

# Poszukiwanie magnesów trwałych niezawierających ciężkich pierwiastków ziem rzadkich z wykorzystaniem uczenia maszynowego

Autor projektu: Mirosław Werwiński

Celem projektu jest odkrycie zamienników dla obecnie używanych magnesów trwałych. Stosowane dziś magnesy o najlepszych parametrach, takie jak magnesy neodymowe i samarowe, zawierają zazwyczaj od kilku do kilkudziesięciu procent pierwiastków, których dostępność i wydobycie są mocno ograniczone. Do pierwiastków tych, których dostępność ulegała w przeszłości znacznym wahaniom i których wydobycie może nie zaspokoić popytu w przyszłości, należą, między innymi, ciężkie pierwiastki ziem rzadkich, takie jak neodym, prazeodym i samar, wchodzące w skład powszechnie używanych magnesów trwałych. Ponadto dynamiczny rozwój takich gałęzi przemysłu jak motoryzacja elektryczna, robotyka czy energetyka wiatrowa, wywołuje stale rosnące zapotrzebowanie na najwyższej jakości magnesy trwałe, które są niezbędne do pracy większości silników elektrycznych i turbin wiatrowych. Dlatego, aby zaspokoić rosnące zapotrzebowanie na magnesy trwałe, a jednocześnie zmniejszyć negatywny wpływ na środowisko związany z wydobyciem neodymu i samaru, konieczne jest odkrycie nowych materiałów, które nie będą zawierały w swoim składzie tych krytycznych pierwiastków.

Planowane badania obejmują dominującą część obliczeniową oraz etap eksperymentalny mający na celu weryfikację przewidywań. W części obliczeniowej, wykorzystując algorytmy uczenia maszynowego, na podstawie przygotowanej przez nas obszernej bazy danych opracowany zostanie uniwersalny model, który posłuży do przewidywania optymalnych składów magnesów trwałych. Baza danych zostanie utworzona na podstawie obliczeń kwantowo-mechanicznych, nazywanych obliczeniami z pierwszych zasad, w których materiały będą modelowane na poziomie atomowym w postaci przestrzennego rozkładu jąder i elektronów. Optymalne składy uzyskane za pomocą algorytmów uczenia maszynowego, po pomyślnej weryfikacji teoretycznej, zostaną zsyntezowane i scharakteryzowane w laboratorium. Część obliczeniowa projektu zostanie wykonywana w Poznańskim Centrum Superkomputerowo-Sieciowym (PCSS) oraz w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu. Członkowie projektu będą ściśle współpracować z partnerami zagranicznymi z Wydziału Fizyki i Astronomii Uniwersytetu w Uppsali w Szwecji.

Badania prowadzone w ramach projektu przełożą się na rozwój pola badań i dyscypliny naukowej na trzech poziomach. Na najwyższym poziomie zostaną określone nowe składy magnesów trwałych, które będą mogły znaleźć zastosowanie w przemyśle lub stać się podstawą do badań na poziomie optymalizacji mikrostruktury i dalszych modyfikacji składu. Na środkowym poziomie opracowane zostaną podstawy metod numerycznych - uczenia maszynowego opartego na obliczeniach z pierwszych zasad - które mogą znaleźć uniwersalne zastosowanie w poszukiwaniu nowych materiałów o pożądanych właściwościach. Na najniższym poziomie, obliczeń z pierwszych zasad, rozwijane będą nowe zagadnienia związane z wykorzystaniem w pełni relatywistycznej metody ustalonego momentu spinowego oraz modelowania stopów na bazie wielokrotnych superkomórek.