

W(110)위에 성장한 Fe 옷층의 전자 및 자기적 성질*

홍순철

울산대학교 물리학과

이재일

인하대학교 물리학과

A. J. Freeman

Dept. of Physics, Northwestern Univ.

(1991년 8월 25일 받음)

비자성 천이금속인 W의 (110)표면 위에 성장한 강자성 Fe 원자층의 전자적 성질 및 자기적 성질을 국소밀도근사 범위 내의 Full Potential Linearized Augmented Plane Wave (FLAPW) 방법을 이용하여 계산하였다. 이 계산에서 W, Fe의 층간 거리는 bulk값을 이용하였으며 표면이완 및 계면이완은 고려하지 않았다. 전하밀도, 스핀밀도, 자기 모멘트, 집속 초미세장, 2차원 띠구조, 각층의 상태밀도 등의 계산결과를 제시하였다. Fe 옷층이 1층인 경우, Fe의 자기 모멘트는 $2.56 \mu_B$ 로 bulk에 비해 16% 증가하였고, Fe 옷층이 2층인 경우 표면 및 계면을 이루는 Fe층의 자기 모멘트는 각각 2.90과 $2.30 \mu_B$ 로 평균 자기모멘트는 bulk에 비해 약 18% 증가한 것으로 나타났다. Fe 층수가 1층일 때 자기초미세장의 크기는 2층일 때와는 큰 차이를 보여주고 있다. 깨끗한 Fe(110)의 결과와 비교함으로써 W과의 미혼합 효과와 격자상수 확장 효과에 대해 논의하고 실험결과와 계산결과를 비교 검토하여 보았다.

I. 서 론

표면 및 계면 자성에 관한 연구는 지난 20여년 동안 실험적으로, 또 이론적으로 활발하게 연구되어 왔다. 특히 최근에는 제조기술의 발달로 우리가 원하는 물성을 갖는 인위적인 물질을 만들 수 있게 되었고[1-7] 실험기술의 발달과 컴퓨터 능력의 향상으로 이러한 인위적인 물질에 대한 정교한 분석이 가능하게 되었다. 표면 및 계면자성에서 이론적 흥미로서는 국제화되어 있는 표면 및 계면상태의 존재와 표면의 전자구조와 자성에 관한 이 상태들의 역할, 줄어든 좌표수와 줄어든 대칭성의 영향에 관한 것이라 할 수 있다.[8-11]

강자성 천이금속 표면의 자성에 관한 여러 이론적 계산에 의하면 자기모멘트가 bulk에 비해 20-300% 정도 증가함을 예측하고 있어, 표면이 자성에 미치는 영향에 관한 연구는 아주 중요하다 하겠다. 특히 현재의 연구와 관련하여 Fe(001)[10] 및 Fe(110)[11] 표면에서는 자기모멘트가 bulk에 비해 각각 약 35%와 20% 증가하나, 자기초

미세장에서 가장 기여가 큰 항인 Fermi 항 (H_c)은 오히려 감소하는데 그 이유는 표면에서는 전도전자에 의한 기여가 bulk와는 달리 양수이기 때문이다.

천이금속에서 깨끗한 표면의 자성에 관한 연구와 함께 박막, 옷층, sandwich, 초격자 등의 인위적인 물질에 관한 이론적 연구 또한 흥미를 끄는 데 이러한 연구는 실험물리학자에게 유용한 지침을 제공하게 된다. 2차원 자성이 가능한가를 검토하기 위해 귀금속(Au, Ag, Cu) 위에 강자성 천이금속(Fe, Ni, Cr, V)층이 얹힌 계에 대해 몇몇 이론적 연구가 수행되었다[12-15]. 이러한 연구에서도 자기모멘트가 아주 크게 증가함을 예측하고 있다. 예로 Au 위의 Cr 단층은 강자성상태와 반강자성상태에 관계 없이 아주 큰 자기모멘트(각각 $3.76 \mu_B$ 와 $3.50 \mu_B$)를 가지는 것으로 계산되었고, 강자성의 경우에는 이웃한 Au도 측정가능한 정도인 $0.14 \mu_B$ 의 자기모멘트가 유도된다는 것이 발견되었다. Ag(001) 위의 Fe단층의 자기모멘트 값은 깨끗한 Fe(001)[8]면의 표면층의 자기모멘트 값과 아주 비슷하다는 것이 발견되었다. Ag와 Fe의 2차원 격자상수가 거의 같다는 것을 감안하면 이는 Ag와 Fe의 상호작용이 약함을 뜻한다.

위에서 언급한 흥미로운 이론적 예측은 실험물리학자

* 이 논문은 1989년도 문교부 지원 한국학술진흥재단의 신진교수 학술연구조성비에 의하여 연구되었음.

들을 크게 자극하여 CEMS, SPARPES, ferromagnetic resonance(FMR) 등을 이용하여 자기모멘트와 초미세장을 측정하는 등, 천이금속의 자기적 성질에 대한 활발한 실험연구를 촉발시켰다. 이들 실험연구 중에서 몇 연구 group에서 Fe/W(110)에 관한 재미있는 실험 사실들을 발견하였다. 최근의 low energy electron diffraction (LEED) 실험[16]에 의하면 Fe의 격자상수가 W의 격자상수에 비해 무려 9.4% 작음에도 불구하고 2, 3층까지는 Fe 원자가 W(110) 면위에 W와 같은 격자상수를 유지하면서 성장하는 것을 발견하였다.

W(110)면 위의 Fe 원자층의 자기적 성질을 이해하기 위하여 SPARPES와 CEMS 실험이 수행되었다. 상온에서 행해진 SPARPES 실험[17]에 의하면 W(110) 위에 Fe층이 2층 (2Fe/W(110))인 경우 전체 자기모멘트가 약 20% 증가하고 W(110) 위에 Fe층이 1층 (1Fe/W(110))인 경우 약 50% 감소함을 발견하였다. 반면, CEMS 실험은 깨끗한 1Fe/W(110)의 Curie 온도가 210K이어서 상온에서는 강자성이 되지 못한다는 것을 주장하고 있다. 더욱이 CEMS 실험[18]에서 아주 흥미로운 사실이 발견되었는데, 그것은 저온에서 1Fe/W(110)의 자기모멘트가 bulk Fe와 거의 같음에도 불구하고 1Fe/W(110)의 초미세장의 세기가 bulk Fe(-340 kG)에 비해 크게 감소하여 약 -100 kG가 되며 Fe가 이층으로 성장하게 되면 초미세장의 세기가 약 -300 kG로 다시 증가한다는 것이다.

본 연구에서는 국소밀도근사[19-20]를 바탕으로 하는 스핀 분극 FLAPW 에너지방법[21]을 이용하여 Fe/W(110)의 자기모멘트와 초미세장의 세기를 계산하여 실험적 사실들을 설명하고자 한다. II절에서는 본 연구에서 이용한 방법에 대해 간략하게 소개한다. III절에서는 전하밀도, 스핀밀도, 일함수, 자기모멘트, 초미세장에 관한 계산 결과를 제시하고, 단일입자 에너지 스펙트럼을 이용하여 물리적 배경을 논의하게 된다. IV절에서는 연구결과를 요약하였다.

II. 계산방법

일반적으로 금속의 차폐거리가 대략 원자간거리 정도이어서 표면과 계면의 영향은 그들의 바로 아랫층에 국한되는 것으로 받아들여지고 있다. 그러므로, W(110) 위의 Fe층의 물성을 연구하기 위해 그림 1과 같이 5층의 W(110)의 양면에 Fe 한층 혹은 두층이 부착되어 있는 single slab으로 계를 설정하였다. 표면의 재구성과 표면 및 계면이완은 고려하지 않아 Fe-Fe 및 W-W 원자

간거리는 bulk의 값을 사용하였고, Fe-W 원자간거리는 Fe-Fe와 W-W 원자간거리의 평균으로 택하였다. 2차원 평면의 격자상수는 bulk W값을 사용하였고, 접촉 muffin-tin(MT) 반경을 도입하였다.

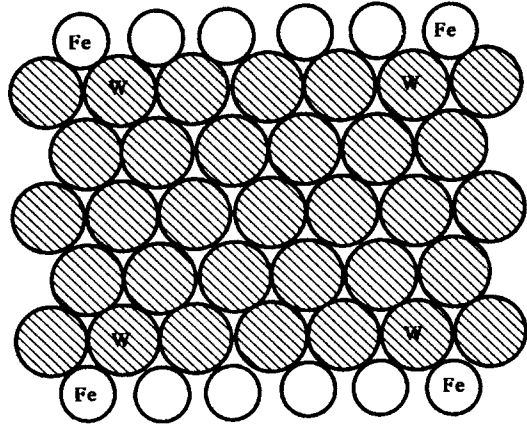


Fig. 1. The slab model for 1Fe/W(110)

FLAPW을 이용하여 위와 같은 계에 대한 Kohn-Sham 방정식의 해를 자체충족적으로 구하였다. 이 방법에서는 Poisson 방정식의 해[22]를 구하는 데 있어 포텐셜이나 전하밀도에 대해 어떠한 형태근사도 취하지 않음으로써 일반적인 포텐셜에 대한 모든 행렬요소를 모든 공간 영역에 대해 엄격하게 고려하였다. MT구 내의 전하밀도와 포텐셜을 각운동량 $l=8$ 까지 격자조화함수를 이용하여 전개하였으며 스핀분극 계산에서는 von Barth-Hedin의 교환-상관 포텐셜[23]을 이용하였다.

핵심전자는 완전히 상대론적으로 취급하였고 가전자들은 스핀-궤도 상호작용을 제외한 모든 항을 고려하여 준상대론적으로 취급하였다[24]. 대칭성을 고려하여 2차원 Brillouin 영역 중 1/4에 해당되는 기약영역(irreducible region)내의 18개 파수벡터 k 에 대해 각각 약 2×340 의 기저함수를 사용하였고 전하 및 스핀밀도의 입력과 출력 사이의 차가 $5 \times 10^{-4} e/(a.u.)^3$ 이하일 때 계산이 자체충족적인 것으로 간주하였다.

III. 계산결과

1. 전하밀도 및 스핀밀도

전하밀도와 스핀밀도는 국소스핀밀도근사에서 기본이

되는 물리량이므로 직접적인 물리적 의미를 가지며 표면 및 계면의 형성에 대해 물리적 직관을 제공한다. 그림 2는 2Fe/W(110) slab의 윗쪽 반에 대해 각각 10^{-3} 전자/(a. u.)³ 과 10^{-4} 스핀/(a. u.)³ 단위로 (100)면 위의 전하밀도와 스핀밀도의 등고선을 보여주고 있다. 그림에서 이윗한 등고선은 각각 $\sqrt{2}$, 2배의 밀도를 표시하고 있다.

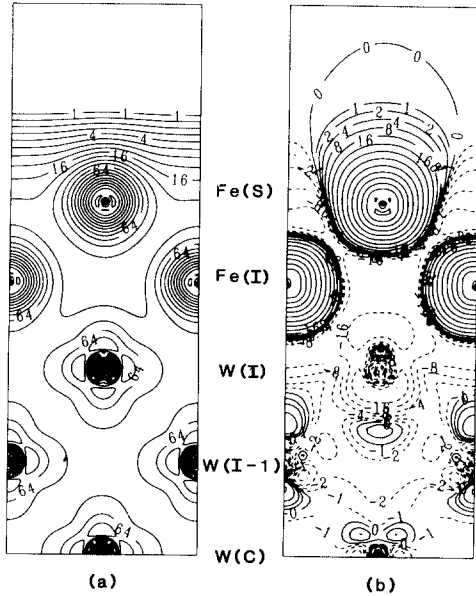


Fig. 2. Valence Electron charge density and spin density in the upper half plane of a 2Fe/W(110) slab in the (001) plane perpendicular to the surface in the units of $10^{-3} e/(a. u.)^3$ and $10^{-4} e/(a. u.)^3$, respectively.

그림 2a의 전하밀도 등고선은 표면에서의 급격한 단절을 차폐시키기 위해 표면 Fe의 s, p 전자가 진공 쪽으로 흘러나오고 있음을 보여주고 있으며, 계면 바로 아랫쪽의 W원자는 중심에 위치한 W원자와 이미 거의 같은 전자배치임을 보여주고 있다. 이는 다른 계에서도 관찰되듯이 전하밀도 요동에 대한 차폐거리가 대략 원자간 거리정도이고 계면효과는 거의 계면에만 국한되어 우리가 선택한 slab 두께가 충분함을 의미한다.

일함수는 진공 쪽으로 흘러나온 전자의 쌍극자장벽에 의해 결정되므로 국소스핀밀도근사에서 직접적인 물리적 의미를 지닌다. 2Fe/W(110)의 일함수는 4.6 eV로 깨

끗한 Fe(110)면의 계산치 [25] 보다 0.5 eV 낮다. 2Au/Cr(001)에 대한 계산에서 이 계의 일함수가 깨끗한 Au(001)면의 실험치와 거의 일치함 [13]을 상기한다면 2Fe/W(110)가 Fe(100)면보다 낮은 일함수를 갖는다는 것은 이 계에서 Fe의 격자상수가 W의 값을 따라 증가한 것에 주로 기인하는 것으로 보인다. 뒤에서 논의되겠지만 결합길이가 길어지면 소수스핀의 결합상태가 비어지면서 다수스핀의 반결합상태가 채워지게 된다. 결과적으로 d-d 결합이 약해져 이것이 일함수를 낮추는 요인일 것이다.

그림 2b의 스핀밀도 그림에서 실선은 양의 스핀밀도를 표시하고 있고 점선은 음의 스핀밀도를 나타낸다. 스핀밀도가 진공 쪽으로 뚜렷하게 부풀어 올라와 있음을 볼 수 있는데 이는 증가된 표면 Fe원자의 자기모멘트를 시각적으로 보여 주는 것이다. 계면 W원자는 이윗한 Fe 원자와의 강한 교환상호작용으로 인하여 음의 자기모멘트를 갖게 된다.

정량적으로 자기모멘트를 보기 위해 표 1에 각층에 대한 자기모멘트의 계산 결과를 열거하였고 비교를 위해 깨끗한 Fe(110)의 자기모멘트도 함께 제시하였다. Fe층이 2층일 때 표면과 계면 Fe의 자기모멘트는 각각 2.90과 2.30 μ_B 로 bulk Fe의 자기모멘트(2.22 μ_B)에 비해 약 32%와 5%증가한 것을 보여 주고 있다. 평균적으로 18%증가한 것으로 SPARPES 실험치(20%) [17]와 거의 일치하고 있다. 2Fe/W(110)의 표면 Fe 자기모멘트가 깨끗한 Fe(110) [11]의 표면 Fe(2.65 μ_B)에 비해 더 큰 자기모멘트를 가지는 것은 Fe의 2차원 격자상수가 W의 값을 따라 9.4% 증가하였기 때문이다. 하지만 계면 Fe의 자기모멘트 (2.30 μ_B)는 Fe(110)의 표면 바로 아랫층의 자기모멘트(2.37 μ_B)보다 작음을 보여 주는데 이는 Fe원자와 W원자의 d- π 혼합에 원인이 있는 것으로 판단된다.

Fe층이 일층일 때 Fe의 자기모멘트(2.56 μ_B)는 깨끗한 Fe(110)의 표면층(2.65 μ_B)에 비해 감소하였으나, bulk에 비해서는 약 16% 증가하는 것으로 나타났는데, 이 결과는 bulk에 비해 50% 감소한다는 상온에서 수행된 SPARPES 실험결과 [17]와 차이가 있었다. 이는 아마도 실험에서 지적된 바와 같이 Fe가 일층일 때는 이 계의 2차원성이 Curie 온도를 낮추어 상온에서는 bulk보다 작은 자기모멘트를 갖기 때문일 것으로 믿어진다. 그러므로 $T=0$ K의 본연구의 계산결과를 300 K의 실험결과와 직접 비교하기는 어렵고, 저온에서의 실험이 행하여져야 본연구 결과와 비교 검토가 가능할 것이다.

계면 W원자가 측정 가능하면서 음의 값인 약 $-0.1 \mu_B$

표 1. 자기모멘트 $M(\mu_B)$ 와 자기초미세장 $H_c(\text{kGauss})$ 의 세기에 대한 계산결과. 자기초미세장은 핵심전자 기여와 전도전자 기여로 나누었다.

$M(\mu_B)$		$H_c(\text{kGauss})$			핵심전자/M
		핵심전자	전도전자	전체	
2Fe/W(110)					
Fe(S)	2.90	-403	+100	-303	-139
Fe(S-1)	2.30	-319	+46	-273	-139
W(S-2)	-0.11				
W(S-3)	-0.00				
W(C)	+0.00				
1Fe/W(110)					
Fe(S)	2.56	-353	+159	-194	-138
W(S-1)	-0.08				
W(S-2)	-0.01				
W(C)	-0.00				
깨끗한 Fe(110)					
Fe(S)	2.65	-364	+40	-324	-138
Fe(S)	2.37	-324	-61	-387	-138
Fe(S-1)	2.22	-305	-47	-350	-137
Fe(C)					

로 분류된다는 것은 주목할 만하다. 이 음수로의 분류는 Fe-3d와 W-5d 사이의 강한 교환상호작용으로 유발된다. 그러나, 계면 바로 아랫층의 W원자의 자기모멘트는 거의 무시할 만한데 이는 본 연구에서 택한 slab 모형에 대한 신뢰성을 다시 확인시켜 주는 것이다.

2. 자기 초미세장

핵에서의 전자스핀밀도는 Mössbauer 실험으로 측정할 수 있는 초미세 상호작용을 해석하는 데 있어 가장 핵심적인 양이다. 초미세장은 결정장 내에서 소멸되지 않고 남아있는 각운동량장, 쌍극자장, Fermi 접촉초미세장(H_c)으로 구성되는데 H_c 은 각운동량장과 쌍극자장에 비해 상당히 크고 핵에서의 s 전자스핀밀도에 비례한다[26]. H_c 를 핵심전자와 전도전자가 기여하는 항으로 나누는 것이 표면에서의 H_c 변화를 논의하는 데 편리하다. 각층에 대해 계산된 H_c 값과 그 성분을 표 1에 나타내었다.

3d 각 내에 위치한 핵심전자는 3d 전자와의 교환상호작용에 의해 핵심전자의 다수스핀이 3d 전자에 이끌려 바깥쪽으로 이동함으로써 핵에서는 소수스핀 수가 많아져 큰 음의 값으로 H_c 에 기여한다. 여러 다른 bulk 및 표면계들에서 발견되었듯이 핵심전자의 기여는 주위환경에 관계없이 아주 정확하게 자기모멘트에 비례한다[8-10, 15]. 반면, 3d 전자에 비해 바깥 쪽에 위치한 전도전자

4s의 기여는 그 자신들이 속한 원자의 3d 전자 외에도 이웃 원자의 3d와도 교환상호작용을 함으로써 주위환경에 크게 영향을 받는다. bulk에서는 이러한 간접적인 공유분극으로 핵에서의 전도전자 스핀밀도가 음이되어 4s 전자는 H_c 에 음으로 기여한다. 그러나, 표면과 계면 Fe에서는 고립된 자유 원자와 유사하게 직접분극으로 인하여 핵에서 4s 전자의 스핀밀도는 양이 된다. 101 Fe/W(110)의 표면 Fe의 전도전자는 깨끗한 Fe(110)의 경우보다 더 크게 양으로 기여함을 보여 준다. 이는 윗층 Fe의 4s전자가 Fe(110) 표면 보다 더 고립된 원자의 s 전자에 가깝다는 것을 의미한다. 그 이유는 2가지로 요약될 수 있는데 1) Fe-Fe 결합길이가 Fe(110)의 경우보다 크고 2) Fe-4s 전자는 거의 Fe-W 사이의 결합에 참여하지 않기 때문인 것으로 보인다.

표면에서의 전도전자는 bulk와 달리 H_c 에 양으로 기여하기 때문에 자기모멘트 증가에 따른 핵심전자의 음의 기여 증가를 능가하여 자기모멘트 증가에도 불구하고 초미세장의 크기는 Fe(110)표면과 bulk[11]에 비해 오히려 줄어 들었다. 초미세장의 세기는 결코 자기모멘트의 세기에 비례하지 않음을 예측하는 것으로 초미세장의 측정으로 자기모멘트를 추정하기 어려움을 나타내는 것이다.

3. 단일입자 에너지 스펙트럼

이 절에서는 W(110) 위의 Fe웃층의 자성에 대한 물리적 배경을 이해하기 위해 띠구조와 각층의 상태밀도에 대한 계산결과를 논의하기로 한다.

그림 3, 4, 5는 깨끗한 W(110)표면, 1Fe/W(110), 2Fe/W(110)의 기약 2차원 Brillouin 영역에서 대칭선을 따라 그린 에너지 띠이며, 띠를 보기 쉽게 대칭선에 대한 경면대칭에 따라 분류하여 윗 그림은 기대칭(odd parity)을, 아랫 그림은 우대칭(even parity)을 나타내고 있다. 그림 4와 5의 왼쪽(오른쪽)은 다수(소수) 스핀 상태를 나타낸다. 그림에서 긴 점선은 slab의 중앙 평면에 대한 기대칭을, 짧은 점선은 우대칭을 표시한다. 전하밀도가 표면층에 50% 이상 존재할 때 표면상태 (surface state)라 정의하고 이들은 굵은 실선으로 표시하였다. 표면상태의 교환상호작용에 의한 소수스핀과 다수스핀 상태 사이의 에너지 분리는 1Fe/W(110), 2Fe/W(110)에 대해 각각 대략 2.1 eV와 2.8 eV였고 2Fe/W(110)의 경우 W(110)와 계면을 이루는 Fe층에 대해서는 약 2.2 eV이었다.

최근에 Kurzawa 등은 2차원 Brillouin 영역의 Γ 상태에 대한 SPARPES 실험을 수행하여 다음 사실을 발견하였다[17]: 1) 깨끗한 W(110)에 대하여 결합에너지 $E_b =$

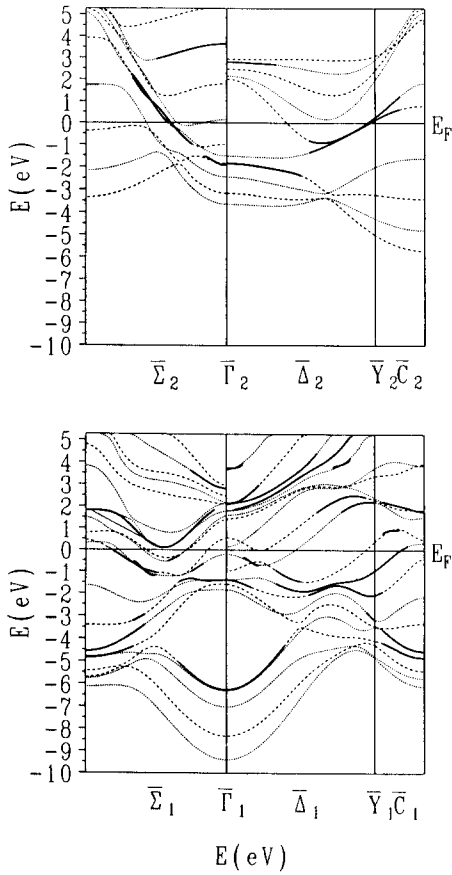


Fig. 3. Energy bands for a five-layer W(110) along high symmetry directions in the 2D Brillouin zone. Top and lower panels show odd and even symmetry with respect to the given symmetry line. Solid lines indicate surface states whose wave functions have more than 50% weight within the surface layer.

0.3과 1.6 eV인 두개의 뚜렷한 peak가 존재하고; 2) Fe 옷층이 1층일 때 $E_b=1.6$ eV인 peak의 세기는 크게 감소하고 $E_b=0.3$ eV의 peak는 결합에너지가 큰쪽(0.5 eV)으로 이동하며; 3) Fe 옷층이 2층일 때 다수스핀에 대해 $E_b=1.0$ 과 1.5 eV인 두개의 peak와 소수스핀에 대해 $E_b=0.3$ 과 0.5 eV인 두개의 peak가 발견되었다.

본 계산에서 깨끗한 W(110) 표면에 대해 $E_b=1.4$ 과 1.8 eV인 $\bar{\Gamma}$ 에 표면상태가 존재하는 것으로 계산되었다. 그러나, $E_b=1.8$ eV인 표면상태는 대칭성($\bar{\Gamma}_2$)이 전자방출을 금지하여 광전자 방출에 기여하지 못하므로 $E_b=$

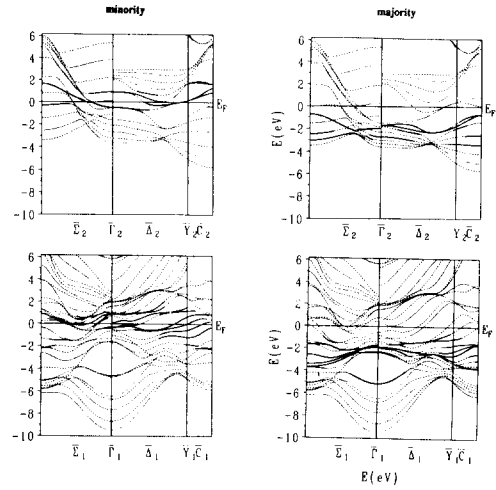


Fig. 4. Energy bands for 1Fe/W(110) of majority and minority spins along high symmetry directions in the 2D Brillouin zone(notations identical to that of Fig. 3).

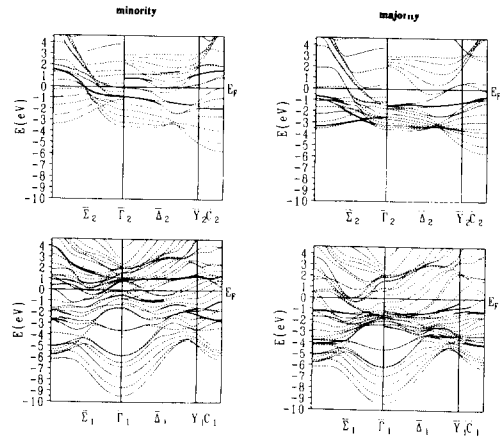


Fig. 5. Energy bands for 2Fe/W(110) of majority and minority spins along high symmetry directions in the 2D Brillouin zone(notations identical to that of Fig. 3).

1.4 eV의 표면상태가 SPARPES에서 발견된 $E_b=1.6$ eV의 폭이 넓은 peak에 해당되는 것으로 보인다. 그림 4가 보여 주듯이 Fe 옷층이 1층일 경우 $\bar{\Gamma}$ 에 여러개의 다수

스핀 표면상태가 $E_b=1.7$ 과 2.3 eV 사이에 존재한다. 소수스핀에 대해서는 채워진 표면상태가 $\bar{\Gamma}$ 에 $E_b=0.35$ 과 0.5 eV 사이에 존재하는데 0.5 eV 상태는 대칭성($\bar{\Gamma}_2$) 때문에 SPARPES에서는 발견될 수 없다. 그러므로 $E_b=0.35$ eV의 표면상태가 1Fe/W(110)에 대한 실험에서 관찰된 $E_b=0.5$ eV에 위치한 peak에 해당되는 것으로 판단된다.

2Fe/W(110)에 대해서는 $\bar{\Gamma}$ 의 Fe 표면과 계면에 국재되어 있는 상태가 1) 다수 스핀에 대하여 $E_b=1.7$ 과 1.5 eV; 2) 소수 스핀에 대하여 $E_b=0.24$ 과 0.6 eV에 존재함을 발견하였다. 그러므로 2Fe/W(110)에 대해서 계산된 다수스핀의 표면상태가 SPARPES의 1.5 eV의 peak에, 계산된 소수스핀의 표면상태가 0.3 과 0.5 eV의 peak에 해당되는 것으로 보인다. 위에서 논의한 것을 요약하여 계산된 표면상태와 SPARPES 실험에서 관찰된 peak를 표 2에 나타내었다.

표 2. $\bar{\Gamma}$ 에 위치한 계산된 표면상태와 SPARPES에서 관찰된 peak와의 비교.

	계산된 $\bar{\Gamma}$ 의 표면상태	SPARPES의 peak
깨끗한 W(110)	1.4 eV	1.6 eV
	1.8 eV	금지된 천이
1Fe/W(110)	1.7 eV(다수스핀)
	2.3 eV(다수스핀)
	0.35 eV(소수스핀)	0.5 eV
	0.5 eV(소수스핀)	금지된 천이
2Fe/W(110)	1.5 eV(다수스핀)	1.5 eV
	1.7 eV(다수스핀)	1.5 eV
	0.35 eV(소수스핀)	0.3 eV
	0.5 eV(소수스핀)	0.5 eV

그림 6은 1Fe/W(110)와 2Fe/W(110)에 대한 각원자층의 상태밀도(LDOS)를 보여 주고 있다. 왼쪽은 다수스핀상태를, 오른쪽은 소수스핀상태를 표시한다. 9.4% 확장된 2차원 격자상수의 영향과 Fe-3d와 W-5d 사이의 락혼합의 영향을 정립하기 위해 깨끗한 Fe(110)와 bulk형 Fe의 LDOS도 함께 보여 주었다[25].

웃층이 2층일 때, 금속의 짧은 차폐거리 때문에 표면 Fe의 LDOS는 락이 2차원 격자의 확장으로 좁아진 것을 제외하면 근본적으로 깨끗한 Fe(110)의 것과 아주 유사한 특징을 보여 주고 있다. 이 사실로부터 락혼합이 자기모멘트의 증가에 중요한 역할을 하는 것으로 추론할 수 있다. bulk Fe에서 Fermi 에너지가 소수스핀의 결합상태와 반결합상태 사이의 골에 위치하여 결합상태

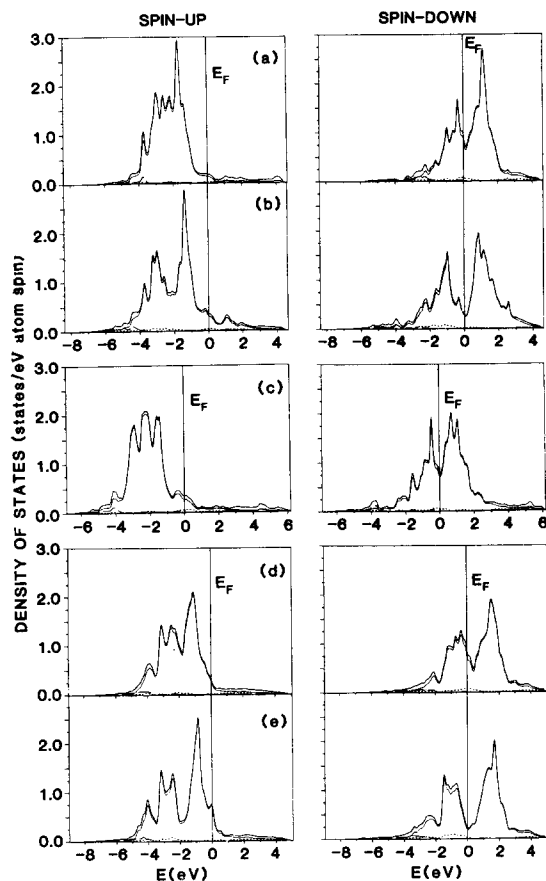


Fig. 6. Layer-projected partial density of states of Fe layers in units of states/(eV atom) for the surface and subsurface of 2Fe/W(110) (a and b), for 1Fe/W(110) (c), and for the surface and center layers of clean Fe(110) (d and e). Dotted lines indicate d-states and broken lines represent s and p contributions.

가 거의 완전히 채워져 있는 것과는 달리 2Fe/W(110)에서는 Fermi 에너지가 골 약간 아랫 쪽에 위치하여 소수스핀의 결합상태가 부분적으로 채워져 있어 이 구조가 약간의 불안정성을 가지고 있다고 판단된다. 표면 바로 아랫 층의 LDOS는 락이 좁아졌다는 것을 제외하면 bulk형 Fe와 아주 유사하다는 것은 주목할 만 하다. 이는 귀금속 위의 Fe 웃층에서와는 달리 Fe-3d와 아랫층 W-5d 사이의 락혼합이 아주 강하다는 것을 의미한다.

1Fe/W(110)의 LDOS는 2Fe/W(110)에 비해 peak들이 합쳐져 좀 더 매끈해졌다. 2Fe/W(110)에서 뚜렷했던

The Electronic and Magnetic Properties of Fe Overlayers on W(110)

Soon C. Hong

Department of Physics, University of Ulsan, Ulsan 680-749

Jae Il Lee

Department of Physics, Inha University, Incheon 402-751

A. J. Freeman

*Department of Physics, Northwestern University, Evanston
Illinois 60208*

(Received 25 August 1991)

The electronic and magnetic structure of Fe overlayers on W(110) is determined by means of the all-electron local spin density full potential linearized augmented plane wave (FLAPW) method with a single slab approach. Charge and spin densities, magnetic moments, contact hyperfine fields, and layer projected density of states (LDOS) are presented. For bilayer Fe coverage, we find magnetic moments to be 2.90 and $2.30 \mu_B$ for the surface and subsurface Fe layers, respectively, corresponding to a 18% enhancement of the total magnetization compared with the calculated bulk value ($2.22 \mu_B$). For monolayer coverage the moment is $2.56 \mu_B$ which is enhanced by 16% compared to bulk. Unusual changes in the magnetic hyperfine interaction are found in going from a monolayer to a bilayer coverage. Comparison of the results to the theoretical ones of the clean Fe(110) to discuss the hybridization and the negative pressure effects. We discuss our results by comparing them to experimental results.