

(Το παρόν θέμα πτυχιακής εργασίας έχει ανατεθεί)

## Τίτλος

Μαγνητικές διακυμάνσεις στο FeRh

## Περιγραφή

Το κρυσταλλικό κράμα FeRh παρουσιάζει μια ασυνήθιστη μετάβαση φάσης στους 370 K από αντισιδηρομαγνητική σε σιδηρομαγνητική, η οποία παραμένει ως τη θερμοκρασία Curie (670 K). Η ασυνήθιστη μετάβαση συνοδεύεται από μεταβολή του πλεγματού ογκού και της ηλεκτρικής αντίστασης. Κατά τη μετάβαση, η μαγνητική ροπή των ατόμων Fe παραμένει κατά μέτρο περίπου σταθερή (περίπου 3  $\mu_B$ ), ενώ εκείνη των ατόμων Rh αλλάζει από περίπου 1  $\mu_B$  σε μηδενική τιμή.

Η θεωρητική περιγραφή της συμπεριφοράς του συστήματος απαιτεί υπολογισμούς της ηλεκτρονικής και μαγνητικής δομής και της ολικής ενέργειας με βάση τη θεωρία του συναρτησιακού της πυκνότητας (*density-functional theory*). Πέρα από τη σιδηρομαγνητική και την αντισιδηρομαγνητική κατάσταση, θα γίνουν υπολογισμοί καταστάσεων με αταξία στις μαγνητικές ροπές (*disordered local moment states*), οι οποίες αντιστοιχούν στη μετάβαση μεταξύ των δύο καταστάσεων. Για τους υπολογισμούς θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος Korringa, Kohn & Rostoker (KKR) των συναρτήσεων Green. Για τη μαγνητική αταξία θα εφαρμοστεί η προσέγγιση *Coherent Potential Approximation* (CPA). Στο τέλος, θα αναζητηθεί η ενεργειακή και εντροπική συνεισφορά στη μετάβαση φάσης.

## Προαπαιτούμενα

- Γνώσεις Κβαντικής Μηχανικής, Στατιστικής Φυσικής, και Φυσικής Στερεάς Κατάστασης στο επίπεδο των μαθημάτων του Τμήματος ως και το 6<sup>ο</sup> 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