

# 3d 및 4d 전이금속과 Pd가 c(2 × 2) 합금을 이룬 단층의 자성에 대한 제일원리 연구

김동철\*

한라대학교 전기전자공학과, 강원 원주시 한라대 1길, 220-712

최창식

인하대학교 물리학과, 인천시 남구 용현동 253, 402-751

(2010년 5월 24일 받음, 2010년 6월 17일 최종수정본 받음, 2010년 6월 17일 게재확정)

Pd과 3d(V, Ti) 및 4d(Mo, Ru, Rh) 전이금속이 c(2 × 2) 합금을 이루고 있는 단층의 자성을 제일원리적 FLAPW 에너지띠 방법을 이용하여 연구하였다. 이들 합금과 비교를 위하여 Pd와 V, Ti 및 Mo, Ru, Rh 원자로만 이루어진 단층의 전자구조도 계산하였다. 3d 원소인 V와 Ti 만으로 이루어진 단층의 경우, V는 반강자성, Ti의 경우는 강자성상태가 안정적이었으나, 이들이 Pd와 c(2 × 2) 합금을 이루었을 경우 모두 자기모멘트가 반대 방향을 가지는 준강자성 상태가 안정적이었다. 반면에 4d 원자인 Mo, Ru, Rh이 Pd와 c(2 × 2) 합금을 이룬 경우에는 자기모멘트들이 같은 방향을 가졌다. 자기모멘트 값을 보면, Ru이나 Rh의 경우 순수단층이나 Pd과 합금을 이룬 경우 그리 큰 차이를 보이지 않았으나, Mo의 경우 0.02  $\mu_B$ 에서 2.98  $\mu_B$ 로 급격히 증가하였다. 합금을 이루는 두 원소사이의 전하이동은 전기음성도에 따르게 됨을 알았다.

**주제어** : 3d, 4d 전이금속, 단층, 자성

## I. 서 론

제조기술의 발전에 따라, 이론적으로만 논의되었던 저차원 물질의 제조 가능성이 점차 증대되고 있다. 물질이 저차원으로 갈 경우, 일반적으로 구조적 측면이나 자성 등에서 덩치(bulk) 상태와 다른 물성을 나타내게 된다. 자성을 예로 들자면, 원래 덩치구조에서 비자성 이었던 3d나 4d 물질이 2차원 단층(ML: monolayer)이나 1차원 선형 구조(LC: linear chain)에서는 자성이 발현되기도 한다[1-5].

또한 귀금속이나 비자성 전이금속 위에 3d 또는 4d 비자성 전이금속을 단층으로 얹을 경우 자성이 생기기도 한다. 이러한 현상들에 대해 비교적 오래 전에 Blügel 등이 이론적으로 탐구하였다[3-5]. 이들은 특히 3d, 4d 및 5d 전이금속 단층을 귀금속인 금, 은이나 구리 등의 (001) 표면 위에 얹었을 때의 자성을 FLAPW(Full-potential Linearized Augmented-Plane-Wave) 전자구조 계산방법을 이용하여 연구하였다. 이에 따르면 덩치 상태에서 자성을 가지지 않는 3d 원소인 Ti이나 V, 그리고 4d 원소인 Ru이나 Rh의 단층은 강자성을 가지며, 그 자기모멘트의 크기는 슬레이터-폴링(Slater Pauling) 법칙에 부합한다고 보고하였다[3]. 또한 Pd 위에 3d 원소인 Ti을 얹을 경우에는 비자성상태를 유지하였으며, V을 얹을 경우에는 반강자성 상태가 되었다[4]. Ru이나 Rh 를 Pd (001) 위

에 얹었을 때, Ru은 원자 당 자기모멘트가 0.21  $\mu_B$ 를 갖는 강자성상태이었고, Rh단층은 비자성상태였다[5]. 한편, Nautiyal 등은, 3d, 4d 및 5d 원소에 대해, 1차원, 2차원, 3차원 상태에서의 전자구조를 FLAPW 방법 하에서 완전상대론적인 경우와 준상대론적인 방법을 적용하여 체계적으로 연구하였으며, 결합길이, 자기모멘트 등을 계산하고 자성을 논의하였다[1, 2].

어떤 금속 층을 얇게 다른 금속 표면 층에 올릴 경우, 위층 금속 원자들이 아래 층으로 파고 들어가 표면 합금을 이루는 경우도 많다. 이러한 경우와 관련하여 최근에 Khalifeh 등은 전이금속(Fe, V, Mo, Cr, Mn,)이 Pd(001) 위에 얹혀서 Pd과 c(2 × 2) 합금 구조를 가질 때의 자성을 연구하였다 [6, 7].

여기에서는 Pd과 비자성 전이금속 3d원소인 Ti, V 그리고 4d원소인 Mo, Ru, Rh이 c(2 × 2) 정사각형 구조를 이루는 단층에 대해 전자구조를 계산하고 자기상태를 연구하고자 한다. 3d나 4d 원소와 합금을 이루는 원소로 Pd를 택한 것은 Pd의 Pd 덩치[8]나 표면의 자성[9]이 독특한 양상을 나타내기 때문이다.

## II. 연구방법 및 모형

Pd과 다른 전이금속이 c(2 × 2) 구조의 합금을 이루는 단층을 고려하기 위해 Fig. 1과 같은 구조를 생각하였다. Fig. 1

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

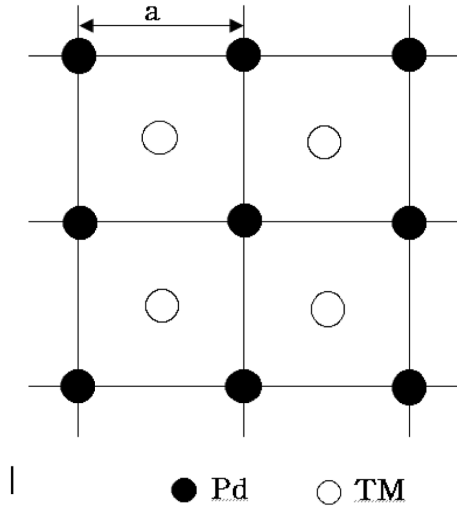


Fig. 1. Pd-TM alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer structure.

에서 검은 점은 Pd 원자를 나타내고 흰점은 Pd와  $c(2 \times 2)$  구조를 이루는 다른 원자(Ti, V, Mo, Ru, Rh)를 나타낸다. 전자 구조 계산 방법은 FLAPW 전자구조 계산방법[10]을 이용하였다. FLAPW 방법에서는 계산의 편의상, 핵을 중심으로

한 MT(Muffin Tin)구와 그 사이 영역을 고려하는데, 여기서는 원자들이 거의 접촉할 정도의 반지름을 생각하여 Pd나 다른 전이금속 원자에 대해 MT 반지름을 2.598 a.u.로 잡았다. 격자상수는 fcc Pd에서 (001)면을 따르는 단위세포로 한 변이  $a = 7.351$  a.u.인 정사각형을 생각하였다. 에너지띠를 계산하는  $k$ -점의 수는 36개로 Kohn-Sham 방정식[11]을 풀었으며, 보강평면파 등을 구성하기 위한 기저 함수의 개수는 270개로 하여 단위원자당 135개로 계산하였다.

교환상관 퍼텐셜 형태로 PW91 형[12]의 일반기울기 근사(GGA)를 이용하였다. 원자가전자들은 스핀-궤도 상호작용을 고려하지 않고 준상대론적으로 취급하였고, 핵심전자들에 대해서는 디락 방정식을 고려하는 완전상대론적 취급을 하였다[13]. 전하밀도와 스핀밀도가 각각  $1.0 \times 10^{-4}$  e/a.u.<sup>3</sup> 이하일 때 자체충족적 수렴조건을 만족하는 것으로 간주하였다.

### III. 결과 및 논의

Pd와 전이금속이  $c(2 \times 2)$  합금구조에 대한 계산에 앞서, 먼저 Pd 만으로 이루어진 단층에 대해 안정한 자성상태를 알아

Table I. The angular momentum projected number of electrons in MT sphere and magnetic moments (in  $\mu_B$  unit) for Pd monolayer.

	Magnetic state	Atom type	Spin	s	p	d	Total	Magnetic moment [ $\mu_B$ ]
Pd	FM	Pd	↑	0.17	0.06	4.37	4.61	0.36
			↓	0.16	0.06	4.02	4.25	

Table II. The angular momentum projected number of electrons in MT sphere and magnetic moments (in  $\mu_B$  unit) for Ti monolayer and Ti-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer.

	Magnetic state	Atom type	Spin	s	p	d	Total	Magnetic moment [ $\mu_B$ ]
Ti ML	FM	Ti	↑	0.18	0.13	1.74	2.06	1.48
			↓	0.16	0.06	0.35	0.57	
Ti-Pd ML	AF-like	Ti	↑	0.17	0.09	1.65	1.92	1.40
			↓	0.13	0.07	0.31	0.52	
		Pd	↑	0.25	0.10	4.10	4.46	-0.11
			↓	0.27	0.04	4.26	4.57	

Table III. The angular momentum projected number of electrons in MT sphere and magnetic moments (in  $\mu_B$  unit) for V monolayer and V-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer.

	Magnetic state	Atom type	Spin	s	p	d	Total	Magnetic moment [ $\mu_B$ ]
V ML	AFM	V	↑	0.21	0.07	2.75	3.03	2.32
			↓	0.16	0.10	0.44	0.71	
			↑	0.16	0.10	0.44	0.71	-2.32
			↓	0.21	0.07	2.75	3.03	
V-Pd ML	AF-like	V	↑	0.20	0.09	2.84	3.14	2.69
			↓	0.13	0.07	0.23	0.45	
		Pd	↑	0.24	0.09	4.10	4.43	-0.14
			↓	0.25	0.03	4.29	4.57	

**Table IV.** The angular momentum projected number of electrons in MT sphere and magnetic moments (in  $\mu_B$  unit) for Mo monolayer and Mo-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer.

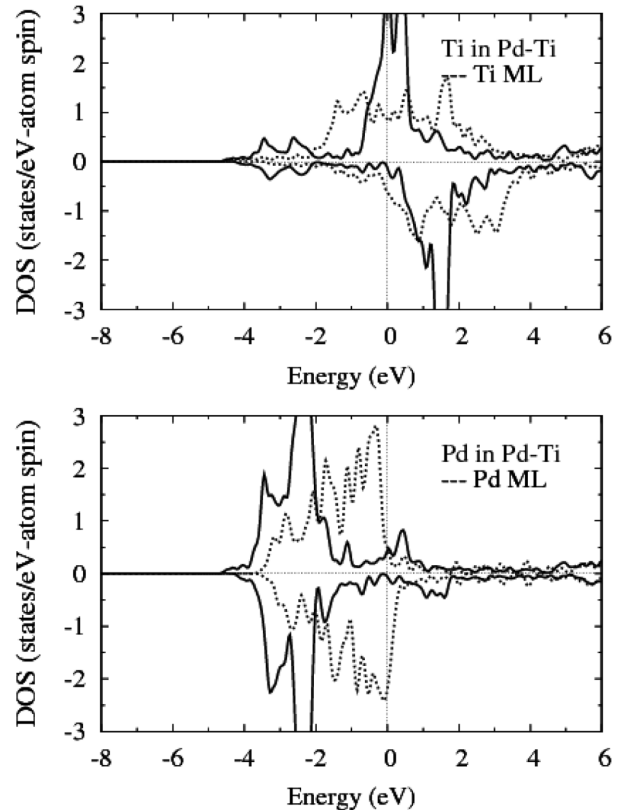
	Magnetic state	Atom type	Spin	s	p	d	Total	Magnetic moment [ $\mu_B$ ]
Mo ML	FM	Mo	↑	0.16	0.08	1.90	2.15	0.02
			↓	0.16	0.08	1.89	2.14	
Mo-Pd ML	FM-like	Mo	↑	0.18	0.08	3.31	3.58	2.98
			↓	0.11	0.05	0.42	0.59	
		Pd	↑	0.25	0.11	4.19	4.57	0.09
			↓	0.26	0.04	4.18	4.49	

내고, 그 자기모멘트 값을 계산하였다. 강자성, 반강자성 및 비자성(NM: nonmagnetic)등에 대한 총 에너지 계산으로부터 강자성 상태가, 비자성이나 반강자성 상태보다 단위세포 당 총에너지가 14 meV 및 7 meV 정도 낮아 강자성 상태가 안정함을 알았다. 이때의 원자 당 자기모멘트는 Table I에서 보듯이 0.36  $\mu_B$ 이다. 즉 덩치상태에서는 자성을 갖지 않는 Pd 이 단층을 이루면서 자성이 발현되는 것으로, 다른 연구 결과와 부합하는 결과를 준다[4].

Pd 원자와 3d 또는 4d 전이금속 원자들이  $c(2 \times 2)$  합금단층을 이루었을 때의 자성을 계산한 결과가 Table II~VI에 정리되어 있다. 비교를 위해, 전이금속만으로 이루어진 단층에 대한 결과도 각 Table에 함께 실었다. 3d 원자인 Ti과 V의 경우 이들 원소만으로 단층을 이룰 경우, Ti 단층은 강자성상태가 안정하였으나, V 단층은 반강자성상태가 안정하였다. 반면, 이들이 Pd와  $c(2 \times 2)$  합금상태를 이룰 경우 이들 원소와 Pd의 자기모멘트가 서로 반대방향인 준강자성(Ferrimagnetism) 상태가 강자성 상태보다 7 meV 정도 낮은 에너지를 가졌다. 전이금속 원소의 자기모멘트 크기를 보면 Ti 경우는 순수단층일 때의 1.48  $\mu_B$ 에서 합금을 이루었을 때 1.40  $\mu_B$ 로 작아진 반면, V 경우는 순수단층일 때의 2.32  $\mu_B$ 에서 합금을 이루었을 때 2.69  $\mu_B$ 로 커졌다. 합금단층에서 Ti과 V 원자의 자기모멘트의 크기를 보면 훈트(Hund) 규칙 [14]을 따라 거의 포화된 크기를 가짐을 알았다.

Ti-Pd와 V-Pd 합금구조에서 Pd가 음의 자기모멘트를 갖게 된 것은 Ti 원자로부터 Pd 원자 쪽으로 소수 s 전자가 상당수 이동한 결과이다. 실제로 Ti-Pd 합금에서 Pd 원자에서 MT 구 내의 전자수는 9.04이고 V-Pd 합금의 경우는 9.00으로 Pd 단층의 경우인 8.86보다 0.18에서 0.14 정도 크다. 그 이유는 Pd의 전기음성도 값[15]이 2.20으로 Ti와 V의 1.54와 1.63보다 크기 때문이다.

Fig. 2 및 3에 Ti-Pd 및 V-Pd 합금 단층의 원자별 상태밀도가 실선으로 그려져 있다. 비교를 위해 Ti 및 V 단층의 상태밀도와 Pd 단층의 상태밀도가 해당되는 원자에 점선으로 겹쳐 그려져 있다. 여기서 두드러지게 알 수 있는 것 중 한 가지는 Pd의 4d 상태가 순수단층을 이루었을 때 보다 합금



**Fig. 2.** The atom-projected density of states for Ti-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer (full lines) and for Ti and Pd monolayers (dotted lines in each panel). Spin-down values are multiplied by -1 and Fermi levels are set to zero.

을 이루었을 때 더 낮은 에너지 쪽으로 이동한 것이다. 이는 3d 전이금속의 3d 상태에 비해 Pd의 4d 상태가 더 낮은 에너지 상태에 있기 때문이다. 다른 하나는 Ti만으로 이루어진 단층의 상태밀도는 넓게 퍼져 있는데 반해(Fig. 2의 위쪽 패널에서 점선), Ti-Pd 합금에서 Ti 원자의 상태밀도(실선)는 폭이 좁아지고 봉우리로 예리하다는 점이다. 이는 Ti만의 단층은 강자성 상태가 안정적인데 반해 Ti-Pd 합금에서는 그 자기모멘트가 서로 반대방향으로 되어, Ti의 상태밀도가 Ti 단층에서와 같이 반강자성적 특성을 나타내기 때문이다. 이러한 점은 Fig. 3의 위쪽 패널에 주어진 V 단층 및 V-Pd 합금

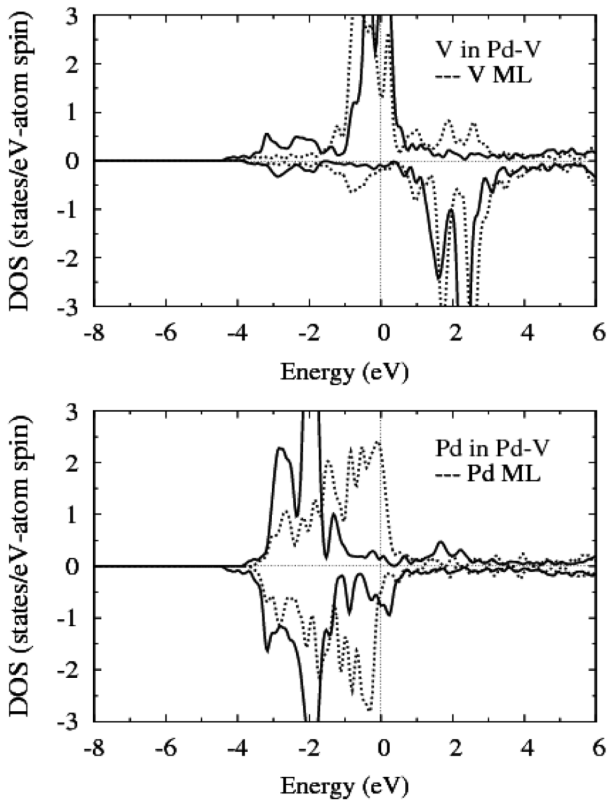


Fig. 3. The atom-projected density of states for V-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer (full lines) and for V and Pd monolayers (dotted lines in each pannel).

단층에서 V의 상태밀도를 비교하여 보면 이해할 수 있다.

4d 원자인 Mo, Ru, Rh이 Pd과  $c(2 \times 2)$  단층을 이루었을

때의 자성을 계산한 결과가 Table IV~VI에 정리되어 있다. 여기서도 비교를 위해, 4d 원자로만 이루어진 단층의 자료도 함께 실었다. 이들 Table에서 각각의 4d 원자에서 순수단층과 Pd와 합금을 이루었을 때의 자성상태를 보면 Mo, Ru 및 Rh 원자 모두에서 순수단층이나 합금단층 모두에서 강자성 상태가 안정적이었다. Mo-Pd 합금의 경우 강자성상태가 준강자성상태보다 에너지가 1.5 meV 낮았다. 3d 원소인 Ti과 V 이 Pd와 합금단층을 이루었을 때는 자기모멘트 방향이 서로 반대이고, 4d 원소인 Mo, Ru 및 Rh가 Pd와 단층을 이루었을 때는 자기모멘트 방향이 같은 것은 이들 원소에서 3d 전자와 4d 전자들이 Pd의 4d 전자와 상호작용하는 교환상호작용의 부호가 다르기 때문으로 생각된다.

Table IV~VI에서, 순수단층과 합금단층에서 4d 원자들의 자기모멘트 크기를 비교하여 보면, Ru 및 Rh의 경우는 합금을 이룰 경우 Ru과 Rh의 자기모멘트는 각각  $2.64 \mu_B$  및  $1.46 \mu_B$ 으로, Ru과 Rh의 자기모멘트가 각각  $2.21 \mu_B$  및  $1.45 \mu_B$ 인 순수단층의 경우에 비해 다소 증가하였다. 이에 반해 Mo의 경우는 순수단층의 경우  $0.015 \mu_B$ 에서 합금을 이룰 경우  $2.98 \mu_B$ 로 급격히 증가하였다. 이는 합금을 이루면서 4d 원자들 사이의 거리가 증가하면서 자성이 크게 발현하고 훈트 규칙에 따라 자기모멘트를 가지기 때문으로 보인다. 이와 같은 상황이 Fig. 4에서 Mo 단층과  $c(2 \times 2)$  Mo-Pd 단층에서 Mo 원자에 대한 상태밀도에 반영이 되어 있다. Mo 단층에서 퍼져 있던 상태밀도가  $c(2 \times 2)$  Mo-Pd 단층에서는 띠폭이 줄어들면서, 다수 스핀 상태는 거의 채워진 반면, 소수 스핀은 거의 비어 있는 것을 확인할 수 있다.

Table V. The angular momentum projected number of electrons in MT sphere and magnetic moments (in  $\mu_B$  unit) for Rh monolayer and Rh-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer.

	Magnetic state	Atom type	Spin	s	p	d	Total	Magnetic moment [ $\mu_B$ ]
Rh ML	FM	Rh	↑	0.19	0.07	4.31	4.58	1.45
			↓	0.16	0.07	2.88	3.13	
Rh-Pd ML	FM-like	Rh	↑	0.19	0.06	4.31	4.71	1.46
			↓	0.14	0.06	2.90	3.11	
		Pd	↑	0.19	0.07	4.44	4.71	0.55
			↓	0.19	0.07	3.89	4.16	

Table VI. The angular momentum projected number of electrons in MT sphere and magnetic moments (in  $\mu_B$  unit) for Ru monolayer and Ru-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer.

	Magnetic state	Atom type	Spin	s	p	d	Total	Magnetic moment [ $\mu_B$ ]
Ru ML	FM	Ru	↑	0.20	0.08	4.01	4.30	2.03
			↓	0.16	0.08	2.03	2.27	
Ru-Pd ML	FM-like	Ru	↑	0.21	0.07	4.26	4.55	2.64
			↓	0.14	0.06	1.69	1.91	
		Pd	↑	0.21	0.08	4.43	4.74	0.53
			↓	0.21	0.07	3.91	4.20	

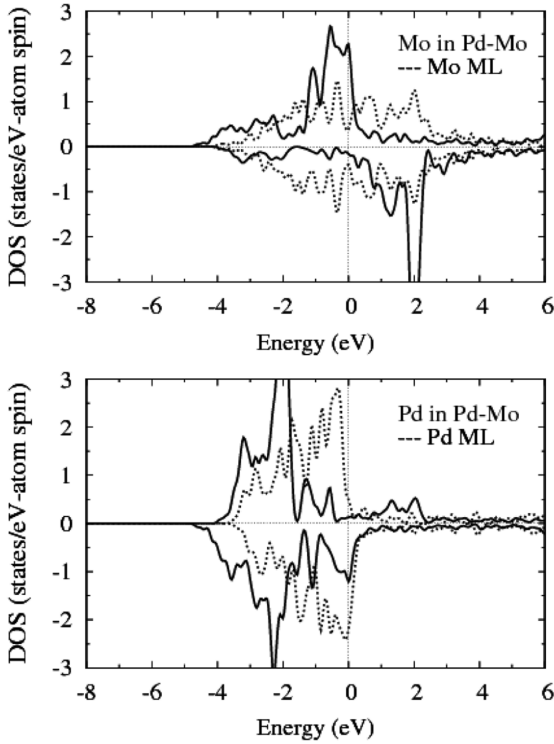


Fig. 4. The atom-projected density of states for Mo-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer (full lines) and for Mo and Pd monolayers (dotted lines in each panel).

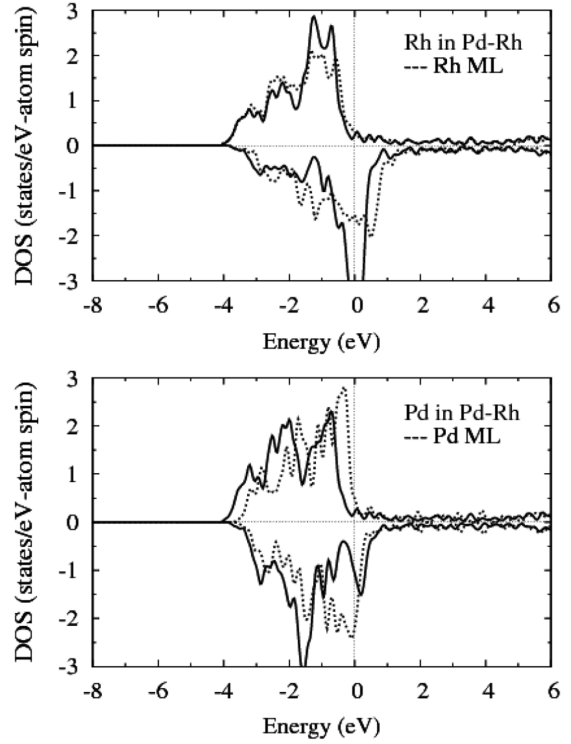


Fig. 6. The atom-projected density of states for Rh-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer (full lines) and for Rh and Pd monolayers (dotted lines in each panel).

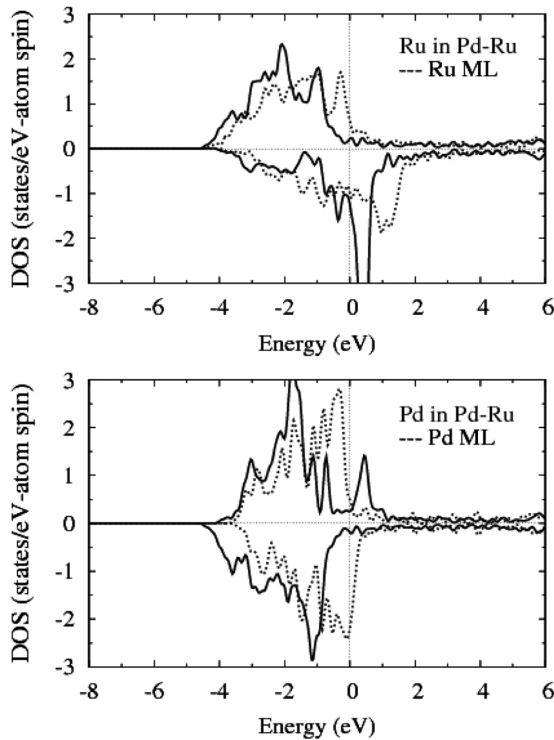


Fig. 5. The atom-projected density of states for Ru-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer (full lines) and for Ru and Pd monolayers (dotted lines in each panel).

4d 원소인 Mo, Ru, Rh이 Pd와  $c(2 \times 2)$  합금을 이룬 경우에도 이들 원자들 사이의 전하이동에 대해서도 전기음성도와 관련하여 살펴 볼 수 있다. 전기음성도가 2.20인 Pd와 비슷한 전기음성도를 가진 Mo(2.16)이나 Ru(2.20)과 Pd 사이에는 전하이동이 거의 없음을 Table IV 및 VI로부터 알 수 있다. 반면, Pd 보다 전하음성도가 2.28로 Pd 보다 다소 큰 Rh의 경우, 다소의 전자가 Pd에서 Rh 쪽으로 이동하여 Rh 단층의 경우보다 Rh-Pd 단층의 경우 Rh의 전자수가 약 0.05 증가하였음을 Table V로부터 확인할 수 있다.

#### IV. 결론 및 요약

3d 및 4d 전이금속인 Ti, V, Mo, Rh, Ru 등이 Pd와 합금을 이룬  $c(2 \times 2)$  단층의 자성을 FLAPW 에너지 띠 계산 방법을 이용하여 탐구하였다. 비교를 위하여 이들 3d와 4d 원자만으로 이루어진 단층에 대해서도 계산을 수행하였다. 단층에서 단위세포를 이루는 정사각형의 격자상수는 Pd(001)면과 같이 7.351 a.u.로 잡았고, MT 구 반지름은 2.598 a.u.로 택했다.

계산 결과, 3d 원소의 경우, 순수단층에서 반강자성상태를 보인 V은 Pd와  $c(2 \times 2)$  합금 단층을 이루어도 그 자기모멘

트가 Pd와 반대방향이었으나, Ti의 경우는 순수단층에서는 강자성상태였으나 합금단층에서 그 자기모멘트가 Pd와 반대방향으로 바뀌었다. Ti에서 자성상태의 변환은 상태밀도 모양에 반영되어 있다.

Mo, Ru, Rh 등의 4d 원소와 Pd가 합금단층을 이룬 경우에는, 3d의 경우와 달리, 순수단층과 같이 모두 강자성상태가 안정하였다. 즉 3d 원소와 Pd가 합금단층을 이룬 경우에는 반강자성상태가, 4d 원소가 Pd가 합금을 이룬 경우는 강자성상태가 안정하였다. 이러한 차이는 3d 전자 및 4d 전자가 각각 Pd의 d 전자와 상호작용하는 교환상호작용의 부호가 다르기 때문으로 생각된다.

합금단층에서, 3d와 4d 원자의 자기모멘트는, Ti과 V는 각각 1.40과 2.69  $\mu_B$ 이고, Mo, Ru, Rh의 경우는 각각 2.98, 2.64, 1.46  $\mu_B$ 로서 대략 훈트 규칙을 따르고 있다.

합금단층을 이루면서 3d 및 4d 원소와 Pd 사이의 전하이동을 이들의 전기음성도 값과 계산된 MT 구내의 전자수를 이용하여 검토하여 보았다. Pd 보다 전기음성도가 상당히 작은 Ti과 V의 경우에는 합금을 이루면서, Pd 쪽으로 전하이동이 있었으며, Pd 보다 전기음성도가 유일하게 큰 Rh의 경우에는 Pd 쪽에서 Rh 쪽으로 전하이동이 다소 있었음을 알았다.

### 참고문헌

[1] Tashi Nautiyal, T. H. Rho, and K. S. Kim, Phys. Rev. B **69**,

- 193404 (2004).  
 [2] Anu Bala, Tashi Nautiyal, and K. S. Kim, Phys. Rev. B **74**, 174429 (2006).  
 [3] S. Blügel, M. Weinert, and P. H. Dederiches, Phys. Rev. Lett. **60**, 1077 (1988).  
 [4] S. Blügel, Europhys. Lett. **18**, 257 (1992).  
 [5] S. Blügel, B. Drittler, R. Zeller, and P. H. Dederiches, Appl. Phys. A **49**, 547 (1989).  
 [6] J. M. Khalifeh and B. A. Hamad, Physica B **321**, 230 (2002).  
 [7] B. A. Hamad and J. M. Khalifeh, Surf. Sci. **481**, 33 (2001).  
 [8] S. C. Hong, J. I. Lee, and R. Wu, Phys. Rev. B **75**, 172402 (2007).  
 [9] S. C. Hong and J. I. Lee, J. Korean Phys. Soc. **52**, 1099 (2008).  
 [10] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981).  
 [11] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964); W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).  
 [12] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).  
 [13] D. D. Koelling and B. N. Harmon, J. Phys. C **10**, 3107 (1977).  
 [14] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics 7th Ed, Wiley, New York, p. 424 (1996).  
 [15] L. Pauling, Nature of the Chemical Bond. Cornell University Press. Ithaca, pp. 88-107 (1960).

## Electronic Structure and Magnetism of (3d, 4d)-Pd Alloyed $c(2 \times 2)$ Monolayers

Dong-Chul Kim\*

Department of Electrical and Electronics Engineering, Halla University, Wonju 220-712 Korea

Changsik Choi

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

(Received 24 May 2010, Received in final form 17 June 2010, Accepted 17 June 2010)

We investigated the electronic structure and magnetism of the (3d, 4d)-Pd alloyed  $c(2 \times 2)$  monolayer systems, by use of the FLAPW band method. For comparison, pure 3d- and 4d-transition metal monolayers are also considered. We found that the antiferromagnetic configuration of pure V monolayers is sustained in the V-Pd alloy system, while the Ti-Pd alloy system is changed to antiferromagnetic configuration from the ferromagnetic state in pure Ti monolayer. The 4d TM (Mo, Ru, Rh)-Pd monolayers are found to be stable in ferromagnetic configurations. The magnetic moments of Ru and Rh atoms in Ru-Pd and Rh-Pd systems are almost same with those of pure Ru and Rh monolayers, while the magnetic moment of Mo atom is increased to 2.98  $\mu_B$  in Mo-Pd alloyed system from the value of Mo monolayer, 0.02  $\mu_B$ .

**Keywords** : 3d and 4d transition metal, monolayer, magnetism