**СЛАЙД 1.** Здравствуйте. Разрешите представить доклад, посвященный исследованию **ВЛИЯНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НА ЗНАЧЕНИЯ КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ И КОНСТАНТЫ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОБЪЕМНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ FE, CO, NI.**

**СЛАЙД 2.**  В ферромагнитных материалах магнитные моменты атомов направлены параллельно друг другу, если температура меньше критической. В связи с этим в твердом теле образуются домены с большими спонтанными магнитными моментами. Ферромагнитные пленки применяют в микроэлектронике и вычислительных устройствах в роли магнитных носителей в устройствах для хранения и записи информации. Магнитные пленки способствуют повышению плотности записи информации и быстродействия ЗУ.

Железо, никель и кобальт – типичные примеры ферромагнетиков. Изучение таких металлов дает возможность получить важные данные о магнитных свойствах ферромагнитных материалах, расширить знания во многих областях, связанных с магнетизмом.

**СЛАЙД 3.** Цели данной работы : 1) С помощью пакета SPR-KKR провести расчеты минимума энергии для Fe, Co, Ni в различных постоянных решетках 2) Провести расчеты спинового и орбитального магнитного момента с помощью пакета SPR-KKR 3) Провести расчеты обменного интеграла при значениях постоянной решётки с помощью пакета SPR-KKR.

**СЛАЙД 4.** Программный комплекс SPRKKR (спин-поляризованный релятивистский метод Корринги-Кона-Ростокера) выполняет неэмпирические расчеты электронной структуры трехмерных периодически упорядоченных систем в рамках теории функционала плотности. Основан на методе Корринги-Кона-Ростокера. В пакет SPR-KKR входят две программы: первая программа проводит самосогласованные расчеты потенциала и волновых функций многоэлектронной системы, вторая программа вычисляет функции Грина, которые применяются для вычисления обменного интеграла.

**СЛАЙД 5.** Чтобы описать ферромагнитное или антиферромагнитное упорядочение в разных математических моделях применяют выражение Дирака, в котором энергия пропорциональна скалярному произведению операторов спинов $s\_{i}$ и $s\_{j}$, представлена на формуле 1. Знак определяет тип взаимодействия: $J>0$ ферромагнитное упорядочивание, $J<0$ антиферромагнитное.

**СЛАЙД 6.** Главная суть метода ККР — определить функции Грина всей системы с неизменной энергией. Для этого задается t - матрица, описывающая рассеивания от каждого индивидуального атомного рассеивателя, охарактеризованное неперекрывающимися и пространственно ограниченными потенциалами. Совместное применение уравнения Дайсона, атомных t - матриц и структурных констант G позволяет задать так называемый оператор пути рассеяния τ.

**СЛАЙД 7.** Обменные константы входят в гамильтониан Гейзенберга, который представлен на формуле 2. В рамках ККР метода и теории многократного рассеяния можно вычислить параметры обменного взаимодействия между магнитными моментами, используя формулировку А.Лихтенштейна, представлена на формуле 3. Таким образом, параметры магнитного обменного взаимодействия полностью определяются величинами, полученными в теории многократного рассеяния. Интегрирование осуществляется по прямой линии,

параллельной реальной оси с малой мнимой частью. Поэтому сначала выполняются расчеты равновесных потенциалов , а затем параметров обменного взаимодействия.

Полученные обменные взаимодействия действительны только в пределах малых возмущений магнитной структуры и без учета самосогласованной релаксации электронной

структуры. Углы отклонения магнитных моментов по отношению друг к другу должны

быть малыми.

**СЛАЙД 8.**  В таблице 1 и 2 представлены результаты расчетов спинового и орбитального магнитных моментов для Co и Fe, соответственно. Из таблиц видно, что постоянная решетки металла Co меняется в PBE приближении, в остальных же приближениях обменно-корреляционного потенциала постоянная решетки Co остается неизменной.

**СЛАЙД 9.** В таблице 3 также представлены результаты расчетов спинового и орбитального магнитных моментов для Ni. Из таблицы видно, что Ni в простой кубической решетке является немагнитным, т.к. значения магнитных моментов равны нулю. Из таблиц 1, 2, 3, видно, что лучше использовать PBE приближение, т. к. полученные значения приближены к экспериментальным.

**СЛАЙД 10.** В таблице 4 показаны результаты расчетов обменных интегралов для Co, Fe, Ni в различных приближениях обменно-корреляционного потенциала в теории среднего поля и в теории Гейзенберга. Как видно из данной таблицы для всех металлов обменное взаимодействие носит ферромагнитный характер. Также значения констант обменного взаимодействия у Co, Fe, Ni в теории Гейзенберга меньше, чем в теории среднего поля. Самое большое значение критической температуры $T\_{c}$ у Co. Ni в простой кубической решетке является немагнитным.

**СЛАЙД 11.** На рисунке 2 представлена зависимость параметров обменных интегралов $J\_{ij}$от расстояния между атомами R/a. Из рисунка следует, что следует, что постоянные обменного взаимодействия практически не меняются с увеличением расстояния R/a. В теории среднего поля наибольшее значение у Fe, наименьшее – у Ni. В теории Гейзенберга наибольшее значение у Fe, а у Co и Ni существенно не отличаются. Обменное взаимодействие следующего за ближайшими соседями необходимо учитывать для Fе, в то время как для Ni и Co можно пренебречь.

**СЛАЙД 12.** По результатам расчетов, проведенных в данной работе, можно сделать следующие выводы: для всех металлов обменное взаимодействие носит ферромагнитный характер; самое большое значение критической температуры $T\_{c}$ у Co; значения констант обменного взаимодействия у Co, Fe, Ni в теории Гейзенберга меньше, чем в теории среднего поля; в простой кубической решетке Ni является немагнитным; постоянные обменного взаимодействия$J\_{ij}$практически не меняются с увеличением расстояния R/a