

## Obliczenia własności elektronowych materiałów magnetycznie twardych niezawierających pierwiastków ziem rzadkich

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

Kontakt: dr hab. Andrzej Szajek, prof. IFM PAN,  
tel.: 61 8695 124,  
e-mail: [Andrzej.Szajek@ifmpan.poznan.pl](mailto:Andrzej.Szajek@ifmpan.poznan.pl)

Opiekun pomocniczy: dr inż. Mirosław Werwiński,  
tel.: 61 8695 125,  
e-mail: [Werwinski@ifmpan.poznan.pl](mailto:Werwinski@ifmpan.poznan.pl),  
<http://www.ifmpan.poznan.pl/~wemir/>

### Wprowadzenie:

Kwantowo-mechaniczny model budowy atomu pozwolił w latach dwudziestych XX w. na wyjaśnienie w jednej chwili szeregu właściwości wszystkich pierwiastków w układzie okresowym. Naturalnym krokiem była rozbudowa modelu teoretycznego od pojedynczego atomu do molekuly dwuatomowej itd. Uwieńczeniem tej drogi są modele ciał stałych zawierające jednocześnie wiele atomów różnego typu. Przykładem może być model powszechnie znanego magnezu neodymowego o formule  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ . W którym to modelu jedynym założeniem jest określona liczba atomowa  $Z$  poszczególnych pierwiastków. Geometria 3D badanego układu może być następnie modelowana w oparciu o badania rentgenowskie struktury krystalograficznej, jak również określana teoretycznie. Numeryczne rozwiązanie równań dla wszystkich elektronów oddziałujących w układzie pozwala wyznaczyć strukturę pasmową badanego materiału, a stąd szereg własności makroskopowych takich jak współczynnik sprężystości czy namagnesowanie.

Zakład Teorii Ciała Stałego (Z2) IFM PAN wykorzystuje superkomputer o architekturze dedykowanej do obliczeń wieloprocesorowych (<http://www.ifmpan.poznan.pl/pl/jednostki-naukowe/zaklad-teorii-ciala-stalego-wyposazenie.html>). Z2 dysponuje równocześnie szeroką gamą specjalistycznego oprogramowania bazującego na systemie operacyjnym Linux.

### Cel naukowy pracy i proponowane metody badawcze.

Głównym celem pracy będzie opracowanie nowej generacji materiałów magnetycznych niezawierających pierwiastków ziem rzadkich do zastosowania jako magnesy trwałe. W ramach projektu wytypowane materiały na bazie stopów żelazo-kobalt-bor będą modelowane komputerowo w skali atomowej przy pomocy metod obliczeń kwantowo-mechanicznych, nazywanych metodami "z pierwszych zasad" lub *ab initio*. Obliczenia *ab initio* nakierowane będą na uwzględnienie nieporządku chemicznego. W tym celu zostaną wykorzystane programy WIEN2k, FPLO oraz SPR-KKR.