

Optymalizacja właściwości stopów i związków międzymetalicznych twardych magnetycznie w oparciu o obliczenia *ab initio*

Instytucja wiodąca: Instytut Fizyki Molekularnej PAN, Zakład Teorii Ciała Stałego
<https://www.ifmpan.poznan.pl/pl/jednostki-naukowe/zaklad-teorii-ciala-stalego.html>

Kontakt: dr hab. Andrzej Szajek, prof. IFM PAN
nr tel. 61 86 95 124 e-mail: andrzej.szajek@ifmpan.poznan.pl

WPROWADZENIE: Powszechnie stosowane magnetycznie twarde stopy zawierają pierwiastki ziem rzadkich. Obecnie technolodzy skupiają się na ograniczeniu bądź całkowitym wyeliminowaniu ich ze składu. Jednym z takich stopów jest FeCo, dla którego przeprowadzono wstępne obliczenia metodami z pierwszych zasad (*ab initio*). W oparciu o metodę *virtual crystal approximation* (VCA) wykonano obliczenia, wskazujące na dużą wartość energii anizotropii magnetycznej [1] dla tej rodziny związków, a ponadto modyfikacje składu chemicznego mogą prowadzić do dodatkowego wzrostu energii anizotropii magnetycznej [2]. Należy się spodziewać, że niewielkie modyfikacje zawartości poszczególnych składników mogą istotnie zwiększyć wartość anizotropii magnetokrystalicznej również w innych stopach bazujących na pierwiastkach metali przejściowych, czego dowodem są obliczenia przeprowadzone z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości (*density functional theory* - DFT) dla stopu Hf₂Co₁₁B [3].

CEL NAUKOWY PRACY I PROPONOWANE METODY BADAWCZE: Głównym celem pracy doktorskiej będzie charakterystyka stopów i związków międzymetalicznych, bazujących na pierwiastkach metali przejściowych, z wykorzystaniem teoretycznych metod obliczeniowych, a także opis wpływu podstawień i domieszkowania na ich właściwości. Wyniki będą podstawą do zaprojektowania nowych magnetycznie twardych stopów, mogących znaleźć zastosowanie w sensorach magnetycznych. Do obliczenia struktury elektronowej z uwzględnieniem różnych wersji potencjału wymiennego oraz poprawkami gradientowymi zostanie wykorzystane przybliżenie lokalnej gęstości spinowej (LSDA) [4]. W przypadku, gdy efekty korelacyjne będą odgrywały znaczącą rolę, dodatkowo uwzględnione zostaną poprawki LSD+U. Metody typu *ab initio* z pełnym potencjałem (FP), takie jak FP-LAPW i FPLO, mogą być użyteczne jako baza dla przeprowadzenia prac eksperymentalnych. Dla struktur, w których efekt relatywistyczny będzie odgrywał istotną rolę, zastosowany zostanie formalizm relatywistyczny ze sprzężeniem spin-orbita, a wkłady orbitalne do całkowitego momentu magnetycznego wyliczane będą z uwzględnieniem orbitalnej polaryzacji. Pomocniczo będą także zastosowane metody dużych superkomórek lub przybliżenie koherentnego potencjału (CPA).

Literatura

- [1] T. Burkert, L. Nodstrom, O. Eriksson, O. Heinonen, *Giant Magnetic Anisotropy in Tetragonal FeCo Alloys*, Physical Review Letters **93** (2004) 027203
- [2] A. Edstrom, M. Werwiński, D. Iusan, J. Rusz, O. Eriksson, *Magnetic properties of (Fe_{1-x}Co_x)₂B alloys and the effect of doping by 5d elements*, Physical Review B **92** (2015) 174413
- [3] B. Das, B. Balamurugan, Pankaj Kumar, R. Skomski, V. R. Shah, J.E.Shield, A. Kashyap and D. J. Sellmyer, *HfCo₇-Based Rare-Earth-Free Permanent-Magnet Alloys*, IEEE Transaction on Magnetism **49** (2013) 3330
- [4] M. Werwiński and A. Szajek, J.A. Morkowski, *First principles calculations of electronic structure and magnetic properties of UCuSb₂*, Computational Materials Science **81** (2014) 402