

Fe-Ti-R 합금에서의 12:1과 17:2 상의 결정 구조적 관계  
(Structural relation between 12:1 and 17:2 phases in Fe-Ti-R alloys)

성화 대학교 금속공학과: 장 태 석

Dept. of Materials Sci. and Engr., N.C. State Univ.: Hans H. Stadelmaier

### 1. 서 론

Fe-Nd-B 이후, Tetragonal  $Mn_{12}Th$  구조를 갖는  $(Fe, T)_{12}R$  ( $T =$  Transition metal)이 새로운 강 자성 재료로서 많은 연구의 대상이 되어왔다. 이  $Mn_{12}Th$  구조를 갖는 상(이후, 12:1상이라 함)은 Fe-R 이원계에서는 존재하지 않고, 약간의 Fe를 Ti, V, Cr 등으로 치환함으로써 안정화된다. 이러한 12:1 상의 일반적 조성은  $Fe_{12-x}T_xR$ 에서 T가 Ti, W인 경우  $x = 1$ , T가 V, Cr, Mo 또는 Si인 경우  $x = 2$ 이다<sup>1)</sup>. 이와는 달리, Hexagonal ( $Ni_{17}Th_2$  type) 또는 Rhombohedral ( $Zn_{17}Th_2$  type) 구조를 갖는  $Fe_{17}R_2$  상(이후, 17:2 상이라 함)은 연 자성체로서, 순수한 이원계에서도 존재한다.

한편, 이 12:1과 17:2의 결정 구조들은 모두 Hexagonal 5:1 ( $Cu_5Ca$  type) 구조에서 파생된 것들로서, x-ray diffraction pattern들이 서로 유사하여, diffraction pattern 분석 시에 혼란을 가져오기 쉬우며, 특히, pattern이 명확하지 않은 경우엔 그 가능성이 더욱 높다.

따라서, 본 연구에서는 Fe를 다량 함유한 Fe-Ti-Nd계에서 조성과 열 처리의 변화에 따라 나타나는 상들의 분석을 통하여, Fe-Ti-R 계에 존재하는 12:1과 17:2 상의 결정 구조적 관계, diffraction pattern 상의 차이점 등을 조명해 보고자 한다.

### 2. 실험 방법

1 ~ 2 g의  $Fe_{12-x}Ti_xNd$  ( $x = 0.3 \sim 2.4$ ) 합금을 고순도의 Ar 분위기에서 Arc 용해하였다. 열 처리는 quartz tube에 시편을 넣고, 진공시킨 후 밀봉하여, 900 °C 에서 72 시간 동안 유지한 후, 급냉하였다. As-cast와 열 처리된 시편들은 각각 미세 조직 관찰, Debye-Scherrer powder x-ray diffraction 방법에 의한 상 및 결정 구조 분석, EPMA에 의한 성분 분석 등을 행하였으며, 자기적 성질은 허용 자장 1.5 T 의 VSM을 사용하여 측정하였다.

### 3. 실험 결과 및 고찰

$Fe_{12-x}Ti_xNd$ 에서  $x$ 가 0.6 (~5 at. %) 이상일 때 12:1 상이 정출하였고, 그 이하에서는 17:2 상이 primary phase로서 정출하였다. 12:1 상은 열 처리 후 17:2 상으로 변환되었으며, 이 Fe-Ti-Nd 계에서 나타나는 17:2 상은 모두  $Zn_{17}Th_2$  type rhombohedral 구조를 갖고 있었다. 12:1과 17:2 외에 Ti에 의해 안정화 된  $Fe_7Nd$  (hexagonal  $Cu_7Tb$  type) 상이  $x = 0.6, 1.0$ 인

조성의 합금에서 발견되었는데, 이 7:1 상 역시 hexagonal 5:1에서 파생된 구조를 가지며, 12:1과 마찬가지로 열 처리 후 17:2로 분해되었다.

5:1 구조로 부터 파생되는 결정 구조들의 성분 비는  $T_{5m}R_{2n}$ 의 식<sup>2)</sup>에 따라 얻어지며, 여기서 m은 새로운 결정 구조를 형성하는  $T_5R$  unit의 수를 나타내고, n은 m개의  $T_5R$  unit 중에서 T 원자 dumbbell pair들에 의해 치환되는 R의 수를 나타낸다. 이 m과 n의 관계로 부터 5:1 구조의 격자 상수 a, c 와 새로운 구조들의 격자 상수 a', c'의 관계를 살펴보면, hexagonal 17:2는  $a' = a\sqrt{3}$ ,  $c' = 2c$  이고, rhombohedral 17:2는  $a' = a\sqrt{3}$ ,  $c' = 3c$  이며, tetragonal 12:1에서는  $a' = a\sqrt{3}$  (또는  $a' = 2c$ ),  $c' = a$  이다. 따라서,  $(Fe, Ti)_{17}R_2$  구조에서는 Fe원자의 dumbbell pair 가 c' 축에 평행하게 배열되나,  $(Fe, Ti)_{12}R$ 에서는 a' 축에 평행하게 배열 됨을 알 수 있다. 한편, 12:1과 rhombohedral 17:2의 diffraction pattern을 비교한 결과, low angle 구역에서는 intensity가 10 이상인 peak들이 거의 일치하나, high angle 구역에서는 12:1의 경우 intensity가 비교적 높은 세 쌍의 peak들이 (532), (631), (602)에서 나타나는 반면, 17:2의 경우 intensity가 100인 peak이 (060)에서 나타남을 알 수 있었다.

#### 4. 결론

Fe를 다량 함유한 Fe-Ti-Nd 계에서는 조성과 열 처리의 변화에 따라 12:1, 17:2, 7:1 등이 단독으로, 혹은 공존하여 나타나며, 특히, Fe-Ti-R 계에서 대표적으로 나타나는 12:1과 17:2 상의 x-ray diffraction pattern 은 서로 흡사하지만, high angle 구역에서 비교적 뚜렷한 차이를 보임을 알 수 있다.

#### 5. 참고 문헌

- 1) K.H.J. Buschow, J. Magnetism Magn. Materials 80, pp 1-8 (1989)
- 2) Hans H. Stadelmaier, Z. Metallkunde 75, pp 227-230 (1984)