Title: Hyperjemné interkace ve feritech se spinelovou strukturou

Autor: Vojtěch Chlan
Matematick-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova v Praze

Školitel: Prof. RNDr. Helena Štěpánková, CSc.

Abstrakt:

Feritové systémy se spinelovou strukturou, manganatý ferit, lithný ferit a magnetit, jsou studovány experimentálně pomocí jaderné magnetické resonance (NMR) a z prvních principů pomocí výpočtů elektronové struktury vycházejících z teorie funkcionálu hustoty (DFT). Manganaté ferity s různými stupni inverze manganu/železa a s různými obsahy manganu jsou studovány s ohledem na magnetickou strukturu a uspořádání kationtů. Na případu lithného feritu je vypracován přístup pro interpretaci NMR spekter, který spočívá ve srovnání spočtené anizotropie hyperjemného pole s experimentálními výsledky. Tato metoda je pak aplikována na nízkoteplotní fázi magnetitu a ukazuje slibnou cestu k vyřešení její komplikované struktury a orbitálního a nábojového uspořádání. Přesmyknutí magnetické snadné osy účinkem externího magnetického pole a s tím spojené strukturní změny jsou studovány magnetickými a NMR měřeními. Magnetit s kationtovými vakancemi je zkoumán analýzou satelitní struktury indukované vakancemi; je ukázáno, že přítomnost vakance vede k přeskupení elektronů v oktaedrální podmříži, což je doprovázeno výskytem atomů železa se značným orbitálním momentem.