

스핀-궤도 각운동량 상호작용의 구조 최적화에 대한 효과; 비스무스 텔루라이드의 제일원리 계산의 경우

Tran Van Quang

아주대학교 물리학과, 경기 수원시 원천동 산 5-1, 443-749

김미영*

숙명여자대학교 나노물리학과, 서울시 용산구 청파로 47길, 140-742

(2012년 11월 21일 받음, 2013년 2월 5일 최종수정본 받음, 2013년 2월 5일 게재확정)

스핀 궤도 각운동량의 상호작용은 저차원계 자성물질에서 나타나는 여러 가지 특이한 현상들의 물리적 원인을 제공하는 것으로 알려져 있다. 최근 들어 자성 도핑을 이용한 열전 물질의 합성에 대한 관심이 높아지면서, 열전 및 위상 절연체(Topological Insulator) 등의 물리적 성질 결정에 중요한 역할을 하는 페르미 에너지 준위 부근에서의 전자구조에 대한 스핀 궤도 각운동량의 효과 연구가 관심을 끌고 있다. 본 연구에서는 가장 일반적인 열전 호스트 물질인 비스무스 텔루라이드의 격자 상수 및 부피 팽창률에 대한 스핀 궤도 각운동량 상호작용의 효과를 연구하기 위하여 모든 전자(all-electron) FLAPW(full-potential linearized augmented plane wave) 방법을 이용하여 전자구조 계산을 수행하였다. 국소밀도 근사법 및 일반 기울기 보정법의 서로 다른 교환상호작용 퍼텐셜을 채용하고, 수평격자 및 수직격자를 분리하여 변화시키는 구조최적화 계산을 통하여, 스핀-궤도 각운동량 상호작용의 효과가 격자상수 팽형 값을 약하게 증가시키는 반면, 부피탄성률을 크게 감소시키는 영향을 주며, 그 효과는 구조적 이방성이 뚜렷한 비스무스 텔루라이드의 특성에 의하여 격자방향에 대한 의존성을 보인다는 것을 확인했다.

주제어 : 스핀 궤도 각운동량 상호작용, 열전성질, 전자구조 계산

I. 서 론

열전효과(thermoelectric effect)의 물리적 메커니즘과 그 응용을 통해 일상에서 소모되는 열에너지를 전기에너지로 전환하여 사용할 수 있는 가능성이 알려진 것은 수십 년 전의 일이지만, 최근 들어서 탄소 저감 및 그린 에너지에 대한 관심과 맞물려서 고효율 열전 물질의 개발 및 그 실제 응용을 위한 이론 및 실험 연구가 더욱 많은 관심을 끌고 있다. 물질의 열전 성능을 나타내는 열전 감도 지수(figure of merit)인 ZT 값은 $ZT = S^2\sigma T / (\kappa_L + \kappa_e)$ 로 계산할 수 있으며, 따라서 물질의 전기전도도(σ), 열전도도의 격자적 및 전기적 기여($\kappa_L + \kappa_e$) 및 Seebeck 계수(S) 등에 의존하여 결정된다[1]. 물질의 전기 전도도와 열전도도는 밀접하게 연결되어 있어서 동시에 증가하거나 감소하는 경우가 일반적이므로, 열전 성능을 증가시키기 위해 전기전도도를 증가시키면서 낮은 열전도도 값을 유지시키는 물질을 디자인 하기 위해 이론과 실험 양쪽 분야에서 많은 노력이 있어왔다. 그 일환으로서 전도의 방향에 수직으로 서로 다른 물성의 물질을 교대로 쌓아서 형

성된 초격자 구조를 이용하여 포논막음/전자투과(phonon-blocking/electron transmission) 기작을 이용하는 여러 형태의 연구가 보고되어, 300 K 온도에서 p -형 반도체인 $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 초격자 물질로부터, 고전적인 열전물질인 비스무스 텔루라이드의 열전 감도 지수($ZT \sim 1.0$)의 2~3배의 ZT 값이 보고되기도 하였으나 열적 안정성 등의 기술적인 문제로 인하여 실용화되지 못하고 있는 실정이다[2]. 특히 $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 초격자 구조에 대한 제일원리 계산은 열전 성질의 기작을 설명하는데 있어서 초격자를 이루는 성분 물질의 격자 상수 부 조합에 따른 변형이 중대한 영향을 준다는 것을 보임으로써 텔루라이드 계열의 열전 성질 계산에 있어서 구조 최적화의 역할이 중요함을 보고하고 있다[3].

한편 고효율 열전물질 개발에 대한 노력은 자성 도핑을 이용한 연구로도 이어지고 있다. Fe, Co, Mn 등의 전이금속 도핑된 비스무스 텔루라이드 및 셀레나이드 합금에서의 강자성 상태의 안정화에 대한 보고와 함께 3차원 체적 위상 절연체(Topological Insulator)의 전형적인 디랙 형태(Dirac-like)의 전도 전자 구조를 갖는다는 최근 일련의 연구결과들은 자성 도핑된 열전 물질에 대한 관심을 더욱 증가 시킨 바 있다[4-10]. 전이금속 도핑에 비하여 희토류 물질의 도핑에 의한 열전 물질의 전자구조 및 자성 상변화에 대한 연구는 상대적으로

로 미미한 형편인데, 특히 강하게 국소화되어있는 f 전자띠로 인해 기존의 자성물질에서 보여온 특성을 고려할 때 열전 성질 및 이에 의한 페르미 에너지 준위에서의 전자구조에 대한 영향은 흥미로운 주제가 아닐 수 없다. 강한 자성이방성 및 큰 자기모멘트 등의 고유한 자기적 특성과 함께, 희토류를 통한 자성도핑의 경우 도핑 원자의 큰 사이즈로 인하여 호스트 물질의 대체 원자 종류에 따라 기존 물질의 구조 및 격자 상수의 변화가 크게 나타나고, 이에 따른 새로운 물리적 현상을 보이는 것이 보고되어, 희토류 도핑 열전물질의 연구에서도 역시 합금의 정확한 최적 구조를 얻는 것이 중요한 요인임을 확인하고 있다[11, 12].

이에 우리의 연구에서는, 상온 작동 고효율 열전 물질 개발의 기본 재료가 되고 있는 비스무스 텔루라이드(Bi_2Te_3)를 호스트로 한 열전 물질 연구에 있어서 구조 최적화의 중요성에 주목하고, 스핀-궤도 각운동량 상호작용이 최적 격자 상수 및 부피 탄성률 등의 구조관련 물성에 미치는 영향에 대한 연구를 목적으로 제일원리 전자구조 계산을 수행하였다.

II. 연구방법 및 모형

Bi_2Te_3 는 실험적으로 162 meV로 알려진 작은 에너지띠 틈 (energy band gap)값과 다중의 전도띠극대점/바깥띠극소점 (conduction band minimum/valence band maximum) 구조를 갖는 절연체이다[12]. 밀도범함수법(DFT; Density functional Theory) 기반의 제일원리 계산을 통해 실험값에 유사한 에너지띠 틈값과 전자구조를 얻기 위해서는 금속성 및 가벼운 원자들로 이루어진 광범위한 물질들을 효과적으로 기술해 온 국소밀도 근사법(LDA; local density approximation)을 뛰어넘는 보완적인 교환상호작용 퍼텐셜 및 스핀-궤도 각운동량 상호작용을 도입하는 것이 필요하다는 것이 알려져 있다[14, 15]. 이러한 보완적인 교환상호작용 퍼텐셜은 에너지띠 틈값 뿐만 아니라 열전성질 결정에 중요한 요인이 되는 페르미 에너지 준위 근처에서의 에너지띠 위상 특성에도 영향을 주는 것으로 나타났으나, 이러한 변화는 실제 열전성질 계산에서는 결정적인 변화를 주지 않음으로 인하여, 복잡한 열전물질의 경우, 보완 퍼텐셜 대신 강에너지띠근사(rigid-band approximation) 내에서 전도 에너지띠 이동으로 에너지띠 틈값을 실험값에 근사시킨 후 계산하기도 한다. 본 연구에서도 구조 최적화와 그에 따른 최적 격자 상수 및 부피 탄성률의 스핀-궤도 각운동량 상호작용의 의존성에 연구의 주된 목적이 있으므로, 정확한 에너지띠 틈값을 얻기 위한 보완 퍼텐셜은 채택하지 않았으며 대신하여 가장 일반적인 두가지 교환상호작용 퍼텐셜인 국소밀도 근사법과 PBE형 일반기울기 근사법(GGA, generalized gradient approximation)[16]을 채택하여 비교하

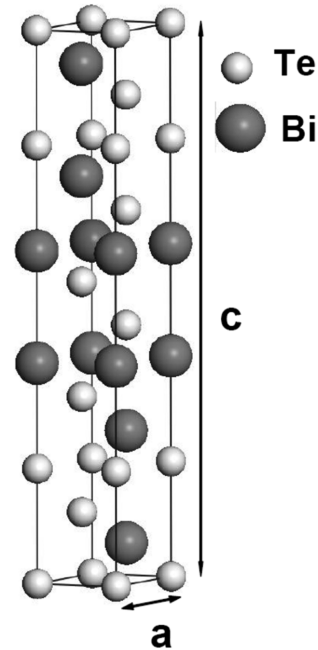


Fig. 1. The atomic structure of Bi_2Te_3 with five atoms in its hexagonal unit cell with the in-plane and the perpendicular lattice constant, a and c , respectively.

였다.

Bi_2Te_3 는 한 단위셀 당 다섯 개의 원자를 가진 삼방정계 (trigonal) 격자구조를 가지고 있으며 Fig. 1에서 보인 바와 같이 육방격자(hexagonal lattice)로 나타내었을 때 수평격자상수(in-plane lattice constant) a 와 수직격자상수(perpendicular lattice constant) c 의 실험값은 각각 원자단위(atomic unit)로 $a = 8.28$ a.u.와 $c = 45.56$ a.u.로 알려져 있다[17]. 본 연구에서는 전자구조 계산과 구조 최적화를 위하여 FLAPW(full-potential augmented plane-wave) 방법[18]을 이용하였다. Bi 원자와 Te 원자의 머핀 틴(MT, muffin tin) 구 영역으로서는 핵을 중심으로 각각 3.0 및 2.4 a.u. 반지름을 갖는 원으로 잡고, 이 MT 영역 안에서의 구면조화함수는 $L_{max} = 8$ 의 각운동량 절단값을 채택하여 계산하였으며, 그 밖의 격자틈새(interstitial) 영역에서의 보강평면파는 원자당 약 200개의 기저 함수를 사용하도록 하는 에너지 차단값을 사용하였다. 핵심 전자들은 디락 방정식을 직접 풀어냄으로써 완전 상대론적으로 취급하는 한편 원자가전자들은 준상대론적으로 취급한 후, 제 2 변분법적 접근법(second variational approach)을 사용하여 스핀-궤도 각운동량의 상호작용을 자체 충족적인 되풀이법으로 포함하는 방식으로 계산하였다. 격자상수의 평형 값을 결정하기 위하여 각 격자상수 값에 대하여 원자적 힘 계산을 통하여 원자의 평형위치를 얻었으며 이렇게 얻어진 총 에너지 계산 값을 최소화 하여 격자 상수 평형 값을 얻었다. 결과 및 논의 부분에서 자세히 설명하였듯이 부피탄성률을 계

산하기 위하여 부피변화의 함수로 얻은 총에너지 계산값에 Murnaghan fitting을 적용하여[19, 20] 부피탄성률을 부피의 함수로 얻고 부피의 실험값 및 최적화 계산을 통한 부피의 이론값을 각각 부피 평형값으로 채택한 계산을 수행하여 그 차이를 비교하였다.

III. 결과 및 논의

격자 상수의 평형값의 결정을 위한 국소밀도 근사법에 의한 총에너지 계산 결과를 2차원 에너지 등가선으로 얻어 Fig. 2에 나타냈다. 그림의 (a)에는 스핀-궤도 각운동량 상호작용(SOC)을 포함되지 않은 계산 결과를, (b)에는 스핀-궤도 각운동량 상호작용이 포함된 계산 결과를 보였으며 계산 값과의 비교를 위하여 실험값에 해당하는 위치를 함께 표시하였다. 에너지 등가선의 2차원 최소점에 해당하는 부분의 x축과 y축

값이 각각 계산으로 얻어진 격자 상수 a 와 c 값의 평형 값에 해당하며, 그 값들을 Table I에 나열하였다. 그림에 나타난 LDA와 함께 GGA에 의한 계산도 수행하였으며 그 평형값을 역시 Table I에 함께 보였다. 일반적으로 GGA는 LDA에 비하여 큰 격자상수 평형값을 주고 있는 것으로 알려졌는데 우리의 결과에서도 역시 같은 경향성이 보이고 있으며, 그 결과 LDA가 실험값에 비하여 과소평가하고 있는 수평격자상수 계산 값을 GGA는 매우 근사하게 기술하고 있음을 보이는 반면, LDA가 실험값을 매우 잘 기술하고 있는 수직격자상수의 경우, GGA에 의한 격자상수 증가효과는 실험값에서 0.03% 더 멀어지는 결과를 주고 있다. 한편 이 연구의 주된 관심사인 SOC 효과를 살펴보기 위하여 SOC가 포함되지 않은 계산값과 비교해 보면, SOC가 수평 및 수직 격자상수 값을 모두 약 0.2~0.8%씩 약하게 증가시키는 효과를 준다는 사실을 확인할 수 있다. 한편 Fig. 2로부터 SOC에 의한 격자상수 증가 효과는 수평격자상수에 비하여 수직격자상수에서 상대적으로 더 크다는 것을 알 수 있으며, 이것은 SOC에 의한 격자상수 증가 효과가 방향에 따른 이방성을 갖는다는 것을 나타낸다.

한편 격자상수를 변화시키면서 총에너지 계산 결과를 부피 변화에 대한 이차함수로 근사하고 이차항의 계수를 계산함으로써 부피탄성률(Bulk modulus)을 얻을 수 있다. 그러나 여기에서는 소위 Murnaghan 근사로 알려진 더 복잡한 방법을 사용하여 부피탄성률을 구하였으며 그 결과를 Table II에 보였다. 이 계산을 위하여 수평격자상수 및 수직격자상수 중 하나의 값을 실험값 또는 국소밀도 근사법에 의한 평형값으로 고정시킨 후 다른 하나의 상수를 변화시키는 방법으로 격자의 부피를 변화시키면서 SOC를 포함한 경우와 포함하지 않은 경우의 총 에너지를 부피의 함수로 계산하였으며, 그 중

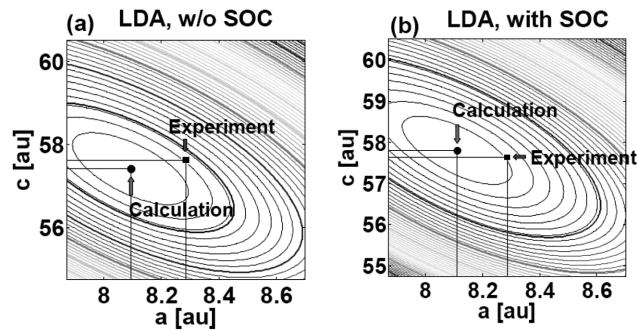


Fig. 2. The contour plot of the total energies as the function of lattice constants, a and c , in the local density approximation (a) with and (b) without spin-orbit coupling (SOC) interaction. The x and y coordinates of the filled square points show the experimental lattice constants, a_{exp} and c_{exp} , and those of the filled circle points stand for our calculated equilibrium lattice constants, a_{LDA} and c_{LDA} .

Table I. Comparison of the experimental and the calculated in-plane(a) and perpendicular(c) lattice constants in a.u. within the local density approximation and the generalized gradient approximation, with and without spin-orbit coupling interactions for the valence electrons.

	LDA		GGA		Experiment [13]
	Without SOC	With SOC	Without SOC	With SOC	
a (a.u.)	8.09	8.11	8.27	8.33	8.29
c (a.u.)	57.42	57.81	58.77	59.12	57.63

Table II. Calculated bulk modulus B in GPa in LDA, with and without SOC, when the volume is fixed to the experimental value, V_{exp} , or the theoretically optimized value, V_{opt} , in LDA. Experimental values as well as other calculational results are also given for the comparison. Results of two different fittings for total energy curve, which are the Murnaghan [19, 20] and the quadratic fittings, are given by B_{Mur} and B_{qdr} , respectively.

	LDA with SOC	LDA w/o SOC	LDA with SOC	LDA with/o SOC	Experiment [21]	Other calculations [21]
	(V_{exp})	(V_{exp})	(V_{opt})	(V_{opt})		
B_{Mur} (GPa)	35.9	37.0	37.5	41.7	39.5	34.4, 37.3
B_{qdr} (GPa)	35.5	36.3	35.7	37.5		

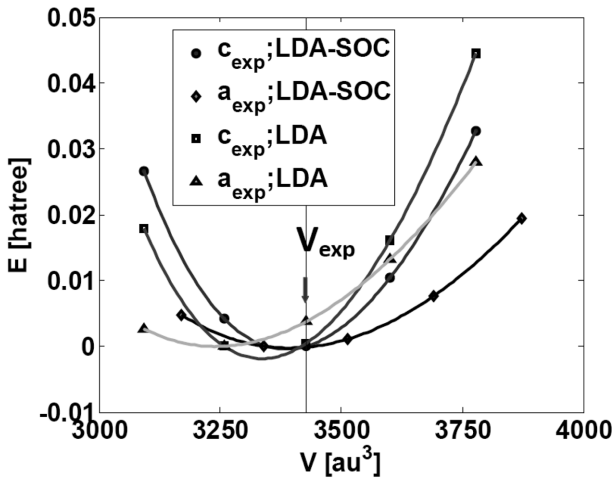


Fig. 3. The LDA total energy calculations as the function of volume; with the in-plane lattice constant fixed while the perpendicular lattice constant is varying (diamond and triangle data points, indicated by a_{exp}) and vice versa (circle and square data points, indicated by c_{exp}) with (indicated by LDA-SOC) and without SOC (indicated by LDA). The experimental volume is also shown for comparison.

실험값으로 고정시키며 계산한 결과를 Fig. 3에 나타냈다. 그림에 나타낸 각 계산에서 총 에너지의 최소값을 주는 부피 값은 각 격자부피의 평형값을 나타낸다. 계산 결과와 함께 실험값(V_{exp})과 비교했을 때, 수평격자상수를 고정시키고 수직격자상수 값을 변화시키며 SOC를 포함하여 계산한 격자부피 평형값(그림의 마름모꼴 데이터 값에 해당)이 실험값에 가장 근사한 결과를 주는 것을 알 수 있다. 위에서 살펴보았듯이 스핀-궤도 각운동량 상호작용은 격자상수를 증가시키는 역할을 하므로 이에 따른 격자부피 평형값 역시 증가하게 되는데, 이는 그림의 결과에 잘 나타나고 있다. 이러한 효과는 수평 격자상수를 고정시키고 수직격자상수 값을 변화시킨 계산(그림의 마름모와 세모꼴 데이터를 비교)에서 더욱 뚜렷이 나타나며, 수직격자상수를 고정시키고 수평격자상수 값을 변화시킨 경우(그림의 네모와 원형 데이터 점을 비교)에서는 그 효과가 상대적으로 작게 나타나고 있어서 앞에서 살펴본 Fig. 2에서의 결과와 일치한다는 것을 알 수 있다. 반면 부피에 대한 이차곡선으로 근사되는 에너지 곡선의 곡률은 부피탄성률에 비례하여 증가하는 효과를 기대할 수 있는데, 수직격자상수를 고정하고 수평격자상수 값을 변화시킨 두 계산에서 그 반대의 경우보다 에너지 곡선의 곡률이 더 크게 나타나는 것을 뚜렷하게 볼 수 있다. 이렇게 방향에 따라 크게 다른 거동을 보이는 부피탄성률은 비스무스 텔루라이드의 강한 이방적 원자구조 특성에 기인한다고 이해할 수 있다.

한편 스핀-궤도 각운동량 상호작용에 따른 총 에너지 곡선의 곡률 변화는 그 차이를 뚜렷이 확인하기 어려우므로 정확한 계산을 통해 비교해야 할 것이다. 이를 위하여 위에서 설

명한 두 가지 서로 다른 방법으로의(즉, 수평격자상수 또는 수직격자상수 증가에 의한) 부피증가에 대해 계산한 총에너지 곡선을 각각 Murnaghan 함수로 근사하여 수평 또는 수직 방향의 부피탄성률을 각각 얻은 후에 그 평균값을 계산함으로써 부피탄성률을 결정하여 그 결과를 Table II에 나타내었다(B_{Mur}). 여기에는 Fig. 3에서와 같이 실험 격자상수 값을 평형값으로 이용하여 얻은 결과(V_{exp} 로 표시)와 함께 LDA에 의한 격자상수 평형값을 이용하여 얻은 결과(V_{LDA} 로 표시)를 함께 나타냈다. 한편, 비교를 위하여 일반적으로 널리 채택하고 있으나 상대적으로 더 거친 근사라고 할 수 있는 이차함수로의 에너지 곡선 근사와 이차항 계수를 통한 부피탄성률 계산 결과도 함께 보였다(B_{qdr}). B_{Mur} 계산에 있어서, 여기에 보이지는 않았으나, 수직 격자 상수를 고정시킨 부피변화에 따른 에너지 곡선을 통해 얻은 부피팽창률 값은, 수평 격자를 고정시키고 수직 격자를 변화시키면서 얻은 부피팽창률에 비해 두 배가 넘는 큰 값을 주는 것으로 계산되어, 비스무스 텔루라이드에서의 부피팽창률이 팽창방향에 크게 의존하는 이방성을 뚜렷이 볼 수 있었다.

위의 Fig. 3에 보인 총에너지 곡선에서는 뚜렷이 관측하기 어려웠으나, Table II에 나타난 계산 값을 비교해 보면 SOC를 채용할 경우 부피탄성률이 감소하는 효과를 가져온다는 것을 알 수 있다. 격자부피의 실험값에서 부피탄성률을 계산할 경우(V_{exp} 로 표시된 결과) SOC를 고려하지 않으면 실험값(39.5 GPa[21])에 비하여 6%가 더 작은 값이 얻어지는데, 여기에 SOC 효과를 넣어주면 부피탄성률이 더욱 감소하게 되고 그 결과 실험값에 비하여 약 9% 정도 더 작은 값을 얻게 되었다. 국소밀도 근사법의 평형 부피 값을 사용할 경우(V_{opt} 로 표시된 결과) 부피탄성률은 SOC를 고려하지 않으면 41.7 GPa로서 실험값에 비하여 5% 더 큰 값을, SOC의 효과를 고려할 경우 그 부피팽창률이 37.5 GPa까지 크게 감소하여 실험값보다 5% 작은 값을 각각 얻게 된다. 이 경우 SOC 효과는 수평격자 상수를 고정시키고 격자에 수직방향의 압력에 의한 부피변화와 그 반대의 경우 각각 부피팽창률에 13% 및 8%의 감소 효과를 주는 것으로 계산되어, SOC에 의한 부피팽창률 감소효과 역시 뚜렷한 격자 이방성을 나타냈다.

한편, Table II에는 보다 일반적이고 거친 이차곡선 근사에서 이차항의 계수 계산을 이용한 부피탄성률 계산 결과를 나타내었다. 이를 Murnaghan 함수로 근사한 결과와 비교해보면 전체적인 경향성, 즉, 스핀-궤도 각운동량 상호작용에 의한 부피탄성률 감소 효과와 그로 인해 실험값과의 차이가 더 커지는 효과는 B_{Mur} 과 B_{qdr} 양쪽에서 공통으로 관찰되고 있으며, 그 부피탄성률 감소의 정도는 B_{Mur} 에서 더 크게 나타나는 것을 알 수 있다. 부피 평형값의 실험값을 채용하는 것보다

는 이론값을 채용하는 것이, 그리고 일반적인 이차곡선 근사 보다는 Murnaghan fitting을 이용하는 것이 실험값에 더 가까운 부피탄성률을 주며, 여기에 보이지는 않았으나 근사곡선에 대한 계산 데이터 값의 표준편차를 통해서도 Murnaghan fitting이 본 물질의 최적결정성질 계산 결과에 더 알맞은 근사임을 알 수 있다.

IV. 결론 및 요약

전형적인 열전 재료의 하나로서 최근 들어 다양한 자성 도핑 합금의 호스트로 연구되고 있는 Bi_2Te_3 의 격자상수 및 부피탄성률의 제일원리 계산을 통한 결과에 스핀-궤도 각운동량 상호작용이 미치는 효과에 대하여 연구하였다. 국소밀도 근사법과 일반기울기 근사법 두 경우 모두에서 스핀-궤도 각운동량 상호작용은 수평과 수직 격자상수를 모두 약하게 증가시키는 효과를 주는 것으로 나타났으며 그 효과는 수직 격자상수에서 상대적으로 더 뚜렷하게 보였다. 부피 탄성률은 격자의 부피변화가 수직 격자 상수에 의한 경우와 수평 격자 상수에 의한 경우에서 크게 다르게 나타났는데 Bi_2Te_3 의 뚜렷한 구조적 이방성으로 인하여 후자의 경우에 전자에 비해 두 배 이상의 부피탄성률 값을 갖는 것으로 계산되었다. 스핀-궤도 각운동량 상호작용의 효과는 부피탄성률을 크게 감소시키는 결과로 나타났으며, 이러한 효과 역시 방향 의존성을 보여서, 수직 격자 변화에 의한 부피탄성률 계산에서 더욱 뚜렷이 나타나는 이방성을 보였다. 국소밀도 근사법에 의한 총에너지 곡선으로부터 Murnaghan fitting으로 계산된 부피탄성률 값은 스핀-궤도 각운동량 상호작용을 고려하여 계산하였을 때 실험값에 비하여 약 5% 정도 축소 평가된 결과로서, 이는 에너지 곡선의 이차식 근사를 통한 계산보다 실험값을 더 잘 기술하는 것으로 나타났다.

감사의 글

이 연구는 교육과학기술부 산하 한국연구재단의 일반연구

자 지원사업(NRF-2012-0004354)의 지원을 받아 수행되었다.

참고문헌

- [1] G. J. Snyder and E. S. Toberer, *Nature Mater.* **7**, 105 (2008).
- [2] D.-Y. Chung, T. Hogan, P. Brazis, M. Rocci-Lane, C. Kannewurf, M. Bastea, C. Uher, and M. G. Kanatzidis, *Science* **287**, 1024 (2000).
- [3] M. S. Park, J. H. Song, J. E. Medvedeva, M. Kim, I. G. Kim, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **81**, 155211 (2010).
- [4] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, and B. O'Quinn, *Nature* **413**, 597 (2001).
- [5] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **76**, 045 (2007).
- [6] J. Moore, *Nature Phys.* **5**, 378 (2009).
- [7] J. Zaanen, *Science* **323**, 888 (2009).
- [8] R. Yu, W. Zhang, H. Zhang, S. Zhang, X. Dai, and Z. Fang, *Science* **329**, 61 (2010).
- [9] Q. Liu, C. Liu, C. Xu, X. Qi, and S. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 156603 (2009).
- [10] M. Kim and J.-H. Song, *J. Appl. Phys.* **111**, 07E307 (2012).
- [11] F. Hulliger and T. Siegrist, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter and Quanta* **35**, 81 (1979).
- [12] C. G. Duan, R. F. Sabiryanov, J. Liu, W. N. Mei, P. A. Dowben, and J. R. Hardy, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 237201 (2005).
- [13] B. M. Golts'man et al., *Thermodynamic Semiconductor Material Based on Bi_2Te_3* , US National Technical Information Center (1973).
- [14] M. Kim, A. J. Freeman, and C. B. Geller, *Phys. Rev. B* **72**, 035205 (2005).
- [15] S. J. Youn and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **63**, 085112 (2001).
- [16] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [17] A. Adam, *Materials Research Bulletin* **42**, 1986 (2007).
- [18] E. Wimmer, K. Krakauer, M. Wienert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **24**, 864 (1981).
- [19] F. D. Murnaghan, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **30**, 244 (1944).
- [20] C. L. Fu and K. M. Ho, *Phys. Rev. B* **28**, 5480 (1983).
- [21] Bo Qiu and Xiulin Ruan, *Phys. Rev. B* **80**, 165203 (2009).

Spin-orbit Coupling Effect on the Structural Optimization; Bismuth Telluride in First-principles

Tran Van Quang

Dept. of Physics, Ajou University, Suwon 443-749, Korea

Miyoung Kim*

Dept. of Nano Physics, Sookmyung Women's University, Seoul 140-742, Korea

(Received 21 November 2012, Received in final form 5 February 2013, Accepted 5 February 2013)

Spin-orbit coupling (SOC) effect is known to be the physical origin for various exotic magnetic phenomena in the low-dimensional systems. Recently, SOC also draws lots of attention in the study on magnetically doped thermoelectric alloys to determine their properties as the thermoelectric application as well as the topological insulator via the exact electronic structures determination near the Fermi level. In this research, aiming to investigate the spin-orbit coupling effect on the structural properties such as the lattice constants and the bulk modulus of the most widely investigated thermoelectric host material, Bi_2Te_3 , we carried out the first-principles electronic structure calculation using the all-electron FLAPW (full-potential linearized augmented plane-wave) method. Employing both the local density approximation (LDA) and the generalized gradient approximation (GGA), the structural optimization is achieved by varying the in-plane lattice constant fixing the perpendicular lattice constant and vice versa, to find that the SOC effect increases the equilibrium lattices slightly in both directions while it markedly reduces the bulk modulus value implying the strong orientational dependence, which are attributed to the material's intrinsic structural anisotropy.

Keywords : spin-orbit coupling effect, thermoelectric, electronic structure calculation