

(Το παρόν θέμα πτυχιακής εργασίας έχει ανατεθεί)

Τίτλος

Μελέτη ηλεκτρονικής δομής προσμίξεων σε απλά μέταλλα με βάση τη θεωρία συναρτησιακού της πυκνότητας

Περιγραφή

Άτομα φιλοξενούμενα σε μεταλλικό περιβάλλον διατηρούν κάποια χαρακτηριστικά τους, χάνουν όμως άλλα, λόγω της δυνατότητας διαφυγής των ηλεκτρονίων από τις δέσμιες ατομικές καταστάσεις στο συνεχές των μεταλλικών καταστάσεων. Για παράδειγμα, η κατηγοριοποίηση των καταστάσεων μέσω της στροφορμής διατηρείται, το ενεργειακό φάσμα γίνεται συνεχές με κορυφές πυκνότητας καταστάσεων στη θέση των ατομικών ενεργειών, η πόλωση σπιν και το σχίσμα ανταλλαγής μειώνονται και ενδεχομένως μηδενίζονται.

Η θεωρητική περιγραφή της ηλεκτρονικής και μαγνητικής δομής τέτοιων συστημάτων μπορεί να προσεγγιστεί από υπολογισμούς βασισμένους στη θεωρία του συναρτησιακού της πυκνότητας (*density-functional theory*). Για τους υπολογισμούς θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος Korringa, Kohn & Rostoker (KKR) των συναρτήσεων Green σε συνδυασμό με την *Coherent Potential Approximation* (CPA) για την αντικατάσταση κρυσταλλικών ατόμων από προσμίξεις. Ως φιλοξενών κρύσταλλος θα ληφθεί μέταλλο ελευθέρων ηλεκτρονίων (αλκάλια, ευγενή μέταλλα), ενώ οι προσμίξεις θα καλύπτουν τον περιοδικό πίνακα. Για μαγνητικές προσμίξεις, θα υπολογιστεί η μαγνητική ροπή, η ενέργεια πόλωσης σπιν, και η αλληλεπίδραση ανταλλαγής μεταξύ μαγνητικών ροπών συναρτήσει της απόστασης.

Προαπαιτούμενα

- Γνώσεις Κβαντικής Μηχανικής, Στατιστικής Φυσικής, και Φυσικής Στερεάς Κατάστασης στο επίπεδο των μαθημάτων του Τμήματος ως και το 6^ο εξάμηνο.
- Γνώσεις αγγλικής γλώσσας σε επίπεδο ανάγνωσης επιστημονικών κειμένων.
- Γνώσεις προγραμματισμού βασικού επιπέδου σε Fortran, C++, ή Python.

Μαθησιακά αποτελέσματα

- Γνώσεις περιγραφής της ηλεκτρονικής δομής της ύλης.
- Εμπειρία σε αριθμητικές μεθόδους υπολογισμού της ηλεκτρονικής δομής της ύλης.
- Εμπειρία σε παρουσίαση αποτελεσμάτων στο πλαίσιο ερευνητικής εργασίας.

Υπεύθυνος καθηγητής

Φοίβος Μαυρόπουλος
fmavrop@phys.uoa.gr