

Секція:

Фізика

УДК 537.611.44, 519.642.6

Гой А. – ст. гр. СП-11

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

## **ЗАСТОСУВАННЯ ЧИСЕЛЬНИХ МЕТОДІВ ДО РОЗВ'ЯЗУВАННЯ СИСТЕМ ІНТЕГРАЛЬНИХ РІВНЯНЬ В ТЕОРІЇ СИЛЬНОСКОРЕЛЬОВАНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СИСТЕМ**

Науковий керівник: к.ф.-м.н., доц. Крамар О.І.

При теоретичному дослідженні властивостей матеріалів, що описуються моделями, котрі враховують сильні міжелектронні взаємодії, важливим завданням залишається пошук швидкого та надійного чисельного способу розрахунку фізичних характеристик систем. Зокрема, для дослідження умов виникнення у таких моделях феромагнітного впорядкування та його адекватного опису необхідно розглядати складну варіаційну задачу, тобто одночасно змінювати декілька параметрів електронної підсистеми (ступінь заповнення зони, температуру, намагніченість тощо). Крім того, суттєву роль грає складна форма незбуреної густини електронних станів, що робить неможливим у реалістичному випадку застосування аналітичних підходів. У цій роботі зроблена спроба застосувати сучасні засоби програмування та чисельні методи до розв'язування систем інтегральних рівнянь, характерних для таких задач.

Для здійснення окремих етапів розрахунку за допомогою середовища *MS Visual C++* розроблено підпрограми, які реалізують ряд відомих підходів [1]. Зокрема, при обчисленні інтегралів застосовано метод Сімпсона, причому для підвищення точності обчислень проміжок інтегрування розбито на значну кількість інтервалів (кількість кроків становить до  $10^6$ ), що потребує суттєвих затрат машинного часу. Для розв'язування системи рівнянь застосовано метод мінімізації цільової функції та метод золотого перерізу. Використання типу *double* для змінних в процесі розрахунків дозволяє забезпечити необхідну точність. Отримані числові результати виводяться через спеціально організований файл даних, який може бути візуалізований у вигляді графіків іншими програмними засобами.

У підсумку зазначимо, що отримані у роботі результати (незважаючи на розгляд простих граничних випадків моделі) стосовно температурної залежності намагніченості вузькозонного феромагнетика якісно узгоджуються з даними, отриманими з допомогою інших підходів [2].

1. Чисельні методи: Навчальний посібник / Шелестовський Б.Г., Самборська О.М. – Тернопіль: ТНТУ, 2010. – 164с.
2. Крамар О.І., Скоренький Ю.Л. Вплив форми модельної густини електронних станів на електричні та магнітні властивості вузькозонних матеріалів // Матеріали наукового семінару “Актуальні проблеми теоретичної та експериментальної фізики”. – Тернопіль: ТНТУ, 2010.- С. 8-9.