

Cr₂Te₃에서 쿨롱 상관효과의 크기와 자기모멘트 크기의 계산

윤석주*

경상대학교 사범대학 과학교육학부 물리전공 및 기초과학연구소, 경남 진주시 가좌동 900, 660-701

권세균

POSTECH 화학과 기능성분자계 연구단, 경북 포항시 남구 효자동 산31, 790-784

(2006년 4월 4일 받음, 2006년 4월 13일 최종수정본 받음)

자기구조가 복잡한 것으로 알려져 있는 Cr₂Te₃의 전자구조와 자기구조를 이론적 방법으로 연구하였다. LDA+U 방법에 의해 Cr-d 전자의 상관효과를 고려해서 계산하면 전자의 상태밀도와 자기모멘트가 국소밀도근사(LDA)에 의한 것보다 실험과 더 잘 일치하는 것을 보였다. 이 과정에서 Cr₂Te₃에서 Cr-d 전자의 상관효과의 크기 U=1.7 eV를 구했다. Cr₂Te₃의 강자성 상태와 준강자성 상태의 에너지가 같아서 축퇴된다면 실험에서 알려진 Cr의 자기모멘트를 설명할 수 있음을 보였다.

주제어 : Cr₂Te₃, 전자구조 계산, 자기모멘트, LDA+U

I. 서 론

Cr₂Te₃는 강자성체로서 큐리온도가 $T_C=183$ K이고 Cr이 대부분의 자기 모멘트를 가지고 있다[1]. Cr₂Te₃는 Cr_{1- δ} Te₃계 화합물의 일종으로 볼 수 있는데 여기서 δ 는 부족한 Cr을 나타낸다. Cr_{1- δ} Te₃계 화합물은 금속성이고 강자성을 보이는데, CrTe($\delta=0$), Cr₅Te₆($\delta=0.17$), Cr₃Te₄($\delta=0.25$), Cr₂Te₃($\delta=0.33$), Cr₅Te₈($\delta=0.375$), CrTe₃($\delta=0.67$) 등이 알려져 있다[2]. 이 중에서 Cr₂Te₃는 자기구조가 상대적으로 복잡하다는 것이 알려져 있는데 현재도 자기구조가 명확하게 밝혀져 있지 않다. 쉐 자기장에서도 자기화는 잘 포화되지 않으며, 큐리 온도와 자기화가 외부에서 가해진 압력에 따라 민감하게 변하는 것으로 알려졌다[3, 4].

Fig. 1은 Cr₂Te₃의 결정구조를 보여주는데 CrTe 결정을 바탕으로 이해할 수 있다. CrTe 결정은 NiAs과 같은 육방정계(hexagonal) 구조로서 Cr₁-Te₁-Cr₂-Te₂층이 c-축 방향으로 반복되는 구조이다. Cr₂Te₃는 CrTe의 반복 단위가 2배로 커진 모양을 하고 있는데, Fig. 1에 나타낸 것과 같이 단위세포(unit cell)를 옆에서 보면 Cr₁-Te₁-Cr₂-Te₂-Cr₃-Te₃-Cr₄-Te₄이 c-축 방향으로 반복되는 모양이다. 이때 Cr₁ 층과 Cr₃ 층에는 Cr 자리가 Cr_{II}와 Cr_{III}로 채워지지만, Cr₂ 층과 Cr₄ 층에는 빈자리가 생겨서 Cr_I과 빈자리 Empty_I과 Empty_{II}로 채워져 있다. 자기적 성질을 결정하는 Cr만을 살펴보면 Cr으로 완전히 채워진 층과 텅 찬 층이 교대로 나타난다. CrTe 결정의 격자상수를 a_0 와 c_0 라 하면 Cr₂Te₃의 격자상수는 $a \approx \sqrt{3} a_0$,

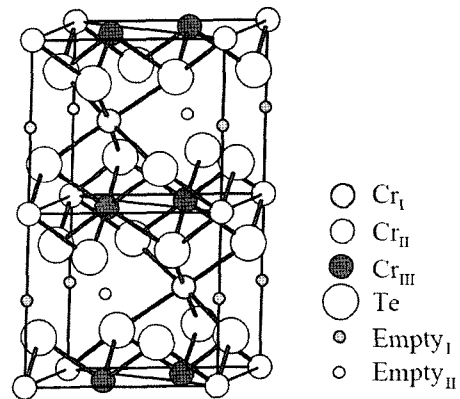


Fig. 1. Hexagonal crystal structure of Cr₂Te₃.

$c \approx 2c_0$ 로 나타낼 수 있다. 그렇지만 Cr 빈자리로 인하여 c-축 방향으로 압축된 구조를 보이는데, c_0/a_0 비가 1.498로서 이상적인 hcp에서의 값 $\sqrt{8/3}=1.633$ 보다 작다. Fig. 1의 결정 구조를 보면 Cr_{II}과 Cr_{III} 원자는 서로 가까이 있으면서 자기적으로 강한 상호작용을 할 것이 예상되지만, Cr_I 원자는 가장 가까운 이웃원자가 Te이고 그 다음으로 Cr_{III}가 있어서 다른 원자와의 자기결합이 약할 것이 기대된다. 실제 우리의 계산결과에서도 Cr_I의 결합이 약한 것으로 나타났다.

Cr₂Te₃의 이온 모형에 의하면 Cr은 Cr³⁺ 상태에 있고 Te는 Te²⁻ 상태에 있어서 Cr의 자기모멘트는 $3 \mu_B$ 를 가질 것이 기대된다. Dijkstra 등에 의한 전자구조 계산 결과에 의하면 Cr_I, Cr_{II}, Cr_{III}의 자기모멘트가 3.28, 3.29, 3.32 μ_B 로서 이온 모형에서와 비슷한 결과를 얻었다[5]. 그렇지만 중성자 산란 실험에 의하면 Cr₂Te₃가 준강자성(ferrimagnetic)인 결과를 얻

*Tel: (055) 751-5651, E-mail: ysj@gnu.ac.kr

었는데, Cr_I, Cr_{II}, Cr_{III}의 자기모멘트가 각각 -0.14, 2.78, 2.53 μ_B 로서 이론 모형에 의한 값보다 작은 값을 보인다[6]. Cr의 포화 자기모멘트도 2.48 μ_B 로서 이론치보다 작다[4]. 이렇게 이론과 실험이 다른 것에 대해 Dijkstra 등은 자기모멘트들이 비-일직선(non-collinear) 자기화를 가지는 것으로 보였다.

한편 광전자 방출(photoemission) 실험[2, 7], X-선 흡수분광학(x-ray absorption spectroscopy) 실험[8], 광학 반사율 측정 실험[1]에서는 Cr 전자들이 가진 상관효과(correlation effect)를 고려해야할 필요성이 제기되었다. 예를 들어 광전자 방출실험에서 얻어진 전자의 상태밀도가 국소밀도근사(LDA, local density approximation)[9]에 의해 이론적으로 얻어진 것과 결합에너지(binding energy) 2~4 eV에서 차이가 나는 것은 상관효과에 의한 것으로 알려졌다. 지금까지 알려진 Cr₂Te₃의 에너지띠 계산에서는 Cr 전자의 상관효과를 고려하지 않았고 상태밀도나 자기모멘트가 실험치와 맞지 않았다. 우리는 LDA+U 방법을 이용하여 상관효과를 고려하여 전자 구조와 자기구조를 계산하였다. 계산결과 얻어진 상태밀도를 광전자 방출실험과 비교하여 Cr 전자들 사이의 상관효과 크기 U를 구할 수 있고, 실험으로 얻어진 Cr의 자기모멘트를 설명할 수 있음을 보일 것이다.

II. 계산 방법

Cr₂Te₃의 전자구조와 자기 구조는 밀도범함수 이론에 바탕한 LMTO-ASA(linear muffin-tin orbital-atomic sphere approximation)방법을 이용하였다[10]. 다전자계의 교환-상관 효과는 국소밀도근사의 일종인 Barth-Hedin 형식을 사용하였다[11]. k-공간에서의 적분을 위해서는 128개의 k-point를 골라서 선형사면체 방법을 이용하여 적분하였다[12]. 전자구조 계산에서는 온도효과를 고려하지 않았으므로 원자들의 좌표는 낮은 온도에서 구해진 실험치를 사용하였는데 a=6.823 Å, c=11.800 Å이다[6]. Cr_I, Cr_{II}, Cr_{III}의 머핀-틴 구(muffin-tin sphere) 반경은 모두 1.29 Å으로 같은 크기를 사용하였고, Te는 1.94 Å을 사용하였다. Empty_I과 Empty_{II} 자리는 Cr의 빈 자리이므로 Cr과 같은 반경의 머핀-틴 구를 사용하였다. Cr과 Te 자리의 파동함수는 각각 4s, 4p, 3d와 5s, 5p, 5d 궤도함수를 기저로 사용하였고 Empty_I과 Empty_{II}에서는 1s, 2p 궤도함수를 기저로 사용하였다. 상관효과를 고려할 때에는 LDA+U 방법에 의해 계산하였다[13-15]. LDA+U 계산에서 F^4/F^2 의 값이 필요한데 이것은 $F^4/F^2=0.625$ 로 고정하였다. 여기서 F^2 와 F^4 는 2차와 4차 Slater 적분을 나타낸다[16]. U 값은 1.7~3.0 eV 사이의 값 중에서 광전자방출 실험과 봉우리의 위치가 잘 일치하도록 정하였으며, 교환상호작용 J의 크기는 0.89 eV로 고정하였다.

III. 결과 및 고찰

Fig. 2은 LDA 계산에 의해 얻어진 강자성 Cr₂Te₃에서 Cr-d 전자의 상태밀도를 보여준다. Cr₂Te₃에서 Cr 원자들은 Te에 팔면체속에 놓여 있으므로 d 궤도의 전자들은 t_{2g} 와 e_g 띠로 나뉘지며, t_{2g} 띠가 e_g 띠보다 낮은 에너지를 가진다. Fig. 2(b)에서 보듯이 Cr_I-d 띠에서 t_{2g} 띠는 -1.2 eV에 있고 e_g 띠는 페르미 에너지 근처에 부분적으로 채워져 있는 것을 볼 수 있다. 화살표 ↑과 ↓은 전자의 스핀방향을 나타낸다. 결정장(crystal field)에 의한 에너지 분리가 약 1.0 eV 정도 되는 것을 알 수 있다. Cr_{II}와 Cr_{III}에서 t_{2g} 전자들은 높은 에너지 쪽으로 이동하지만 e_g 띠의 전자들은 페르미 에너지 근처에 있다. 그래서 Cr_{II}와 Cr_{III} 원자의 결정장 분리는 0.7 eV 정도이다. Yaji 등은 XMCD(X-ray magnetic circular dichroism) 실험을 cluster 모형과 비교하면서 결정장 분리 10Dq=1 eV를 얻었는데 우리 계산결과와 비교하면 Cr_I와 잘 일치한다[8]. Fig. 2(a)는 실험과 비교하기 위하여 모든 Cr 원자의 상태밀도를 합한 것을 보여준다. 이때 Cr₂Te₃ 단위세포에 포함된 Cr_I, Cr_{II}, Cr_{III} 원자수의 비가 1:1:2 이므로 1:1:2의 가중치를 주어서 합하였고, 스핀 방향도 합하였다. Fig. 2(a)에서 주요

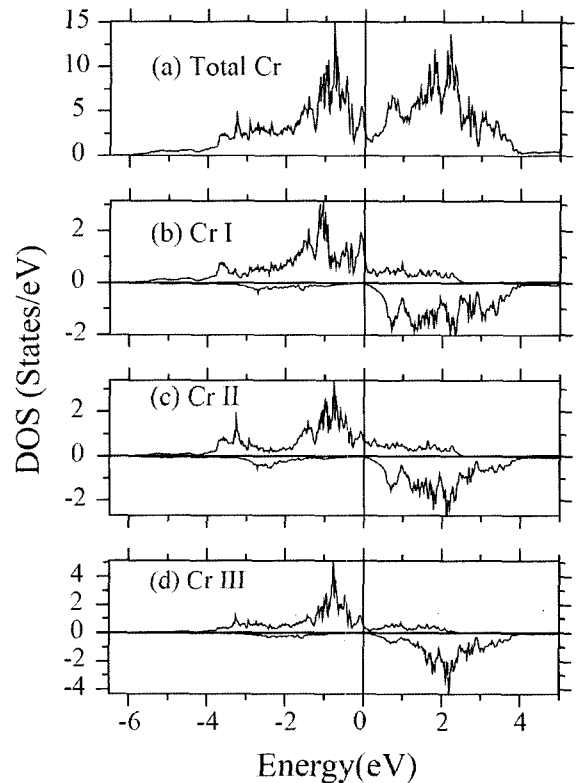


Fig. 2. LDA partial density of states of Cr-d orbitals in ferromagnetic Cr₂Te₃. Negative or positive sign in the figure represents the spin direction.

한 봉우리가 -0.772, -0.07, 0.70, 2.19 eV에 있는 것을 알 수 있다. Cr₂Te₃에서 Cr_{III} 원자수가 가장 많아서 -0.772 eV와 2.19 eV의 봉우리는 Cr_{III}가 가장 많은 기여를 하고 있고, -0.07 eV와 0.70 eV 봉우리에는 Cr_I가 가장 많은 기여를 하는 것을 알 수 있다. Cr_I, Cr_{II}, Cr_{III}의 자기모멘트는 각각 3.13, 2.88, 3.29 μ_B 가 되어서 Cr³⁺ 이온상태에서 예상되는 자기모멘트와 비슷한 값을 가진다. Dijkstra 등의 계산에서도 3.28, 3.29, 3.32 μ_B 를 얻었는데 우리의 계산보다 조금 큰 것을 알 수 있다[5]. 지금까지의 이론계산 결과는 중성자 산란에 의한 값 -0.14, 2.78, 2.53 μ_B 보다 큰 값을 가지는 것을 볼 수 있는데, Dijkstra 등은 이에 대하여 나선형 자기화를 제안하였다.

계산에서 얻은 Cr-d 전자의 상태밀도는 공명 광전자 방출 (RPES, Resonant Photoemission Spectroscopy) 실험 결과와 비교할 수 있다. Koyama 등은 자외선 광전자 방출 (Ultraviolet photoemission) 실험과 역-광전자 방출 (inverse photoemission) 실험을 결합하여 Cr₂Te₃에서 Cr-d 전자의 상태밀도를 얻었다[7]. 그들은 $0.05 \leq \delta \leq 0.375$ 사이의 Cr₁₋₈Te계 화합물에 대해 실험하였는데 $0.05 \leq \delta \leq 0.33$ 사이의 상태밀도는 봉우리의 위치가 δ 의 값에 상관없이 일정한 위치에서 관측되었고, $\delta=0.375$ 에서 약간의 변화를 보였다. 대표적으로 Cr_{0.83}Te에서 -0.1, -1.2, -2.9, -5.6 eV와 0.3, 1.5 eV에서 봉우리를 관측하였다. Cr₂Te₃에 대한 실험에서도 Cr_{0.83}Te의 봉우리가 그대로 관측되므로 Fig. 2(a)의 계산결과와 비교하면 봉우리의 위치가 맞지 않는 것을 알 수 있다.

강자성 Cr₂Te₃에서 Cr의 상태밀도와 자기모멘트가 실험치와 맞지 않으므로 우리는 준강자성 상태일 때 Cr₂Te₃의 전자 구조를 연구하여 보았다. 준강자성 상태 중에서 가장 가능성이 높은 것은 중성자 산란 실험에 의해 알려진 것과 같이 Cr_I의 자기모멘트가 반대방향으로 정렬된 상태이다. 단위세포당 전체에너지를 계산하여 보면 Cr_I의 자기모멘트가 반대방향으로 정렬되었을 때 전체에너지가 176 meV만큼 더 높아지지만, Cr_{II}와 Cr_{III}의 자기모멘트를 바꾸면 각각 353 meV와 477 meV만큼 더 높아져서 Cr_I가 상대적으로 자유롭게 움직일 수 있는 것을 알 수 있다. Fig. 1의 결정구조를 보아도 Cr_I은 다른 Cr 원자와의 거리가 멀지만, Cr_{II}와 Cr_{III}는 서로 가까이 있어서 자기적으로 더 강한 결합을 하고 있을 것이 기대된다. Fig. 3은 Cr_I의 자기모멘트가 반대방향으로 정렬된 준강자성 상태일 때 LDA 계산에 의해 구한 Cr-d 전자의 상태밀도를 보여준다. 강자성 상태가 준강자성 상태보다 낮은 에너지인 것은 Fig. 2와 Fig. 3의 상태밀도를 비교하면 알 수 있는데, Cr_{II}와 Cr_{III}는 준강자성 또는 강자성일 때 모두 상태밀도가 -0.8 eV 근처에서 최대값을 보이지만 Cr_I은 자기화 상태에 따라 상태밀도의 봉우리 위치가 다르다. Fig. 2(b)와 같이 강자성 상태에서 Cr_I-d \uparrow 은 다른 Cr-d 전자들보다 0.3

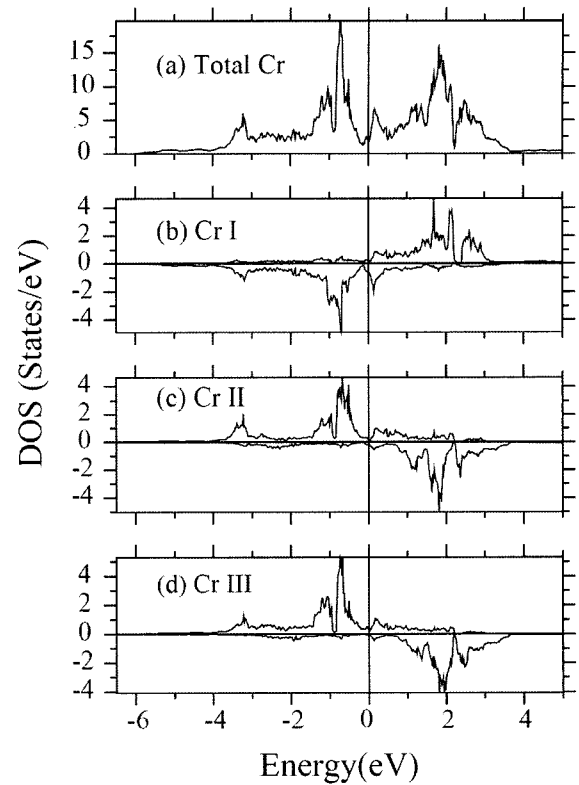


Fig. 3. LDA partial density of states of Cr-d orbitals in ferrimagnetic Cr₂Te₃. Negative or positive sign in the figure represents the spin direction.

eV 낮은 -1.1 eV에 최대의 봉우리가 있지만, Fig. 3(b)의 준강자성 상태에서 Cr_I-d \downarrow 은 보통의 Cr-d 전자들처럼 -0.8 eV에서 최대 봉우리가 있어서 강자성 상태가 낮은 에너지가 된다. 준강자성 상태의 상태밀도를 광전자 방출실험과 비교하면 Fig. 3(a)에서 상태밀도의 봉우리가 -0.76, 0.16, 1.2, 1.82 eV에 있어서 실험과 맞지 않는다. 준강자성 상태의 자기모멘트는 Cr_I, Cr_{II}, Cr_{III}가 각각 -2.74, 2.66, 3.12 μ_B 인데, Cr_{II}의 자기모멘트는 실험치와 비슷하지만 Cr_I과 Cr_{III}의 자기모멘트는 실험치와 차이를 보인다.

앞에서 보인 것과 같이 LDA 계산에 의한 상태밀도와 자기모멘트가 실험과 맞지 않으므로 우리는 LDA+U 방법에 의해 Cr-d 전자들 간의 상관효과를 고려하여보았다. 앞선 연구에서도 Cr₂Te₃에서 Cr-d 전자들이 상관효과를 보일 것이라는 보고가 있었다[1, 2, 7, 8, 17]. Shimada 등은 광전자 방출 실험을 분석하여 U=2.0 eV를 얻었지만, Auger 분광학 분광실험에서는 U=1.7~2.3 eV값을 얻었다[2]. Koyama 등은 자외선 광전자 방출(Ultraviolet photoemission) 실험과 역-광전자 방출(inverse photoemission) 실험을 결합하여 U_{eff}=2.7 eV를 얻었는데[7] 여기서 U_{eff}는 높은 Hubbard 띠(Upper Hubbard Band)와 낮은 Hubbard 띠(Lower Hubbard Band) 사이의

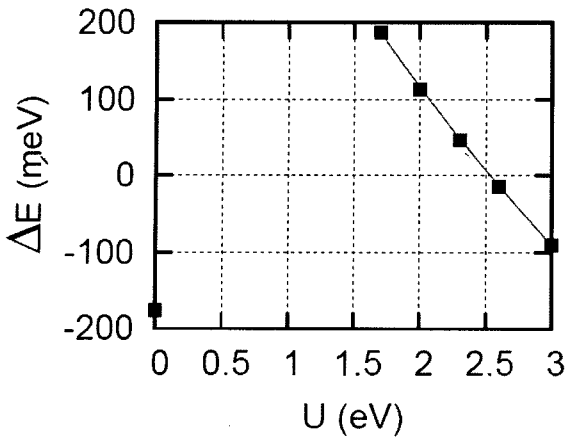


Fig. 4. Energy difference $\Delta E = E_{ferro} - E_{ferri}$ between ferrimagnetic and ferromagnetic arrangement of Cr_1 as a function of U .

에너지 분리를 나타낸다. Yaji 등은 XAS, XMCD 실험을 분석하여 $U=2.3$ eV를 얻었다[8].

Fig. 4는 LDA+U 계산에서 상관효과의 크기 U 를 변화시킬 때, Cr_2Te_3 이 준강자성 상태일 때와 강자성상태일 때 전체 에너지의 차이 $\Delta E = E_{ferro} - E_{ferri}$ 를 보여준다. $U=0$ eV는 LDA 계산결과를 나타낸다. 계산에 사용한 U 값은 Shimada 등이 Auger 분광학 분광실험에서 얻은 U 값의 범위 $U=1.7\sim 2.3$ eV 이외에 U 값을 3 eV까지 더 계산하여 보았다. 흥미로운 점은 LDA+U 계산에서 U 값이 2.51 eV보다 작을 때에는 준강자성상태가 바닥상태이지만 U 값이 2.51 eV 보다 크면 강자성상태가 바닥상태라는 것이다. 예를 들어, $U=1.7$ eV일 때 $\Delta E=186$ meV로서 준강자성 상태가 에너지가 낮다. Cr_2Te_3 는 금속성이므로 산화물 Cr_2O_3 보다는 상관효과가 적어서 U 값이 3 eV보다 작은 것은 짐작할 수 있다.

LDA+U에서 얻어진 상태밀도를 Koyama 등의 광전자 방출 실험과 비교하였는데, 봉우리의 위치가 $U=1.7$ eV일 때 잘 일치하는 결과를 얻었다. Fig. 5과 Fig. 6은 Cr_2Te_3 이 각각 강자성 상태일 때와 준강자성 상태일 때 LDA+U 계산에 의해 얻어진 Cr-d 전자의 상태밀도를 보여준다. Fig. 5(b)에서 보듯이 강자성 상태의 $Cr_1-d\uparrow$ 전자들은 최대 봉우리가 -1.30 eV에 있지만, Fig. 6(b)의 준강자성 상태에서는 $Cr_1-d\downarrow$ 전자들이 -1.62 eV에 최대 봉우리가 있어서 준강자성 상태가 낮은 에너지 상태인 것을 알 수 있다. 준강자성상태가 낮은 에너지 상태이므로 이때 얻어진 상태밀도를 광전자방출실험과 비교하였다. Fig. 6(a)에서 주요 봉우리가 -1.27, 0.34, 1.58 eV에 위치해서 실험에서 얻어진 봉우리의 위치 -1.2, 0.3, 1.5 eV와 잘 일치하는 것을 알 수 있다. 그러므로 Cr_2Te_3 에서 $U=1.7$ eV임을 알 수 있다. Cr_I , Cr_{II} , Cr_{III} 의 자기모멘트는 각각 -2.97, 2.83, 3.17 μ_B 인데 실험치와 잘 맞지 않는다. Table I에 강자성과 준강자성 상태일 때 Cr_2Te_3 의 자기모멘트

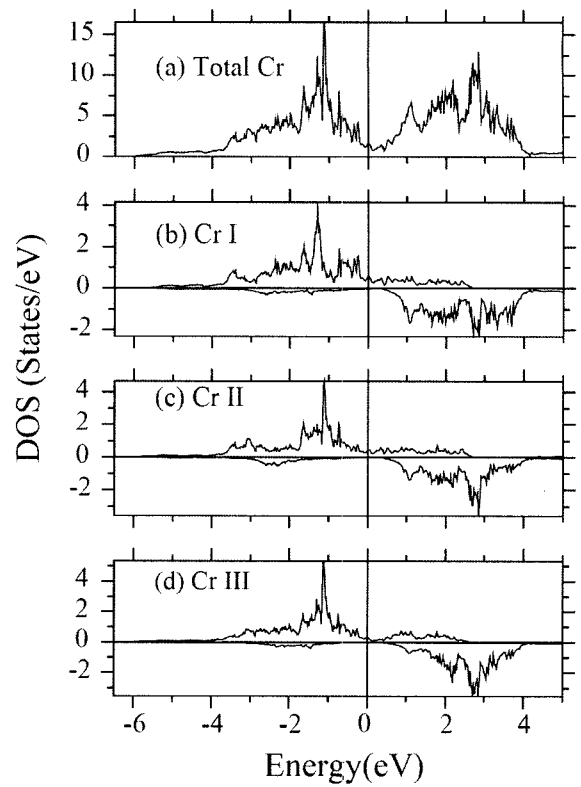


Fig. 5. LDA+U partial density of states of Cr-d orbitals in ferromagnetic Cr_2Te_3 . $U=1.7$ eV.

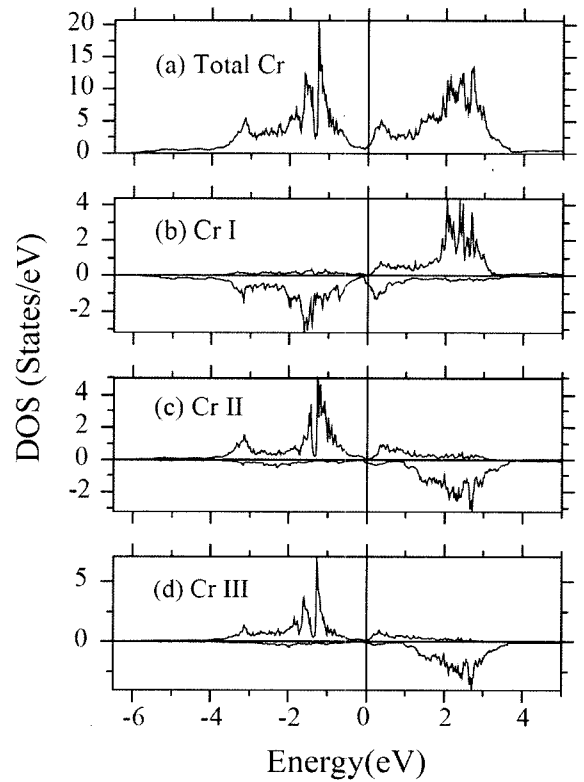


Fig. 6. LDA+U partial density of states of Cr-d orbitals in ferrimagnetic Cr_2Te_3 . $U=1.7$ eV.

Table I. Magnetic moments in μ_B of the constituent atoms of Cr₂Te₃.

		Cr _I	Cr _{II}	Cr _{III}	Te	Total	Average
U=0 eV	ferromagnetic	3.13	2.88	3.29	-0.09	24.12	3.02
	ferrimagnetic	-2.74	2.66	3.12	-0.06	11.53	1.44
U=1.7 eV	ferromagnetic	3.22	2.94	3.31	-0.11	24.24	3.03
	ferrimagnetic	-2.97	2.83	3.17	-0.06	11.72	1.46

를 정리하였다.

계산에서 얻어진 자기모멘트가 실험치와 잘 맞지 않는 원인으로 우리는 준강자성 상태와 강자성 상태가 축퇴되거나 두 상태 사이의 에너지 차이가 이론 계산치보다 작을 가능성을 제시하고자 한다. 준강자성 상태와 강자성 상태가 축퇴된 경우, 두 상태는 한 물질에 동시에 존재할 수 있고 자기모멘트의 값은 두 상태의 평균값을 가질 것이다. Table I에서 주어진 자기모멘트 값을 평균하면 U=1.7 eV에서 2.25 μ_B 를 얻는다. 이것은 Kanomata 등이 얻은 포화자기모멘트의 실험치 2.48 μ_B 와 비슷한 값이다[4]. Kanomata 등의 실험에서 자기장의 세기를 증가시켜도 자기모멘트가 수렴하지 않고 계속 증가하는 것을 볼 수 있는데, 이것은 작은 자기장에서는 강자성 상태와 준강자성 상태가 축퇴되어 Cr_I이 자기화에 기여하지 않지만 자기장을 증가시키면 축퇴가 깨지고 Cr_I이 강자성 상태로 정렬되어 포화자기모멘트를 증가시키는데 기여하는 것으로 볼 수 있다. 그런데 우리 계산에 의하면 광전자방출 실험과 일치하는 상태밀도는 Cr의 상관효과가 U=1.7 eV일 때 얻어지지만, 준강자성 상태와 강자성 상태의 축퇴는 U=2.51 eV에서 일어난다. 전체에너지를 좀 더 정확하게 계산하면 U=2.51 eV 보다 낮은 값에서 축퇴가 일어날 것으로 기대한다. LDA+U 방법은 강한 상관효과를 보이는 계를 잘 기술할 수 있는데, 특히 우리의 계산에서 얻은 U=1.7 eV일 때는 강한 상관효과를 가진다고 볼 수 없으며 이때 얻어진 전체에너지는 부정확하게 구해질 수 있다. 이러한 부정확성을 고려할 때 U=1.7 eV일 때 준강자성과 강자성 상태의 에너지 차이는 현재의 값보다 작은 값을 가질 것이고 따라서 축퇴가 일어나는 U값도 U=2.51 eV 보다 작을 것이다. 상관효과의 크기 U가 작아서 교환상호작용의 크기 J가 비슷할 때 LDA+U 전체에너지를 정확하게 구하고 그래서 Cr₂Te₃에서 준강자성 상태와 강자성 상태의 축퇴 가능성을 더 정확히 기술하는 것은 앞으로의 과제이다.

IV. 결 론

밀도범함수이론에 바탕한 LMTO 방법으로 Cr₂Te₃의 전자 구조와 자기구조를 계산하였다. 국소밀도근사(LDA)에 의해 얻은 Cr-d 전자의 상태밀도는 광전자방출 실험과 다른 결과를 준다. LDA 계산에 의해 얻어진 자기모멘트는 이온모형에

의해 예상된 값과 비슷한 결과를 얻었지만 중성자 산란 실험에 의한 자기모멘트와 일치하지 않았다. 그렇지만 U=1.7 eV인 LDA+U 방법에 의해 Cr 전자의 상관효과를 고려한 계산에서는 광전자방출 실험과 일치하는 결과를 얻었다. Cr의 자기모멘트를 설명하기 위하여 우리는 Cr_I의 강자성 상태와 준강자성 상태가 축퇴되었을 가능성을 제시하였다.

참고문헌

- [1] K. Sato, Y. Aman, M. Hirai, and M. Fujisawa, J. Phys. Soc. Jpn. **59**, 435(1990).
- [2] K. Shimada, T. Saitoh, H. Namatame, A. Fujimori, S. Ishida, S. Asano, M. Matoba, and S. Anzai, Phys. Rev. B **53**, 7673 (1996).
- [3] M. Yuzuri, T. Kanomata, and T. Kaneko, J. Mag. Mag. Mat. **70**, 223(1987).
- [4] T. Kanomata, Y. Sugawara, K. Kamishima, H. Mitamura, T. Goto, S. Ohta, and T. Kaneko, J. Mag. Mag. Mat. **177-181**, 589(1998).
- [5] J. Dijkstra, H. H. Weitering, C. F. van Bruggen, C. Haas, and R. A. de Groot, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 9141(1989).
- [6] T. Hamasaki, T. Hashimoto, Y. Yamaguchi, and H. Watanabe, Solid State Commun. **16**, 895(1975).
- [7] M. Koyama, H. Sato, Y. Ueda, C. Hirai, and M. Taniguchi, J. Electron Spect. Rel. Phenom. **144-147**, 885(2005).
- [8] K. Yaji, A. Kimura, C. Hirai, M. Taniguchi, M. Koyama, H. Sato, K. Shimada, A. Tanaka, T. Muro, S. Imada, and S. Suga, Phys. Rev. B **70**, 064402(2004).
- [9] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133(1965).
- [10] O. K. Andersen, Phys. Rev. B **12**, 3060(1975).
- [11] U. von Barth and L. Hedin, J. Phys. C: Solid State Phys. **5**, 1629(1972).
- [12] J. Rath and A. J. Freeman, Phys. Rev. B. **11**, 2109(1975).
- [13] V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen, Phys. Rev. B. **44**, 943(1991).
- [14] A. I. Liechtenstein, V. I. Anisimov, and J. Zaanen, Phys. Rev. B. **52**, R5467 (1995).
- [15] S. K. Kwon and B. I. Min, Phys. Rev. Lett. **84**, 3970(2000).
- [16] J. C. Slater, Quantum theory of Molecules and Solids (McGraw-Hill, New York, 1974).
- [17] S. Anzai, Physica B **237-238**, 142(1997).

Calculation of the Magnitude of the Coulomb Correlation and Magnetic Moment of Cr_2Te_3

Suk Joo Youn*

Department of Physics Education and Research Institute of Natural Science, Gyeongsang National University, Jinju 660-701 Korea

Se Kyun Kwon

Center for Superfunctional Materials, Department of Chemistry, Pohang University of Science and Technology, Pohang 790-784, Korea

(Received 4 April 2006, in final form 13 April 2006)

Electronic and magnetic structure of Cr_2Te_3 have been studied, which is a material with complex magnetic structure. Density of states and magnetic moments show better agreement with experiments than LDA if they are obtained with the correlation effect of Cr-*d* electrons taken into account by the LDA+U method. In these calculations, the magnitude of the correlation effect is found to be 1.7 eV. It is shown that the magnitude of experimental magnetic moments of Cr atoms can be explained if the ferromagnetic states and the ferrimagnetic states have the same energy to be degenerate.

Key words : Cr_2Te_3 , electronic structure calculation, magnetic moment, LDA+U