**Поиск постоянных магнитов, не содержащих редкоземельных элементов**

***Гавронова А.С.1,2, Полетаев Д.О.1, Оганов А.Р.1***

*Студент, 4 курс специалитета*

*1Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*

*2Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,  
Москва, Россия*

*E-mail: A.Gavronova@skoltech.ru*

Постоянные магниты – материалы с высокой остаточной намагниченностью, сохраняющие такое состояние в течение длительного времени. Их используют в качестве источников магнитного поля. В настоящее время наиболее распространенными постоянными магнитами являются гексагональные ферриты, AlNiCo и сплавы с редкоземельными металлами Nd-Fe-B. Актуальной задачей в этой области является разработка магнитов, которые не содержат редкоземельных элементов, поскольку их использование ограниченно их количеством и ценой [1].

Для постоянных магнитов существует четыре наиболее важных свойства: остаточная намагниченность *M*r, температура Кюри *T*c, коэрцитивная сила *H*c и энергетическое произведение |*BH*|MAX. Эти свойства определяются локальными магнитными моментами, обменными и спин-орбитальными взаимодействиями, которые связаны с электронной и кристаллической структурой материала [2]. Для разработки новых постоянных магнитов мы выбрали стратегию, ориентированную на структуры, включающие:

1) тяжелые элементы 4d, 4f и 5d для обеспечения сильной спин-орбитальной связи;

2) переходные металлы, такие как Fe, Co, Mn или Ni, которые являются хорошими донорами спиновой плотности;

3) элементы B, Si, Al, которые повышают стабильность соединения .

Поиск новых постоянных магнитных материалов только экспериментальным путем невозможен из-за большого разнообразия потенциально подходящих соединений, высокой стоимости материалов и трудоемкости синтеза, однако развитие вычислительных методов позволяет предсказать новые материалы до их синтеза.

В данной работе из базы данных Materials Project [3] было отобрано 123 перспективных соединения. Для 9 соединений были рассчитаны стабильные магнитные конфигурации с помощью кода *Automag* [4], результаты приведены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты поиска коллинеарного магнитного состояния

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | ID | Количество  конфигураций | Стабильная  конфигурация |
| Ni3Bi | mp-976799 | 1394 | fim900 |
| MnBi | mp-1221736 | 41 | fim12 |
| MnBi | mp-568382 | 12 | fm1 |
| AlFe2Mo | mp-672259 | 502 | afm448 |
| Mn2Mo4B4 | mp-1092278 | 16 | fm1 |
| Mn2MoB4 | mp-1078108 | 16 | fm1 |
| MnMo3B4 | mp-1221732 | 5 | afm2 |
| Mn3Mo3B8 | mp-1221919 | 14 | fm3 |

**Литература**

1. Coey J.M.D. Hard magnetic materials: A perspective // IEEE Trans. Magn. 2011. Vol. 47, № 12. P. 4671–4681.

2. Koshkaki S.R. et al. Computational prediction of new magnetic materials // J. Chem. Phys. 2022. Vol. 157, № 12. P. 124704.

3. Jain A. et al. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation // APL Mater. 2013. Vol. 1, № 1.

4. Galasso M., Oganov A.R. Automag: An automatic workflow software for calculating the ground magnetic state of a given structure and estimating its critical temperature // Comput. Phys. Commun. 2023. Vol. 283. P. 108571.