

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0220U000582

Державний реєстраційний номер: 0115U004257

Відкрита

Дата реєстрації: 27-04-2020



1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Моделювання фізичних властивостей і розробка матеріалів для магнітно-твердих нанокомпозитів

Початок етапу: 05-2015

Закінчення етапу: 12-2019

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417331

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 03142, м. Київ, бульв. акад. Вернадського, 36

Телефон: (044) 424-1005

Телефон: (044) 424-2561

E-mail: metall@imp.kiev.ua

WWW: www.imp.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417331

Адреса: 03142, м. Київ, бульв. акад. Вернадського, 36

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: (044) 424-1005

Телефон: (044) 424-2561

E-mail: metall@imp.kiev.ua

WWW: www.imp.kiev.ua

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 6541030

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 629.6 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Моделювання фізичних властивостей і розробка матеріалів для магнітно-твердих нанокompозитів

Назва роботи (англ)

Modeling of the physical properties and development of materials for hard magnetic nanocomposites

Реферат (укр)

Енергія магнітної кристалічної анізотропії (MAE) накладає верхню межу на коерцитивність магнітної системи і отже має величезне значення для розробки магнітно-твердих нанокompозитів і постійних магнітів. На основі моделювання в рамках теорії функціоналу густини були отримані значення MAE для феромагнітної системи MnBi, фосфідів $\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Co}_2\text{P}_2$, легуваних Cr, Mn, Fe, Co, Ni, нітридів літію $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{M}_x)\text{N}$, легуваних Hf, Zr, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn, систем на основі інтерметаліду церію $\text{Ce}_2\text{Co}_{17}$. Одержані фундаментальні уявлення про взаємозв'язок між їх електронною будовою та фізичними властивостями. Показано, що великі значення MAE в MnBi забезпечуються спин-орбітальною взаємодією на Bi і обмінною взаємодією та величиною спінового магнітного моменту на Mn, а температурна залежність MAE головним чином визначається тепловим розширенням ґратки в базальній площині. Показано, що сполука $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{N}$ з невеликою концентрацією Fe характеризується величезними анізотропією орбітального магнітного моменту та MAE. Виявлено, що MAE для $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{M}_x)\text{N}$ (M = Cr, Mn, Co, Ni) є достатньо великою з точки зору вимог постійного магнетизму, але вона принаймні на порядок менша, ніж для $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{N}$. Показано, що найбільш ефективними легуючими елементами для підвищення MAE в $\text{Ce}_2\text{Co}_{17}$ є Zr та Hf. З точки зору можливих застосувань дуже бажано збільшити температуру Кюрі досліджених систем без втрати високої магнітної анізотропії. Перспективними виглядають нанокompозити MnBi, $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{N}$ або $\text{Ce}_2\text{M}_2\text{Co}_{15}$ (M = Zr, Hf) з якоюсь магнітно-м'якою фазою, що має велику температуру Кюрі (подібною до FeCo), а також легувани Mn або Fe інтерметаліди $\text{Ce}_2\text{M}_2\text{Co}_{15}$, оскільки таке легування посилює магнітну анізотропію, зберігаючи намагніченість, в той час як інші легуючі елементи її зменшують.

Реферат (англ)

The magnetocrystalline anisotropy energy (MAE) imposes an upper limit on the coercivity of a magnetic system and therefore is of great importance for the development of magnetically hard nanocomposites and permanent magnets. On the basis of modeling in the framework of the density functional theory we have obtained the MAE for the MnBi ferromagnetic system, $\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Co}_2\text{P}_2$ phosphides doped with Cr, Mn, Fe, Co, Ni, lithium nitride $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{M}_x)\text{N}$ doped with Hf, Zr, Ti, V, Zr, Ti, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn, systems based on the cerium intermetallide $\text{Ce}_2\text{Co}_{17}$. Fundamental concepts about the relationship between their electronic structure and physical properties have been developed. It has been shown that the large values of MAE in MnBi are determined by the spin-orbit coupling at Bi as well as the exchange splitting and spin magnetic moments on Mn, and that the temperature dependence of MAE is mainly determined by the lattice thermal expansion in the basal plane. We have found that $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{N}$ with a small concentration of Fe possesses an enormous orbital magnetic moment anisotropy and MAE. The MAE for $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{M}_x)\text{N}$ (M = Cr, Mn, Co, Ni) is found to be quite large from a point of view of permanent magnetism requirements but at least an order of magnitude smaller than for $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{N}$. Zr and Hf have been shown to be the most effective dopants to enhance the MAE of $\text{Ce}_2\text{Co}_{17}$. From the point of view of possible applications it is very desirable to increase the Curie temperature of the investigated systems without losing high magnetic anisotropy. Possible nanocomposites of MnBi, $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{N}$ or $\text{Ce}_2\text{M}_2\text{Co}_{15}$ (M = Zr, Hf) with a soft phase having a large Curie temperature (like FeCo) seem promising. Also, the $\text{Ce}_2\text{M}_2\text{Co}_{15}$ intermetallides with M = Mn or Fe can be interesting, since these dopants improve the MAE of $\text{Ce}_2\text{M}_2\text{Co}_{15}$ preserving the magnetization while other dopants reduce it.

Індекс УДК: 517.958:530.145, 517.958:530.145;538.97-405;548:537.621;538.955-405;539.21:537.621;535.33/.34;538.915; 537.62; 537.632; 537.9; 538.95; 004.942

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Квантова теорія магнітної кристалічної анізотропії в системах MnBi та $\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Co}_2\text{P}_2$, легованих перехідними металами нітриді літію Li_3N та інтерметаліди церію $\text{Ce}_2\text{Co}_{17}$.

Назва продукції (англ): The quantum theory of magnetocrystalline anisotropy in the MnBi and $\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Co}_2\text{P}_2$ systems, as well as doped with transition metals lithium nitride Li_3N and cerium intermetallide $\text{Ce}_2\text{Co}_{17}$.

Очікувані результати:

Галузь застосування: Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук (72.1).

Опис продукції (укр): Квантова теорія магнітної кристалічної анізотропії в системах MnBi, $\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x\text{Co}_2\text{P}_2$, нітридах літію $\text{Li}_2(\text{Li}_{1-x}\text{M}_x)\text{N}$ з $\text{M} = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}$, легованому Hf, Zr, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn інтерметаліди церію $\text{Ce}_2\text{Co}_{17}$. Фізичні основи магнітних властивостей цих сполук. Енергія магнітної кристалічної анізотропії накладає верхню межу на коерцитивність магнітної системи і отже має величезне значення для розробки магнітно-твердих нанокмполімерів і постійних магнітів.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Ідея, концепція

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: Визначає Президія НАН України

Виробник продукції: ІМФ ім. Г.В. Курдюмова НАН України

Споживачі продукції: науково-дослідні установи, дослідницькі центри, R&D відділи компаній, освітні заклади

Перспективні ринки: ринки України і світу

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1. Ke L., Kukusta D.A., Johnson D.D. Physical Review B. 2016. Vol. 94. P. 144429 -1 – 144429-6. 2. Antonov V.N., Bekenov L.V. Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології – НАНСИС-2016: Тези V наук. конф. (Київ, Україна, 1-2 грудня 2016). Київ, 2016. С. 118. 3. Антонов В.М., Бекєнов Л.В. Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології – НАНСИС-2019: Тези VI наук. конф. (Київ, Україна, 4-6 грудня 2019). Київ, 2019. С. 70.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 78

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Бекєнов Лев Валерійович

Зєніна Ірина Борисівна

Ковальчук Галина Іванівна

Кукуста Дєніс Олександрович

Кучеренко Юрій Миколайович

Мазур Дмитро Вікторович

Мокляк Сергій Вадимович

Сіренко Василь Тихонович

Січкарь Сергій Михайлович

Уваров Микола Вікторович

Керівник організації:

Татаренко Валентин Андрійович

Керівники роботи:

Антонов Віктор Миколайович

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.