

(Το παρόν θέμα πτυχιακής εργασίας έχει ανατεθεί)

Τίτλος

Μη συγγραμικός μαγνητισμός λόγω μαγνητικής σύγχυσης σε επιφάνειες

Περιγραφή

Ο μαγνητισμός υπέρλεπτων υμενίων μετάλλων μετάβασης, πάχους 1-2 ατομικών επιπέδων, τα οποία έχουν εναποτεθεί σε μη μαγνητικές επιφάνειες, είναι δυνατόν να παρουσιάζει εξωτικές καταστάσεις, εξαρτώμενες από τις αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής (*exchange interactions*) και τη γεωμετρία του υποστρώματος. Ιδιαίτερα στην περίπτωση αντισιδηρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων, σε συνδυασμό με εξαγωνικό διδιάστατο πλέγμα στην επιφάνεια, εμφανίζεται το φαινόμενο της μαγνητικής σύγχυσης (*frustration*), διότι είναι γεωμετρικά αδύνατο να ελαχιστοποιηθεί η ενέργεια σε όλα τα ζεύγη πλησιέστερων γειτόνων. Προκύπτουν μη συγγραμικές καταστάσεις, με τη μαγνητική ροπή γειτονικών ατόμων όχι παράλληλη ή αντιπαράλληλη, αλλά υπό κάποια γωνία, δημιουργώντας ένα μαγνητικό υπερπλέγμα. Παραδείγματα τέτοιας συμπεριφοράς είναι το Cr και το Mn σε επιφάνειες Cu(111), Ag(111), Au(111).

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 μη συγγραμικών καταστάσεων και 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 γίνει σύγκριση των αποτελεσμάτων με προβλέψεις απλών μοντέλων, όπως το μοντέλο του Heisenberg.

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 και μαγνητικής 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