

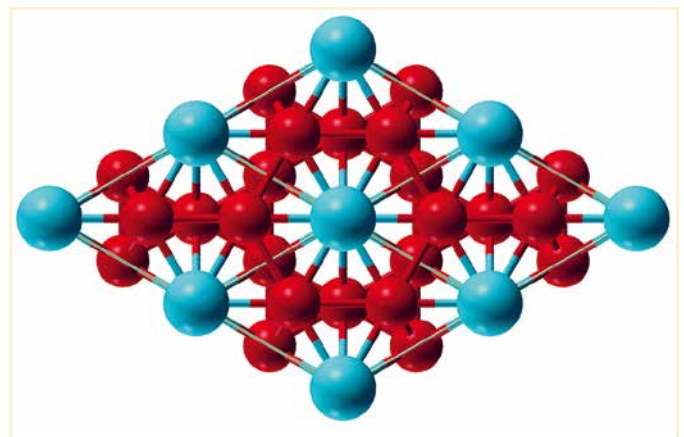
COMPUTATIONAL SCREENING VON HART- MAGNETISCHEN METALLPHASEN

Prof. Dr. Christian Elsässer | Telefon +49 761 5142-286 | christian.elsaesser@iwm.fraunhofer.de

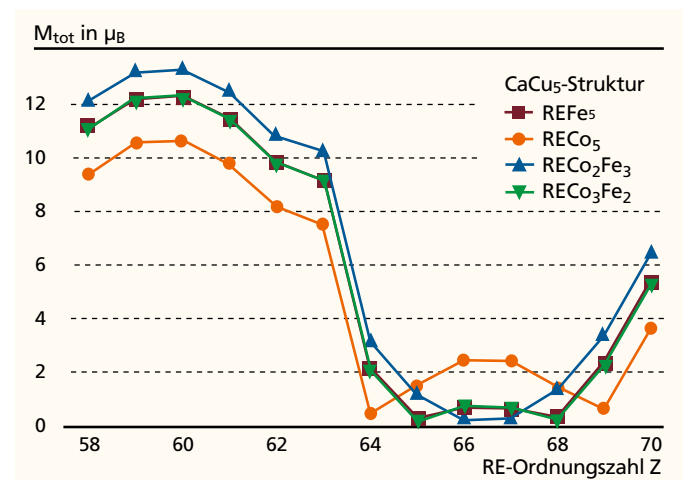
Für neuartige, starke Dauermagnete besteht in den Zukunftsbranchen Elektromobilität und Erneuerbare Energien zurzeit eine sehr große Nachfrage. Die aktuell eingesetzten Dauermagnete enthalten die Seltenerdmetalle Neodym und Dysprosium. Die Versorgungssicherheit dieser Elemente wird als kritisch eingestuft, da sie zu 90 Prozent aus China importiert werden und ihre Preise am Markt stark schwanken. Wir haben uns die materialwissenschaftliche Aufgabe gestellt, durch Computational-Screening-Simulationen nach neuartigen intermetallischen Phasen mit guten hartmagnetischen Eigenschaften zu suchen. Solche Substitutionsmaterialien sollen möglichst geringe Mengen an Seltenerdmetallen und ansonsten leicht verfügbare, ungiftige und kostengünstige Rohstoffe enthalten.

High Throughput Screening zur effizienten Suche nach neuen Materialien

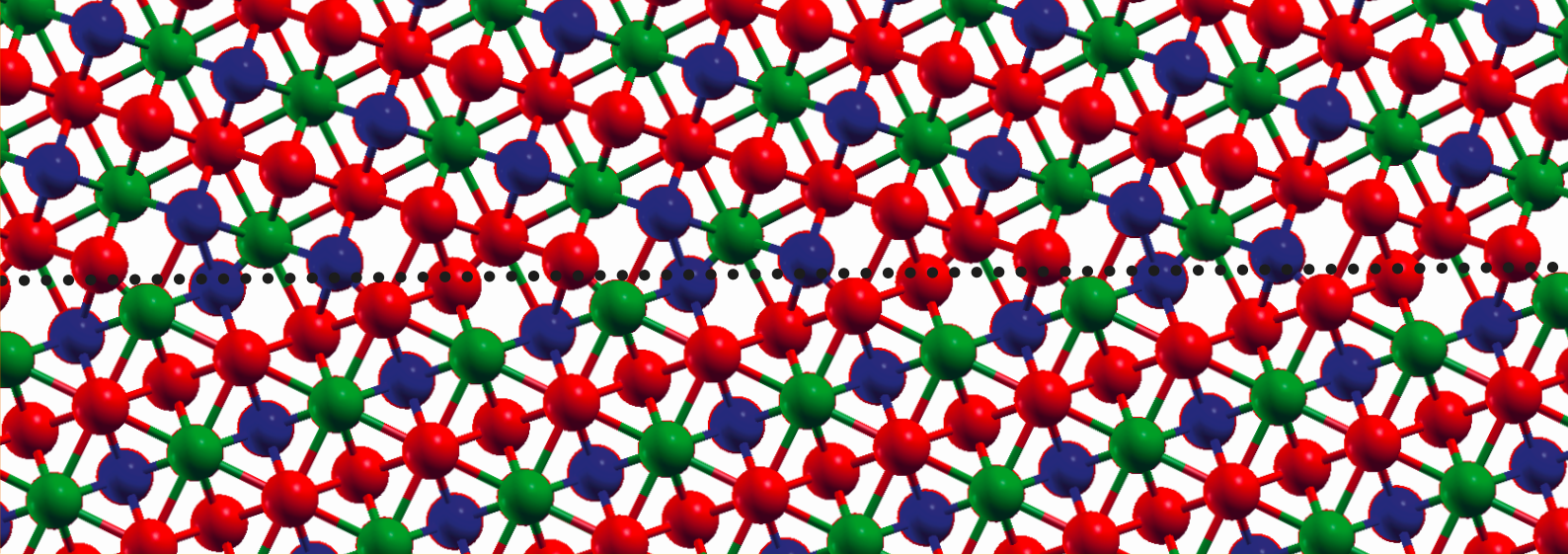
Die systematische Suche nach neuen Materialien mit konventionellen Simulationsmethoden ist sehr aufwändig. Der HTS-Ansatz (High Throughput Screening) stammt ursprünglich aus der Pharmaforschung und beruht auf kombinatorischen Variationen verschiedener Prozessparameter oder Ausgangsmaterialien, um in kurzer Zeit geeignete Materialien zu identifizieren. Wir verwenden diesen innovativen Ansatz, um für eine Vielzahl möglicher Strukturen und Zusammensetzungen von intermetallischen Phasen deren Stabilitäten und Magneteeigenschaften automatisiert zu berechnen. Um die konstruierten Strukturen zu bewerten, nutzen wir am Fraunhofer IWM eine schnelle Methode der Dichtefunktionaltheorie. Diese erlaubt die Berechnung intrinsischer Eigenschaften wie Bildungsenergien, magnetische Momente und effektive Austauschintegrale



1 $CaCu_5$ -Struktur einer Magnetphase. Im Kristallgitter werden Seltenerd- (blau) und Übergangmetallatome (rot) kombiniert.



2 Magnetmomente für RE-Elemente (RE: rare earth) in Magnetphasen mit $CaCu_5$ -Struktur. Simulationen liefern systematische, für das Materialdesign nützliche Trends.



*Korngrenze in Fe₂CoGa (Fe: rot, Co: grün, Ga: blau);
Für solche Defekte berechnen wir Magnetmomente im
Vergleich zu Daten für perfekte Kristalle.*

für einige 1 000 Verbindungen pro Woche (siehe Abbildungen 1 und 2). Die Ergebnisse können in verschiedenen Formaten gespeichert und als Materialdatenbank genutzt werden.

Vorhersage von hartmagnetischen Materialkennwerten

Im BMBF-Projekt »REleaMag« haben wir, zusammen mit Kollegen von der Robert Bosch GmbH, die HTS-Methodik für Magnetphasen entwickelt. Mittlerweile haben wir im Rahmen des Fraunhofer Leitprojektes »Kritikalität Seltene Erden« auch eine approximative Berechnung von für Hartmagnete wichtigen Kennwerten zur magnetokristallinen Anisotropie implementiert. Durch die Wahl von Suchkriterien wie günstigen Bildungsenergien, hohen Magnetmomenten und hohen Kristallanisotropien können aus einer Materialdatenbank vielversprechende hartmagnetische Verbindungen gefiltert werden. Bereits im Projekt REleaMag konnte ein neues hartmagnetisches Material theoretisch vorhergesagt und experimentell nachgewiesen werden. Dies weist auf ein hohes Erfolgspotenzial der HTS-Methodik in Bezug auf leistungsstarke Dauermagnete hin.

Simulation der Mikrostruktur

Die makroskopischen Eigenschaften eines Dauermagneten sind nicht nur durch intrinsische Materialeigenschaften von Einkristallphasen bestimmt. In realen Magneten spielt die Mikrostruktur, also die Anordnung und Ausrichtung von Kristalliten verschiedener Phasen, eine große Rolle. Insbesondere zur Erzielung einer hohen Anisotropie und hoher Koerzitivfelder ist ein Materialdesign der Mikrostruktur unverzichtbar. Wir analysieren daher auch den Einfluss von strukturellen Defekten wie Stapelfehlern, Korngrenzen (siehe Abbildung oben) und

Phasengrenzen auf die Materialeigenschaften. Das Ziel ist hierbei nicht, solche Defekte zu vermeiden, sondern ihre Effekte über eine Analyse lokaler Magnetmomente und Anisotropieparameter aufzuklären und für die Optimierung der Materialeigenschaften nutzbar zu machen.

Ein mit dem rechnergestützten Materialdesign entwickeltes Magnetmaterial kann dann in Energiekonversionssysteme wie Elektromotoren und -generatoren integriert werden. Mit dem Materialdesign können wir Industriepartner dabei unterstützen, ihre Wettbewerbsfähigkeit mit der Entwicklung innovativer Funktionsmaterialien zu sichern.

Dr. Georg Krugel, Dr. Wolfgang Körner