

# Fe-Al 전이금속 화합물의 자성과 결정구조의 상관관계에 대한 밀도범함수연구

윤원석 · 김인기\*

포항공과대학교 철강대학원, 경북 포항시 남구 효자동 산31, 790-784

(2011년 3월 25일 받음, 2011년 4월 18일 최종수정본 받음, 2011년 4월 18일 게재확정)

Fe-Al 계의 전이금속 화합물은 구조적 안정성과 자성에 대한 이견이 많은 것으로 알려져 있다. 본 연구에서는 B2, L1<sub>2</sub>, 및 D0<sub>3</sub> 구조를 갖는 Fe-Al 계 화합물의 자성과 원자구조의 상관관계를 논의하기 위해 전전자 총퍼텐셜선형보강평면파(all-electron full-potential linearized augmented plane wave; FLAPW) 방법을 이용하여 일반기울기 근사(generalized gradient approximation; GGA) 하에서 계산하였다. 고려한 모든 구조에서 강자성이 비자성에 비해 안정한 것으로 계산되었다. Fe 원자의 계산된 스핀 자기모멘트는 B2, L1<sub>2</sub> 구조에서 각각 0.771 μ<sub>B</sub>, 2.373 μ<sub>B</sub>의 값을 얻었고, D0<sub>3</sub> 구조의 Fe(I) 및 Fe(II) 원자들은 각각 2.409 μ<sub>B</sub>, 1.911 μ<sub>B</sub>로 계산 되었다. Fe<sub>3</sub>Al의 같은 조성을 갖는 L1<sub>2</sub>와 D0<sub>3</sub> 구조간의 안정성을 조사하기 위하여 형성 엔탈피 계산을 통해 강자성 상태에서 16 meV/atom의 에너지 차이로 D0<sub>3</sub> 구조가 L1<sub>2</sub> 구조보다 더 안정함을 확인하였다. 이 결과는 실험연구와 잘 일치 하며, 원자구조와 전자구조의 분석을 통해 구조적 안정성과 자성에 대해 이해하였다.

주제어 : FeAl 화합물, 제일원리계산, 자성, 결정구조, 전자구조

## I. 서 론

Fe-Al 계의 금속간 화합물은 낮은 밀도를 가지고, 고온에서 높은 강도와 내마모성 및 내식성이 우수하며, 원재료의 가격이 저렴하여 널리 연구되고 있다[1]. 이와 같은 좋은 특성으로 인해 자동차 및 항공우주 산업의 차세대 고온 구조용 신소재로 응용을 기대하고 있다[2]. 그러나 대량생산에 장애가 되는 여러 문제점들이 아직 해결되지 않고 있다. 이중 가장 심각한 문제로 지적되는 큰 저온 취성과 고온에서 결정구조가 불규칙해지면서 나타나는 내크리프성(creep resistance)이 낮아진다는 것이다[3, 4]. Fe-Al 계의 취성의 원인을 요약해보면, 수소취화(hydrogen embrittlement), 역위상경계(anti-phase boundary; APB)와 전위(dislocation)의 상호작용, 입계 파괴(intergranular fracture), 그리고 매우 낮은 APB 에너지에 기인한 개별 전위의 증가를 들 수 있다[4, 5]. 그리고 Fe-Al 금속간 화합물의 연성-취성 전이온도(ductile-brittle transition temperature; DBTT)는 약 350~450°C이며, 이 DBTT를 크게 낮추는 것도 도전해 볼만한 과제이다.

이전에 보고된 실험과 이론적인 조사에 의하면 Fe-Al 계의 금속간 화합물의 구조적 안정성과 자성에 대한 많은 연구가 있었다. Al이 0~54 at.%로 함유된 Fe-Al 계의 상태도[6]에 따르면, 온도가 낮아짐에 따라 불규칙상인 체심입방(body centered cubic; bcc) 구조의 α Fe로부터 규칙상인 B2 구조의 FeAl을 거쳐 약 550°C 부근에서 규칙상인 D0<sub>3</sub> 구조의 Fe<sub>3</sub>Al로 구조적 상변화가 생기게 된다. 규칙상인 B2 FeAl의

자기모멘트를 아직까지 실험적으로 검출하지는 못하였고, 통상 Cuire-Weiss형태의 상자성체로 분류하기도 한다[7]. 반면 밀도범함수이론(density functional theory; DFT)을 이용한 이론연구에서는 일반적으로 강자성(ferromagnetic; FM) 상태를 자기적 기저상태로 예측하여 실험적 결과와 이견이 있다[8-11]. 이와 같은 이견의 원인으로는 FM, spin-spiral, 반강자성(antiferromagnetism), 상자성(paramagnetism)의 서로 다른 스핀 배열들이 에너지적으로 매우 가까우며, 실험적으로 어떤 작은 결합이 시료의 자기 상태에 큰 영향을 끼쳤는지도 모른다[9, 10]. Mohn 등[12]은 소위 LSDA+U(local spin density approximation+U)를 이용하여 U값이 3.7 eV 이상에서 비자성(nonmagnetic; NM) 상태가 됨을 보고하기도 하였다. 그러나 LSDA+U의 자기위치(on-site) Coulomb 반발에너지 U값의 임의성으로 인해 Mohn 등의 이론적 결과가 실제 기저상태를 잘 표현했다고 보기에는 무리가 따른다.

한편, D0<sub>3</sub> 구조를 갖는 Fe<sub>3</sub>Al의 자기적 기저상태는 실험 및 이론적인 연구를 통해 FM 상태가 안정된다고 알려져 있다[11, 13, 14]. Fe<sub>3</sub>Al과 같은 조성을 갖는 면심입방(face centered cubic; fcc) 구조를 기본으로 한 L1<sub>2</sub> 구조는 D0<sub>3</sub> 구조보다 실험적으로 불안정하다고 알려 있다. Lechermann 등[11]은 mixed-basis pseudopotential(MBPP)와 full-potential linearized augmented plane wave(FLAPW) 방법을 통해 교환상관 퍼텐셜(exchange-correlation potential)의 선택에 따라 구조적 기저상태가 다르다고 보고하였다. 최근의 Kellou 등[14]에 의하면 PBE형태[15]의 일반기울기 근사(generalized gradient approximation; GGA) 하에서 ultra-soft pseudopotential (USPP)를 통해 L1<sub>2</sub> 구조보다 D0<sub>3</sub> 구조가 안정하다고 보고하는

\*Tel: (054) 279-9014, E-mail: igkim@postech.ac.kr

등, 구조 및 자기적 기저상태에 대한 이견이 존재하고 있다.

본 논문에서는 위에서 언급한 불명확한 Fe-Al 계의 화합물의 구조적 안정성과 자성에 대해 제일원리계산 방법으로서 QMD-FLAPW 소프트웨어 패키지에서 제공하는 전전자 총퍼텐셜선형보강평면파(all-electron FLAPW)[16]을 이용하여 연구하였다. 이 FLAPW 방법론은 전자밀도 및 퍼텐셜에 대한 아무런 형태 근사 없이 핵심전자를 포함해 모든 전자를 다루기 때문에 자성 화합물 또는 표면과 계면의 물성을 알고자 할 때 큰 강점이 있다[17-22].

### II. 계산 방법

Fe-Al 화합물의 전자구조와 자성을 계산하기 위해서 교환-상관퍼텐셜은 PBE형태[15]의 GGA 하에서 FLAPW 방법을 이용하여 Kohn-Sham 방정식[23]을 자체충족적으로 풀었다. 에너지 고유값 계산은 3차원 브릴루앙 영역(Brillouin zone; BZ)을 Monkhorst-Pack[24]의  $13 \times 13 \times 13$  격자로 나누어 못 줄이는 BZ의 84 k-점에 대해 계산하였다. 이들 에너지 고유값과 고유함수를 통해 향상된 사면체(improved tetrahedron) 방법[25]을 통해 전하밀도와 상태밀도를 구하였다. 머핀-틴(muffin-tin; MT) 구의 반지름을 Fe 원자와 Al 원자 모두 1.164 Å로 채택하였고, 각 MT 구내의 퍼텐셜, 전하밀도 및 파동함수를  $l_{max} = 8$ 까지의 살창조화함수로 전개하였다. MT 구 사이 영역에서는 에너지 절단이  $4.5(2\pi/a)$ 인 평면파를 이용하여 파동함수를 기술하였고, 퍼텐셜과 전하밀도는  $18(2\pi/a)$  에너지 절단을 갖는 평면파로 전개하였다. 여기서  $a$ 는 고려한 계의 격자상수 값을 뜻한다. 앞서 선택한 BZ 격자 그물과 평면파 에너지 절단값들은 본 계산의 정밀도를 보증한다[22]. MT 구 바깥으로 새어 나온 약간의 핵심전자는 원자가 전자와 Gram-Schmit 직교화 과정을 통해 직교하도록 만들고 이를 사이영역 전자에 포함하여 취급하였다[26]. 입력과 출력의 전하밀도와 스핀밀도의 제곱-평균-제곱근 값의 차이가  $1 \times 10^{-4} e/a.u.^3$  이하일 때 자체충족조건을 만족하는 것으로 간주하였다.

### III. 구조적 모형화

Fig. 1에서는 B2, L1<sub>2</sub>, 및 D0<sub>3</sub> 구조를 갖는 Fe-Al 화합물을 각각 나타내었다. 이때 Fe 원자는 검은색과 회색의 구로 표현하였고, Al 원자는 하얀색의 구로 표현하였다. B2 구조는 bcc 구조에 Fe와 Al 원자가 1:1로 치환된 경우이고, L1<sub>2</sub> 구조는 fcc 구조의 가장자리 위치에 Al 원자로 치환된 경우이다. 마지막으로 D0<sub>3</sub> 구조는 기본적으로 bcc 구조의  $2 \times 2 \times 2$ 배이며, 여기에는 3개의 동등하지 않은(nonequivalent)

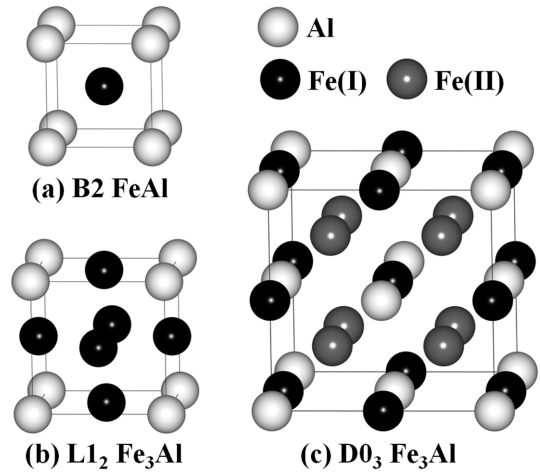


Fig. 1. Computational models for (a) B2 FeAl, (b) L1<sub>2</sub> Fe<sub>3</sub>Al, and (c) D0<sub>3</sub> Fe<sub>3</sub>Al. The Fe (Al) atoms are represented by black and grey (white) spheres, respectively.

위치가 존재한다. 첫째 4a 위치는 (0, 0, 0), (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2), (0, 1/2, 1/2)이고, 둘째 4b 위치는 (1/2, 1/2, 1/2), (0, 0, 1/2), (0, 1/2, 0), (1/2, 0, 0)이다. 마지막으로 8c 위치는  $(\pm 1/4, \pm 1/4, \pm 1/4)$ ,  $(\pm 3/4, \pm 3/4, \pm 1/4)$ ,  $(\pm 3/4, \pm 1/4, \pm 3/4)$ ,  $(\pm 1/4, \pm 3/4, \pm 3/4)$ 이다. 따라서, Fig. 1(c)에서는 4a 위치에 Al 원자가 4b 위치에는 Fe(I) 원자가 8c 위치에는 Fe(II) 원자가 치환된 D0<sub>3</sub> 구조를 보여준다. 이 구조에서 흥미로운 점은 4b 위치에 Fe(I) 원자가 아닌 Al 원자로 바뀌게 되면 이는 B2 구조가 되며, 마찬가지로 4a 위치에 Al 원자 대신 Fe 원자가 바뀌고, 8c 위치에 Fe(II) 원자가 Al 원자와 바뀌게 되면 이것 역시 B2 구조가 됨을 알 수 있다.

격자 상수를 변화시키면서 13개의 격자 상수에 대한 총에너지 값을 구한 후, 이들 값을 최소화방법을 이용하여 universal equation of state (EOS)함수[27]를 구한 후 평형 격자상수를 구하였다. 이렇게 구한 총에너지와 평형 격자상수로부터 구조적 안정성을 이해하기 위하여, 원자당 형성 엔탈피(formation enthalpy,  $\Delta H$ )의 계산을 수행하였다. 온도가 0 K이고 압력이 0인 조건에서 엔탈피( $H$ )는 최적화된 격자 상수에서의 총에너지라고 할 수 있다. 따라서 Fe와 Al의 원소로 구성된 2원계 화합물의 원자당  $\Delta H(Fe_mAl_n)$ 는 다음과 같다.

$$\Delta H(Fe_mAl_n) = \frac{H(Fe_mAl_n) - mH(Fe) - nH(Al)}{m + n} \quad (1)$$

여기서,  $m$ 과  $n$ 은 각각 Fe와 Al의 원자수를 나타내고, 엔탈피  $H(Fe)$ 와  $H(Al)$ 은 각각 구조적 기저상태인 bcc와 fcc 구조에서의 원자당 총엔탈피를 뜻한다.

**Table I.** Calculated equilibrium lattice constant (in Å), formation enthalpy ( $\Delta H$ , in meV/atom), atomic volume ( $\omega_0$ , in Å<sup>3</sup>), and bulk modulus ( $B_0$ , in GPa) for Fe-Al ordered compounds.

System	Magnetic state	Lattice constant	$\Delta H$	$\omega_0$	$B_0$
B2 FeAl	NM	2.871	-296.6	11.83	179
	FM	2.877	-341.0	11.91	175
L1 <sub>2</sub> Fe <sub>3</sub> Al	NM	3.553	+166.6	11.21	216
	FM	3.654	-172.1	12.20	167
D0 <sub>3</sub> Fe <sub>3</sub> Al	NM	5.623	+54.6	11.11	228
	FM	5.742	-188.4	11.83	171

**IV. 결과 및 토의**

Table I에 계산된 NM 상태와 FM 상태에서의 기본적인 물리량을 나타내었다. 계산결과 고려한 모든 시스템에서 FM 상태가 안정한 것으로 계산되었고, NM 상태보다 격자상수와 원자부피 값이 증가하였다. 서론에서 언급한 대로 B2 구조는 실험적으로는 NM 상태를 갖지만 현재의 결과에 따르면 NM 상태보다 FM 상태가 약 44 meV/atom 차이로 안정하였다. 다른 구조(L1<sub>2</sub> 및 D0<sub>3</sub> 구조)에서의 자성 상태간 에너지 차이에 비해 상대적으로 작은 결과를 얻었다. 그러나 실험과의 불일치에 대해서는 다체이론 효과를 고려한 더 깊은 연구가 필요하다.

계산된 평형 격자상수 값은 이전에 보고된 계산결과 및 실험결과와 1% 오차 내로 잘 일치한다[11, 14, 28]. Table I을 보면, L1<sub>2</sub> 구조와 D0<sub>3</sub> 구조의 NM 상태에서는 큰 양의  $\Delta H$  값을 보여주어, 이 자기적 상태에서 이들 구조는 불안할 것으로 여겨진다. 그리고 Fe<sub>3</sub>Al 화합물의 FM 상태에서 두 구조의  $\Delta H$  값을 비교해 보면 약 16 meV/atom의 차이로 같은 조성에서 D0<sub>3</sub> 구조가 안정됨을 알 수 있다. 이것은 서론에서 언급한 GGA하에서 제일원리계산으로 정확한 구조적 기저상태를 도출하지 못한 결과[11]와 확연히 다르고, Kellou 등 [14]에 의한 결과와 일치하는 결과를 얻었다. 그리고 L1<sub>2</sub> 구조가 고온에서 형성됨을 보여준 실험적 결과와도 부합된다. 계산된 체적탄성률은 FM 상태일 때 고려한 모든 구조에서 약 170 GPa로 비슷한 값을 갖는다.

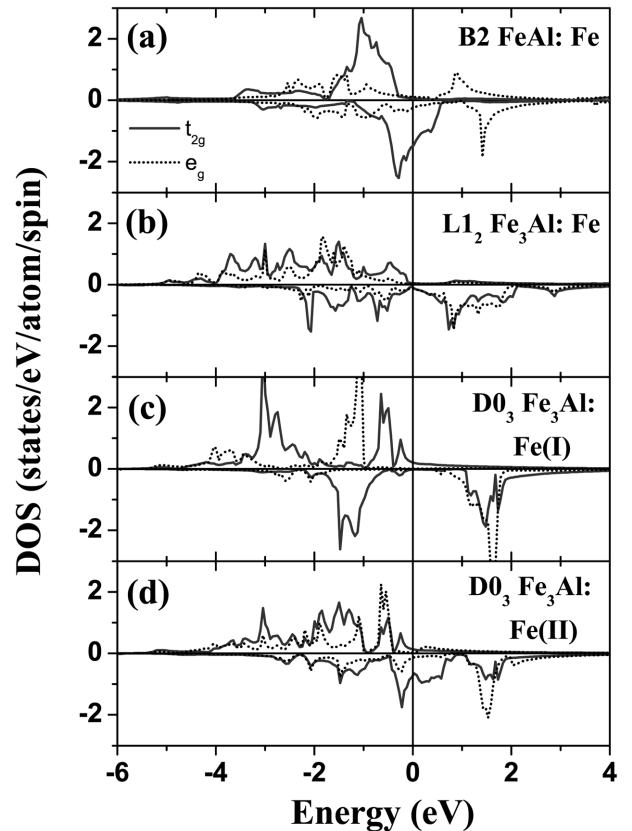
Table II에는 FM 상태에서, MT 구 내의 스핀 자기모멘트를 보여마그네톤( $\mu_B$ ) 단위로 나타내었다. 고려한 시스템에서

**Table II.** Calculated spin magnetic moment (in unit of  $\mu_B$ ) inside each muffin-tin (MT) sphere for the FM states.

System	Fe	Al
B2 FeAl	0.771	-0.031
L1 <sub>2</sub> Fe <sub>3</sub> Al	2.373	-0.111
D0 <sub>3</sub> Fe <sub>3</sub> Al	(I): 2.409, (II): 1.911	-0.092

모두 Al 원자는 음(-)의 스핀 자기모멘트 값을 갖고 Fe 원자의 경우에는 양(+)의 스핀 자기모멘트를 갖는 것을 볼 수 있다. 특히 B2 구조에서 Fe의 자성이 0.771  $\mu_B$ 로 크게 줄어들음을 알 수 있다. 구조적으로 Fe 원자에 가장 이웃한 8개의 Al 원자가 둘러싸고 있으며 결합 길이가 짧아 교환 효과가 줄어들어 데서 기인한 결과라고 여겨진다. 반면 D0<sub>3</sub> 구조의 4b 위치에 있는 Fe(I) 원자는 가장 이웃한 원자가 8개의 Fe 원자이며, 8c 위치에 있는 Fe(II) 원자와 가장 이웃한 원자는 4개의 Fe 원자와 4개의 Al 원자이다. 따라서, Fe(I) 원자가 Fe(II) 원자보다 큰 스핀 자기모멘트 값을 갖게 된다. 중성자 회절 실험결과에서도 마찬가지로 Fe(I) 원자와 Fe(II) 원자는 각각 2.18과 1.50  $\mu_B$ 로 Fe(I)의 스핀 자기모멘트가 더 큰 결과를 도출하였다[13]. L1<sub>2</sub> 구조에서는 12개의 이웃한 원자 중 4개는 Al 원자이고, 8개는 Fe 원자이다. 따라서 결정구조의 원자 분포와 Al 원자와의 혼성으로 인해 Fe 원자의 자성이 줄어들음을 이해할 수 있다.

자성에 대한 미시적인 이해를 돕기 위하여 FM 상태에서 Fe 원자의 궤도함수로 투영된 상태밀도(density of states; DOS)를 Fig. 2에 나타내었다. 소수스핀에 대해서는 계산된



**Fig. 2.** The calculated atom and orbital projected *d*-band density of states (DOS) of Fe atom for (a) B2 FeAl, (b) L1<sub>2</sub> Fe<sub>3</sub>Al, (c) (4b), and (d) (8c) site in D0<sub>3</sub> Fe<sub>3</sub>Al for FM state. Fermi energy is set to zero.

DOS에 -1을 곱하여 음으로 표시함으로써 다수스핀과 비교하기 편하도록 같은 그림 속에 배치하였고 페르미 에너지 (Fermi energy,  $E_F$ )는 0 eV로 맞추었다. 먼저 소수스핀 상태를 보면 Fig. 2(b), (c)를 제외하고는  $E_F$ 에 DOS(특히,  $t_{2g}$  궤도함수)가 크음을 알 수 있다. 이것은  $t_{2g}$  궤도함수의  $xz, yz$  상태가 Al 원자의  $sp$  전자와 결합에 기인한 결과라고 여겨진다. 한편  $L1_2$  구조의 Fe 원자는  $t_{2g}$ 와  $e_g$  궤도함수의 구분이 명확하지 않은 fcc Fe의 DOS[29]의 특성을 잘 보여준다. 앞서 설명한 바와 같이 Fig. 2(c)  $D0_3$  구조의 Fe 원자는 최인접 원자들이 bcc 구조 꼭지점에 해당하는 위치에 있는 Fe(II) 원자들로 둘러싸여 있어 bcc Fe의 전자구조와 비슷한 모습을 보인다[30]. 이로 인해 Fe(I) 원자는 자연상태에서 가장 안정된 bcc 구조와 근접하게 되어  $D0_3$  구조의 총에너지를 낮추는 역할을 하는 것으로 생각된다. Fig. 2(b)-(d)의 Fe 원자의 경우 다수스핀 상태는  $t_{2g}$ 와  $e_g$  궤도함수들은  $E_F$  아래에 위치하여 거의 완벽하게 채워져 있다. 반면 Fig. 2(a)에 나타난 B2 구조의 Fe 원자의 다수스핀의  $e_g$  궤도함수의 일부가  $E_F$  위쪽 약 1 eV 근처에서 형성되어 다수스핀이 모두 채워지지 않기 때문에 B2 구조에서 Fe의 스핀 자기모멘트(0.771  $\mu_B$ )가 다른 구조에 비해 훨씬 작은 이유로 여겨진다.

## V. 요약

Fe-Al 금속간 화합물의 자성과 원자구조에 대해 조사하기 위하여 제일원리계산인 FLAPW 방법을 통하여 DFT 내의 GGA 하에서 연구하였다. Fe-Al 계의 화합물 중 대표적인 B2,  $L1_2$ , 및  $D0_3$  구조에 대해서 형성 엔탈피  $\Delta H$ 와 전자구조를 계산하였고, 모든 구조에서 NM 상태 보다 FM 상태가 안정한 것으로 계산되었다. FM 상태에서 Fe 원자의 스핀 자기모멘트는 B2,  $L1_2$  구조에서 각각 0.771  $\mu_B$ , 2.373  $\mu_B$ 의 값을 얻었고,  $D0_3$  구조에서는 Fe(I) 및 Fe(II) 원자 각각 2.409  $\mu_B$ , 1.911  $\mu_B$ 의 값을 얻었다. 같은 조성을 갖는  $L1_2$ 와  $D0_3$  구조의  $Fe_3Al$ 의 구조적 안정성을 조사하기 위하여  $\Delta H$ 를 계산하였고, 그 결과  $D0_3$  구조가 더 안정적으로 계산되어 실험적인 결과와 잘 일치한다. 자성과 구조적 안정성을 이해하기 위하여 원자구조와 전자구조를 통하여 분석하였다. 하지만 B2 구조에 대한 자기적 기저상태를 정확히 알기 위해서는 더 많은 연구가 필요하다고 생각된다.

## 감사의 글

본 연구는 포스코 철강 혁신 프로그램 및 2009년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 기초연구사업(No. 2009-0088216) 지원을 받아 수행되었다.

## 참고문헌

- [1] C. G. McKamey, J. H. DeVan, P. F. Tortorelli, and V. K. Sikka, *J. Mater. Res.* **6**, 1779 (1991).
- [2] R. L. Fleischer, *J. Mater. Sci.* **22**, 2281 (1987).
- [3] Y. D. Huang, W. Y. Yang, and Z. Q. Sun, *J. Mater. Sci. Lett.* **17**, 1781 (1998).
- [4] N. S. Stoloff and C. T. Liu, *Intermetallics* **2**, 75 (1994).
- [5] W. C. Luu and J. K. Wu, *Mater. Chem. Phys.* **70**, 236 (2001).
- [6] M. Palm, *Intermetallics* **13**, 1286 (2005).
- [7] K. Miyatani and S. Iida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **25**, 1008 (1968).
- [8] B. I. Min, T. Oguchi, H. J. F. Jansen, and A. J. Freeman, *J. Magn. Magn. Mater.* **54-57**, 1091 (1986).
- [9] V. L. Moruzzi and P. M. Marcus, *Phys. Rev. B* **47**, 7878 (1993).
- [10] J. Bogner, W. Steiner, M. Reissner, P. Mohn, P. Blaha, K. Schwarz, R. Krachler, H. Ipser, and B. Sepiol, *Phys. Rev. B* **58**, 14922 (1998).
- [11] F. Lechermann, F. Welsch, C. Elsässer, C. Ederer, M. Fähnle, J. M. Sanchez, and B. Meyer, *Phys. Rev. B* **65**, 132104 (2002).
- [12] P. Mohn, C. Persson, P. Blaha, K. Schwarz, P. Novák, and H. Eschrig, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 196401 (2001).
- [13] S. J. Pickart and R. Nathans, *Phys. Rev.* **123**, 1163 (1961).
- [14] A. Kellou, T. Grosdidier, J. M. Raulot, and H. Aourag, *Phys. Stat. Sol. (b)* **245**, 750 (2008).
- [15] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996); *ibid.* **78**, 1396(E) (1997).
- [16] 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, *ibid.* **26**, 4571 (1982).
- [17] 조이현, 이재일, *한국자기학회지* **18**, 206 (2008).
- [18] Gul Rahman, 김인기, 장삼규, *한국자기학회지* **18**, 211 (2008).
- [19] G. Rahman and I. G. Kim, *J. Magnetism* **13**, 124 (2008).
- [20] 윤원석, 차기범, 노태환, 한동호, 홍순철, *한국자기학회지* **19**, 165 (2009).
- [21] W. S. Yun, S. C. Hong, J. I. Lee, and C. Hwang, *J. Korean Phys. Soc.* **56**, 1472 (2010).
- [22] S.-W. Seo, Y. Y. Song, G. Rahman, I. G. Kim, M. Weinert, and A. J. Freeman, *J. Magnetism* **14**, 137 (2009).
- [23] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
- [24] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
- [24] J.-H. Lee, T. Shishidou, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **66**, 233102 (2002).
- [26] M. Weinert, G. Schneider, R. Podlucky, and J. Redinger, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 084201 (2009).
- [27] P. Vinett, J. H. Rose, J. Ferrante, and J. R. Smith, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 1941 (1989).
- [28] W. B. Person, *A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys*, Pergamon, Oxford (1958).
- [29] W. S. Yun, G.-B. Cha, and S. C. Hong, *J. Magnetism* **13**, 144 (2008).
- [30] F. Lechermann, M. Fähnle, B. Meyer, and C. Elsässer, *Phys. Rev. B* **69**, 165116 (2004).

## Density Functional Study on Correlation between Magnetism and Crystal Structure of Fe-Al Transition Metal Compounds

Won Seok Yun and In Gee Kim\*

*Graduate Institute of Ferrous Technology, Pohang University of Science and Technology, Pohang 790-784, Korea*

(Received 25 March 2011, Received in final form 18 April 2011, Accepted 18 April 2011)

It is known that the Fe-Al transition metal compounds have a lot of disagreement about structural stability and magnetism. In this study, the correlation between magnetism and atomic structure of ordered B<sub>2</sub>, L1<sub>2</sub>, and D0<sub>3</sub> structured Fe-Al compounds has been investigated using the all-electron full-potential linearized augmented plane wave (FLAPW) method based on the generalized gradient approximation (GGA). We found that considered all the structures were calculated to be stabilized in a ferromagnetic state. The calculated spin magnetic moments of the Fe atoms for B2 and L1<sub>2</sub> structures were 0.771 and 2.373  $\mu_B$ , respectively, and that of Fe(I) and Fe(II) in D0<sub>3</sub> structure calculated to be 2.409  $\mu_B$ , 1.911  $\mu_B$ , respectively. In order to investigate structural stability between L1<sub>2</sub> and D0<sub>3</sub> structures, we performed the formation enthalpy calculations. As a result, the D0<sub>3</sub> structure is found to be more favorable than L1<sub>2</sub> one by energy difference 16 meV/atom, which is well consistent with the experimental observation. We understood about structural stability and magnetism for Fe-Al compounds in terms of analysis of their atomic and electronic structures.

**Keywords :** FeAl intermetallic, first-principles, magnetism, crystal structure, electronic structure