

# HIGH-THROUGHPUT-SCREENING ZUR ENTWICKLUNG NEUER DAUER- MAGNETE

Das dynamische Wachstum der Branchen Elektromobilität und Erneuerbare Energien hat die Nachfrage nach starken Dauermagneten, die aus Seltenerdmetallen (rare earths RE) und Übergangsmetallen (TM) bestehen, deutlich erhöht. Aus der damit verbundenen Verknappung von RE-Ressourcen entstand eine materialwissenschaftliche Aufgabe: Gesucht werden neue intermetallische RE-TM-Phasen mit guten magnetischen Eigenschaften, die aus nachhaltigen und kostengünstigen Rohstoffen bestehen und weniger von einzelnen RE-Elementen abhängen.

## Neue hartmagnetische Phasen suchen

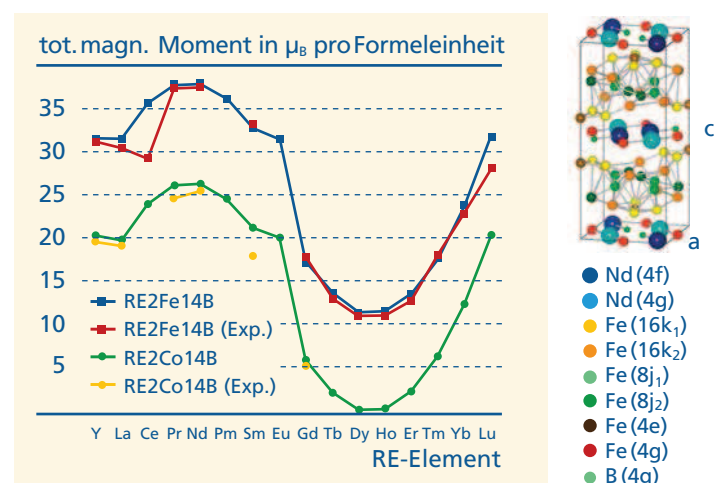
Die Kristallstrukturen der häufigsten Dauermagnete wie  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  sind Varianten der »topologisch dicht gepackten« (TCP) Phasen. Diese TCP-Phasen bieten noch ein weites Spektrum an Suchmöglichkeiten für neue magnetische Phasen, in denen RE-Atome so mit TM-Atomen umgeben werden, dass sich große, richtungs- und temperaturstabile magnetische Momente ausbilden. Die Erweiterung der kombinatorischen Möglichkeiten von den bekannten Magnetphasen auf viel mehr denkbare TCP-Phasen ergibt ein weites Suchgebiet. Solche Magnete sollen die Lücke zwischen kostengünstigen Ferriten und  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ -Hochleistungsmagneten füllen und dabei geringe RE-Anteile haben.

## Magnetische Eigenschaften vorhersagen

Um die kombinatorische Vielzahl der RE-TM-Möglichkeiten systematisch auf gute hartmagnetische Eigenschaften hin zu durchsuchen, werden im BMBF-Projekt REleaMag der Robert Bosch GmbH, des Fraunhofer IWM und drei weiteren Partnern simulatorische und experimentelle High-Throughput-Screening-Methoden eingesetzt. Am Fraunhofer IWM werden

mit einer schnellen Methode der Dichtefunktionaltheorie (DFT) intrinsische magnetische Eigenschaften, zum Beispiel lokale magnetische Momente und effektive Austauschintegrale, für reale und hypothetische Magnetphasen berechnet beziehungsweise vorhergesagt. Viele Kristallstrukturen für TCP-Phasen als Eingabedaten für DFT-Simulationen sind aus Literaturquellen und Datenbanken verfügbar. Es konnte bereits eine erste neue RE-TM-Phase theoretisch vorhergesagt und experimentell bestätigt werden. Dies deutet auf ein hohes Erfolgspotenzial der physikalischen Werkstoffmodellierung in Bezug auf neue leistungsstarke Dauermagnete hin.

Dr. Nedko Drebov, Prof. Dr. Christian Elsässer



1 Die Kristallstruktur von  $\text{RE}_2\text{TM}_{14}\text{B}$ -Verbindungen (rechts) und theoretische Resultate für deren totale magnetische Momente im Vergleich zu experimentellen Werten (links).

## SCHWERPUNKT MAGNETWERKSTOFFE UND NACHHALTIGKEIT

Mit zwei neuen, gerade anlaufenden Projekten »Kritikalität Seltene Erden« und »HEUSLER – New Magnetic Materials Without Rare Earths« baut das Fraunhofer IWM seinen Arbeitsschwerpunkt zur Erforschung neuer Magnetwerkstoffe und Substitution kritischer Rohstoffe weiter aus.

### Fraunhofer-Leitprojekt »Kritikalität Seltene Erden«

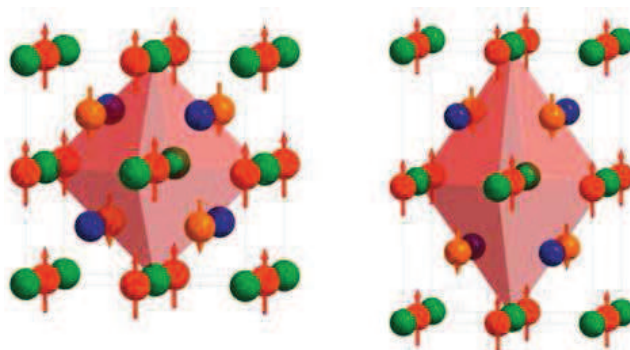
Das Fraunhofer IWM koordiniert das Projekt und erarbeitet theoretische Modelle für Magnetwerkstoffe sowie simulatorische und experimentelle Methoden für das High-Throughput-Screening. Zum einen sollen magnetische Phasen mit geringerem Mengenanteil an Seltenen Erden (rare earths RE) und darüber hinaus alternative RE-freie Magnetwerkstoffe mit neuartigen Kristallstrukturen und -kompositionen aufgespürt werden. Zum anderen sollen mikroskopische, intrinsische Ferromagnet-Eigenschaften für ideale einkristalline Phasen berechnet sowie Einflüsse von Grenzflächen und Fehlstellen in realen polykristallinen Gefügen auf makroskopische, extrinsische Dauermagnet-Eigenschaften besser aufgeklärt, und damit kontrollier- und optimierbar gemacht werden (vgl. Seite 11).

### Fraunhofer-Max-Planck-Kooperationsprojekt »HEUSLER«

Im Vordergrund stehen magnetische intermetallische Heusler-Phasen. Das Besondere dieser Materialien ist ihre erstaunliche Vielfalt an wissenschaftlich und technologisch interessanten Funktionseigenschaften (magnetisch, optisch, elektrisch, thermisch, ...). Zusammen mit den Max-Planck-Instituten für Chemische Physik fester Stoffe in Dresden und für Mikrostrukturphysik in Halle wird das Fraunhofer IWM in diesem Projekt ab Anfang 2014 mit High-Throughput-

Screening-Methoden untersuchen, auf welche Weise kubische Mn- und Fe-basierte Heusler-Phasen nicht nur ferromagnetisch, sondern durch Fehlstellen, Dotierungen und Grenzflächen uniaxial anisotrop verzerrt (Abbildung 2) und damit hartmagnetisch werden. Das Ziel ist, neuartige Heusler-basierte RE-freie Dauermagnete zu entwickeln. Wir werden uns mit Methoden der Simulation darauf konzentrieren, die Rolle von Strukturdefekten für intrinsische, ferromagnetische und extrinsische, hartmagnetische Eigenschaften von Heusler-Phasen aufzuklären, um Strukturdefekte nutzbar zu machen statt sie zu vermeiden.

Prof. Dr. Christian Elsässer und Dr. Günter Kleer



2 Kristallstrukturen von Heusler-Phasen, links kubisch, rechts tetragonal verzerrt. Rote und gelbe Kugeln mit Pfeilen bezeichnen Atome mit lokalen magnetischen Momenten, grüne und blaue Kugeln unmagnetische Atome.