

## Dissertation – Kurzfassung

Titel: Electronic Structure Calculation of Magnetization and Magnetocrystalline Anisotropy Energy of Novel Hard Magnetic Materials

Name des Kandidaten: Ahmad ASALI

Name des Betreuers: Univ. Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Josef FIDLER

Name des 1. Begutachters: Prof. Dr. Georg Kent Hellerup MADSEN

Name des 2. Begutachters: Prof. Dr. tech. Dipl.-Ing. Gino HRKAC

In den 1960er Jahren wurden neue binäre und ternäre Übergangsmetall-Seltene Erde Phasen ( $T - R$ ) mit großen Magnetisierungen ( $M_S$ ) und magnetokristallinen Anisotropieenergien (MAE) entdeckt. Seitdem haben die darauf basierenden Materialien weitreichende Anwendungen in vielen Technologien wie Autoindustrie, Daten- und Energiespeicherung gefunden. Diese Phasen sind auch vom Interesse wegen ihrer komplexen atomaren Physik, von der ihre hervorragenden makroskopischen Eigenschaften stammen. Die Zusammenwirkung von Spin-Bahn-Kopplung und Kristallfeldeffekt beeinflusst die Fermi-Fläche in so einer Weise, dass eine große magnetokristalline Anisotropie erzielt wird. Um eine große  $J_S$  zu erhalten, ist eine ferromagnetische Kopplung der Magnetisierungen der  $T$  und der  $R$  -Atome maßgeblich. So eine vorteilhafte Kopplung wird in den zwei Phasen  $RT_5$  and  $R_2T_{14}B$  beobachtet, mit  $R = Y, Pr, Sm, Nd, Dy$  and  $T = Co, Fe$  and  $Cu$ .

Die Kristallstruktur der  $RCO_5$  Phase und ihre Symmetrien sind eine Quelle der ungewöhnlich großen Orbitalmomente der  $Co$  -Atome in diesen Systemen. Die technisch relevanten makroskopischen Eigenschaften Koerzitivität und Remanenz werden durch mikroskopische Eigenschaften, besonders MAE und  $M_S$  bestimmt. Das Ziel dieses Werks ist es, diese zwei Größen für ideale Kristalle zu rechnen. Weiteres sind die Substitution von einem  $Co$  -atom durch  $Fe$  und  $Cu$  in  $RCO_5$  und die Einflüsse dieser Substitution in Betracht genommen. So eine Veränderung beeinflusst nicht nur die Kristallstruktur, sondern auch die magnetische Eigenschaften. In den  $2 - 14 - 1$  Phasen wird ein  $R$  -Atom durch ein anderes  $R$  - Atom, wie z.B.  $Pr$  durch  $Dy$  ersetzt. Fremde Atome, die die Bestandteile der Phasen ersetzen oder sich in den Zwischenräumen lagern, verändern die Fermi-Fläche und dadurch auch MAE und  $M_S$ , die auf kleinsten Änderungen in der Fermienergie reagieren. Ein weiterer Aspekt dieser Arbeit ist die Betrachtung des Einflusses der Gitterparameter- und Volumenänderungen auf der MAE und  $M_S$ . Solch eine strukturelle Änderung ist eine Simulation einer Substitution.

Numerische Rechnungen basierend auf Dichtefunktionaltheorie (DFT) ermöglichen eine genaue Beschreibung der elektronischen Struktur der Festkörper sowie eine Feststellung des Einflusses einer Substitution oder struktureller Änderung ohne zeit- und kostenintensive Experimentalmessungen. Diese DFT Rechnungen erlauben auch die Optimierung und die Relaxation der Kristallsysteme durch Minimierung der Grundzustandsenergie. In diesem Werk wurden zwei DFT-Codes, WIEN2k und VASP, verwendet, um MAE und  $M_S$  zu rechnen. WIEN2k ist basiert auf die Methode der „linearisierten, augmentierten Ebenen-Wellen“ (LAPW), und VASP ist basiert auf „projizierten, augmentierten Wellen“ (PAW).