

Ir(001) 위의 철 단층의 자성에 대한 전자구조 연구

김동철*

한라대학교 전기전자공학과, 강원도 원주시 한라대 1길 32, 220-712

이재일

인하대학교 물리학과, 인천시 남구 용현동 253, 402-751

(2009년 9월 21일 받음, 2009년 10월 5일 최종수정본 받음, 2009년 10월 7일 게재확정)

Ir(001) 표면 위에 얹혀진 철 단층의 자성을 제일원리 전자구조 계산방법을 이용하여 이론적으로 탐구하였다. 비교를 위하여 Fe와 Ir이 규칙적으로 반반 섞인 위층에 대하여도 계산하였다. 모두 Fe로 이루어진 단층의 경우 철원자의 자기모멘트는 2.95 보어마그네톤으로 비교적 큰 값을 가졌으며, Fe와 Ir이 반반 섞인 위층에서 Fe의 자기모멘트는 2.83 보어마그네톤이었다. 이러한 자성과 전자구조의 자세한 면은 계산된 상태밀도와 스핀밀도를 통하여 논의한다. 각 위층 원자의 평형위치를 구하기 위해 총에너지와 원자힘 계산을 하였다. 그 결과 Fe 위층에서의 Fe 원자위치가 Fe와 Ir이 반반 섞인 위층의 Fe 위치보다 Ir 기판에 다소 가까웠다.

주제어 : Fe 위층, Ir(001), 표면자성, 전자구조

I. 서 론

자성을 갖지 않은 다양한 금속이나 부도체 표면 위에 얹혀진 층의 전이금속의 자성에 대한 연구는 저차원 자성의 발현이라는 본질적 문제와 관련되어 지난 20여 년 동안 이론적으로나 실험적으로 지속적인 관심을 끌고 있다[1-3]. 특히 제일원리에 의한 이론적 계산은 저차원 자성에 대한 이해의 폭을 넓히는데 커다란 기여를 하였다.

부도체 표면 위의 자성전이금속 박막 층에 대한 이론적 연구로 Li와 Freeman[4]이 MgO(001) 표면 위의 Fe 단층의 자기모멘트를 계산한 결과 순수한 철 단층의 경우(3.10 보어마그네톤)와 그리 큰 차이를 보이지 않는 3.07 보어마그네톤으로 거의 2차원적 자성을 나타냈다. Wu와 Freeman[5]은 이어서 MgO(001) 표면 위에서 Pd, Rh, Ru 등 4d 전이금속 단층의 전자구조를 계산하였으며, 그 결과 Rh와 Ru 단층은 자기모멘트를 가졌으나 Pd 단층은 자성을 가지지 않았다. 이러한 결과로부터 Pd의 경우 순수한 단층이 자성을 가진다는 것을 고려하면, MgO 기판과의 미세한 상호작용이 자성발현에 결정적인 영향을 미침을 알 수 있다. 이와 관련하여, Huang 등[6]은 Fe/MgO(001)계에 대한 중성자 산란 실험을 통해 이론적 계산과는 달리 자성을 발견하지 못하였다. 그 이유는 철 위층이 층층이 성장하지 않는 것이 주원인으로 밝혀졌으며, 이러한 연구에 동기를 얻어, Wu와 Freeman[7]은 Fe

ML/MgO(001)계에 Au 덧층이 자성에 미치는 영향을 이론적으로 고찰하였다. 이 때 Au 덧층의 영향으로 Fe 위층의 자기모멘트가 3.07에서 2.93 보어마그네톤으로 줄어들음을 발견하였으며, 이는 부도체보다는 금속과의 상호작용이 Fe의 자성에 더 큰 영향을 미친다는 것을 설명하고 있다. 실제로 Au(001) 위의 Fe 단층의 자기모멘트는 2.97 보어마그네톤으로 MgO(001) 위의 Fe 단층의 경우보다 0.14 보어마그네톤만큼 작았다[8].

이와 같이 금속 기판이 3d나 4d 전이금속 박막층의 자성에 미치는 영향을 연구하기 위해 상당히 많은 수의 연구가 이루어져 왔다. 여기에는 Cu, Ag, Au 등의 귀금속이나 4d 전이금속인 Pd(001) 기판 위의 Fe, Co, Ni, Cr, Mn 등의 박막층[9-18]의 자성에 대한 연구가 포함된다. 이러한 연구들의 주요한 결과는 박막층의 자기모멘트는 덩어리 상태에 비해 상당히 증가하며, Fe, Co, Ni 위층의 경우 이들 밑층 위에서 강자성을 가지는데 비해, Cr, Mn 등은 c(2×2) 구조의 반강자성을 가진다는 것으로, 자성박막 위층과 금속 밑층과의 상호작용이 미묘한 영향을 미침을 보여주고 있다.

위와 같은 결과와 달리 5d 전이금속인 W(001)를 기판으로 한 경우에는 3d 전이금속 위층의 자성이 거의 정반대의 결과를 준다. W(001) 위의 Fe 단층에 대한 실험결과들[19, 20]은 그 순 자기모멘트가 0인 결과를 주었으며, 이는 W(001)위의 Fe 단층이 c(2×2) 반강자성을 가진다는 에너지 띠 계산결과[21]와 부합하고 있으며, 최근의 스핀분극 홀기 꿰뚫기 현미경 실험결과[22]와도 일치한다. 좀 더 최근에, Ferriani 등

*Tel: (033) 760-1253, E-mail: dckim@halla.ac.kr

[23]에 의해 행해진 계산 결과는 W(001)을 밑층으로 두고 있는 3d 전이금속에서 V, Cr과 Mn 단층은 강자성을 가지는데 반해 Fe와 Co 위층은 $c(2 \times 2)$ 반강자성을 가진다고 보고하고 있어 앞서의 결과와 부합하고 있다. 다만, Ni 위층은 특이하게 자성을 가지지 않고 있다. 이들은 위와 같은 자성현상에 대해, 3d 전이금속 위층과 5d W 기판이 계면을 이루면서 이들의 3d나 5d 에너지 띠 채움이 달라지고 결과적으로 3d-5d 결합의 성격이 변하게 되어 교환상호작용 J의 부호가 달라지기 때문으로 설명하고 있다. 이러한 결과는 기판과 위층이 모두 금속일 경우 이들 사이의 상호작용에 따라 자성이 미묘하게 달라진다는 것을 다시 입증하고 있다.

최근에, Hamad 등[24]은 지금까지 별로 다루지 않았던, Ir(001) 표면 위에 3d 전이금속 즉 V, Cr, Mn과 Fe 단층이 위층으로 있을 경우의 자성을 이론적으로 계산하고 그 자성을 논의하였다. 이들의 계산 결과는 Cu, Ag, Au 등 귀금속을 기판으로 둔 경우와 같게 V, Cr, Mn 단층은 $c(2 \times 2)$ 반강자성 상태를 가지고 Fe 단층은 강자성 상태를 가졌다. 그러나, 이들의 계산은 허바드 해밀터니안(Hubbard Hamiltonian)에 하트리폭(Hartree-Fock) 근사에 근거한 밀접결합 방법을 이용하였기에, 좀 더 정확한 제일원리적 접근이 필요하다. 본 논문에서는 Ir(001) 표면 위에 Fe 단층과 Fe와 Ir이 반반 섞인 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}$ 단층이 있을 때의 자성을 FLAPW(Full potential linearized augmented plane wave) 방법[25]을 이용한 제일원리 에너지 띠 계산에 의해 탐구하고자 한다.

2절에서는 계산에 사용한 얇은 판 모형과 계산방법을 소개하고, 3절에서는 계산결과를 제시하고 이에 대한 논의를 한다. 4절에서 간략히 결론을 정리한다.

II. 얇은 판 모형 및 계산 방법

Ir(001) 위에 얹힌 Fe 단층(Fe/Ir(001))과 Fe와 Ir이 규칙적으로 반반 섞인 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}$ 단층($Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$)의 자성을 탐구하기 위해, 9개의 원자 층으로 이루어진 Ir(001)의 얇은 판 아래와 위쪽에 각각 Fe나 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}$ 층이 한 층씩 부착되어 11개의 원자 층으로 이루어진 2개의 얇은 판을 고려하였다. 비교를 위하여, 순수한 Fe와 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}$ 단층도 고려하였다. 표면층에 평행한 2차원 격자상수는 덩어리 Ir의 격자상수를 이용하여 Fe/Ir(001)의 경우는 5.133644 a.u., $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$ 계의 경우는 이 값의 $\sqrt{2}$ 배인 7.26 a.u.로 잡았다. 층간 간격도 일단 덩어리 Ir에서 (001)면간 간격으로 3.63 a.u.를 잡았으며, 위층 및 이들과 계면을 이루는 Ir(001) 표면 원자 층에서 각 원자들의 위치는 총에너지와 원자힘 계산[26, 27]을 통하여 최적화 위치를 구하였다.

이들 계의 자성을 탐구하기 위해 FLAPW 방법[25]을 이용

하여 Kohn-Sham 방정식[28]을 풀어 전자구조를 계산하였다. 교환상관 퍼텐셜에 대해 PW91 형태[29]의 일반기울기 근사(GGA)를 이용하였다. 원자가전자에 대해서는 스핀-궤도 상호작용을 고려하지 않고 준상대론적으로 취급하였으며, 핵심전자에 대해서는 디락 방정식을 직접 푸는 완전상대론적 취급을 하였다[30]. 에너지 고유값 계산은 줄일 수 없는 브릴루앙 영역을 9×9 로 분할하여 얻은 k-점에 대해 계산하였다.

Fe와 Ir 원자에 대해 각기 2.20 a.u.와 2.30 a.u.로 잡은 머핀-틴(muffin-tin) 구내에서, 퍼텐셜, 전하밀도와 파동함수는 각 운동량 l이 8보다 작은 값을 갖는 구조화함수를 이용하여 전개하였다. 스타함수와 기저함수를 위한 에너지 차단(cutoff) 값은 각기 256 Ry와 16.0 Ry로 잡았다. 입력과 출력의 전하밀도와 스핀밀도의 제곱평균-제곱근 값 차이가 각기 1.0×10^{-5} electrons/(a.u.)³ 보다 작아졌을 때 자체충족계산과정을 만족한 것으로 간주하였다.

III. 결과 및 논의

전자구조를 계산하는 과정에서 총에너지와 원자힘 계산을 이용하여 위층 원자들과 기판의 표면 Ir 원자층의 최적 위치를 계산하였다. 그 결과 Fe/Ir(001)계의 경우, 기판 Ir 표면층 원자가 0.11 a.u. 정도 바깥쪽으로 나오고, 위층 Fe 원자는 0.14 a.u. 정도 안쪽으로 들어가 층간 간격이 Ir(001) 면 사이

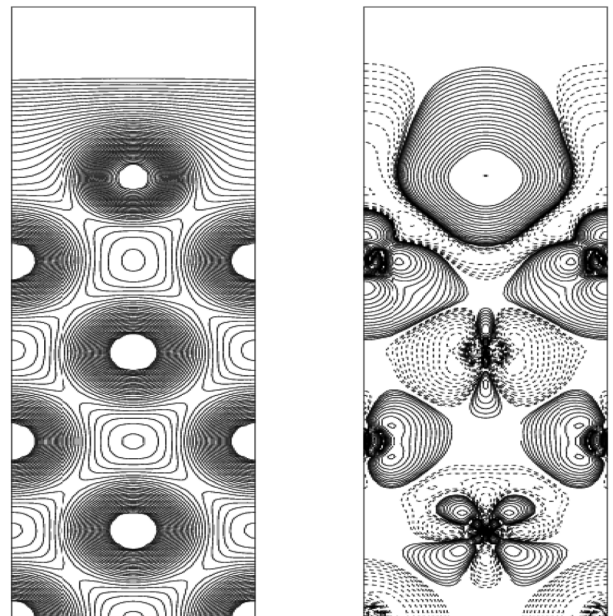


Fig. 1. The valence charge density (left panel) and spin density (right panel) for Fe/Ir(001). Contours on the vertical (110) plane start from $\pm 1.0 \times 10^{-4}$ e/a.u.⁴ and increase successively by a factor of $\sqrt{2}$. The solid and dashed lines indicate positive and negative spin density respectively.

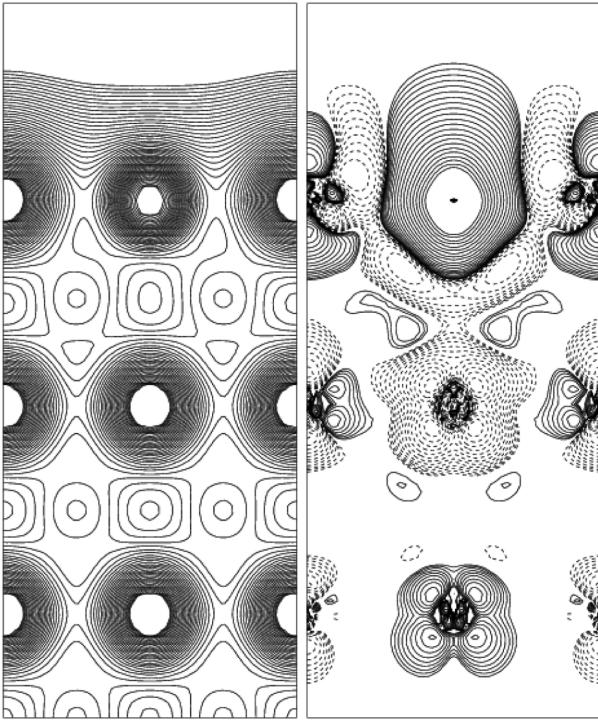


Fig. 2. The valence charge density (left panel) and spin density (right panel) for $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$.

의 간격 보다 0.25 a.u. 줄어든 3.38 a.u.가 되었다. $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$ 계의 경우, $Fe_{0.5}Ir_{0.5}$ 위층에서 Ir 원자위치는 거의 변화가 없었으며, Fe 원자는 Fe/Ir(001)계의 Fe 위층의 경우 (0.25 a.u.)보다 작은 0.07 a.u. 만큼 안쪽으로 들어갔다. 이와 같은 상황을 나타내는 전하밀도의 그림이 Fig. 1과 2에 주어 져 있다. Fig. 1 및 2에서 각기 왼쪽 패널에 주어진 전하밀 도를 보면, Fe/Ir(001)의 경우 Fe 원자로부터 분출된 p 전자 에 의해 표면 전하분포가 평평한 모양을 보이고 있다. $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$ 의 경우 앞서 기술하였듯이 위층 Ir 원자의 위 치는 거의 변화가 없고 Fe 원자만 다소 안쪽으로 들어가 표

면 전하밀도에 약간의 굴곡이 있다. 이렇게 Ir 원자의 위치는 변화가 없고, Fe 원자만 안쪽으로 들어간 이유는 Table I 과 II에 주어졌듯이 MT 구안의 각운동량 별 전자수를 보면 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$ 계에서 위층 Ir로부터 p 전자의 분출이 많아 이들이 Ir 원자가 안쪽으로 들어가는 것을 저지하기 때문이다.

Fig. 1과 2의 오른쪽 패널에 주어진 스핀밀도를 보면, Fe/Ir(001)계에서 Fe 원자의 스핀밀도의 분출이 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$ 계에서의 Fe 원자의 경우보다 큰 것으로 보아 당연히 전자의 자기모멘트가 클 것으로 예상된다. 실제로 이러한 예측은 Table I과 II에 주어진 각 Fe 원자의 MT 구내부의 전자수와 자기모멘트 값으로부터 확인할 수 있다. Fe/Ir(001)에서 Fe 원자의 자기모멘트는 2.95 보어마그네톤으로 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$ 계에서 Fe 원자의 자기모멘트인 2.83 보어마그네톤보다 크다. 이들 값들은 각기 이들 계와 같은 2차원 격자상수를 갖는 순 Fe 단층과 순 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}$ 단층의 Fe의 자기모멘트 값인 3.16 이나 3.44 보어마그네톤 보다 당연히 작은 값을 가진다. 여기서 순 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}$ 단층에서의 Fe의 자기모멘트 값이 순 Fe 단 층의 경우보다 큰 것은 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}$ 단층의 경우 Fe 원자간 간 격이 $\sqrt{2}$ 배 만큼 크기 때문이다. 그러나 Fe/Ir(001)계와 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$ 계에서 우리의 Fe 원자의 자기모멘트 값들은 Hamad 등의 계산보다 큰 데, 이로부터 Hamad 등의 계산방 법이 Fe의 자기모멘트를 과소하게 계산함을 알 수 있다.

Fig. 1 및 2의 스핀밀도 그림에서 Fe/Ir(001)의 경우 계면 Ir(I)이 양의 스핀밀도를 가지고 있어서 양의 자기모멘트 값을 가지며, 그 밑층 Ir(I-1)은 음의 스핀밀도를 가져 그 자기모멘 트가 음이 됨을 알 수 있다. 실제 계산 결과를 보면 Ir(I) 와 Ir(I-1)은 각기 0.03과 -0.01 보어마그네톤의 자기모멘트를 가 진다. 또한 $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$ 계에서 위층 Ir의 스핀밀도는 양의 값을 가짐을 알 수 있고, 그 계산 값은 0.05 보어마그네톤이 다. 이 값은 Hamad의 계산 결과인 0.57 보어마그네톤 보다 훨씬 작는데 이는 Hamad 등의 계산에서 Ir의 자기모멘트를 과대하게 계산하기 때문이다.

Table I. Number of *l*-decomposed spin-up and -down electrons in muffin-tin sphere for Fe atoms in Fe/Ir(001) system. For comparison, the data for Fe monolayer are also given.

Atom type	s (\uparrow/\downarrow)	p (\uparrow/\downarrow)	d (\uparrow/\downarrow)	Total (\uparrow/\downarrow)	Magnetic moment
Fe in Fe/Ir(001)	0.15/0.14	0.12/0.11	4.42/1.49	4.70/1.75	2.95
Fe in Fe ML	0.17/0.14	0.06/0.04	4.50/1.39	4.73/1.57	3.16

Table II. Number of *l*-decomposed spin-up and -down electrons in muffin-tin sphere for Fe atoms in $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$. The data for Fe atom in $Fe_{0.5}Ir_{0.5}$ monolayer are also given.

Atom type	s (\uparrow/\downarrow)	p (\uparrow/\downarrow)	d (\uparrow/\downarrow)	Total (\uparrow/\downarrow)	Magnetic moment
Fe in $Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)$	0.16/0.14	0.13/0.12	4.33/1.54	4.63/1.80	2.83
Fe in $Fe_{0.5}Ir_{0.5}$ ML	0.17/0.13	0.08/0.06	4.58/1.20	4.83/1.39	3.44

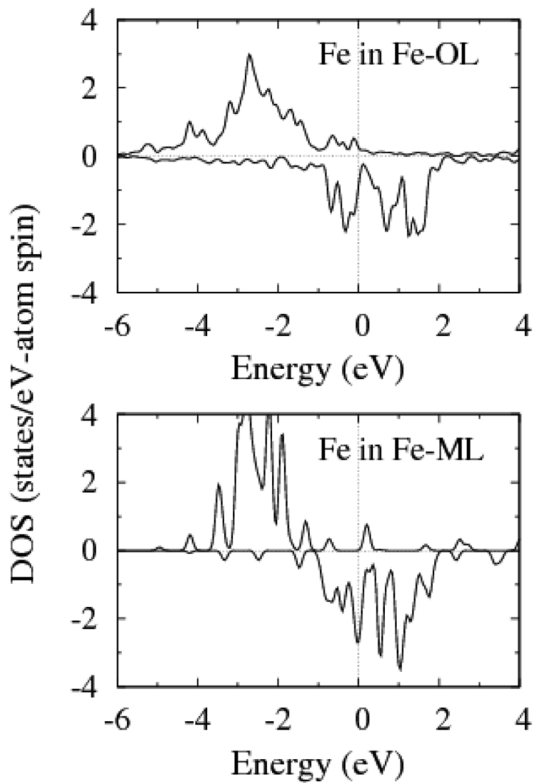


Fig. 3. The projected density of states for Fe atoms in Fe/Ir(001) (upper panel) and Fe monolayer (lower panel). Minority density of states are multiplied by -1.

전이금속 위층의 자성은 밀층 금속과의 상호작용에 민감하게 의존하는데, 이를 보기 위하여, Fig. 3 및 4에 주어진 Fe/Ir(001)과 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}/\text{Ir}(001)$ 계의 Fe 원자의 상태밀도를 살펴 보기로 한다. 비교를 위하여 순 Fe 단층과 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}$ 단층에서 Fe 원자의 상태밀도도 같이 주어졌다. Fig. 3에 주어진 Fe/Ir(001)에서 Fe 위층의 상태밀도를 순 Fe 단층의 상태밀도와 비교하며 보면, Fe 단층의 예리한 상태밀도가 Fe/Ir(001)의 경우에는 부드럽게 변화했는데 이는 Fe 3d와 밀층 Ir 원자에서 5d 상태와의 혼성 때문이며, 특히 Fe 원자의 다수 상태밀도에서 -0.5 eV와 페르미 에너지 사이에 보이는 상태밀도는 밀층 Ir과의 혼성을 입증하는 것이다. $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}/\text{Ir}(001)$ 계에서 Fe 원자의 상태밀도는 단층 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}$ 에서 Fe의 경우보다 더욱 부드러워졌는데 이는 밀층 Ir 및 위층 Ir과의 복합적인 혼성의 결과로 생각된다.

IV. 요약 및 결론

5d 전이금속 위에 있는 자성전이금속 박막의 자성을 고찰하기 위한 연구의 하나로, Fe/Ir(001)계와 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}/\text{Ir}(001)$ 계의 전자구조를 GGA 근사를 채용한 FLAPW 방법을 이용하

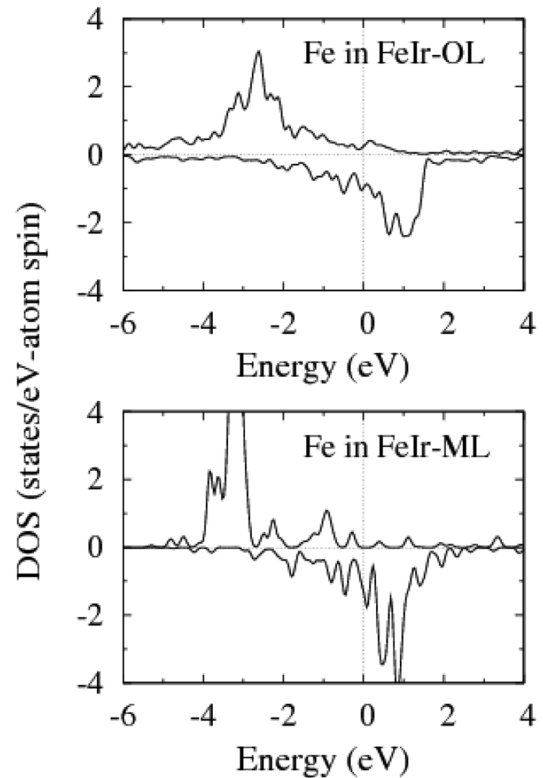


Fig. 4. The projected density of states for Fe atoms in $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}/\text{Ir}(001)$ (upper panel) and $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}$ monolayer (lower panel).

여 계산하였다. 또한 위층 원자들의 최적 위치를 결정하기 위해 총에너지와 원자힘 계산을 병행하였다. Fe/Ir(001)에서 Fe 원자가 안쪽으로 들어가는 정도가 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}/\text{Ir}(001)$ 계에서 Fe 원자가 안쪽으로 들어가는 정도보다 더 컸는데 이는 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}/\text{Ir}(001)$ 계에서 Ir 원자로부터 분출되는 p 전자의 양과 관계가 있다. Fe/Ir(001)계와 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}/\text{Ir}(001)$ 계에서 Fe 위층 원자의 자기모멘트는 각기 2.95와 2.83 보어마그네톤으로 Hamad 등의 계산결과에 비해 컸다. 또한 이들의 상태밀도를 보면 Fe/Ir(001)의 경우는 Ir 밀층과의 혼성, $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}/\text{Ir}(001)$ 계의 경우에는 위층 Ir 및 밀층 Ir과의 복합적 혼성이 영향을 미쳤음을 알 수 있다.

원자힘 계산에 의해 위층 원자들의 최적 위치를 결정한 결과 Fe/Ir(001)계의 Fe 원자가 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}/\text{Ir}(001)$ 계의 Fe 원자보다 안쪽으로 더 들어갔는데, 이는 $\text{Fe}_{0.5}\text{Ir}_{0.5}/\text{Ir}(001)$ 에서 Ir 원자로부터 분출되는 p 전자수와 관계가 있다.

참고문헌

- [1] A. J. Freeman and R. Wu, *J. Magn. Magn. Mater.*, **100**, 497 (1991).
- [2] T. Asada, G. Bihlmayer, S. Handschuh, S. Heinze, P. Kurz, and S. Bluegel, *J. Phys.: Condens. Matter*, **11**, 9347 (1999).

- [3] Z. Q. Qiu and S. D. Bader, *Surf. Sci.*, **438**, 319 (1999).
 [4] C. Li and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B*, **43**, 78 (1991).
 [5] R. Wu and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B*, **51**, 3408 (1995).
 [6] Y. Y. Huang, C. Liu, and G. P. Felcher, *Phys. Rev. B*, **47**, 183 (1993).
 [7] R. Wu and A. J. Freeman, *J. Magn. Magn. Mater.*, **137**, 127 (1994).
 [8] C. Li, A. J. Freeman, and C. L. Fu, *J. Magn. Magn. Mater.*, **75**, 201 (1988).
 [9] S. Bluegel, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 851 (1992).
 [10] S. Bluegel and P. H. Dederichs, *Europhys. Lett.*, **9**, 597 (1989).
 [11] S. Bluegel, B. Drittler, R. Zeller, and P. H. Dederichs, *Appl. Phys. A.*, **49**, 547 (1989).
 [12] R. Wu and A. J. Freeman, *J. Appl. Phys.*, **79**, 6500 (1996).
 [13] Z. Yang and R. Wu, *Phys. Rev. B*, **63**, 064413 (2001).
 [14] V. dos Santos and C. A. Kuhnen, *Thin Solid Films*, **350**, 258 (1999).
 [15] A. B. Klautau, P. R. Peduto, and S. Frota-Pessoa, *J. Magn. Magn. Mater.*, **186**, 223 (1998).
 [16] B. A. Hamad and J. M. Khalifeh, *Surf. Sci.*, **481**, 33 (2001).
 [17] S. Bluegel, M. Weinert, and P. H. Dederichs, *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 1077 (1988).
 [18] S. Bluegel, *Europhys. Lett.*, **9**, 597 (1989).
 [19] G. A. Mulhollan, R. L. Fink, J. L. Erskine, and G. K. Walters, *Phys. Rev. B*, **43**, 645 (1991).
 [20] J. Chen and J. L. Erskine, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 1212 (1992).
 [21] R. Wu and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B*, **45**, R7532 (1992).
 [22] R. Kubetzka, P. Ferriani, M. Bode, S. Heinze, G. Bihlmayer, K. von Bergmann, O. Pietzsch, S. Bluegel, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 087204 (2005).
 [23] P. Ferriani, S. Heinze, G. Bihlmayer, and S. Bluegel, *Phys. Rev. B.*, **72**, 024452 (2005).
 [24] B. A. Hamad, J. M. Khalifeh, and C. Demangeat, *Surf. Sci.*, **601**, 346 (2007).
 [25] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B*, **24**, 864 (1981), and references therein; M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B*, **26**, 4571 (1982).
 [26] W. Mannstadt and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B*, **55**, 13298 (1997).
 [27] J. I. Lee, W. Mannstadt, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B*, **59**, 1673 (1999).
 [28] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.*, **136**, B864 (1964); W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **140**, A1133 (1965).
 [29] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3865 (1996).
 [30] D. D. Koelling and B. N. Harmon, *J. Phys. C*, **10**, 3107 (1997).

Electronic Structure and Magnetism of Fe Monolayer on Ir(001)

Dong-Chul Kim*

Department of Electrical and Electronic Engineering, Halla University, Wonju, Kangwon-Do 220-712, Korea

Jae Il Lee

Department of Physics, Inha University, Incheon 402-751, Korea

(Received 21 September 2009, Received in final form 5 October 2009, Accepted 7 October 2009)

The magnetism of the Fe monolayer on Ir(001) substrate [Fe/Ir(001)] was investigated by the first-principles energy band method. For comparison, the Fe and Ir ordered-alloyed monolayer on Ir(001) [Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001)] was also considered. The calculated magnetic moments for Fe atoms in Fe/Ir(001) system and Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001) system are 2.95 and 2.83 bohr magnetons, respectively. The detailed aspects of the magnetism and electronic structures for these systems are discussed with the calculated density of states and spin densities. The optimized atomic sites for the overlayer Fe and Ir atoms were determined by the total energy and atomic force calculations. The Fe atoms in Fe/Ir(001) move closer to the substrate Ir layer than the Fe atoms in Fe_{0.5}Ir_{0.5}/Ir(001) do to the Ir substrate.

Keywords : Fe overlayer, electronic structure, magnetic moment, Ir(001)