

## Nabídka studentských projektů

vedoucí práce: Mgr. Jaroslav Hamrle, Ph.D.

[hamrle@karlov.mff.cuni.cz](mailto:hamrle@karlov.mff.cuni.cz)

<http://alma.karlov.mff.cuni.cz/hamrle/>

### *Ab-initio* výpočty vlastností elektronů v krystalu kobaltu

Výpočty vlastností elektronů v krystalech pomocí *ab-initio* (výpočty z prvních principů) jsou zavedená a ověřená technika používaná k předpovědím a popisu mnoha různých vlastností krystalů, např. optické, mechanické, tepelné či vodivostní vlastnosti krystalů.

Cílem tohoto projektu je spočítat vlastnosti elektronů v krystalu kobaltu a následné určení jeho optických vlastností, v těchto dvou krocích.

1) Nejprve je určen základní stav elektronů, což je nejmenší možná celková energie všech elektronů (stav s minimální energií) v daném krystalu (zde krystalu kobaltu). Každému elektronu v krystalu je určena např. jeho energie, hybnost, a obecně jeho vlnová funkce.

2) Druhým krokem je pak výpočet žádané optické vlastnosti, což v našem případě bude určení závislosti permitivity na vlnové délce světla.

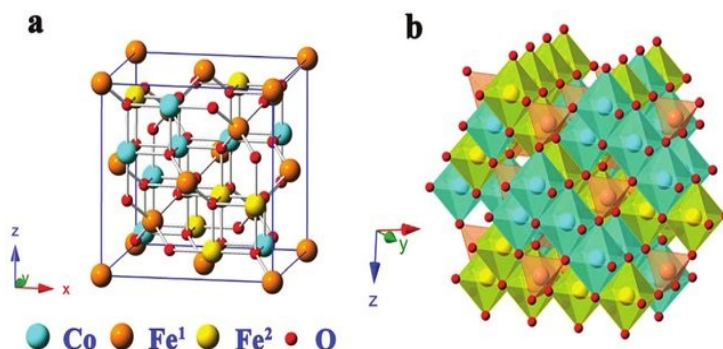
V průběhu projektu se student seznámí s *ab-initio* výpočty vlastností elektronů v krystalech. Použitá technika výpočtu bude DFT (teorie hustotního potenciálu), implementovaná v programu Wien2k.

---

### Magnetooptická spektroskopie niklových a kobaltových feritů

Kobaltové a niklové ferity ( $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  a  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$ ) jsou materiály složené z atomů železa, kyslíku a dalšího prvku, zde kobaltu nebo niklu. Tyto materiály jsou zajímavé pro kombinaci svých strukturních vlastností (stabilita, snadná příprava nanočástic) a magnetických vlastností (silný magnetický moment).

Cílem této práce je změřit elipsometrická a magnetooptická spektra na sadě vzorků (vrstev) těchto materiálů, kde různé vzorky budou mít různou koncentraci niklu a kobaltu. Vzorky budou vyrobeny na Univerzitě Osnabrueck, Německo. V průběhu projektu se student seznámí se základy elipsometrie, magnetooptické spektroskopie a základního zpracování těchto dat.



Krystalová struktura kobaltového feritu,  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ . [Zeng *et al*, *Nanoscale* **9**, 7493 (2017)]