





그림 1 Layer-projected spin-polarized density of states (DOS) of the V(S) and W(S-1) layers. The spin down DOS values are factored by -1 and the  $s+p$  contributions are magnified by a factor of 10 for easy comparison. Fermi level  $E_F$  is set to zero. The calculated magnetic moments (in units of  $\mu_B$ ) of each layer is also presented.

### 3. 결과 및 고찰

그림 1에 V(S) 층과 W(S-1) 층의 상태밀도와 자기모멘트를 나타내었다. V(S) 층의 자기모멘트는  $1.35 \mu_B$ 로 계산되었다. 이 값은 Fu 등[2]이 Ag(001) 위에 V 단층이 얹혀졌을 경우에 대해 이론적으로 예측한 값인  $1.99 \mu_B$  보다 작은 값이나, 덩치 V이나 W이 비자성 물질인 점을 고려할 때 대단히 큰 자기모멘트이다. V의 3d 상태는 매우 큰 스핀 분극을 보이는 반면, W의 4d 상태의 스핀 분극은 매우 작다. 그러나,  $-4 \sim -1$  eV 영역에 걸쳐 볼 수 있는 강한  $sp$  띠 혼성이 W(S-1) 층의 작은 자기모멘트의 원인으로 여겨진다.

### 4. 참고 문헌

- [1] A. J. Freeman and Ru-qian Wu, J. Magn. Mater. **100**, 497 (1991); 홍순철, 이재일, 한국자기학회지 **5**, 315 (1995).
- [2] C. L. Fu, A. J. Freeman, and T. Oguchi, Phys. Rev. Lett. **54**, 2700 (1985); S. Blügel and P. H. Dederichs, Europhys. Lett. **9**, 597 (1989); J. E. Ortega and F. J. Himpsel, Phys. Rev. B **47**, 16441 (1993); P. Pervan, T. Valla, and M. Milun, Surf. Sci. **397**, 270 (1998).
- [3] Iskander G. Batyrev, Jun-Hyung Cho, and Leonard Kleinman, Phys. Rev. B **63**, 172420 (2001); R. Robles, J. Izquierdo, A. Vega, and L. C. Balbás, Phys. Rev. B **63**, 172406 (2001).
- [4] In Gee Kim and J. I. Lee, Current Appl. Phys. **1**, 183 (2001); G. Bihlmayer, T. Asada, and S. Blügel, Phys. Rev. B **62**, R11937 (2000); B. A. Hamad, J. M. Khalifeh, and C. Demangeat, Surf. Sci. **481**, 119 (2001).
- [5] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981); M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **26**, 1629 (1982).
- [6] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed. (Wiley & Sons, New York, 1996), p. 23.
- [7] U. von Barth and L. Hedin, J. Phys. C **5**, 1629 (1972).