게 된다. X 팔면체 외부에 위치한 원자의 자기모멘트가 *B2* CoFe의 것보다 큰 이유는 격자 상수의 증가에 기인하는 것이라 분석할 수 있다. 반면에 X 팔면체 내에 있는 원자는 격자 상수가 크게 늘어났음에도 불구하고 *B2* CoFe와 비슷하거나 더 작은 모멘트를 가

Table I. Calculated lattice constants and magnetic moments of bulk $CoFeO_3$, $FeCoF_3$, $CoFeS_3$, $CoFeCl_3$.

		$CoFeO_3$	$FeCoF_3$	$CoFeS_3$	$CoFeCl_3$
LC (Å)		3.700	4.070	4.410	4.795
MM (μ_B)	Co	2.557	2.097	2.244	2.427
	Fe	2.415	3.218	2.031	2.225
	X	0.284	0.102	0.219	0.106

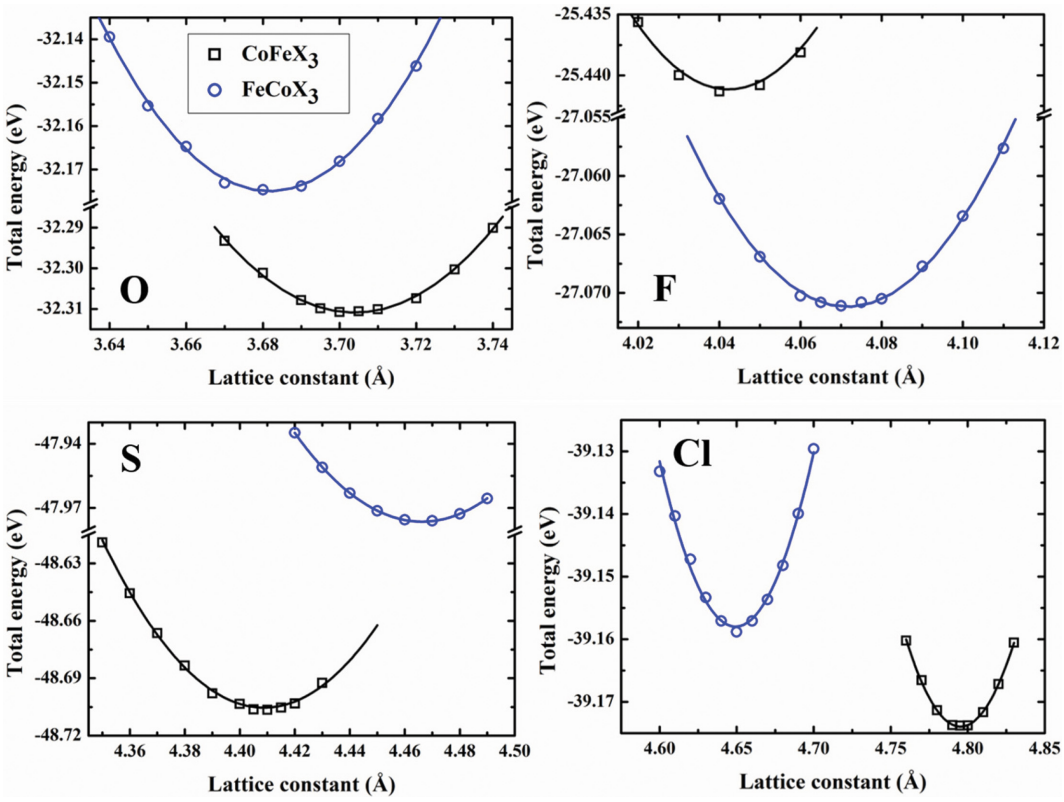


Fig. 2. (Color online) Calculated total energies of $CoFeX_3$ and $FeCoX_3$. Square and circle symbols represent $CoFeX_3$ and $FeCoX_3$, respectively.

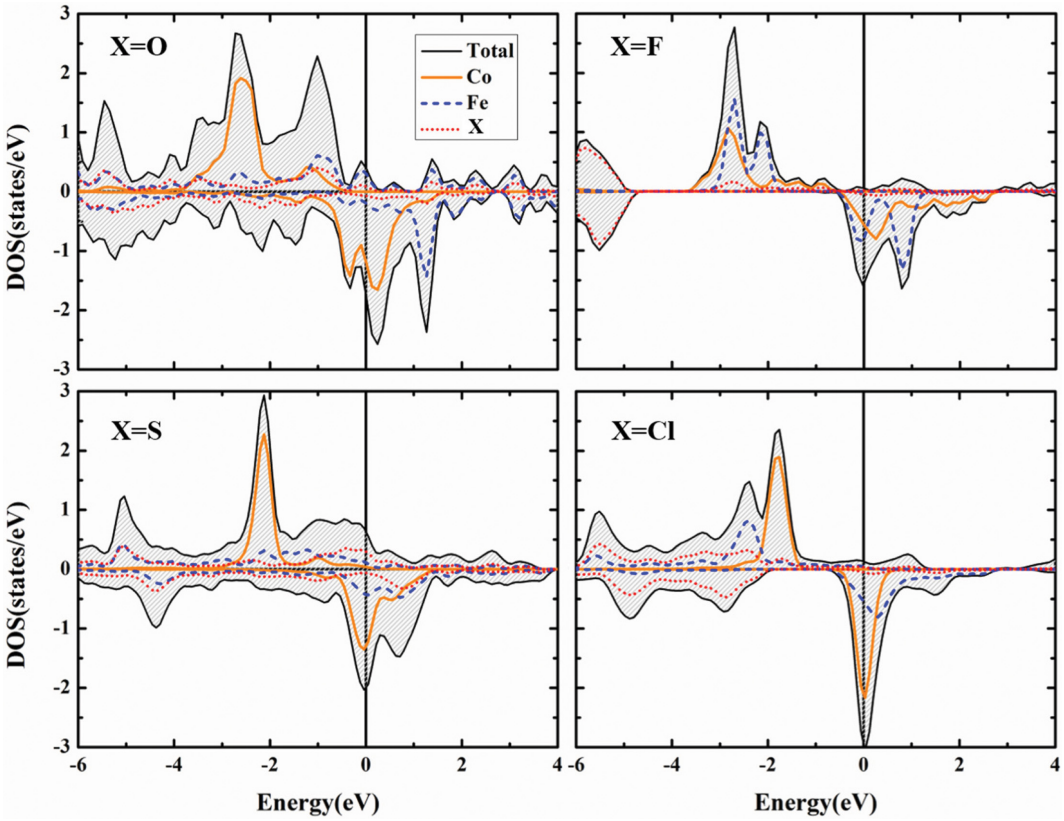


Fig. 3. (Color online) Density of states (DOS) of bulk $CoFeO_3$, $FeCoF_3$, $CoFeS_3$, $CoFeCl_3$. Gray shade is total DOS of unit cell. Solid, dashed, dotted lines represent partial DOS of Co, Fe and O, respectively.

분극을 약화시키는 역할을 하기 때문이라고 예측된다. 하지만 격자가 늘어날수록 자기모멘트도 함께 늘어나는 일반적인 현상들에 반하는 결과이기 때문에 이에 대한 더 자세한 분석과 논의가 필요하다고 생각된다.

X 원자에 따른 전자 상태밀도를 분석하기 위해 Fig. 3에는 Table I에 제시한 격자 상수를 사용하여 $CoFeO_3$, $FeCoF_3$, $CoFeS_3$, $CoFeCl_3$의 전자 상태밀도를 나타내었다. 회색면은 단위 격자 당의 총 전자 상태밀도(density of states: DOS)이고 실선, 파선, 점선은 각각 Co, Fe, X 원자의 기여를 의미한다. *B2* CoFe의 전자 상태밀도[26]와 비교해 볼 때, 면심의 X 원자들로 인해 페르미 준위의 소수 스핀(minority spin) 상태밀도가 상당히 큰 것을 확인할 수 있다. $CoFeO_3$와 $CoFeS_3$는 페르미 준위의 소수 스핀 상태밀도뿐만 아니라 다수 스핀(majority spin) 상태밀도도 함께 증가하였다. 이로 인해 *B2* CoFe의 스핀 분극이 페르미 준위에서 약 80 %인 것에 비해 $CoFeO_3$와 $CoFeS_3$는 소수 스핀 상태밀도가 증가했음에도 불구하고 스핀 분극율은 78 %, 66 %로 감소한다. 반면에 $FeCoF_3$와 $CoFeCl_3$의 다수 스핀 상태밀도는 페르미 준위에서 무시할 수 있을 정도로 낮아 스핀 분극율이 각각 97 %와 96%로 반쪽금속에 근접하는 것을 확인 할 수 있다. 각 원자의 상태밀도를 살펴보면, X의 팔면체 자리에 Fe이 갇혀 있는 $CoFeO_3$, $CoFeS_3$, $CoFeCl_3$은 페르미 준위의 소수 스핀 상태 밀도는 Co 원자가 더 크게 기여하고 이와는 반대로 X의 팔면체 자리에 Co가 갇힌 $FeCoF_3$은 Fe 원자가 더 큰 기여를 하는 것으로 나타났다. 따라서 X가 만드는 팔면체 내에 있는 원자는 페르미 준위에서 소수 스핀 상태밀도를 증가시키는 데 크게 기여하지 못하고, 대부분의 기여는 팔면체 밖에 위치한 원자에 의한 것이라고 분석할 수 있다.

Fig. 4는 5층의 $CoFeO_3$, $FeCoF_3$, $CoFeS_3$, $CoFeCl_3$ 박막의 자기이방성 에너지를 보여주고 있다. 실선과 점선은 각각 Co 표면을 가지는 박막과 Fe 표면을 가지는 박막을 표시한다. 앞서 정의했던 E_{MCA} 식으로부터, 양수와 음수 값은 각각 수직과 수평 자기이방성를 뜻한다. $CoFeO_3$를 제외하면, Co 표면을 가지는 박막은 모두 수직 자기이방성를, Fe 표면을 가지는 박막은 모두 수평 자기이방성를 가지는 것으로 계산되었다. 특히 Co 표면의 $CoFeCl_3$의 자기이방성는 약 1.0 meV/cell로써 고려한 박막들 중 가장 큰 수치를 보였다. 이는 2.76 Å의 이차원 격자 상수를 가지는 Co 표면의 CoFe 5층 박막의 자기결정이방성이 0.363 meV[26]로 계산된 것과 비교해 볼 때 약 3배 정도 큰 값이다. 게다가 덩치 $CoFeCl_3$은

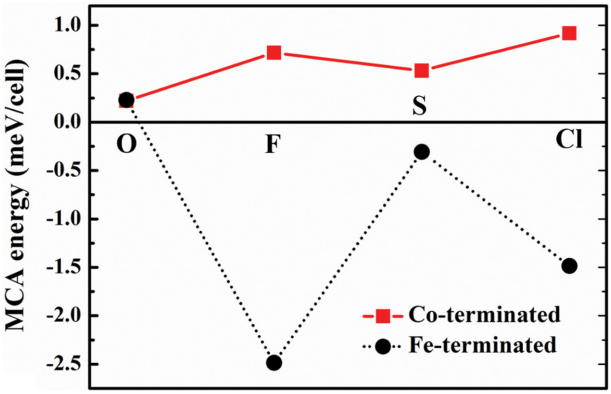


Fig. 4. (Color online) MCA energies of 5-ML $CoFeO_3$, $FeCoF_3$, $CoFeS_3$, $CoFeCl_3$. Square (circle) corresponds Co (Fe)-terminated film. From the definition of E_{MCA}, positive (negative) sign means perpendicular (in-plane) MCA energy.

페르미 준위에서 반쪽금속에 근접한 96 %의 스핀 분극을 가졌으며, 박막에서도 약 94 %로 그 값이 유지되는 것으로 나타났다.

표면층에 따른 자기이방성 에너지를 분석하기 위해 가장 높은 스핀 분극율과 강한 수직 자기이방성를 가지는 $CoFeCl_3$ 박막의 표면층 전자 상태밀도를 비교하였다. Fig. 5는 5층의 $CoFeCl_3$ 박막이 Co 표면을 가질 때와 Fe 표면을 가질 때의 Co(S)와 Fe(S)의 *d*-전자의 상태밀도를 각각 나타낸 것이다. Co(S)의 경우 d_{xy} 상태가 페르미 준위에서 국소화 되어있는 반면 Fe(S)는 $d_{x^2-y^2}$ 상태가 페르미 준위에 위치해 있다. Fig. 1에 나타낸 $CoFeCl_3$의 원자 구조로부터 Co의 d_{xy} 상태는 Cl의 s, *p* 상태와 띠혼합을 하고 Fe의 $d_{x^2-y^2}$ 상태는 Cl의 s, *p* 상태와 띠혼합할 것을 쉽게 예상할 수 있다. 따라서 페르미 준위 근처의 상태는 Cl 원자와의 상호작용에 기인한 것이라고 분석할 수 있다. Fe으로 표면이 끝나는 $CoFeCl_3$ 박막이 수평 자기이방성를 보이는 이유는 페르미 준위 근처에 있는 d_{yz}, $d_{x^2-y^2}$ 상태의 $\langle yz|L_x|x^2-y^2\rangle$ 결합에 의한 것으로 생각된다. 반면에 Co(S)의 경우에는 페르미 준위 근처의 d_{xy} 상태가 $\langle xy|L_z|x^2-y^2\rangle$ 결합을 통해 강한 수직 자기이방성에 기여하기 때문인 것으로 판단된다[27].

현재 $CoFeX_3$(O, F, S, Cl) 합금의 자성에 대한 실험적 보고가 없긴 하나 제일원리이론 계산 결과 6, 7 족의 원소들을 잘 활용하면 큰 스핀 분극과 강한 수직 자기이방성을 함께 가지는 물질을 제조할 수 있을 것으로 기대되며, 이는 STT-MRAM의 상용화에 활용할 수 있을 것으로 기대한다.

IV. 결 론

본 논문은 제일원리계산을 통해 페로브스카이트 구조를 가지는 $CoFeX_3$(X = O, F, S, Cl)의 전자구조와 자기이방성 에너지를 계산하였다. 페로브스카이트 구조는 X 원자가 만드는 팔면체 자리 가운데 Fe 원자가 위치하는 $CoFeX_3$와 Co 원자가 가운데 위치하는 $FeCoX_3$을 모두 고려하였다. 그 결과 X 원자가 F일 때는 $FeCoX_3$ 구조를 가졌고 나머지는 $CoFeX_3$ 구조가 에너지적으로 더 안정했다. 페르미 준위에서 덩치 $CoFeO_3$, $FeCoF_3$, $CoFeS_3$, $CoFeCl_3$의 스핀 분극율은 각각 78 %, 97 %, 66 %, 96 %로 계산되어, 7족 원소는 *B2* CoFe에 비해 스핀 분극율을 15 % 이상 증가시킴을 확인할 수 있었다. 뿐만 아니라 5층 박막에서의 자기이방성 에너지를 계산해본 결과, 표면이 Co 원자로 끝나게 되면 X 원자가 O, F, S, Cl 일 때 모두 수직 자기이방성을 보였고, 특히 $CoFeCl_3$의 자기이방성 에너지는 약 1.0 meV/cell로 Co 표면을 가지는 5층의 CoFe 박막보다 약 3배 정도 큰 값을 가졌다. 따라서 6, 7 족의 원소들을 잘 활용하면 페르미 준위에서의 높은 스핀 분극율과 강한 수직 자기이방성을 함께 가지는 물질을 제조할 수 있음을 예측하였다. 이는 STT-MRAM이 구동할 때 높은 열적 안정성과 낮은 반전전류를 동시에 만족시킬 수

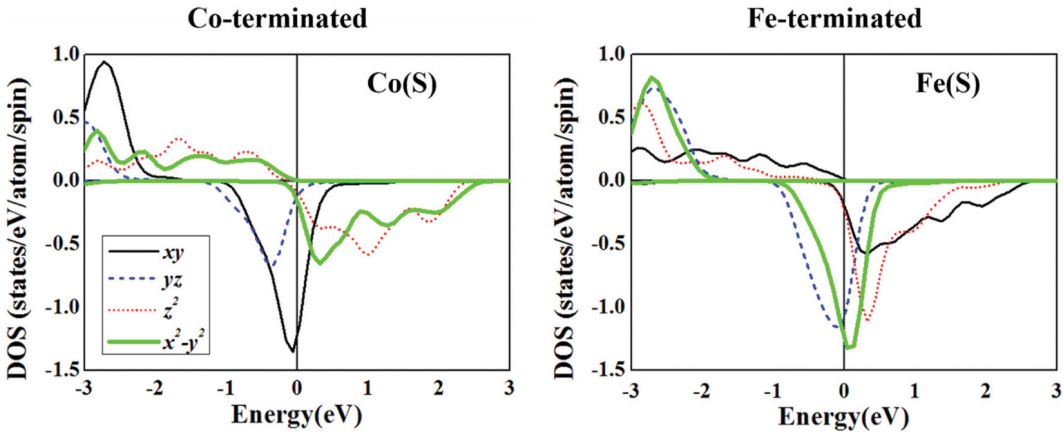


Fig. 5. (Color online) Atomic-projected density of states of the Co(S) and Fe(S) in Co- and Fe-terminated $CoFeCl_3$ thin films, respectively.

있고, 따라서 STT-MRAM의 상용화에 기여를 할 것으로 판단한다.

감사의 말

이 논문은 2009년도 교육부와 2015년도 미래창조과학부의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 기초연구사업임(NRF-2009-0093818, NRF-2015R1A2A2A01003621).

References

[1] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, Science **294**, 1488, (2001).
[2] A. V. Khvalkovskiy, D. Apalkov, S. Watts, R. Chepulskii, R. S. Beach, A. Ong, X. Tang, A. Driskill-Smith, W. H. Butler, P. B. Visscher, D. Lottis, E. Chen, V. Nikitin, and M. Krounbi, J. Phys. D: Appl. Phys. **46**, 074001 (2013).
[3] I. Žutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
[4] A. Fert, Rev. Mod. Phys. **80**, 1517 (2008).
[5] C. Felser, G. H. Fecher, and B. Balke, Angew. Chem. Int. Edit. **46**, 668 (2007).
[6] D. D. Awschalom, M. E. Flatté, and N. Samarth, Sci. Am. **286**, 66 (2002).
[7] Y. M. Lee, J. Hayakawa, S. Ikeda, F. Matsukura, and H. Ohno, Appl. Phys. Lett. **90**, 2507 (2007).
[8] S. I. Kiselev, J. C. Sankey, I. N. Krivorotov, N. C. Emley, R. J. Schoelkopf, R. A. Buhrman, and D. C. Ralph, Nature **425**, 380 (2003).
[9] N. N. Mojumder, C. Augustine, D. E. Nikonov, and K. Roy, J. Appl. Phys. **108**, 104306 (2010).
[10] J. E. Pask, L. H. Yang, C. Y. Fong, W. E. Pickett, and S. Dag, Phys. Rev. B **67**, 224420 (2003).
[11] C. Y. Fong, M. C. Qian, J. E. Pask, L. H. Yang, and S. Dag, Appl. Phys. Lett. **84**, 239 (2004).
[12] S. Jekal, O. Kwon, S. C. Hong, and J. I. Lee, J. Nanosci. Nanotech. **15**, 2356 (2015).
[13] X. Hu, Adv. Mater. **24**, 294 (2012).
[14] S. Ikeda, K. Miura, H. Yamamoto, K. Mizunuma, H. D. Gan, M. Endo, S. Kanai, J. Hayakawa, F. Matsukura, and H. Ohno, Nat. Mater. **9**, 721 (2010).
[15] G. Kim, Y. Sakuraba, M. Oogane, Y. Ando, and T. Miyazaki, Appl. Phys. Lett. Appl. Phys. Lett. **92**, 172502 (2008).
[16] K. Yakushiji, T. Saruya, H. Kubota, A. Fukushima, T. Nagahama, S. Yuasa, and K. Ando, Appl. Phys. Lett. **97**, 232508 (2010).
[17] S. Jekal, S. H. Rhim, O. Kwon, and S. C. Hong, J. Appl. Phys. **117**, 17E105 (2015).
[18] D. Sander, A. Enders, C. Schmidthals, J. Kirschner, H. L. Johnston, C. S. Arnold, and D. Venus, J. Appl. Phys. **81**, 4702 (1997).
[19] W. Wang, H. Sukegawa, R. Shan, S. Mitani, and K. Inomata, Appl. Phys. Lett. **95**, 182502 (2009).
[20] S. Emori, U. Bauer, S. M. Ahn, E. Martinez, and G. S. Beach, Nat. Mater. **12**, 611 (2013).
[21] X. Jiang, R. Wang, R. M. Shelby, and S. S. P. Parkin, IBM J. Res. Dev. **50**, 111 (2006).
[22] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
[23] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
[24] P. E. Blöchl, Phys. Rev. B **50**, 17953 (1994).
[25] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
[26] E. G. Kim, S. Jekal, O. Kwon, and S. C. Hong, J. Kor. Magn. Soc. **24**, 35 (2014).
[27] D. S. Wang, R. Wu, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **47**, 14932 (1993).