

Geometricky frustrovaná mříž 227 oxidů – analýza experimentálních dat

studentský projekt 2021/2022

Materials:

Kubické vzácno-zeminné oxidy $A_2B_2O_7$, kde A značí vzácnou zeminu a B je přechodový kov nebo prvek z hlavní skupiny, jsou systematicky studovány pro jejich často exotické krystalografické a elektronové vlastnosti. V těchto materiálech byly pozorovány rozmanité základní stavy, magnetické struktury, a předpovídané elektronové, magnetické a dokonce topologické vlastnosti určené vzájemným působením elektron-elektronových korelací a spin-orbitální interakce. Geometrická frustrace magnetických momentů na krystalografických pozicích A a/nebo B rovněž nabízí široké pole pro vědecká zkoumání těchto oxidů.

Goals:

Cíl projektu spočívá v základní charakterizaci nově připravených polykrystalů a monokrystalů z rodiny $A_2B_2O_7$, konkrétně $Er_2Zr_2O_7$, $Tm_2Zr_2O_7$ a $Yb_2Zr_2O_7$ včetně analýzy dat neutronového rozptylu.

Methods:

Experimentální data budou analyzována a zpracována programy FullProf a Esmeralda Laue, a získané výsledky budou prezentovány s využitím programu Origin.

- Student se naučí:**
- základy rentgenové a neutronové difrakce
 - základní ovládaání vybraných programů z balíčku FullProf
 - ovládat program Esmeralda

Základní uživatelské znalosti softwaru Origin jsou vítány, nikoliv však nezbytné.

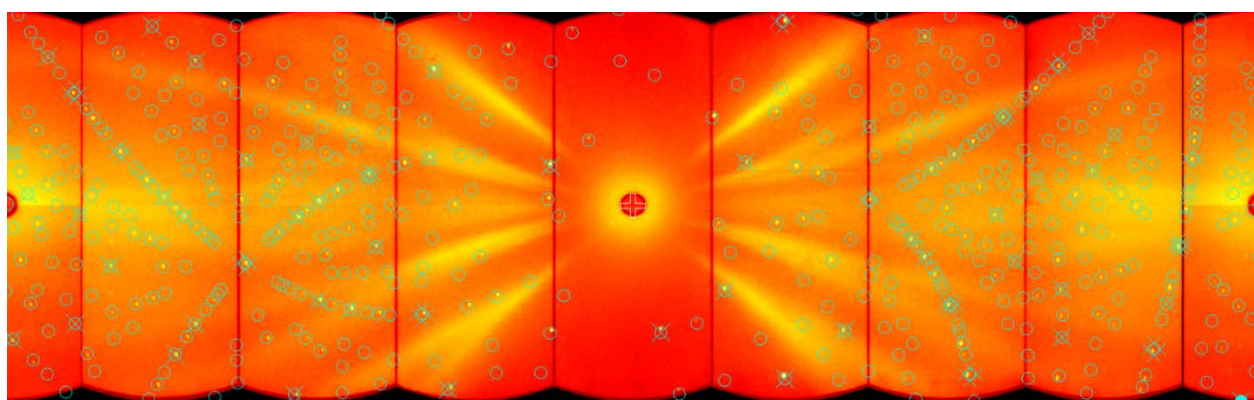


Figure: Laue neutronová difrakce a simulace reflexí monokrystalu $Er_2Ti_2O_7$.

Více informací: *RNDr. Milan Klicpera, Ph.D.*

mi.klicpera@mag.mff.cuni.cz

Geometrically frustrated lattice of 227 oxides – analysis of experimental data

student project 2021/2022

Materials:

Cubic rare-earth $A_2B_2O_7$ oxides, with A standing for a rare-earth element and B for a transition metal or main block element, have been systematically studied for their frequently exotic crystallographic and electronic properties. Diverse ground states, magnetic structures, and predicted exciting electronic, magnetic, and even topological properties originating from a competition between electron-electron correlations and spin-orbit coupling have been reported. The geometrical frustration of magnetic moments residing on the A and/or B crystallographic positions offers a playground for scientific investigations as well.

Goals:

The aim of the project is a basic characterization of newly prepared $A_2B_2O_7$ poly- and single crystals, namely $Er_2Zr_2O_7$, $Tm_2Zr_2O_7$, and $Yb_2Zr_2O_7$, including the analyses of neutron scattering data.

Methods:

The experimental data are to be analyzed and processed by FullProf and Esmeralda Laue suites, and obtained results presented employing Origin program.

- Student will learn:**
- basics of x-ray and neutron diffraction
 - basics of selected programs in the FullProf suite
 - operate the Esmeralda program

Basic knowledge on Origin software are welcome, but not mandatory.

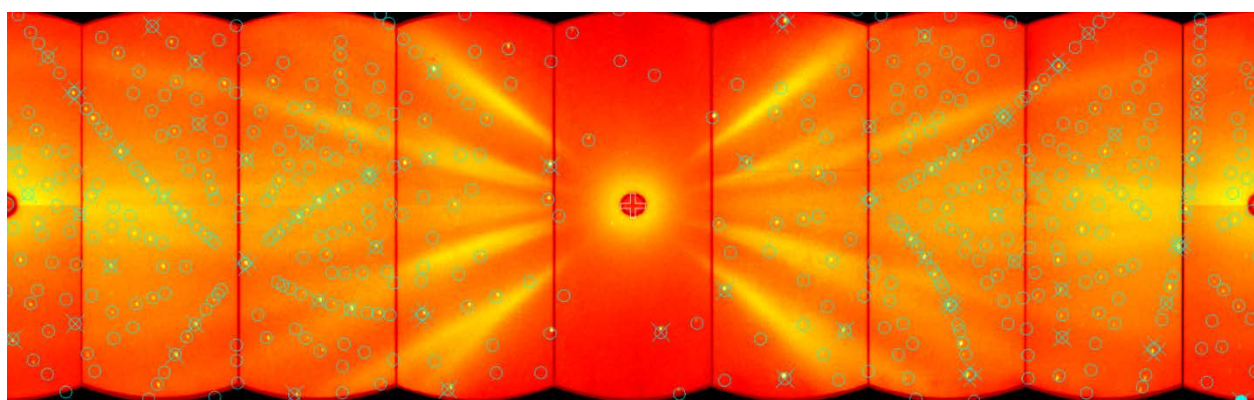


Figure: Laue neutron diffraction and simulated reflections of $Er_2Ti_2O_7$ single crystal.

More information: *RNDr. Milan Klicpera, PhD*

mi.klicpera@mag.mff.cuni.cz