

Studium frustrovaných magnetů a jejich magnetokalorických vlastností

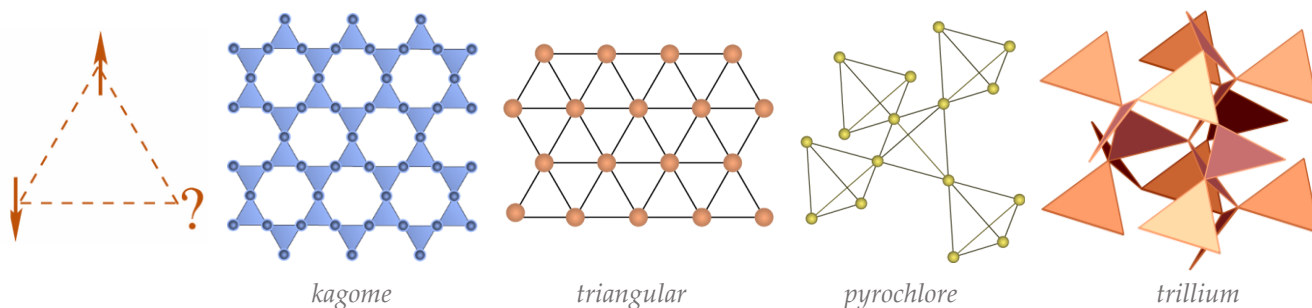
Vedoucí projektu: Lenka Kubíčková (kubickol@fzu.cz)

Pracoviště: [Laborař Mössbauerovy spektroskopie](#), KFNT, MFF UK
ve spolupráci s [Oddělením magnetik a supravodičů](#), FZU, AV ČR

Klíčová slova: kvantový magnetismus, geometrická frustrace, Mössbauerova spektroskopie, magnetické vlastnosti, struktura

Časová náročnost: předpokládáno 80 hodin

Život může být díky frustraci (někdy) zajímavější a ve fyzice je frustrace spojena s řadou zajímavých jevů. V případě frustrovaných magnetů interakce mezi jednotlivými magnetickými ionty – s jejich nejbližšími a druhými nejbližšími magnetickými sousedy – brání jednoznačnému magnetickému uspořádání při teplotách, při nichž by se podobné nefrustrované látky magneticky uspořádaly. Příkladem takových látek mohou být materiály s trojúhelníkovými motivy magnetických iontů (tzv. geometrická frustrace, viz obrázek níže). Mezi exotickými vlastnostmi frustrovaných magnetů můžeme zmínit např. přítomnost magnetických monopólů, kvantových kritických bodů, vlastností spinového ledu nebo kapaliny, nebo třeba Bose-Einsteinovu kondenzaci spinů. Kromě toho, že jsou frustrované magnety fascinující pro základní výzkum hledající fundamentálně nové vlastnosti materiálů, mohou také pomoci při návrhu nových zařízení pro ukládání dat nebo tvořit účinné magnetokalorické materiály pro chlazení pomocí magnetického pole (např. pro zkapalňování vodíku).



Trojúhelníkový motiv typický pro frustrované magnety, který při antiferomagnetické interakci mezi magnetickými momenty atomů komplikuje vznik magnetického uspořádání, se vyskytuje v různých typech krystalových mříží, např. v tzv. kagome nebo triangulární mříži (2D), případně pyrochlorové nebo trilliové („trojčtetkové“) mříži (3D).

Cílem projektu je studium základních vlastností vybraných materiálů disponujících geometricky frustrovanou mříží magnetických atomů. Podle preferencí zájemce se zaměříme buď na experimentální, nebo teoretické studium vybraného materiálu (případně obojí). V případě zájmu studenta lze na výsledky tohoto projektu snadno navázat v bakalářské nebo diplomové práci, které pak mohou zahrnovat i méně obvyklé metody na velkých infrastrukturách, např. s využitím synchrotronového záření nebo neutronů, případně extrémně vysokých magnetických polí či tlaků.

Experimentální studium může zahrnovat např.:

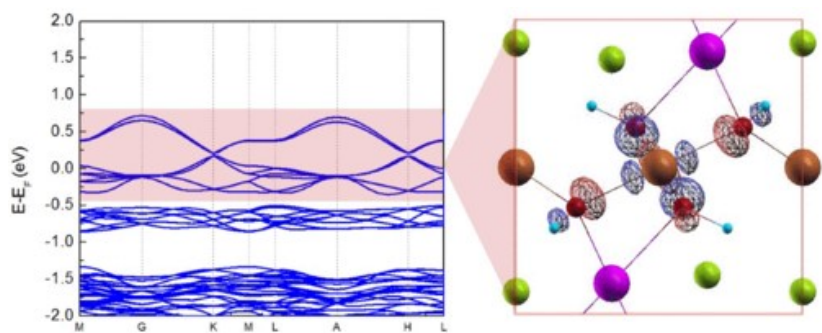
- strukturní charakterizace (krystalová struktura, fázová čistota) pomocí práškové rentgenové difrakce
- měření magnetických vlastností ve statickém a střídavém poli pomocí magnetometru na principu SQUID (superconducting quantum interference device, při teplotách 2-400 K, v magnetických polích až do 7 T)
- měření tepelné kapacity pomocí aparatury PPMS (Physical Property Measurement System, 2-400 K, do 14 T)
- nepřímou analýzu magnetokalorických vlastností z magnetizace a tepelné kapacity
- Mössbauerovu spektroskopii u látek obsahujících železo nebo cín.
- V případě zájmu si lze vyzkoušet hydrotermální syntézu nových materiálů. Hydrotermální syntéza je založená na chemických reakcích, které probíhají ve vodných roztocích při zvýšeném tlaku a při teplotě vyšší, než je teplota varu vody za atmosférického tlaku (např. 180–350 °C). Metoda hydrotermální syntézy je inspirovaná přirozenými procesy v zemské kůře, během nichž dochází k tvorbě různých minerálů, navíc je velmi vhodná pro růst krystalů.



Vlevo: Jádru práškového rentgenového difraktometru pro strukturní analýzu. Vpravo: Multifunkční sestava přístroje PPMS.

Teoretické studium obnáší:

- výpočty elektronových struktur pomocí programů Wien2k a VASP
- případně výpočty pomocí metody Monte Carlo
- velkou výhodou teoretického studia obzvláště pro mimopražské zájemce je možnost řešení projektu na dálku



Vlevo: Jednoelektronová pásová struktura herbertsmithitu $ZnCu_3(OH)_6Cl_2$ s kagome mříží magnetických atomů, kandidáta na kvantovou spinovou kapalinu. Vpravo: Wannierovy funkce zvýrazněných pásů kolem Fermiho meze. Převzato z [Liu et al., Phys. Rev. B 92, 165101 \(2015\)](#).