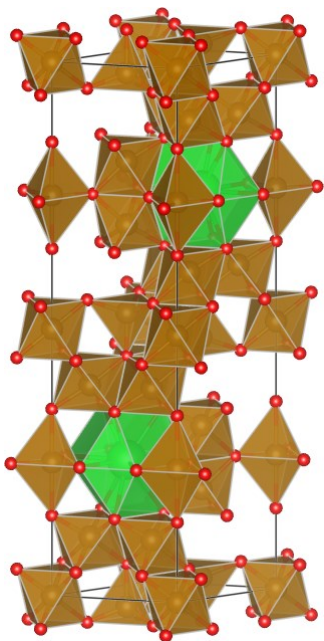


Modelování NMR spekter z *ab initio* výpočtů

Vedoucí projektu: Vojtěch Chlan, vojtech.chlan@mff.cuni.cz
Katedra fyziky nízkých teplot, laboratoř NMR spektroskopie



Výpočty elektronové struktury pevných látek metodou teorie funkcionálu hustoty (DFT) hrají nezastupitelnou roli ve zkoumání pevných látek. V kombinaci s fyzikálními experimenty usnadňuje teoretické modelování interpretaci výsledků měření, dává lepší pochopení struktury a probíhajících fyzikálních dějů, a mnohdy umožňuje dokonce predikci experimentů nebo získání takových dat, která by šlo naměřit jen obtížně.

DFT výpočty se vhodně doplňují se spektroskopií jaderné magnetické rezonance (NMR), neboť obě metody výhodně spojuje lokální charakter jejich zkoumání: hodnoty polí na jádrech v NMR jsou pro DFT snáze dostupné než například kolektivní nebo delokalizované děje na větších rozměrových škálách.

Náplní projektu může být pestrá škála problémů ve fyzice pevných látek. V principu je společné to, že se zájemce naučí základy DFT výpočtů v různých typech jednoduchých pevných látek, a pak pro vybraný reálnější systém spočítá relevantní spektroskopické parametry s cílem tato data srovnat s experimenty.

NMR v multiferoikách BaRFeO₄

Vedoucí projektu: Vojtěch Chlan, vojtech.chlan@mff.cuni.cz
Jaroslav Kohout, jaroslav.kohout@mff.cuni.cz

Katedra fyziky nízkých teplot, laboratoř NMR spektroskopie a laboratoř Mössbauerovy spektroskopie

Spektroskopie jaderné magnetické rezonance (NMR) a Mössbauerova spektroskopie (MS) se uplatňují při zkoumání struktury, dynamiky, a dalších vlastností kondenzovaných látek. Tvar NMR i MS spekter odpovídá počtu neekvivalentních rezonujících jader a odráží lokální symetrii jejich atomových pozic.

Multiferoické materiály vykazují magnetické, feroelektrické a feroelastické uspořádání a jsou atraktivní svými fyzikálními vlastnostmi i potenciálním využitím v elektronice. Zvláště zajímavá jsou magnetoelektrická (ME) multiferoika, kde by bylo možné řídit spinové proudy elektricky bez nutnosti aplikovat silné magnetické pole.

Nově syntetizovaná třída ME na bázi BaRFeO₄ (R=Y, Gd, Ho, Er, ...) má unikátní krystalovou strukturu a vykazuje složité magnetické fáze, včetně spinové hustotní vlny a cykloidálního uspořádání. Za nízkých teplot se zde objevuje spinově řízený multiferoický stav s výrazným ME efektem.

Náplní projektu je seznámit se s NMR a MS v pevných magnetických látkách, a naměřit NMR spektra na vzácných zeminách R ve struktuře a/nebo MS na ⁵⁷Fe.

