

Energy Conversion with Highly responsive Magnetic Materials for Efficiency

Publieke samenvatting / Public summary

Inleiding

Het magnetocalorisch effect (MCE) is een thermische reactie van een magnetisch materiaal op een verandering in extern magnetisch veld. Met de ontdekking van materialen die een gigantische magnetocalorisch effect vertonen in de buurt van kamertemperatuur, zijn verschillende toepassingen van dit fenomeen mogelijk geworden.

Ten eerste is er de magnetische warmtepomp voor koeling of verwarming, die kan dienen als een milieuvriendelijker alternatief voor conventionele warmtepomp systemen met dampcompressie.

De tweede is de magnetische energieomzetting met behulp van thermomagnetische motoren en generatoren. Deze maakt het mogelijk om afvalwarmte – momenteel een onaangeboorde hulpbron – om te zetten in elektriciteit, resulterend in het verhogen van de energie-efficiëntie van verschillende soorten industrieën zoals zuivel en papier maar ook datacenters. De ontwikkeling van apparaten voor deze toepassingen wordt vergemakkelijkt bij beschikbaarheid van een optimaal passend materiaal dat aan alle praktische eisen voldoet. Tot op heden wordt slechts een handvol materialen als levensvatbaar beschouwd voor commerciële toepassing waaronder $(\text{Mn,Fe})_2(\text{P,Si})$ legeringen, Ni-Mn-gebaseerd Heusler-legeringen en La(Fe,Si)_{13} -legeringen zijn het meest prominent.

Projectinformatie / Project information

Projectnummer / Project number
TKITOE1821405

Subsidiebedrag / Grant amount
€ 150.000,00

Algemene informatie / General information

Penvoerder / Secretariat
TUD

Publicaties en materialen / Publications and attachments

• 19.02.2024

1821405 IPP Magnetocaloric Materials - Openbaar eindrapport

Volg Topsector Energie op X / Follow Topsector Energie on X

@TSEnergie

Doelstelling

Het doel van dit project was om nieuwe veelbelovende magnetocalorische materialen te identificeren en bekende materiaalsystemen te verbeteren. Hierbij werd een combinatie gebruikt van experimentele technieken, *ab initio* modellering en databasescreening.

Werkwijze

Het potentieel van een computerondersteunde zoektocht naar nieuwe magnetocalorische systemen met hoge prestaties is onderzocht. Bekende magnetocalorische materialen werden geanalyseerd om af te leiden welke eigenschappen nodig zijn voor een materiaal om een groot magnetocalorisch effect te hebben zodat dit met succes kan worden gebruikt in praktische toepassingen. Op basis hiervan zijn verschillende screening parameters voorgesteld om eerder onbekende interessante systemen te identificeren. Factoren zoals prijs, beschikbaarheid en toxiciteit van kandidaatmaterialen worden in overweging genomen samen met specifieke magnetische eigenschappen. Om dit laatste te modelleren zijn (DFT) berekeningen gebruikt. Het intern veld - een normalisatie van magnetisatie naar volume - dient om materialen met grotere magnetische momenten te vergelijken en te selecteren. Voor het voorspellen van de magnetocalorische prestaties introduceren we een nieuwe rekenkundige metriek: de magneto-elastische respons γM . Deze wordt voor ieder kandidaat materiaal verkregen door modellering van de veranderingen in het magnetische moment van het materiaal over een reeks vervormingen. Grote waarden van γM worden verwacht voor materialen van de eerste orde. Deze parameter liet een goede correlatie zien met de magnetische entropieverandering ΔS_m gemeten in bekende magnetocalorische materialen, en kan daarom dienen als een rekenkundige proxy om de prestaties te schatten van de kandidaat-verbindingen. Verschillende materiaaldatabases werden geëvalueerd als primaire informatiebron over bekende anorganische stoffen.

Resultaten

Van het project zelf:

Door een stapsgewijze toepassing van initiële screeningparameters om ongeschikte materialen uit te sorteren voorafgaand aan nauwkeurige, rekenkundig zware DFT berekeningen, is een snelle verwerking mogelijk van een zeer groot aantal kandidaat materialen. De toepassing van deze workflow op basis van de informatie verzameld uit verscheidene kristallografische databases (Materials Project, Crystallography Open Database en ICSD) resulteerde in een lijst met materialen met geschikte eigenschappen voor koeling nabij kamertemperatuur. Deze shortlist bevat veelbelovende verbindingen gerangschikt naar hun potentieel, die als leidraad kan dienen voor experimenteel onderzoek.

Verder werd het bekende $(\text{Mn,Fe})_2(\text{P, Si})$ systeem bestudeerd en geoptimaliseerd. Hierbij zijn DFT berekeningen gebruikt om potentiële doteerstoffen voor deze materiaalfamilie te onderzoeken. De sitevoorkeuren en optimale roosterparameters voor de vervangingen met elementen uit de 2e, 3e en 4e periode werden bepaald. Een overzicht van de veranderingen in magnetisatie en structurele parameters samen met dopinglimieten voor elk type doteermiddel werd samengesteld. Meest verrassend was het geval van Li-doping, waarbij het Fe-atomen op de 3g-plaats vervangt. Bij deze "Lithiation" wordt de Fe_2P -eenheidscel vervormd, waardoor de c/a -verhouding daalt. Deze verandering in roosterparameters gaat gepaard met een significante toename van de Curie-temperatuur en een verlies van het totale magnetische moment, wat de sterke magneto-elastisch koppeling in dit materiaal benadrukt.

Wat betreft mogelijkheden voor spin off en vervolgactiviteiten:

De lijst met kandidaat materialen is voor een deel getest met experimenten. De materialen op de shortlist blijken wel sterke magnetoelastische effecten te vertonen in combinatie met faseovergangen van tweede orde. Dit is

veelbelovend voor de toepassing van energieconversie van restwarmte. Echter, het project heeft tot op heden nog geen nieuw materiaal opgeleverd dat gebruikt kan worden voor warmtepompen. De dotering van het bekende MnFePSi systeem heeft wel tot een verdere verbetering van deze materialen geleid. Deze know-how is met het spin-out bedrijf Magneto Systems gedeeld.

De data in deze applicatie is afkomstig van de Rijksdienst voor Ondernemend Nederland (RVO) en wordt in samenwerking met de Topsector Energie ontsloten.

Voor meer informatie over de Topsector Energie, ga naar www.topsectorenergie.nl.

Voor meer informatie over de TSE / Energie-Innovatie regelingen die RVO aanbiedt, ga naar www.rvo.nl/tse.