

유한요소법에 의한 자성재료의 전자구조가 자기저항에 미치는 영향 조사
(Study on the Electronic Structure Effects of Ferromagnets on
Magnetoresistance in terms of Finite Element Method)

카이스트 신소재공학과 노은선*, 이혁모

1. 서론

스핀밸브와 자기터널소자 등에서 나타나는 자기저항을 보다 높이기 위한 방법 중 하나로 자성재료에 대한 많은 연구가 이루어져 왔다. 그 결과, 코발트가 퍼멀로이보다 자기저항을 보다 크게 한다는 퍼멀로이를 (111) 방향으로 에피택시로 성장시킴으로써 자기저항을 두 배로 높인다는 등의 등 현재까지 자성재료에 대한 최적조건이 어느 정도 결정된 상태이다. 그러나 실험결과에 대한 원인규명이 확실하지 않고 그에 따라 더 이상의 연구진척이 어려운 실정이다. 따라서 본 연구에서는 Circuit theory 라는 유한요소법을 사용하여 자성재료의 방향성과 성분에 따른 자기저항과 스핀분극을 계산함으로써 자성재료의 전자구조가 어떻게 자기저항에 영향을 미치는지를 조사하였다.

2. 실험방법

시뮬레이션 대상은 [자성층120Å/Cu60Å/자성층] 이라는 단순한 구조의 CPP 스핀밸브이며 자성재료의 방향성이 자기저항에 미치는 영향을 알아보기 위해 자성재료를 polycrystalline NiFe, (111) textured NiFe, (100) textured NiFe 로 설정하였고 자성재료의 성분이 자기저항에 미치는 영향을 알아보기 위해 자성재료를 Co 와 NiFe 로 설정하였다. Circuit theory 는 두 개의 자성층 간의 자화방향 (θ) 에 따른 소자전체저항에 대한 식을 제공하는 데 본 연구에서는 이 식을 이용하여 자기저항을 계산하였으며 식은 다음과 같다.

$$\frac{e^2}{h} R(\theta) = \frac{2}{g} \frac{\left\{ \tan^2 \frac{\theta}{2} + \eta \right\}}{\left\{ (1-p^2) \tan^2 \frac{\theta}{2} + \eta \right\}} \quad \left(g = G^\uparrow + G^\downarrow, \quad p = \frac{G^\uparrow - G^\downarrow}{G^\uparrow + G^\downarrow}, \quad \eta = \frac{2G^{\uparrow\downarrow}}{G^\uparrow + G^\downarrow} \right)$$

$$G^\uparrow = \frac{e^2}{h} \sum_{nm} |t_{\uparrow}^{nm}|^2, \quad G^\downarrow = \frac{e^2}{h} \sum_{nm} |t_{\downarrow}^{nm}|^2, \quad G^{\uparrow\downarrow} = \frac{e^2}{h} \left[M - \sum_{nm} r_{\uparrow}^{nm} (r_{\downarrow}^{nm})^* \right]$$

위의 식들을 계산하기 위해 기본적으로 필요한 것이 mode 와 spin 에 따른 transmission coefficient 이며 본 연구에서는 Transfer matrix method 에 의해 transmission coefficient 를 결정하였고 식은 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix} A^{1,+} \\ A^{1,-} \end{pmatrix} = \prod_{i=1}^{N-1} T(i, i+1) \begin{pmatrix} A^{N,+} \\ A^{N,-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11}(1, N) & T_{12}(1, N) \\ T_{21}(1, N) & T_{22}(1, N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{N,+} \\ A^{N,-} \end{pmatrix}, \quad t = \frac{k^N}{k^1} \times \frac{1}{(T_{11}(1, N))^2}$$

위의 식들을 계산하기 위해 기본적으로 필요한 것이 파동벡터이며 본 연구에서는 Effective mass approximation 에서 제공하는 Hamiltonian 을 사용하여 파동벡터를 계산하였다. 식은 다음과 같다.

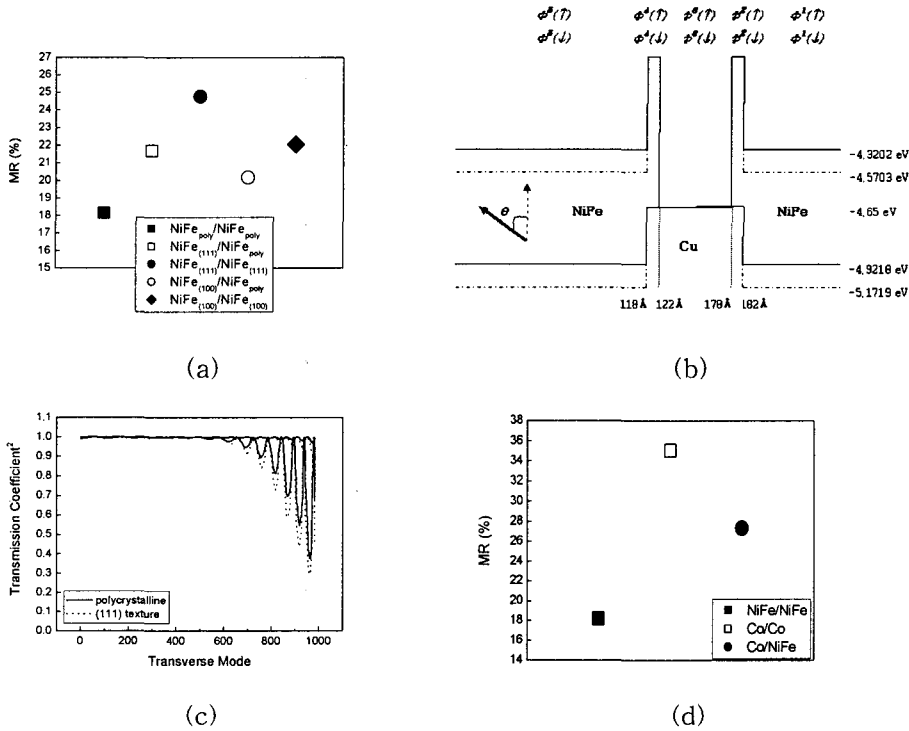
$$\left[\epsilon_s + \frac{(i\eta \nabla_x + eA_x)^2}{2m} + U(x) \right] \Psi(x) = \epsilon \Psi(x)$$

위의 식을 계산하기 위해 평면파를 사용하였고 Cu 의 ϵ_c 는 Work function 으로 결정하였

고 자성재료의 ϵ_c 는 Stoner exchange parameter 에 의해 결정하였고 계면에서의 Contact potential 은 $\left| \epsilon_c^{non-ferro} - \epsilon_c^{ferro,\uparrow} \right|$ 으로 정의하였다. 자성재료의 ϵ_c 에 대한 식은 다음과 같다.

$$\epsilon_c^\uparrow = \epsilon_F - \frac{2\pi\eta^2}{m} \times n_s^\uparrow - \frac{1}{2} \times I, \quad \epsilon_c^\downarrow = \epsilon_F - \frac{2\pi\eta^2}{m} \times n_s^\downarrow + \frac{1}{2} \times I$$

3. 실험결과 및 고찰



그림(a) 은 자성재료의 방향성에 따른 자기저항에 대한 결과로 이로부터 (111) textured NiFe 가 가장 자기저항에 유리하다는 것을 알 수가 있다. 그림(b) 와 그림(c) 로부터 그 이유를 알 수가 있는데, 그림(b) 에서 점선은 (111) textured NiFe 에 대한 potential diagram 이고 실선은 polycrystalline NiFe 에 관한 것이다. Contact potential 의 높이가 (111) textured NiFe 의 경우가 polycrystalline NiFe 의 경우보다 더 높은 것을 볼 수가 있고 이로 인해 그림(c) 에서 mode 가 높은 경우에 나타나는 dip 의 깊이가 Contact potential 이 더 높은 (111) textured NiFe 의 경우에 더 깊게 나타나서 결국 스핀분극이 (111) textured NiFe 의 경우에 더 크게 나타나게 되는 것이다. 자성재료의 방향성에 따른 Contact potential 의 차이는 Work function 의 차이로부터 비롯되었다. 이로부터 자성층과 Cu 층간의 계면에서의 전자구조가 자기저항에 중요한 영향을 미친다는 것을 알 수가 있다. 그림(d) 는 자성재료의 성분에 따른 자기저항에 대한 결과로 이로부터 Co 가 NiFe 보다 자기저항이 더 높다는 것을 알 수가 있다. 이는 Co 의 Stoner exchange parameter 가 NiFe 보다 더 높아서 그로 인해 Co 와 Cu 간의 Contact potential 이 더 높기 때문에 나타나는 현상이다.

4. 참고문헌

- [1] A. Brataas, Y. V. Nazarov and G. E. W. Bauer, Eur. Phys. J. B 22, 99 (2001)
- [2] J. F. Janak, Phys. Rev. B 16, 255 (1977)