

# Biaxial Compressive Strain-Induced Magnetic Properties in Fe<sub>3</sub>GaTe<sub>2</sub> Monolayer

Jinmyeong Han and Jisang Hong\*

Department of Physics, Pukyong National University, Busan 48513, South Korea

(Received 16 August 2024, Received in final form 28 August 2024, Accepted 29 August 2024)

In this study, we investigate the biaxial compressive strain-dependent magnetic properties of monolayer Fe<sub>3</sub>GaTe<sub>2</sub> using first principle calculation and wannier function calculation. The Fe<sub>3</sub>GaTe<sub>2</sub> retains its ferromagnetic ground state under biaxial compressive strain. The exchange coupling parameter diminishes under the existence of biaxial compressive strain, while the magnetic anisotropy energy enhances under the existence of compressive strain. As a result of them, the Curie temperature is unchanged under strain, about 300 K. The anomalous Hall conductivity fluctuates under strain, in range of -14 S/cm ~ -342 S/cm. Its variation with chemical potential level is suppressed compared to that in pristine system. Anomalous Nernst conductivity decreases significantly under strain. These phenomena may originate from the changes in the Berry curvature under biaxial compressive strain.

**Keywords :** Fe<sub>3</sub>GaTe<sub>2</sub>, compressive strain, magnetic properties

## 이축 압축 변형에 따른 철갈륨디텔루라이드의 자성 특성 변화

한진명 · 홍지상\*

국립 부경대학교, 물리학과, 부산광역시 남구 용소로 45, 48513

(2024년 8월 16일 받음, 2024년 8월 28일 최종수정본 받음, 2024년 8월 29일 게재확정)

본 연구에서는 제일원리 계산과 와니어 함수 계산을 이용하여 단층 철갈륨디텔루라이드 (Fe<sub>3</sub>GaTe<sub>2</sub>) 박막의 이축 압축 변형에 따른 자성 특성 변화에 대해 연구하였다. 이축 압축 변형 하에서 강자성 성질이 유지되었으며 자성 상호작용 인자는 변형의 유무에 따라 감소, 자기 이방성 에너지는 변형의 유무에 따라 증가함을 확인할 수 있었다. 큐리 온도는 순수한 단층 박막과 차이가 거의 없는 300 K을 유지하였다. 거기다 비정상 홀 효과는 변형에 따라 -14 S/cm ~ -342 S/cm 범위의 큰 폭으로 요동치며 화학 퍼텐셜 준위에 따른 변화가 순수한 단층 박막에 비해 억제되었다. 비정상 네른스트 효과는 순수한 단층 박막과 비교하여 크게 줄었다. 이는 이축 압축 변형에 따라 베리 곡률이 변화하면서 생긴 현상이다.

**주제어:** 철갈륨디텔루라이드, 압축 변형, 자성특성

### I. 서 론

강자성 박막 물질은 전자 운동이 얇은 층 내에서만 이루어지는 고유한 특성으로 인해 재료과학과 응집물질물리 분야에서 광범위한 연구 관심을 끌고 있다. 첨단화된 공학 기술은 원자단위 두께의 이차원 물질을 제작할 수 있게 하였으나, 대부분의 이차원 물질은 비자성을 띄며 실험적으로 보고된 이차원 강자성 물질은 몇 가지에 불과하다. 그 예시로, 이차원 육텔루르화지마늄크로뮴(Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub>)과 삼아이오딘화크로뮴(CrI<sub>3</sub>)은 반도체 강자성 특성을 나타내며, 1T 상 철저마늄디텔

루라이드(Fe<sub>3</sub>GeTe<sub>2</sub>) 강자성 박막 또한 최근 제작되었다 [1-3]. 하지만 이러한 물질들은 상온보다 낮은 큐리 온도를 가지고 있다. 따라서 상온 이상의 임계온도를 가지는 이차원 강자성 물질을 개발하려는 시도는 계속되고 있다. 이러한 맥락 속에서, 최근 철저마늄디텔루라이드(Fe<sub>3</sub>GeTe<sub>2</sub>)와 같은 구조를 가진 철갈륨디텔루라이드(Fe<sub>3</sub>GaTe<sub>2</sub>) 박막을 9.5 nm 두께로 만드는데 성공하였으며, 이를 기반으로 원자층 단위 두께에서의 특성도 이론적으로 연구되었다[4-6]. 이 물질은 상온에서도 자성을 유지하며, 두께에 따라 증가하는 자기 이방성을 보인다. 한편, 박막의 경우 특유의 전자 구속 효과로 인해 자성 성질에 큰 변화를 야기할 수 있다. 예시로, 삼아이오딘화철(FeI<sub>3</sub>) 박막에 변형을 가했을 때 큐리 온도가 148 K에서 286 K으로 증가하였으며, 1T 상 단층 바나듐디셀레나이드(VSe<sub>2</sub>) 박막의

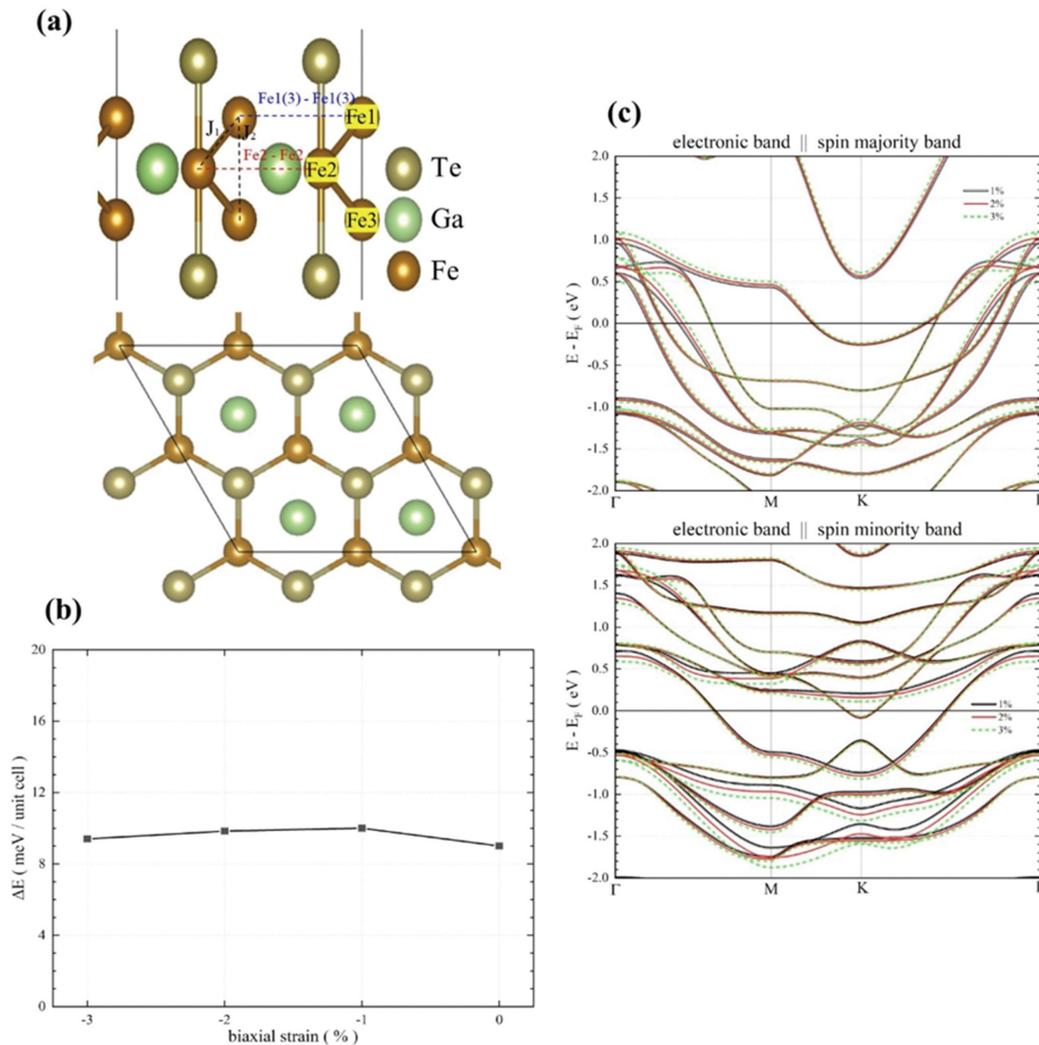
© The Korean Magnetics Society. All rights reserved.  
\*Corresponding author: Tel: +82-51-629-5573  
Fax: +82-51-629-5549, e-mail: hongj@pknu.ac.kr

경우 3%의 인장 변형 하에서 퀴리 온도가 400 K 으로 증가하고 철저마늄디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ )의 경우에는 이축 인장 변형을 줄 시 자기 이방성이 높아짐이 보고되었다[7-9]. 한편, 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ )의 인장력에 의해 비정상 홀 효과가 요동침 또한 이론적으로 연구되었다[10]. 하지만, 압축 변형에 따른 효과에 대한 연구는 아직 진행되지 않았다. 이에, 본 연구에서는 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ) 단층 박막의 이축 압축 변형에 의한 물질의 자성 특성 변화를 조사하고자 한다.

## II. 계산방법

Vienna ab initio simulation package(VASP)의 projector augmented wave set을 사용, Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)의 exchange correlational functional을 사용한 일반 기울기 근사

(GGA)를 적용시켜 범밀도함수 계산을 수행하였다[11-14]. Plane wave의 energy cutoff는 상당히 높은 값인 650 eV로 설정하였고, energy criteria와 force criteria를 각각  $10^{-6}$  eV와 0.015 eV/Å 로 설정하였다. 브릴루앙 영역은 감마( $\Gamma$ ) 방법으로 361 개의 k-point를 사용하여 샘플링하였고, 다른 층과의 상호작용을 배제하기 위해 z축 방향으로 20 Å의 진공 영역을 설정하였다. 또한, 반데르발스(van der Waals) 상호작용을 고려하기 위해 Becke-Johnson damping function을 이용한 Grimme의 DFT-D3 방법이 사용되었다[15,16]. 이 방법으로 계산하였을 때, 실험적으로 얻어진 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ) 박막의 격자 크기를 잘 모방하였다[5,6]. 자기 이방성 에너지는 최 외각 전자 사이의 스핀-궤도 상호작용을 적용시킨 뒤, 스핀 정렬 방향에 따른 총 에너지 차이로 계산하였다. 자기 이방성 에너지는 보다 정확한 계산이 필요하므로, 구조가 수렴한 361개의 k-point 에서부터 자기 이방성 에너지 값이 수렴하는



**Fig. 1.** (Color online) (a) Side and top view of  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  monolayer (b) Exchange energy of the monolayer under biaxial compressive strain. (c) Spin polarized majority band (up) and spin polarized minority band (down).

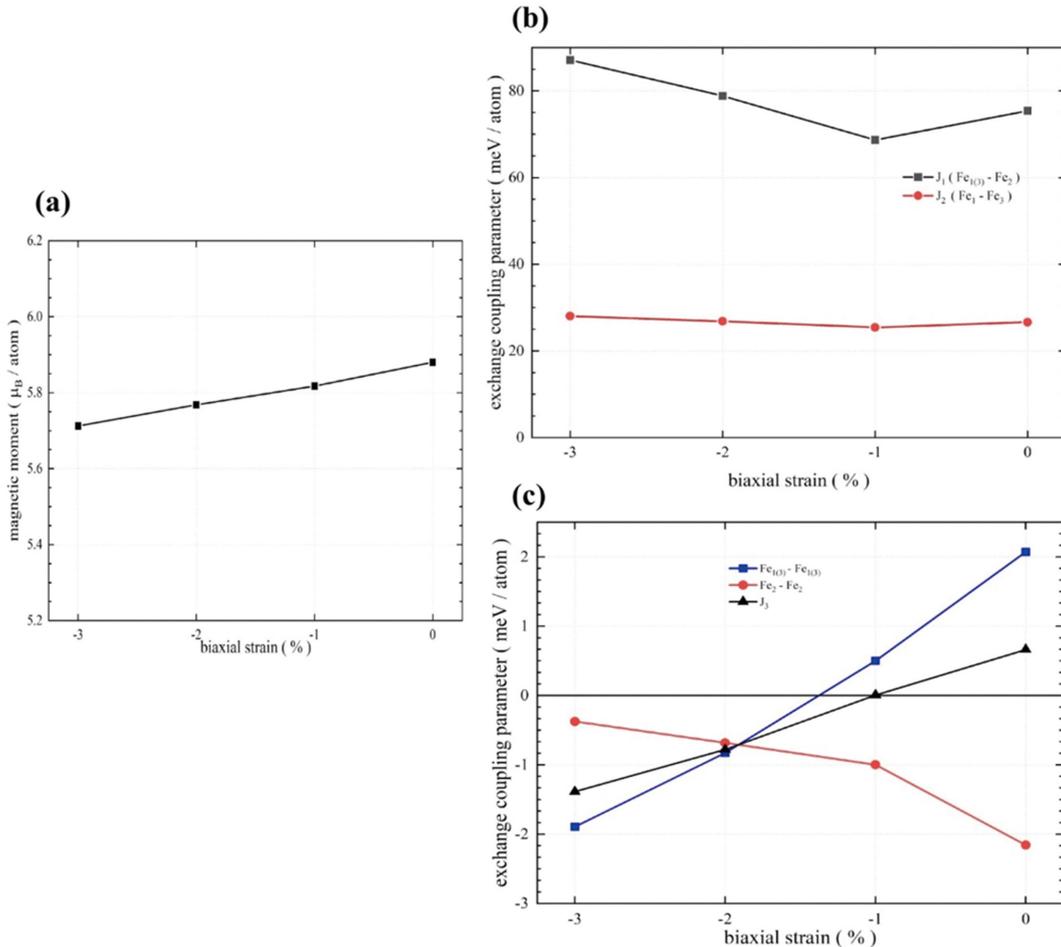
529개의 k-point까지 조금씩 늘려가며 계산하였다. 자성 성질의 온도 효과를 계산하는 데엔 VAMPIRE 소프트웨어의 몬테 카를로 시뮬레이션(Monte Carlo simulation)을 사용하였다. 이때 계산은  $20 \times 20$  supercell 에서 70,000-equilibrium time step, 50,000-loop time step으로 설정하여 시행했다[17,18]. 베리 곡률과 비정상 홀 효과, 비정상 네른스트 효과는 WANNIER90 소프트웨어를 통해 DFT로 얻은 전자구조를 와니어 함수화 시킴으로써 구했다[19]. 보다 정확한 계산을 위해, 160,000 개의 k-point로 구조를 샘플링 한 후 밀도 행렬의 선택된 열 (Selected columns of the density matrix) 분석 방법을 적용하였다[20,21].

### III. 결과 및 논의

Fig. 1(a)은 이상적인 단층 철갈륨디텔루라이드 ( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ) 박막의 x축 방향과 z축 방향에서 본 모식도이다. 이는 187번 공간무리를 형성하고 있는 육방정계 구조이다. 이축 압축 변형에 따른 두께 및 결합 각도는 Table I에서 볼 수 있다. 또한, 자기적 안정상태를 찾기 위해 강자성 상태의 에너지와 반자성 상태의 에너지 사이의 차이인  $\Delta E_{\text{ex}}$ 를 계산하였는데, 이때 반자성 상태는 순수한 단층 철갈륨디텔루라이드 ( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ) 박막의 반자성 상태 스핀 구조를 따랐으며 그 값은 Fig. 1(b)에 표현하였다. 순수한 단층 박막의 경우와 같이 강자성 상

**Table I.** Thickness, binding angle of Te-Fe-Fe and Fe-Fe-Fe, and Fermi level.

Strain	Thickness (Å)	Te-Fe-Fe (°)	Fe-Fe-Fe (°)	Fermi level (eV)
0%	5.11	58.84	56.64	0.00
-1%	5.09	58.09	55.93	0.08
-2%	5.06	57.39	55.30	0.20
-3%	5.05	56.76	54.70	0.32



**Fig. 2.** (Color online) (a) average magnetic moment of monolayer  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  under biaxial compressive strain. (b) Exchange interaction  $\text{Fe}_{1(3)} - \text{Fe}_2$  ( $J_1$ ) and  $\text{Fe}_1 - \text{Fe}_3$  ( $J_2$ ). (c) Exchange interaction between  $\text{Fe}_{1(3)} - \text{Fe}_{1(3)}$ ,  $\text{Fe}_2 - \text{Fe}_2$ , and  $J_3$ .

**Table II.** The value of exchange coupling parameter as a function of distance ( $J_{1-3}$ ), and total average of exchange coupling parameter ( $J_{ave}$ ) in unit cell.

Strain	$J_1$ (meV)	$J_2$ (meV)	$J_3$ (meV)	$J_{ave}$ (meV)
0%	75.4	26.6	0.7	193.4
-1%	68.7	25.4	-0.0	163.0
-2%	78.8	26.8	-0.8	165.8
-3%	87.1	26.0	-1.4	169.0

태가 반자성 상태에 비해 안정적이며 그 에너지 차이는 이축 압축 변형이 가해짐에 따라 미미한 감소를 보였다. Fig. 1(c)는 이축 압축 변형에 따른 스핀 전자 구조이다. 변형의 강도가 강해짐에 따라 페르미 준위의 위치가 양의 값으로 점점 올라가며 spin majority band도 같이 올라가는 양상을 보이나, spin minority band의 위치는 조금씩 내려감을 확인할 수 있다.

Fig. 2(a)는 이축 압축 변형에 따른 자기모멘트 값이다. 이축 압축 변형 하에서, 자기모멘트 값은 거의 차이가 없다. 또한 식(1)으로써 표현되는 교환 결합 인자(exchange coupling parameter)를 각 상호작용 위치별로 나누어 계산하여 Fig. 2(b)와 Table II에 표기하였다. 각 위치는 Fig. 1(a)에 표시하였다. 총 상호작용의 합은 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ) 박막의 이축 인장 변형 하에서의  $J_2$ 에서 유래한 교환 결합 인자의 감소와는 다르게[10], 이축 압축 변형 하에서는 변형의 존재에 의존해서만 값이 크게 줄어드는 현상을 보였다. 보다 정확한 분석을 위해, 각  $J$  값을 위치에 따라 나누어 분석하였다. 이때  $J_3$  보다 먼 거리의 상호작용에 의한 효과는 비교적 미미하여 생략하였다.

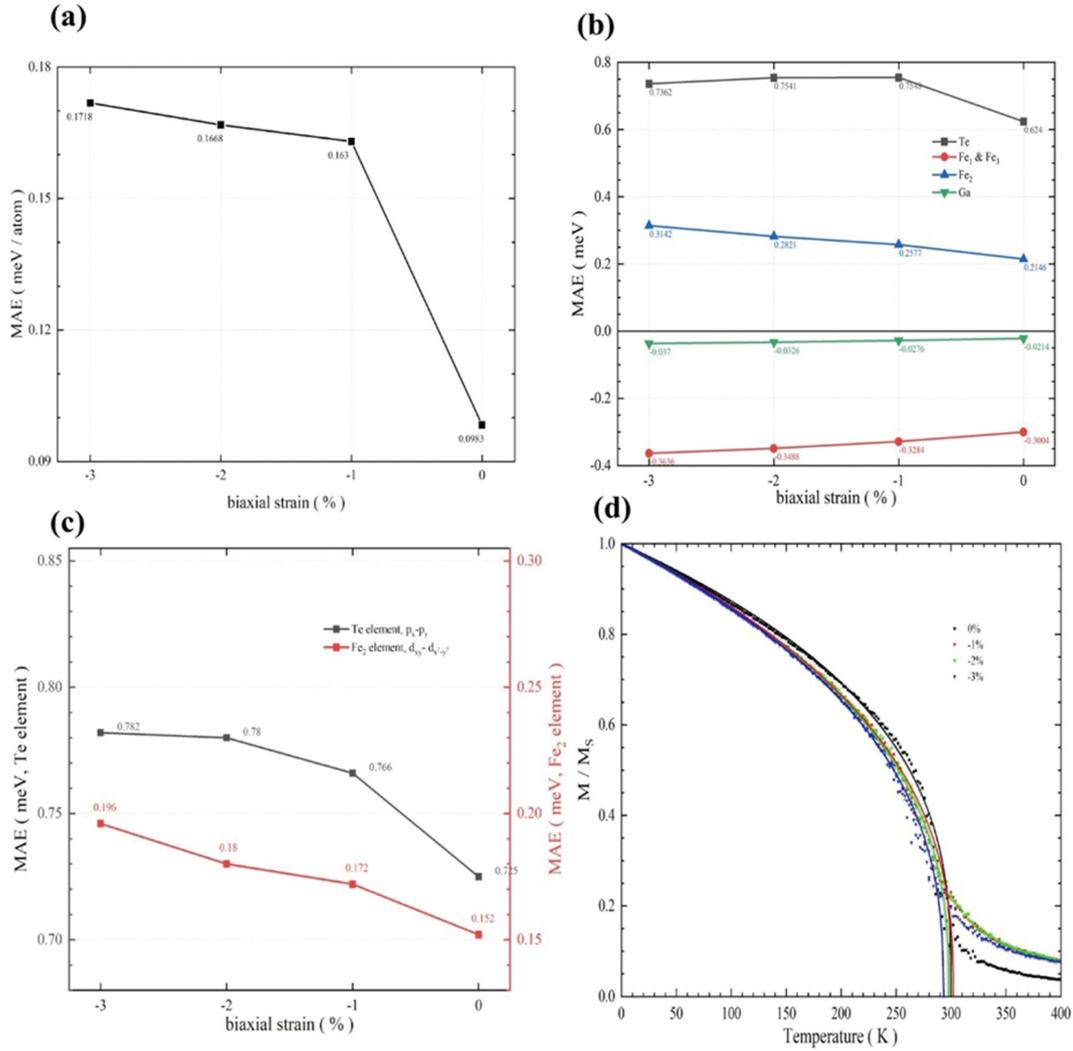
$$J = \frac{\Delta E_{ex}}{Nm^2}. \quad (1)$$

이때  $N$ 은 단위 내 자성 원자의 수이며,  $m$ 은 자기 모멘트이다.  $J_1(\text{Fe}_{1(b)} - \text{Fe}_2)$  상호작용은 -1% 변형에서 순수한 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ )에서의 크기보다 감소하였다가 더 큰 변형이 걸림에 따라 더 높은 값으로 증가하는 형태를 보이며,  $J_2(\text{Fe}_1 - \text{Fe}_3)$  상호작용은 이축 압축 변형 하에서 변화가 거의 없음을 확인할 수 있다. 그러나 이 둘만으로는 이축 압축 변형의 강도에 따른 변화가 거의 없는 것을 설명하는데에 무리가 있어, 추가적으로  $\text{Fe}_{1-3} - \text{Fe}_{1-3}$  또한 위치에 따라 나누어 계산하고, 그 평균값인  $J_{ave}$  값을 Fig. 2(c)와 Table II에 같이 표현하였다. 박막의 외곽에 있는 철 원소들의 상호작용에 의한 효과( $\text{Fe}_{1(b)} - \text{Fe}_{1(b)}$ )의 경우 이축 압축 변형에 따라 선형적으로 감소하는 모습을 보이나, 박막 내부의 철 원소들 간의 상호작용에 의한 효과( $\text{Fe}_2 - \text{Fe}_2$ )의 경우 음수를 유지하며 값이 0에 가까워지는 모습을 보인다. 같은 상호작용 거리를 가지는  $\text{Fe}_1 - \text{Fe}_1$ 의 상호작용에 의한 에너지와  $\text{Fe}_2 - \text{Fe}_2$ ,  $\text{Fe}_3 - \text{Fe}_3$ ,

총 세가지 상호작용의 평균으로 얻어지는  $J_3$  값은 순수한 구조에선 0.66 meV이며, -3% 이축 압축 변형이 가해지며 -1.38 meV까지 선형적으로 감소함을 확인할 수 있다. 이 값은 상기한  $J_1$ 과  $J_2$ 에 비해서는 작은 값이나, 상호작용의 개수가 상대적으로 훨씬 많아  $J_1$ 의 -1 ~ -3% 이축 압축 변형에서의 그 증가폭을 상쇄하여 결과적으로 해당 범위 내에서 값의 변화를 억제한다. 그 결과로, 물질 내 교환 결합 인자의 평균은 이축 압축 변형이 가해짐에 따라 변화가 크지만 개수는 작은  $J_1$ 과 변화는 비교적 작지만 상호작용 개수가 많은  $J_3$ 의 합작용으로 인해 162.95~169.04 meV로, 순수한 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ )의 값인 193.38 meV에서 비해 낮은 범위에서 거의 일정한 값을 유지한다.

자성체에서 중요한 지표들 중 하나는 자기 이방성이다. 자기 이방성은 자화가 특정 방향으로 정렬되려는 성질이며, 이는 각 자화 방향에 따른 안정성의 변화를 나타내는 자기 이방성 에너지로써 나타낼 수 있다. Fig. 3(a)는 단층 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ) 박막의 이축 압축 변형에 따른 원자 하나가 가지는 평균 자기 이방성 에너지의 변화를 나타내었다. 이때, 자기 이방성 에너지의 부호는 자화 정렬 방향을 뜻한다. 양수 값은 자화가 xy 평면에 수직인 방향으로 정렬하려는 성질의 크기이며, 음수 값은 자화가 xy 평면에 평행한 방향으로 정렬하려는 성질의 크기이다. 단층 박막 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ )의 이축 인장 변형에서 보인 단순하게 증가하는 모습과는 달리[10], 이축 압축 변형의 유무에 따라서는 크게 바뀌지만 그 강도에 대해서는 비교적 미미한 증가를 보인다. 보다 상세한 비교를 위해, 이축 압축 변형에 따른 각 원소들의 자기 이방성 에너지 변화를 Fig. 3(b)에 표기하였다. 순수한 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ) 박막에서와 같이,  $\text{Te}$  원소가 자기 이방성에 지배적인 영향을 끼치며, 이축 압축 변형에 따른 자기 이방성 에너지는 주로  $\text{Te}$ 와 박막 내부에 위치한  $\text{Fe}_2$  원자에서부터 유래한다.  $\text{Ga}$  원소의 자기 이방성 에너지는 무시할 수 있을 정도로 작으며, 박막 외곽에 위치한  $\text{Fe}_1$ 과  $\text{Fe}_3$  원자는 감소하는 경향을 보이나  $\text{Fe}_2$ 의 증가폭과 비교하여 감소폭이 약간 작다. 더욱 정확히 분석하기 위해 각 원자별로 전자-궤도 상호작용을 분석한 다음, 그 중 이축 압축 변형 하에서 비교적 큰 변화를 보이는 각 상호작용 성분을 Fig. 3(c)에 나타냈다. 그림에 표기되지 않은 다른 모든 성분들은 변형에 따른 변화가 비교적 미미하여 생략하였다. 까만 선과 빨간 선은 각각  $\text{Te}$  원자의  $p_x - p_y$  전자-궤도 상호작용과  $\text{Fe}_2$  원자의  $d_{xy} - d_{x^2-y^2}$  전자-궤도 상호작용에 의한 자기 이방성 에너지이며, 이들의 이축 압축 변형에 따른 변화가 두 원소의 자기 이방성 에너지의 증가에 큰 영향을 미치고 있다.

다음으로, 우리는 강자성 박막 물질에서 중요한 역할을 하는 큐리 온도를 계산하였다. 큐리 온도는 강자성체가 그 성질



**Fig. 3.** (Color online) Out-of plane direction magnetic anisotropy energy per magnetic atom. (b) Magnetic anisotropy energy of each element. (c) Magnetic anisotropy energy that generates from the Te  $p_x - p_y$  orbital contribution (black) and Fe<sub>2</sub>  $d_{xy} - d_{x^2-y^2}$  orbital contribution (red). (d) temperature-induced magnetization curve.

을 잃어버리는 임계온도이다. 이를 구하기 위해, VAMPIRE 프로그램을 사용하여 하이젠베르크 타입 해밀토니언을 적용시킨 몬테카를로 계산을 하였으며, 그 식은 다음과 같다[17,18]:

$$\hat{H} = -\sum_{i < j} J \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - k_2 \sum_i m_i^2 \quad (2)$$

여기서  $J$ ,  $\hat{m}_{(ij)}$ ,  $m_k$ ,  $k_2$  값은 각각 식(1)의  $J$ , 원자  $i, j$ 의 자기 모멘트, 한쪽 축으로 정렬된 스핀, 자기 이방성 에너지 상수이다. 식(2)을 통해 자기화 곡선을 얻은 뒤, 아래의 식(3)을 사용, 피팅 후 퀴리 온도( $T_c$ )를 얻어 Fig. 3(d)에 나타냈다.

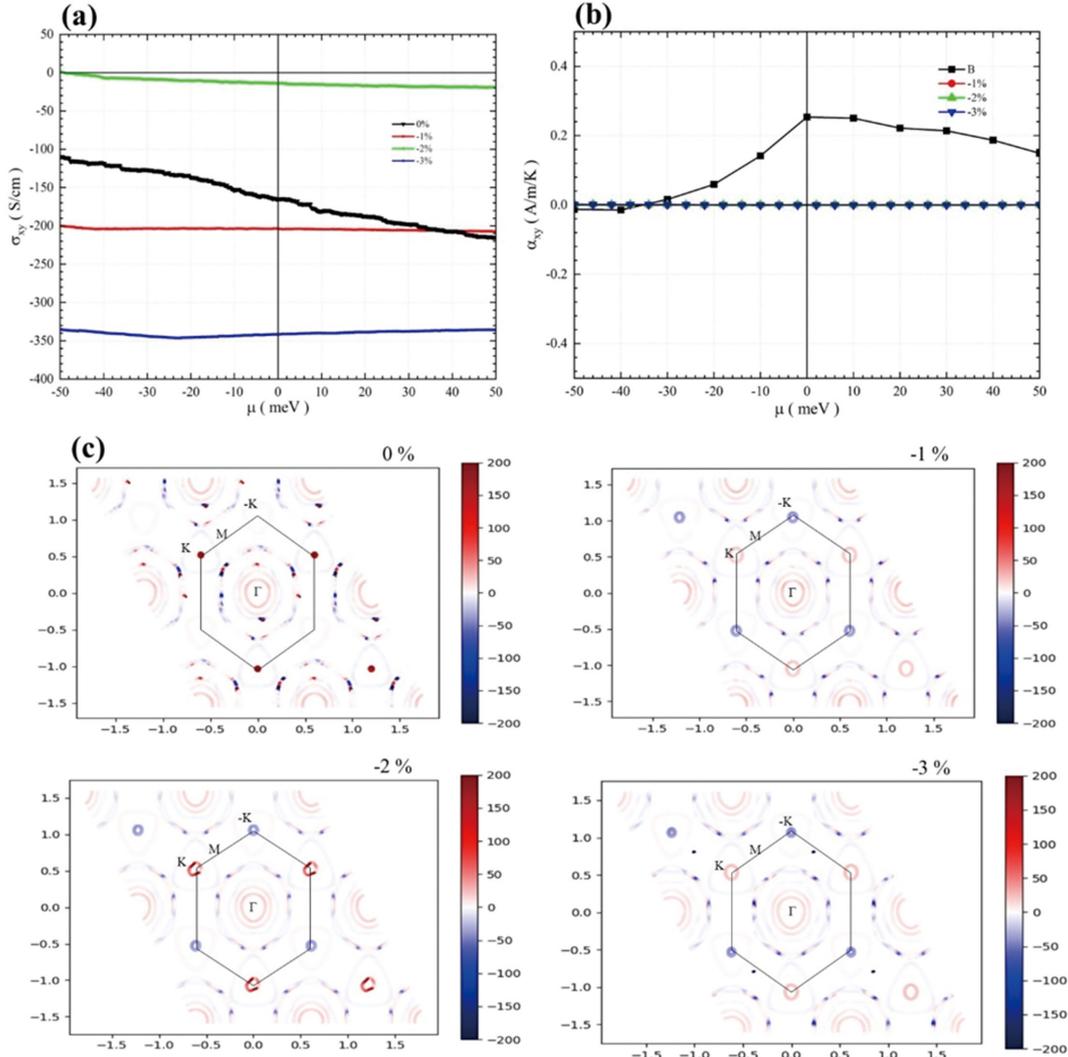
$$m(T) = \left[ 1 - \frac{T}{T_c} \right]^\beta \quad (3)$$

이후 압축 변형 아래에서, 단층 철갈륨디텔루라이드 (Fe<sub>3</sub>GaTe<sub>2</sub>) 박막의 퀴리 온도 변화는 10 K 내외의 변화만

을 가지고 있으며 이는 몬테카를로 계산 상의 오차로 감안할 수 있다. 이는 식(2)로 설명 가능하다. 철갈륨디텔루라이드 (Fe<sub>3</sub>GaTe<sub>2</sub>) 박막에 압축변형으로 인해 낮아진  $J$ 에 의해 감소된 첫번째 항의 값과 비슷한 비율로 높아진 자기 이방성 에너지  $k_2$ , 변형 하에서 미미하게 바뀐 자기 모멘트의 합으로 해밀토니언이 이후 압축 변형과 무관하게 일정한 값을 유지하여 발생한 것이다.

다음으로, 우리는 비정상 홀 효과와 비정상 네른스트 효과를 조사하였다. 이 두 특성들은 Kubo formula로써 구해지는 베리 곡률의 전체 브릴루앙 영역에서의 적분으로써 얻어지기 때문에, 우선 식(4)와 (5)를 이용하여 베리 곡률을 구하였다 [22].

$$\Omega_z = \sum_i f_i \Omega_i(k) \quad (4)$$



**Fig. 4.** (a) (Color online) Anomalous Hall conductivity and (b) anomalous Nernst conductivity at variable of chemical potential. (c) Distribution of Berry curvature in whole Brillouin zone under biaxial compressive strain.

$$\Omega_i(k) = -2 \text{Im} \sum_{j \neq i} \frac{\langle u_{ik} | v_x | u_{jk} \rangle \langle u_{jk} | v_y | u_{ik} \rangle}{(E_{jk} - E_{ik})^2} \quad (5)$$

이때  $f_{\nu} v_{(x,y)}$ ,  $u_{(ijk)}$ 는 각각 페르미-디랙 분포, 속도 연산자, 고유 값  $E_{(ijk)}$ 를 구하는데에 사용된 블로흐 파동함수의 주기성 부분 (periodic part)이다. 이후, 해당 식을 이용하여 비정상 홀 효과 ( $\sigma_{xy}$ )와 비정상 네른스트 효과( $\alpha_{xy}$ )를 다음 공식을 이용하여 계산하였다[23,24].

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \int_{BZ} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Omega_z \quad (6)$$

$$\alpha_{xy} = \frac{1}{eT} \int d\varepsilon (\varepsilon - \mu) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \sigma_{xy} \quad (7)$$

여기서  $e$ ,  $T$ ,  $\mu$ 는 각각 기본 전하, 온도, 물질의 화학 퍼텐셜

을 나타낸다. Fig. 4(a)는 각 화학퍼텐셜 준위에 따른 비정상 홀 효과를 표현한 그래프이다. 가로축은  $-50 \sim 50$  meV 범위의 화학 퍼텐셜, 세로축은 S/cm 단위의 비정상 홀 효과의 크기를 나타낸다. 순수한 단층 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ) 박막의 경우 기준 화학 퍼텐셜(zero chemical potential)에서 대략  $-165$  S/cm의 크기를 가지며, 이축 압축 변형 하에서는 그 값이  $-1\%$ ,  $-2\%$ ,  $-3\%$ 에서 각각  $-203$  S/cm,  $-14$  S/cm,  $-342$  S/cm로 요동치는 모습을 볼 수 있다. 이때 음양 부호는 그 방향을 나타낸다. 한편 9.5 nm 두께에서 비정상 홀 효과는 73 S/cm로,  $-1\%$ 와  $-3\%$  변형에서 그 값이 커짐을 확인할 수 있다 [4]. 다음으로, 화학 퍼텐셜 준위에 따른 비정상 홀 효과의 변화를 살펴보면 순수한 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ )에서는 화학 퍼텐셜 준위가 올라감에 따라 비정상 홀 효과의 절댓값도 커지지만, 이축 압축 변형을 가한 경우에는 화학퍼텐셜과

무관한 값을 가진다. Fig. 4(b)는  $-50\sim 50$  meV 화학 퍼텐셜 범위 하에서의 비정상 네른스트 효과를 나타낸 그림이다. 계산 상 온도 값은 100 K 으로 설정하였다. 그림과 같이 이축 압축 변형 하에서 비정상 네른스트 효과는 큰 폭으로 억제됨을 확인할 수 있다.

식(6)-(7)에 따르면 비정상 네른스트 효과는 비정상 홀 효과에 의존하고, 비정상 홀 효과는 식(4)-(5)의 베리 곡물의 전체 브릴루앙 영역에서의 형태에 의존한다. 따라서 이러한 현상을 분석하기 위해 Fig. 4(c)에  $0\sim 3\%$  이축 압축 변형에 따른 브릴루앙 영역에서의 베리 곡물을 나타내었다. 빨간색이 질을수록 높은 절댓값을 가지는 양수 값, 파란색이 질을수록 높은 절댓값을 가지는 음수 값을 가지고 있음을 뜻한다. 순수한 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ )의 경우 브릴루앙 영역 상의 K 지점에 국지화된 높은 양수 기여와  $\Gamma - K$ 의 중간지점에 음양이 혼재된 기여가 있음을 볼 수 있다. 이는 이축 압축 변형을 줌에 따라 양수 기여들이 주변으로 넓게 퍼지는 형태를 보여주며, 반대로 음수 기여의 경우 이축 압축 변형이 가해짐에 따라  $-K$  지점에 국지화 되는 모습을 확인할 수 있다. 이러한 변화의 결과로써,  $-1\%$ 와  $-3\%$  이축 변형에서 비정상 홀 효과가 음수방향으로 증가한다. 한편,  $-2\%$  이축 변형 하에서는 K 지점에 분산되었던 양수 기여가 브릴루앙 영역 경계지점 두 부분으로 나뉘어진 채 국지화를 이루어  $-K$  지점에 국지화된 음수 기여를 상쇄시켜 비정상 홀 효과가 낮은 절댓값을 가지게 된다.

#### IV. 결 론

요약하면, 단층 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ) 박막에  $-1\sim -3\%$  이축 압축 변형을 주었을 때 자성특성의 변화를 찾기 위해 VASP, VAMPIRE, WANNIER90을 이용한 계산을 하였다. 변형 하에서 푸아송 법칙에 의해 단층 박막의 두께와 결합각도는 증가하였으며 페르미 준위가 높아짐에 따라 spin majority band는 위로, spin minority band는 아래로 내려갔다. 변형 하에서도 강자성 성질을 유지하였으며 교환 결합 인자는 변형의 유무에 따라서만 감소하였고 자기 이방성 에너지는 변형의 유무에 의존해서만 증가하는 경향을 보였다. 교환 결합 인자와 자기 이방성 에너지 둘 다 이축 압축 변형의 크기에 따른 변화는 미미했다. 큐리 온도의 변화는 거의 없었으며 비정상 홀 효과는  $-1\%$ ,  $-3\%$  이축 변형에서는 순수한 철갈륨디텔루라이드( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ )보다 더욱 커졌으나  $-2\%$ 에서는 감소하는 모습을 보였으며 비정상 네른스트 효과는 변형 하에서 거의 사라졌다. 이는 브릴루앙 영역 내의 K 지점에 묻혀있던 양수 기여의 국지화가 변형에 따라 해소되는 동시에  $-K$  지점에서 음수 기여가 점차 국지화되며 나타나는 현상임

을 유추할 수 있다. 해당 연구는 단층 박막에 변형을 주었을 때의 자성특성 변화에 대한 보다 상세한 이해를 도울 것으로 예상된다.

#### Acknowledment

This work was supported by the National Research Foundation of Korea (NRF) grant funded by the Korean government (MSIT) (2022R1A2C1004440).

#### Data Availability

The raw and processed data required to reproduce these findings are available from the corresponding authors upon reasonable request.

#### References

- [1] B. Huang, G. Clark, E. Navarro-Moratalla, et al., *Nature* **546**, 270 (2017).
- [2] C. Gong, L. Li, Z. Li, et al., *Nature* **546**, 265 (2017).
- [3] Z. Fei, et al., *Nature Materials* **17**(9), 778 (2018).
- [4] G. Zhang, F. Guo, H. Wu, et al., *Nature Communications* **13**, 5067 (2022).
- [5] B. Marfoua, I. Khan, and J. Hong, *Journal of Physics D: Applied Physics* **57**, 035003 (2024).
- [6] B. Marfoua and J. Hong, *NPG Asia Materials* **16**, 6 (2024).
- [7] G. Zhaoyong and N. Shuang, *ACS Applied Electronic Materials* **3**(7), 3147 (2021).
- [8] J. Son, B. Marfoua, and J. Hong, *J. Korean Phys. Soc.* **81**, 133 (2022).
- [9] H. L. Zhuang, P. R. C. Kent, and R. G. Hennig, *Phys. Rev. B* **93**, 134407 (2016).
- [10] J. Han, B. Marfoua and J. Hong, *Journal of Magnetism* **29**(2), 166-171 (2024).
- [11] G. Kresse and J. Furthmüller, *Physical Review B* **54**(16), 11169 (1996).
- [12] G. Kresse and D. Joubert, *Physical Review B* **59**(3), 1758 (1999).
- [13] P. E. Blochl, *Physical Review B* **50**, 17953 (1994).
- [14] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Physical Review Letters* **77**(18), 3865 (1996).
- [15] S. Grimme, et al., *The Journal of Chemical Physics* **132**(15), 154104 (2010).
- [16] S. Grimme, S. Ehrlich, and L. Goerigk, *J. Computational Chemistry* **32**(7), 1456 (2011).
- [17] R. F. Evans, et al., *Journal of Physics: Condensed Matter* **26**(10), 103202 (2014).
- [18] R. Evans, VAMPIRE software package version 4.0, University of York, UK (2016).

- [19] G. Pizzi, et al., *Journal of Physics: Condensed Matter* **32**(16), 165902 (2020).
- [20] A. Damle, L. Lin, and L. Ying, *J. Chem. Theory Comput.* **334**, 1463-1469 (2015).
- [21] A. Damle and L. Lin, *Multiscale Model. Simul.* **16**(3), 1392-1410 (2018).
- [22] T. Cai, et al., *Physical Review B* **88**(11), 115140 (2013).
- [23] X. Wang, et al., *Physical Review B* **74**(19), 195118 (2006).
- [24] D. Xiao, et al., *Physical Review Letters* **97**(2), 026603 (2006).