

## *Struktura elektronowa i własności magnetyczne wybranych związków międzymetalicznych z pamięcią kształtu w ramach teorii funkcjonału gęstości*

**Miejsce realizacji:** Instytut Fizyki Molekularnej PAN,  
Zakład Teorii Ciała Stałego  
<http://www.ifmpan.poznan.pl/scientificd.php?div=2>

**Kontakt:** dr hab. Maria Pugaczowa-Michalska,  
tel. 61- 86-95-131, [maria@ifmpan.poznan.pl](mailto:maria@ifmpan.poznan.pl)

### **Wprowadzenie:**

Znaczna grupa materiałów „inteligentnych” czy też wielofunkcyjnych posiada ważną zdolność do jednoczesnej i skoordynowanej odpowiedzi na zmienne warunki zewnętrzne, do których możemy zaliczyć temperaturę, ciśnienie, pole magnetyczne itp. Znakomitymi przykładami odpowiedzi układu na warunki zewnętrzne są zjawiska piezoelektryczności, termosprężystości, chemoluminiscencji. W świetle poszukiwań nowych „inteligentnych” materiałów pamięć kształtu jest jedną z pożądanych cech przy konstrukcji różnego rodzaju przydatnych urządzeń oraz stosowanej w wielu znanych rozwiązaniach medycznych przy zastępowaniu lub uzupełnianiu tkanki narządu w ciele człowieka. Zjawisko pamięci kształtu jest dość interesująca ze względu na swoje fizyczne podłoże. Termosprężysta przemiana martenzytyczna makroskopowo ujawnia się jako zdolność do odzyskiwania pierwotnego kształtu układu po wydawałoby się trwałej deformacji.

### **Cel naukowy i proponowane metody badawcze:**

W literaturze wielokrotnie zostało pokazane, że pożądane własności fizyczne w tym również zjawisko pamięci kształtu stopów międzymetalicznych na bazie żelaza, kobaltu, tytanu, niklu można prognozować w ramach metod stosujących teorię funkcjonału gęstości (DFT).

Głównym celem pracy doktorskiej będzie zbadanie za pomocą zaawansowanego narzędzia teoretycznego, jakim jest teoria funkcjonału gęstości, stopów międzymetalicznych, w których wykazano lub spodziewane jest występowanie zjawiska pamięci kształtu. W ramach badań nad tymi materiałami będzie zwrócona uwaga na szereg zagadnień związanych z opisem stanu podstawowego i potencjalnych przejść fazowych. Planowane w ramach proponowanego tematu badania uzupełnią spójny opis struktury elektronowej i wynikających z niej podstawowych cech badanych układów takich, jak moduł sprężystości, rozszerzalności termicznej, stabilność względem deformacji sieci krystalicznej i inne.

W ramach proponowanego tematu zasadniczą metodą badawczą będzie metoda funkcjonału gęstości zaimplementowana w postaci dostępnych kodów obliczeniowych.