

## B2 FeX(X=Al, Si, Ni, Ga, Ge, Sn)의 자성과 자기변형계수에 대한 제일원리계산

이선철, 윤원석, 홍순철\*

울산대학교 물리학과, 울산 680-749

schong@mail.ulsan.ac.kr

현재 액추에이터, 센서, 선형모터 등에 널리 활용되고 있고 있는 자기변형 물질은 주로 희토류 원소를 기반으로 하는 합금이다. 희토류 기반 합금은 상온에서 높은 자기 변형을 가지나, 포화 자기변형을 얻기 위해 높은 자기장을 요구하는 외에 가격이 비싸고 깨짐성도 큰 단점을 갖고 있다. 최근에 bcc 철을 기반으로 한 합금이 희토류 금속 합금에 버금가는 자기변형을 가질 수 있음을 실험적으로 관찰하였고 [1] 제일원리계산으로 철 합금이 큰 자기변형을 가질 수 있음을 이론적으로 밝힌 바 있다[2].

본 연구에서는 철합금의 기본 결정 구조인 B2 구조의 FeX (X= Al, Si, Ni, Ga, Ge, Sn) 철 이종합금의 자성과 자기변형계수를 제일원리계산 방법으로 연구하였다. 계산방법으로는 총전위선형보강평면파 (full-potential linearized augmented plane-wave: FLAPW) 방법을 사용하였으며 전자 간의 교환상관작용을 기술하기 위해서 일반구배근사 (general gradient approximation: GGA)를 사용하였다.

총에너지계산으로부터 FeX (X=Al, Si, Ni, Ga, Ge, Sn)의 격자상수를 결정하였는데, 계산치는 각각 2.882, 2.770, 2.861, 2.913, 2.924, 3.222 Å 을 가졌다. Si, Ge 합금의 경우 자성이 나타나지 않았으며 Al, Ni, Ga, Sn 합금의 자기모멘트는 Fe 당 각각 0.655, 2.812, 0.770, 2.370, 1.803  $\mu_B$  이었고 자기변형계수는 각각 -5, +6, -84, -552 ppm 으로 계산되었다. 합금의 전자구조 및 탄성과 자기변형 사이의 상관관계를 상세하게 논의할 예정이다.

### 참고문헌

- [1] A. E. Clark, J. B. Restorff, M. Wun-Fgle, T. A. Lograsso, and D. L. Schlagel, IEEE Trans. Magn. 36, 3238 (2000).
- [2] S. C. Hong, W. S. Yun, and R. Wu, Phys. Rev. B 79, 054419 (2009).