

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, ОПТИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЯ $Fe_3Al$

Ю.В. Князев<sup>1</sup>, А.В. Лукоянов<sup>1,2</sup>, Ю.И. Кузьмин<sup>1</sup>, М. Vasundhara<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, 620990, г. Екатеринбург, Россия;

<sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, 620002, г. Екатеринбург, Россия;

<sup>3</sup>CSIR National Institute for Interdisciplinary Science and Technology, Trivandrum 695019,  
Kerala, India

e-mail: [knyazev@imp.uran.ru](mailto:knyazev@imp.uran.ru)

## ELECTRONIC STRUCTURE, OPTICAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF $Al_3Fe$ COMPOUND

Yu.V. Knyazev<sup>1</sup>, A.V. Lukoyanov<sup>1,2</sup>, Yu.I. Kuz'min, M. Vasundhara<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Metal Physics n.a. M.N. Mikheev, Ural Division of RAS, Yekaterinburg, 620990 Russia;

<sup>2</sup>Ural Federal University n.a. B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, 620002 Russia;

<sup>3</sup>CSIR National Institute for Interdisciplinary Science and Technology, Trivandrum 695019,  
Kerala, India

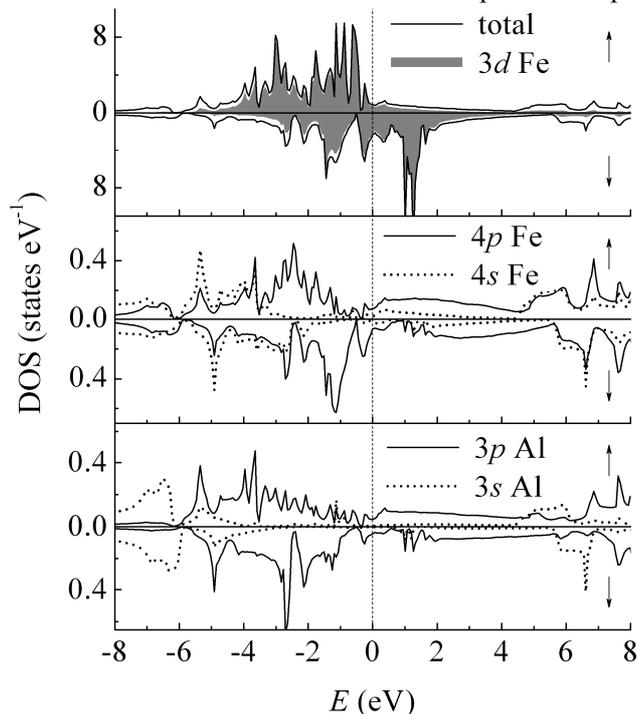
e-mail: [knyazev@imp.uran.ru](mailto:knyazev@imp.uran.ru)

Исследована электронная структура, особенности диэлектрических и магнитных свойств соединения  $Fe_3Al$ , синтезированного в кубической  $DO_3$  структуре. Показано, что результаты спин-поляризованных расчетов электронного энергетического спектра, проведенных в рамках ТВ-LMTO-ASA метода, хорошо коррелируют со спектральным экспериментом. В частности, на основе рассчитанной плотности электронных состояний в широком интервале частот интерпретирована дисперсия межзонной оптической проводимости. Обнаружены аномалии в температурной зависимости намагниченности, связанные переходом из ферро- в парамагнитное состояние ( $T_C \sim 736$  К) и взаимодействием магнитных кластеров ( $T \sim 800$  К). Исследовано поведение температурных зависимостей электросопротивления и магнетокалорического эффекта.

The electronic structure, the features of dielectric and magnetic properties of  $Fe_3Al$  compound, obtained in the cubic  $DO_3$  structure, have been investigated. It has been shown, that the results of spin-polarized calculations of the electron energy spectrum performed within the TB-LMTO-ASA method correlate well with the spectral experiment. The dispersion of the interband optical conductivity for the compound under investigation was interpreted on the basis of the calculated density of electronic states particularly. The alloy reveals anomalies in temperature dependence of magnetization, associated with transition from the ferromagnetic state to the paramagnetic one ( $T_C \sim 736$  K) and with interaction of the magnetic clusters ( $T \sim 800$  K). The behaviour of the temperature dependencies of the electrical resistivity and magnetocaloric effect is investigated.

Среди сплавов, образующих обширное семейство  $Fe_{1-x}Al_x$ , особое внимание уделяется исследованию бинарного соединения вблизи стехиометрического состава  $Fe_3Al$ . Интерес к изучению данного интерметаллида связан с перспективами его функционального использования, основанного на комбинации структурных, магнитных и транспортных свойств, которые, в свою очередь сильно зависят от температуры, легирования и типа химического упорядочения [1-5]. Для практического применения, в частности, важны механические характеристики материала, высокая теплопроводность, антикоррозийность. Кроме того, существенным фактором является низкая стоимость компонентов, образующих сплав. Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что данное соединение является

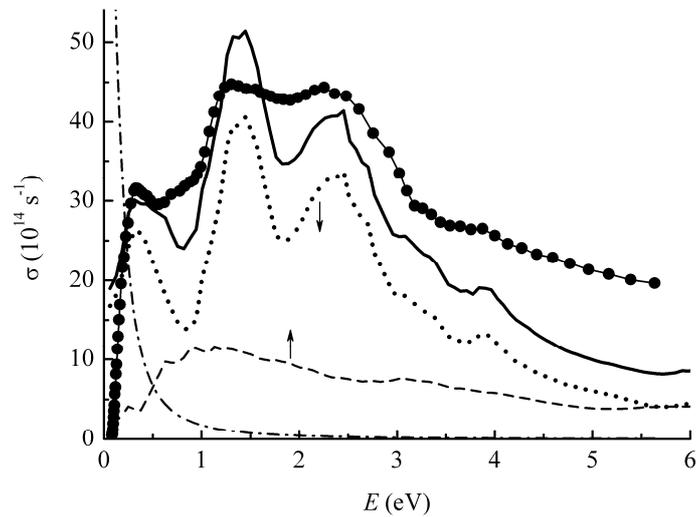
ферромагнетиком, кристаллизующимся в стабильной кубической структуре  $DO_3$ -типа, когда атомы Fe занимают две неэквивалентные позиции, одна из которых связана с октаэдрической, а другая – с тетраэдрической конфигурацией. С повышением температуры ( $\sim 540$  C) структура  $DO_3$  переходит в кубическую структуру B2, при которой происходит перераспределение атомов Fe и Al в подрешетках. Магнитный и структурный переход сопровождается возникновением аномалий в температурных зависимостях магнитных и электронных характеристик.



**Рис. 1** - Полные и парциальные плотности электронных состояний соединения  $Fe_3Al$

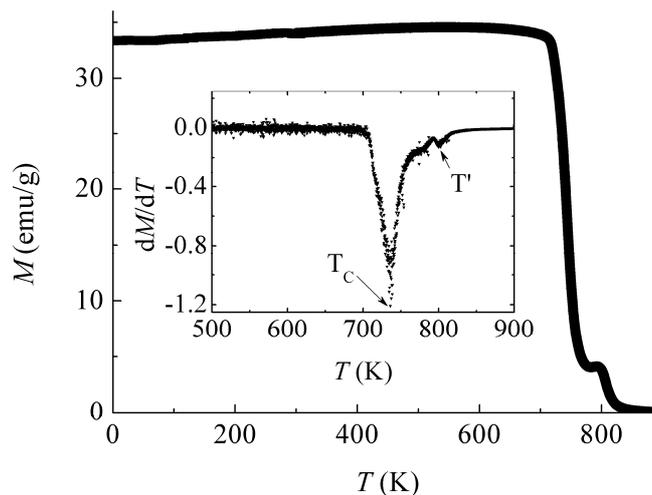
Самосогласованные расчеты электронной структуры  $Fe_3Al$  проводились в пакете программ TB-LMTO-ASA [6], использующем метод линейаризованных маффин-тин орбиталей в приближении атомных сфер. В соответствии с опытными данными моделировалось ферромагнитное упорядочение магнитных моментов ионов Fe. Величина постоянной решетки составляла  $a = 5.82$  Å. В  $DO_3$  структуре три иона Fe локализованы в двух неэквивалентных позициях Fe1 ( $1/2, 1/2, 1/2$ ) и Fe2 ( $1/4, 1/4, 1/4$ ), а ионы Al занимают позиции (0,0,0). Вычисленное значение спиновой поляризации соответствует полному магнитному моменту иона железа  $\sim 6.0$   $\mu_B$ , что включает 2.3  $\mu_B$  для одного Fe1 и 1.9  $\mu_B$  для каждого из двух Fe2. Полная и парциальные (для 3d-, 4p- и 4s-электронов Fe и 3p- и 3s-электронов Al) плотности электронных состояний  $N(E)$  представлены на рис. 1. Видно, что полная  $N(E)$ , состоящая из целого ряда интенсивных максимумов, определяется, преимущественно, 3d-электронными состояниями Fe. При этом состояния с проекцией спина  $\uparrow$  почти полностью заполнены и дают малый вклад в  $N(E_F)$ . В свою очередь  $\downarrow$ -состояния локализованы по обе стороны от уровня Ферми в интервале  $-6 < E_F < 6$  эВ. Парциальные вклады Fe 4p- и 4s-, а также Al 3p- и 3s-электронных состояний по величине на порядок меньше Fe 3d-вклада.

На рис. 2 для сравнения представлены экспериментальные и теоретические спектры межзонной оптической проводимости  $Fe_3Al$ . Расчет выполнен в произвольных единицах на основе сверток полных плотностей состояний  $N(E)$  ниже и выше уровня Ферми. Сравнение показывает, что расчетные данные качественно воспроизводят главные структурные особенности опытного спектра. Теоретическая зависимость показывает наличие полос межзонного поглощения света, форма и локализация которых качественно согласуется с экспериментом. Показано, что основной вклад в оптическое поглощение вносят электронные переходы в  $\downarrow$ -электронной подсистеме.



**Рис. 2** - Спектры межзонной оптической проводимости соединения  $\text{Fe}_3\text{Al}$ . Точки – эксперимент, — расчет из полной плотности электронных состояний  $N(E)$ , ..... и - - - - вклады от переходов в  $\downarrow$ - и  $\uparrow$ - электронных подсистемах, - - - - друдевский вклад

В работе выполнен ряд измерений магнитных и электронных характеристик: намагниченности, петли гистерезиса, изменения магнитной энтропии, электросопротивления. Отметим значительный по величине магнетокалорический эффект, максимум которого находится вблизи точки Кюри. В качестве иллюстрации на рис. 3 представлены температурные зависимости намагниченности  $M$  и её производной по температуре  $dM/dT$ ,



**Рис. 3** - Температурные зависимости намагниченности и её производной по температуре (на вставке) соединения  $\text{Fe}_3\text{Al}$

показывающие сильное влияние магнитных переходов на данные характеристики. При температурах вблизи 736 К и 800 К в зависимостях  $M(T)$  и  $dM/dT$  наблюдаются ярко выраженные аномалии, первая из которых связана с переходом из ферро- в парамагнитное состояние, а вторая – с наличием неоднородных магнитных кластеров.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России ((тема «Электрон», № АААА-А18-118020190098-5)) при поддержке проекта РФФИ № 17-52-45056.

#### Список использованных источников:

1. Wang J., Xing J., Qiu Z., Zhi X., Cao L. // *J. Alloys. Compd.*, 2009. -V. 488.- P. 117.
2. Huang Y.D., Yang W.Y., Sun Z.Q. // *Mater. Sci. Engineering A*, 1999. - V. 265.- P. 75.
3. Niu X, Wang L. // *Comput. Mater. Sci.*, 2012. - V. 53.- P. 128.
4. Verin A.S., Verin M.A. // *Anti-Corrosion Methods Mater.*, 2001.- V. 48.- P. 298.
5. McKamey C.G., Maziasz P.J., JW Jones J.W. // *J. Mater. Research*, 1992. -V.7. - P. 2089.
6. Andersen O.K., Jepsen O. // *Phys. Rev. Lett.*, 1984.-V. 53.- P. 2571.