

# Tytuł projektu: Projektowanie przyszłych magnesów trwałych

Autor projektu: Mirosław Werwiński

Celem projektu jest opracowanie nowej generacji stopów magnetycznych do zastosowania jako magnesy trwałe oraz zbadanie wpływu składu chemicznego na ich właściwości elektronowe i magnetyczne.

Motywacją do podjęcia powyższych badań są poszukiwania nowych materiałów magnetycznie twardych niezawierających metali ziem rzadkich jako zamienników powszechnie używanych magnesów neodymowych. Powyższe poszukiwania motywowane są przez niestabilne ceny metali ziem rzadkich oraz w dłuższej perspektywie ryzyko całkowitego wyczerpania ich zasobów. Uzyskane w projekcie wyniki obliczeń z pierwszych zasad staną się drogowskazem w opracowaniu nowej generacji magnesów trwałych.

Projekt koncentruje się na materiałach na bazie żelaza, kobaltu, manganu i ceru oraz ich stopach z pierwiastkami *5d*. W ramach projektu wytypowane materiały są modelowane komputerowo w skali atomowej przy pomocy metod obliczeń kwantowo-mechanicznych, nazywanych obliczeniami z *pierwszych zasad*. W projekcie obliczane są właściwości materiałów krytyczne dla ich zastosowań jako magnesów trwałych. Obliczanymi parametrami są między innymi namagnesowanie, energia anizotropii magnetokrystalicznej (anizotropia wewnętrzna) i temperatura Curie. Członkowie projektu ściśle współpracują z partnerami z Wydziału Fizyki i Astronomii Uniwersytetu w Uppsali w Szwecji. Ponadto, efektywną realizację zadań obliczeniowych zapewnia grant obliczeniowy w Poznańskim Centrum Superkomputerowo-Sieciowym (PCSS).

Efektami końcowymi niniejszego projektu będą wyniki szeroko zakrojonych badań obliczeniowych, które pozwolą zidentyfikować najbardziej obiecujących kandydatów z grupy rozważanych stopów do zastosowania jako magnesy trwałe niezawierające pierwiastków ziem rzadkich. Oczekujemy, że najbardziej obiecujące składy chemiczne wyznaczone z obliczeń z *pierwszej zasady* zostaną zsyntetyzowane i będą wykazywać przewagę nad istniejącymi materiałami niezawierającymi metali ziem rzadkich. Ponadto, poprawa ogólnego zrozumienia problemu pozwoli na opracowanie nowych strategii poszukiwania nowych magnesów trwałych.