

Electronic Structure Calculations on Bismuth Tellurides with the magnetic doping

Tran Van Quang^{1*} and 김미영²

¹아주대학교 물리학과

²아주대학교 에너지시스템학부

비스무스 텔루라이드는 고전적인 열전물질인 동시에 실용적으로도 가장 많이 사용되고 있는 상온 열전소재 응용 물질 중의 하나이다. 최근 Topological Insulator 에 대한 관심과 함께 비스무스 텔루라이드계열 합금, 특히 자성 도핑 된 텔루라이드계 물질에 대한 실험 및 이론적 관심 또한 증가하고 있다.

본 이론연구에서는 전이금속원자로 자성 도핑 된 비스무스 텔루라이드에 대하여 관심을 갖고, 그 원자구조 및 전자구조 변화와 이에 따른 자성 상변화를 알아보기 위하여 범함수론에 입각한 제일원리 전자구조 계산을 수행하였다. 이를 위하여 all-electron FLAPW (Full-potential linearized augmented plane-wave) 방법(1)을 이용한 GGA 교환상호작용 퍼텐셜을 채택하였으며, atomic force 계산을 통해 도핑 후의 원자구조를 최적화하였다. 도핑 된 자성원자가 비스무스 원자를 치환하는 경우와 약한 반데르발스 작용을 하는 두 텔루라이드 원자층 사이의 공간으로 삽입되는 경우의 두 가지 서로 다른 도핑 유형에 대하여 강자성 및 상자성 total energy 계산을 통하여 자성 상변화에 따른 안정성을 연구하였다.

계산을 통하여 두 가지 서로 다른 도핑 유형 모두에 대하여 강자성상태가 상자성상태보다 에너지적으로 더욱 안정된 상태임을 보았으며, 그 안정성은 자성물질이 비스무스를 치환하여 들어간 도핑의 경우에 더욱 강화됨을 알 수 있었다. 또한 텔루라이드 원자 층 사이로 삽입되어 들어간 도핑의 경우와 비교하여, 치환된 도핑의 경우에 자성원자의 스핀자성모멘트가 40% 정도 크게 향상되는 것으로 나타났다.

이 연구는 한국연구재단의 일반연구지원사업의 지원을 받아 수행된 연구임 (2011-0005887).

References

- [1] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B 24, 864 (1981).