

Estudio de la composición $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ sintetizada por horno de arco

 Ronald Rocha ^{*1} y Robert Guzmán¹

¹ Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú

Recibido 10 Set 2024 – Aceptado 26 Dic 2024 – Publicado 31 Dic 2024

Resumen

La aleación Fe – Al en la composición $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ fue sintetizada por la técnica de horno de arco, luego tratada térmicamente a 600°C . El difractograma de rayos X (DRX) y espectroscopia Mössbauer (EM) a temperatura de ambiente muestran la formación del intermetálico FeAl el cual es ajustado con un singlete; la solución sólida Fe(Al), correspondiente a las vacancias o zona intersticial (además de regiones con más de un vecino de hierro) es ajustado con un doblete; también se observa el remanente de hierro Fe a temperatura de ambiente. Luego del tratamiento térmico queda el intermetálico FeAl y la solución sólida Fe(Al). Los cálculos de primeros principios complementan el estudio realizado, estos últimos están en acuerdo con la estructura cristalina tipo B2 y el carácter metálico del mismo.

Palabras clave: Espectroscopia Mössbauer, Difracción de rayos X, horno de arco.

Study of the composition $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ synthesized by arc furnace

Abstract

The alloy Fe–Al in the composition $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ was synthesized by arc furnace technique, then heat treated at 600°C . The X-ray diffractogram (DRX) and Mössbauer spectroscopy (EM) at room temperature show the formation of the intermetallic FeAl, which is fitted with a singlet; the solid solution Fe(Al) corresponding to the vacancies or interstitial zone (in addition to regions with more than one iron neighbor) is fitted with a doublet; the remnant of iron, Fe, also observed. After the thermal treatment, the intermetallic FeAl and the solid solution Fe(Al) remain. The first principles calculations complement the study carried out, the latter are in agreement with the metallic character and the B2 crystalline structure.

Keywords: Mössbauer spectroscopy, X-ray diffraction, arc technique furnace.

1. Introducción

Las aleaciones Fe – Al han sido investigadas por diversos grupos de investigación debido a sus interesantes propiedades mecánicas, eléctricas, magnéticas, su baja densidad, buena resistencia a la corrosión y oxidación [1], hacen que estas aleaciones sean apropiadas para varias aplicaciones tecnológicas, por ejemplo un punto de fusión alto los hace atractivos como materiales aeroespaciales. Además de tener un comportamiento magnético inusual que depende de la temperatura y concentración [2].

Se han utilizado varias técnicas experimentales como molienda mecánica deformación plástica y trabajo en frío para obtener distintas fases como DO₃, B₂, A₂ las

cuales se caracterizan por las distintas posiciones de los átomos de hierro dentro de la red cristalina [3]. Autor como Kulikov [4] ha demostrado experimentalmente que la concentración y el tipo de defectos puntuales constitucionales (como vacancias o antisitios) influyen fuertemente en las propiedades mecánicas eléctricas y magnéticas de las aleaciones Fe – Al. Investigaciones experimentales señalan que la fase B₂ con la composición estequiométrica de $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ y celda unitaria CsCl no es magnética [5]. Sin embargo Oku y colaboradores [6] dan información de un momento magnético en la fase B₂ a partir del análisis de técnicas nucleares, el cual es debido al propio átomo de hierro.

Desde el punto de vista experimental la espectroscopía

*rrochac@unmsm.edu.pe

© Los autores. Este es un artículo de acceso abierto, distribuido bajo los términos de la licencia Creative Commons Atribución 4.0 Internacional (CC BY 4.0) que permite el uso, distribución y reproducción en cualquier medio, siempre que la obra original sea debidamente citada de su fuente original.



pia Mössbauer es una técnica ampliamente utilizada que permite distinguir y caracterizar diferentes sitios de hierro en un compuesto midiendo los parámetros de interacción hiperfina: Campo magnético hiperfino B_{hf} , desplazamiento isomérico δ y gradiente de campo eléctrico ΔE_Q . Shuaiquin y colaboradores [7] reportan que trabajos de estructura electrónica ab initio FeAl ordenado presenta un momento magnético de 0.55 - 0.7 μB (magnetón de Bohr). Además, Jartych y colaboradores [8] obtuvieron que retiene un magnetismo.

En el presente trabajo los cálculos experimentales y teóricos nos dan información para saber el tipo de comportamiento estructural y magnético del material. Para eso preparamos la composición $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ por la técnica de horno de arco para luego hacerle un tratamiento térmico a la temperatura de 600°C para obtener el intermetálico FeAl y calcular por métodos de primeros principios su estructura de banda y densidad de estados.

2. Metodología experimental

La composición $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ fue preparado a partir de polvos elementales de aluminio (Al, 99.7%, 44 μm) y hierro (Fe 99.5%, 10 μm), fueron pesados en la composición $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ en una balanza analítica y compactada en una prensa hidráulica uniaxial a presión de 10 kPa para obtener muestras en formas de pastillas (cilíndrica). Luego las pastillas fueron fundidas en un equipo de horno de arco voltaico bajo una atmósfera controlada de argón para evitar contaminación por oxidación, para finalmente obtener muestras en forma esférica. Posteriormente la muestra se encapsuló en un tubo de cuarzo con atmósfera de argón y se realizó un tratamiento térmico en un horno tubular. La muestra fue sometida a un calentamiento de $5^\circ\text{C}/\text{min}$ hasta alcanzar una temperatura de 600°C , permaneciendo a esa temperatura durante 48 horas, para luego enfriarse lentamente hasta alcanzar la temperatura de ambiente.

La muestra obtenida a 600°C (con tratamiento térmico) como a temperatura de ambiente (sin tratamiento térmico) fueron pulverizadas para su caracterización, la caracterización estructural se hizo mediante la técnica de difracción de rayos X (DRX) en un equipo Bruker D8 focus con geometría Bragg Brentano a 40 kV y 40 mA con una fuente radioactiva de Cu con longitud de onda $\lambda = 1.5406\text{\AA}$. Las intensidades fueron medidas en el rango de 20° a 90° con un paso de 0.04° y un tiempo de 8 segundos por paso, a temperatura de ambiente. La caracterización microestructural, el entorno local alrededor del átomo de hierro, fue examinado con un espectrometro Mössbauer por transmisión, empleando una fuente radiactiva de Cobalto en una matriz de Rutenio $^{57}\text{Co}/\text{Rh}$.

Todas las medidas se realizaron a temperatura de ambiente y fueron calibrados respecto $\alpha - \text{Fe}$. Se utilizó una señal triangular de 1024 canales para la adquisición de

los datos. Los parámetros Mössbauer, tales como, corrimiento isomérico δ , desdoblamiento cuadrupolar ΔE_Q , campo magnético hiperfino B_{hf} , ancho de línea Γ y área de absorción A, fueron obtenidos con la ayuda del programa Normos [9].

Los cálculos de estructura electrónica ab initio se han realizado en el marco de la teoría de la densidad funcional DFT, se adoptó la aproximación de gradiente generalizado GGA dentro de la función Perdew-Burke-Ernzerh, tal como se implementa en el paquete Quantum Espresso [10, 11], con pseudo potenciales en la aproximación GGA con descripción de intercambio y correlación PBE-SOL [10, 20]. Para estos cálculos trabajamos en una energía de corte de orbitales de Konh-Sham (KS) y densidad electrónica de 140Ry y 1120Ry, respectivamente, con un suavizado de los KS del tipo gauss de 0.01Ry, con un malla en la Zona de Brillouin de $12 \times 12 \times 12$. La tolerancia en error numérico de energía fue de 1meV por celda unidad.

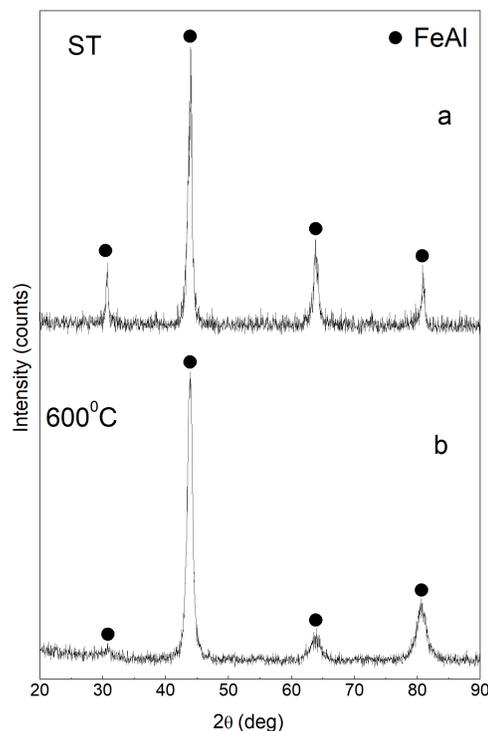


Figura 1: Estudio estructural por difracción de rayos X de la composición $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ sin tratamiento térmico (ST), figura superior y con tratamiento térmico a 600°C , figura inferior.

3. Resultados y discusión

Caracterización estructural y microestructural

En la figura 1 se observa los patrones de difracción de rayos X de la composición $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ tanto a temperatura de ambiente (ST) como a ex-situ 600°C apreciándose la formación del intermetálico FeAl el cual tiene una estructura cúbica conocida como B2 y con grupo espacial $\text{Pm} - 3\text{m}$ [12]. Se observa que la intensidad de los picos son menos intensos para el patrón de difracción obtenido a la temperatura 600°C por lo que podemos decir que ha existido una migración de los átomos a los contornos de grano tal como se muestra en el modelo planteado en la figura 4, [13].

El espectro Mössbauer correspondiente a la muestra sin tratamiento térmico en la figura 2a consiste de un singlete paramagnético correspondiente al intermetálico FeAl , de una solución sólida Fe(Al) atribuida a los contornos de granos y a las vacancias el cual es ajustado con un doblete; además, de un remanente de hierro puro ferromagnético que puede ser atribuido al contorno de grano o la existencia de granos de hierro que no han reaccionado con el aluminio [14].

En la figura 2b a la temperatura de 600°C el espectro Mössbauer es ajustado con un doblete debido a que los átomos de hierro se encuentran contorneados por vacancias además de estar ubicados en los límites de granos [15]. También se observa el singlete debido a la alta simetría que tiene la estructura cúbica del hierro, donde el átomo de hierro está en el centro del cubo y los átomos de aluminio en las esquinas del cubo, tal como se puede observar en el modelo planteado en la figura 4.

El valor del cambio de desdoblamiento cuadrupolar ΔE_Q de 0.2mm/s a 0.5mm/s que se observa en el cua-

dro 1 se debe al crecimiento de la frontera de grano y la formación de vacancias, perturbando fuertemente la distribución de carga de los átomos de hierro [16].

El intermetálico también ha sido encontrado por diferentes grupos de investigación, por ejemplo Trujillo y colaboradores [17], al sintetizar la composición $\text{Fe}_{56.25}\text{Al}_{43.75}$ durante 12 horas mediante aleación mecánica encuentran al intermetálico FeAl coexistiendo con el intermetálico Fe_3Al y un remanente de Fe . Enzo y colaboradores [9] después de sintetizar la composición $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ durante 8 horas por aleación mecánica obtiene el intermetálico FeAl que coexiste con el intermetálico Al_5Fe_2 .

En el cuadro 1 vemos que el corrimiento isomérico δ del intermetálico FeAl de 0.27 mm/s a 0.28 mm/s casi no cambia antes y después del tratamiento térmico nos informa que los entornos locales alrededor del átomo de hierro en los primeros y segundos vecinos se mantiene constante con un pequeño error de 0.01mm/s . el aumento del área de 0.34 a 0.47 nos da información que existe una mayor cantidad de átomos de hierro con primeros vecinos de átomos de aluminio, habiendo una migración de átomos para la formación del intermetálico FeAl .

El cambio del desdoblamiento cuadrupolar ΔE_Q de 0.2 mm/s a 0.5 mm/s en la solución sólida Fe(Al) se debe al aumento de vacancias y dislocaciones alrededor del átomo de hierro, tal como se ve en la figura 2a [8]. La componente del hierro solo existe a temperatura ambiente, tal como se puede ver en los parámetros hiperfinos mostrados en el cuadro 1 y en la figura 2a. En el cuadro 1 se observa que en valor de Γ (mm/s) de 0.4mm/s para la solución sólida Fe(Al) no cambia, por lo que mantiene los mismos entornos locales antes y después del tratamiento térmico, el cambio de área de 81% a 54% para la solución sólida da aumento a la cantidad de átomos de hierro contorneados por primeros vecinos de átomos de aluminio como se ve en la figura 2.

Composición	Intermetálico o solución sólida	Parámetros Hiperfinos	ST	600°C
$\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$	FeAl	δ (mm/s)	0.27(1)	0.28(1)
		Γ (mm/s)	0.34(6)	0.36(1)
		Area (%)	0.34(6)	0.47(1)
		ΔE_Q	0.2(2)	0.5(3)
	Fe(Al)	δ (mm/s)	0.34(6)	0.47(1)
		Γ (mm/s)	0.4(1)	0.4(1)
		Area (%)	81	54
		$B_{hf}(T)$	33(1)	
	Fe	δ (mm/s)	0.00(1)	
		Γ (mm/s)	0.28(1)	
Area (%)		5		

Tabla 1: Parámetros hiperfinos de la aleación $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ sin tratamiento térmico y con tratamiento térmico a la temperatura de 600°C .

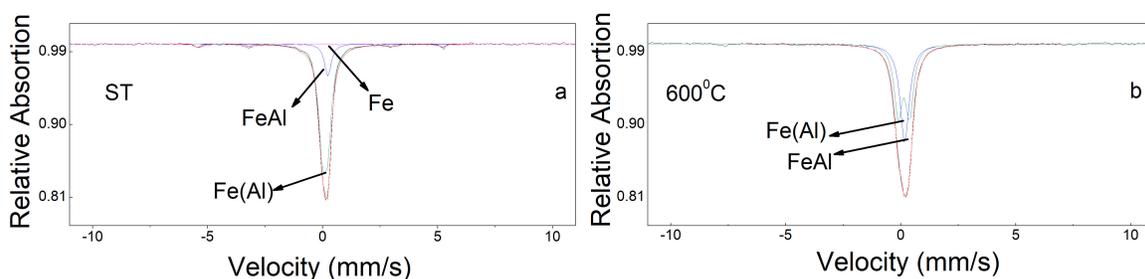


Figura 2: Estudio microestructural de la composición $\text{Fe}_{50}\text{Al}_{50}$ sin tratamiento térmico (ST), figura a y con tratamiento térmico a 600°C , figura b.

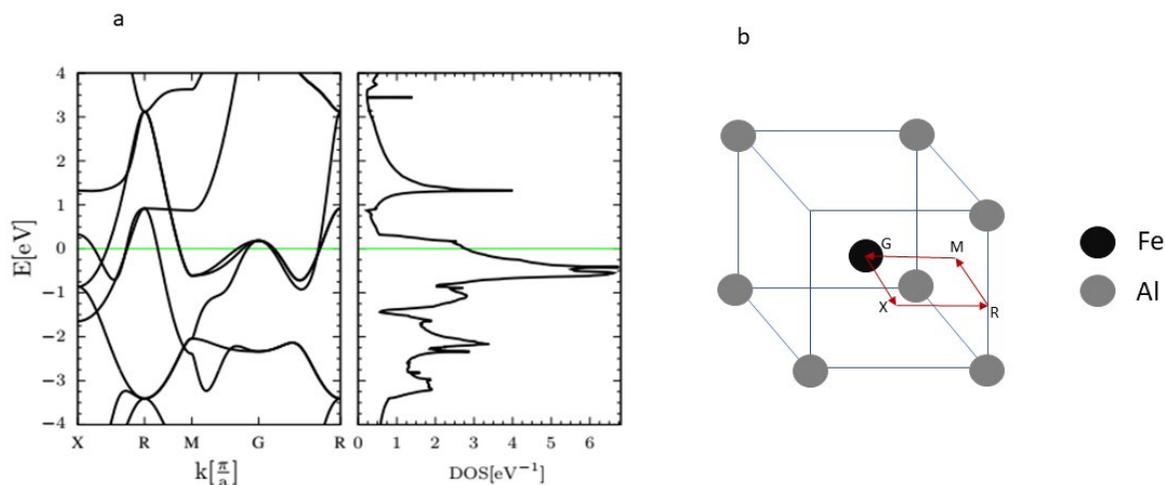


Figura 3: Estructura electrónica no magnética del FeAl. Estructura de bandas y densidad de estados totales obtenida con el método Tetrahedra [11] figura 3a y celda unitaria recíproca con el camino X – R – M – G figura 3b.

Al aumentar la temperatura todo el hierro ha reaccionado teniendo como primer y segundo vecinos más cercanos átomos de aluminios o vacancias, pudiendo confirmar mirando la figura 1 (donde hay una disminución de intensidad alrededor de $2\theta \approx 30^\circ$). Además también lo confirmamos por los valores de espectroscopia Mössbauer.

Cálculo de estructura electrónica

En la Fig. 3 mostramos solo la estructura electrónica del FeAl, el cual por los primeros vecinos de átomos de aluminio cercanos al átomo de hierro explicamos que tiene una estructura no magnética, su estructura consiste en un par de celdas cúbicas simétricamente interconectadas, donde una de ellas está compuesta por Fe y otra por Al. El parametro de red se obtuvo minimizando la energía cuyo valor es $a_0 = 2.85$, que es cercano al valor experimental 2.90, obtenido por el programa Search Match [19]. En la Fig. 3 observamos el diagrama de bandas del FeAl donde

se sintonizó el nivel de Fermi (E_F) en cero. Los resultados, a partir de la red cristalina $\text{Pm} - 3m$ muestran un caracter metálico del sistema, donde se aprecia que las bandas que cruzan por lo que el material tiene caracter metálico y no de semiconductor, teniendo una diepersión E_F del orden del 1eV. Para determinar el caracter orbital de los estados cercanos al nivel de Fermi, mostramos la densidad de estados (DOS).

Es importante notar que el E_F se encuentra en medio de una alta densidad de estados, lo cual sugiere que el estado magnético del FeAl sea más estable debido al principio de Stoner [21]. Por ello, los resultados DFT estan en acuerdo los resultados experimentales de la estructura cristalina, donde el átomo de hierro está totalmente conorneado por el átomo de aluminio presentando la imagen de un singlete simétrico como se puede ver en la figura 2, y el caracter metálico del FeAl, concuerda con el resultado experimental no magnético del FeAl. Sin embargo, estudios de primeros principios en cluster de Fe y Al predicen magnetismo, sugiriendo que el magnetismo puede

ser generado en agrupaciones no cúbicas de Fe y Al [7], y medidas Mössbauer se evidencian magnetismo local en muestras de FeAl en aquellas zonas donde en lugar de un átomo de Al se encuentra un átomo de Fe, [18, 23]. Sin embargo la ausencia de magnetismo en FeAl aún esta en discusión [25]. Un argumento importante de la ausencia de magnetismo en el FeAl puede encontrarse en Fig. 3, note que la densidad de estados decae abruptamente a 0.45eV por arriba de E_F . Si E_F creciera en esta cantidad, el magnetismo obtenido por el calculo DFT tendría que suprimirse debido a la reducción de la densidad de estados. Este proceso fue evidenciado en la referencia [24].

Modelo esquemático

En este modelo los átomos de color negro hace referencia al hierro Fe, los átomos de color plomo hace referencia a los átomos de aluminio Al y los átomos transparentes como las vacancias, tal como se puede observar en la figura 4 donde la parte a representa la muestra obtenida a 600°C en dos dimensiones y la parte b representa el intermetálico simétrico FeAl en tres dimensiones. Los resultados de difracción de rayos X y espectroscopía Mössbauer, para la muestra tratada a temperatura de 600°C se plantea que los átomos de hierro tiene como primer y segundos vecinos mayor átomos de aluminio, por lo que el ajuste Mössbauer fue hecho por un singlete, debido a la alta simetría cúbica que presenta, por lo que se ha seleccionado con un círculo rojo correspondiente a la alta simetría, como se observa en el modelo en dos dimensiones. El doblete es atribuido a la solución sólida Fe(Al) o a la zona intersticial que tienen dislocaciones y vacancias; que además, está contorneado por átomos de hierro. Si comparamos los espectros Mössbauer vemos que cuando se realiza tratamiento térmico a la muestra existe una reorganización de los átomos por lo que existe una mayor simetría en el espectro Mössbauer. A partir de estos resultados es que se hace los calculos de estructura de banda y densidad de estados electrónicos solo para el singlete.

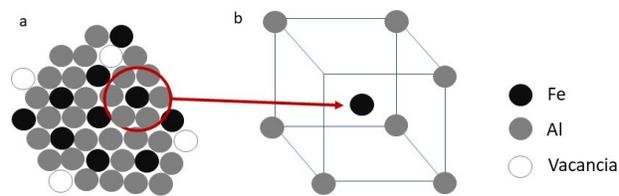


Figura 4: Modelo esquemático de la composición $Fe_{50}Al_{50}$ obtenido por difracción de rayos X y espectroscopía Mössbauer, en dos dimensiones figura a, y en tres dimensiones figura b.

4. Conclusiones

Como resultado del presente estudio se ha comprobado que se obtiene al intermetálico FeAl tanto a la temperatura de ambiente como a la temperatura de 600°C para la composición $Fe_{50}Al_{50}$ cuyos parámetros hiperfinos se pueden observar en el cuadro 1. Además, es posible observar la solución sólida Fe(Al) que es atribuido al contorno de grano variando en el valor del desdoblamiento cuadrupolar debido a la migración de átomos de aluminio y creación de vacancias, observándose además, el remanente de hierro el cual se mantiene solo a temperatura de ambiente.

Además el material, presenta un comportamiento magnético debido al momento magnético propio del hierro. A partir de los resultados de difracción de rayos X y espectroscopía Mössbauer los resultados de estructura de banda y densidad de estados para el intermetálico FeAl muestra que el material es no magnético, no descartando un magnetismo si consideramos más de una estructura cristalina $Pm - 3m$.

Agradecimientos

El autor agradece a la Facultad de Ciencias Físicas y al Vicerrectorado de Investigación y Posgrado de la UNMSM por el apoyo financiero a través del proyecto CON-CON N0. 141301011 (Proyecto 2014).

Referencias

- [1] S. Rajan, R. Shuka, A. Kurnar, A. Vyas, S. Khan and R. Brajpuriya. Mössbauer and magnetization studies of mechanically milled nanocrystalline $Fe_{1-x}Al_x$. *Can.J. Phys.* **93**, 1-7, (2015).
- [2] R. Rocha, Cabrera. Estudio estructural de la aleación $Al_{(x)}F(1-x)$ ($X = 0.25, 0.5$ y 0.75) obtenida por Horno de arco. *Rev. Inv. de Física* **3**, 24 (2021). Doi: <https://doi.org/10.15381/rif.v24i3.21084>
- [3] C. A. Samudio Pérez, A. V. dos Santos. First principles study of the ground state magnetic properties of hypothetical B2- $Fe_{50}Al_{50}$ multilayers. *Solid State communications* **287**, 59-62 (2019).
- [4] N.I. Kulikov, G. Borstel and J. Braun. Onset of magnetism in B2 transition-metal aluminides. *Phys. Review B* **59**, 10 (1998).
- [5] V. Sundarajan, B.R. Sahu, D.G. Kanhere, P.V. Pannat, G.P. Das. Cohesive, electronic and magnetic

- properties of the transition metals aluminides FeAl, CoAl and NiAl. *Phys. Condens Matter* **7**, 6019-6034 (1995).
- [6] M. Oku, N. Masahashi, S. Hanada, K. Wagatsuma. X-ray Photoelectron spectroscopic study of ordered stoichiometric FeAl fractured in situ. *J. Alloys, Comp.* **413**, 239 (2006).
- [7] Suaiquin Yu, Yanhua Fan, Lihua Dong, Yansheng Yin. A DFT Study on the Geometric Structure and Magnetic properties of $(\text{FeAl})_n$ ($n < 4$) Clusters. *Advance materials Research.* **79-82**, 851-854 (2009).
- [8] Mohammed A. Albedah, Farshad Nejdassattari, Zbigniew M. Stadnik, Janusz Przewoknik. ⁵⁷ Fe Mössbauer spectroscopy and magnetic study of $\text{Al}_{13}\text{Fe}_4$. *Journal Alloys Compounds.* **619**, 839-845 (2015).
- [9] S. Enzo, R. Frattini, R. Gupta, P.P. Macri, G. Principi, L. Schiffini, G. Scipione. X - ray Powder diffraction and Mössbauer study of nanocrystalline Fe–Al prepared by mechanical alloying. *Acta mater.* **448**, 3105-3113 (1996).
- [10] J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865-3868 (1996).
- [11] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A.D. Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, and R.M. Wentzcovitch. Quantum espresso, a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter.* **21**, 395502 (2009).
- [12] M. Beth Stearns. Model for the Origin of Ferromagnetism in Fe Average-Moment Internal-Field Variations in FeSi and FeAl Alloys. *Physical Rev. B.* **63326**, (1972).
- [13] M. Pillaca Quispe, C. V. Landauro, M. Z. Pinto Vergara, J. Quispe-Marcatoma, C. Rojas-Ayala, V. A. Peña-Rodriguez, and E. Baggio-Saitovitch. *RSC Adv.* **6**, 5367 (2016).
- [14] Stanisław M. Dubiel, Lukasz Gondek, Tilo Zienert, Jan Zukrowski. *Intermetallics.* **135**, 107217 (2021).
- [15] R. A. Dunlap and D. W. Lawther. *Mater. Sci. Rep.* **10**, 141 (1993).
- [16] G. Rahman. I.G. Kim, H.K.D.H. Bhadeshia, A.J. Freeman. First-principles investigation of magnetism and electronic structures of substitutional 3d transition-metal impurities in Fe. *Phys. B* **81**, 184423 (2010).
- [17] J.S. Trujillo Hernandez, Jesus A. Tabaras, German A. Pérez Alcázar. Effect of heat treatment on the structural and magnetic properties of the system $\text{Fe}_{56.25}\text{Al}_{43.75}$ prepared by mechanical alloying. *Rev. Latin Am. Metal. Mat.* **351**, 49-54 (2015).
- [18] Q.Q. Ren, H.R. Gong. Ground state stoichiometric B_2FeAl . *Solid State Communications.* **169**, 57-61 (2013).
- [19] Rahnama Alireza, Kotadia Hiren, Clark Samuel, Janik Vit, Sridhar Seetharaman. Nano-mechanical properties of Fe – Mn – Al – C lightweight steels. *Scientific Reports* **8** 9065 (2018).
- [20] Perdew John P, Ruzsinszky Adrienn, Csonka Gabor I., Vydrov, Oleg A., Scuseria Gustavo E., Constantin Lucian A., Zhou, Xiaolan, Burke Kiero. Restoring the Density-Gradient Expansion for Exchange in Solids and Surfaces. *Phys. Rev. Lett.* **100** 136406 (2008).
- [21] Harald Ibach, Hans Lüth. *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science* (2009). ISBN: 3540938044.
- [22] Galler A., Taranto C., Wallerberger M., Kaltak M., Kresse G., Sangiovanni, G., Toschi, A., Held, K. Screened moments and absence of ferromagnetism in FeAl. *Phys. Rev. B* **92**, 205132 (2015).
- [23] Bogner J., Steiner W., Reissner M., Mohn P., Blaha P., Schwarz K., Krachler R., Ipser H., Sepiol B. Magnetic order and defect structure of $\text{Fe}_x\text{Al}_{1-x}$ alloys around $x = 0.5$: An experimental and theoretical study. *Phys. Rev. B* **58**, 14922 (1998).
- [24] Mohn P., Persson C., Blaha P., Schwarz K., Novák P., Eschrig H. Correlation Induced Paramagnetic Ground State in FeAl. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 196401 (2001).
- [25] Z. Jaglicic, S. Vrtnik, M. Feuerbacher, and Dolinsek. Magnetic properties of FeAl_2 and Fe_2Al_5 . *Phys. Review B.* **83**, 224427 (2011).