

Úvod do magnetizmu pevných látek

1. Úvod

2. Izolované magnetické momenty

3. Prostředí

4. Interakce

5. Magnetické struktury

6. Doménová struktura a magnetizace

1. Magnetismus pevných látek - úvod

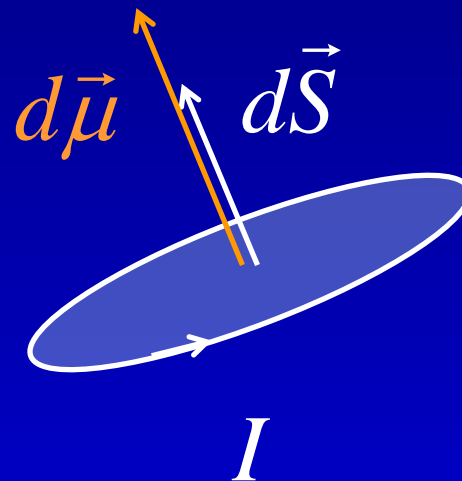
1. Zdroje magnetismu - magnetický moment

1.1. Magnetický moment elementárních částic

Magnetismus pevných látek

1.2. Elektrický proud (Biotův – Savartův zákon)

$$d\vec{\mu} = Id\vec{S} \quad [Am^2]$$



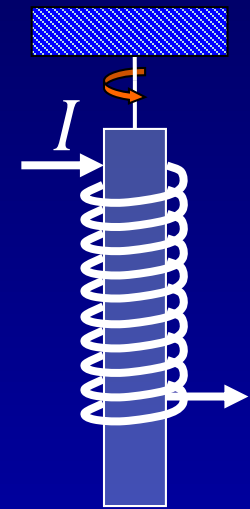
1. Magnetismus pevných látek - úvod

Je zajímavé, že magnetický moment μ je vždy spojen s momentem mechanickým L (m. hybnosti)

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{L}$$

Kde γ je tzv. gyromagnetický poměr

$$\frac{\vec{\mu}}{\vec{L}} = \gamma$$



Kanonická
hybnost

Důkazem této souvislosti je Einsteinův – de Haasův efekt

Spojení magnetického a mechanického momentu je dáno nutností pohybu náboje při vytváření magnetického pole (x spin elektronu ?) $p_c = p_i + qA$

Platí zákon zachování momentu setrvačnosti, opak Barnettův efekt

1. Magnetismus pevných látek - úvod

Bohrův magneton

$$\mu = \pi r^2 I$$

$$I = -ef = -e \frac{v}{2\pi r}$$

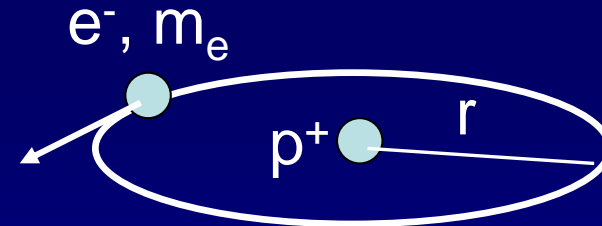
$$L = m_e v r = \hbar \Rightarrow v = \frac{\hbar}{m_e r}$$

Menší moment hybnosti než \hbar není, tj. v základním stavu se musí $L = \hbar$

$$\mu = -\frac{e\hbar}{2m_e} = -\mu_B$$

Bohrův magneton = $9,274 \cdot 10^{-24}$
Am² nebo JT⁻¹

Vodíkový atom



Bohrův magneton bude, co do velikosti, vhodnou jednotkou pro mgt. moment atomů

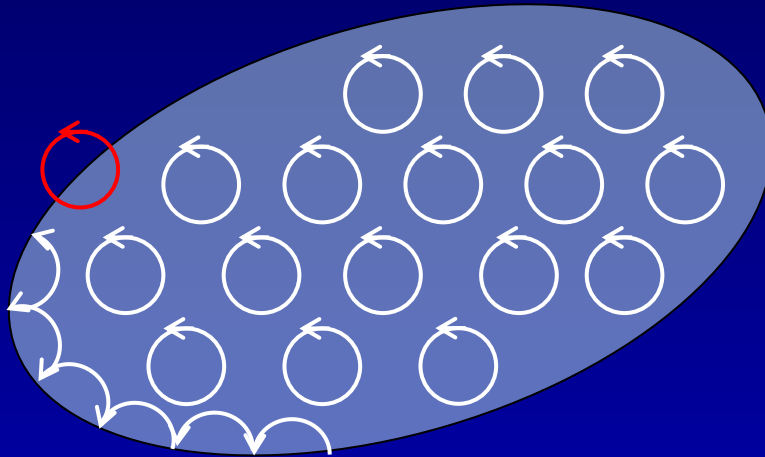
$$\gamma = -\frac{e}{2m_e}$$

Gyromagnetický poměr elektronu

1. Magnetismus pevných látek - úvod

Klasický vs. kvantový systém

Analýzou klasického systému (pevné látky) bychom zjistili, že energie systému je nezávislá na magnetickém poli. (Bohr-van Leeuwen teorém)



Elektrony v klasickém systému vykonávají v mgt. poli pohyb po kružnicích. Avšak proud takto vyvolaný se právě ruší s proudem v důsledku neúplných orbit na hranici vzorku!

Proto je třeba si uvědomit, že magnetismus látek je čistě kvantové povahy. To i přesto, že řadu magnetických jevů ještě nejsme schopni v rámci kvantové mechaniky popsat.

1. Magnetismus pevných látek - úvod

Orbitální a spinový moment hybnosti elektronu v atomu,
kvantová čísla l, m_l a s

Orbitální moment hybnosti L



Velikost(amplituda)	$\sqrt{l(l+1)}\hbar$	Moment hybnosti implikuje moment magnetický	$\sqrt{l(l+1)}\mu_B$
Průmět do osy (B)	$m_l\hbar$	$g \cong 1$	$-gm_l\mu_B$

Spinový moment hybnosti S



Velikost(amplituda)	$\sqrt{s(s+1)}\hbar$		$g\sqrt{s(s+1)}\mu_B$
Průmět do osy (B)	$m_s\hbar$	$g \cong 2$	$gm_s\mu_B = \mu_B!$

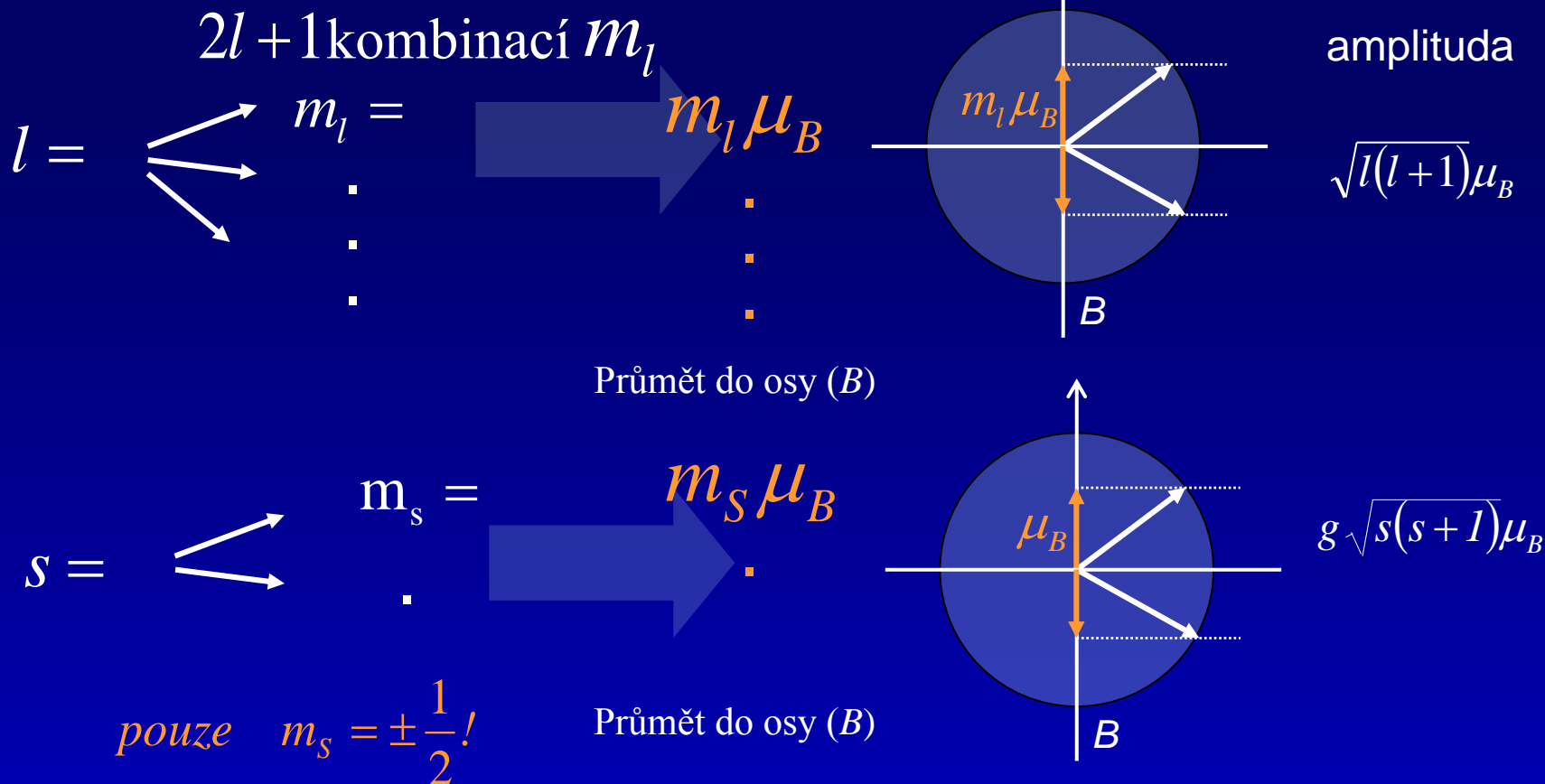
Tzv. g-faktor, vlastnost daná povahou elektronu, g-faktor
atomu je jejich kombinací, často bývá =2, ale může být menší

$$\hat{S}_z|\psi\rangle = m_s|\psi\rangle$$

$$\hat{S}^2|\psi\rangle = s(s+1)|\psi\rangle$$

1. Magnetismus pevných látek - úvod

Orbitální a spinový moment hybnosti **atomu** kvantová čísla l, m_l a s, m_s



Předbýváme

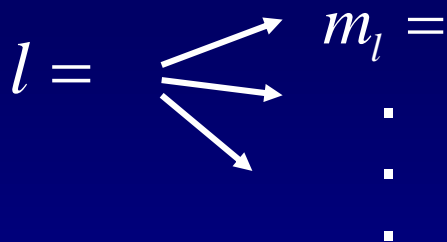
$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = g\vec{m}\mu_B \cdot \vec{B}$$

Energie elektronu v atomu je závislá na mgt. poli, celková energie elektronu se v mgt. poli posune podle B a m
 Zeemanův efekt = štěpení spektrálních čar $\pm E$

1. Magnetismus pevných látek - úvod

Orbitální a spinový moment hybnosti **atomu** kvantová čísla l, m_l a s, m_s

$$m_l = -l, (-l+1), \dots, l$$

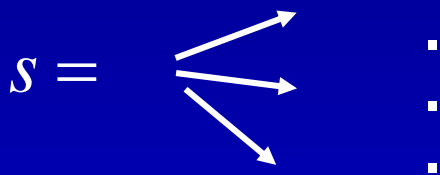


Jedna z kombinací – základní stav – viz. níže Hundova pravidla

$Dy^{+3}, 4f^9$

m_l	↑	↓
3	0	0
2	0	0
1	0	0
0	0	0
-1	0	0
-2	0	0
-3	0	0

$$m_s = -s, (-s+1), \dots, s$$



Výsledek pro iont:

$$S = 5/2$$

$$L = 5$$

Lymanova serie u vodíku (se spin-orbitální interakcí)

Kvůli interakci s magnetickým polem se každá hladina rozpadá na $2j+1$ ekvidistantních hladin

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = g\vec{m}\mu_B \cdot \vec{B}$$

Předbíláme

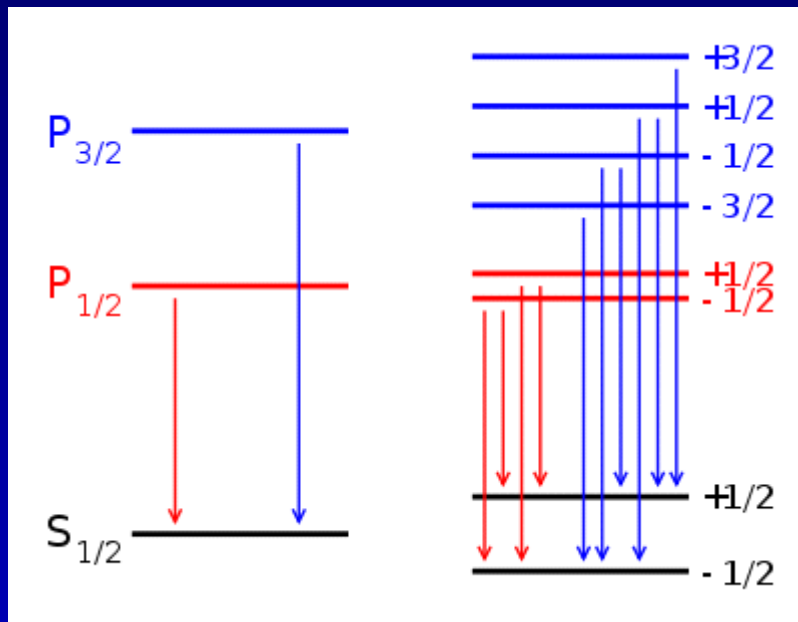
g_J pro tři hladiny jsou

Landé faktor

$$g_J = 2 \quad \text{pro } 1S_{1/2} \quad (j=1/2, l=0)$$

$$g_J = 2/3 \quad \text{pro } 2P_{1/2} \quad (j=1/2, l=1)$$

$$g_J = 4/3 \quad \text{pro } 2P_{3/2} \quad (j=3/2, l=1)$$



Rozštěpení je různé pro různé orbitaly kvůli g_J

$$\Delta E = g_J \mu_B B$$

$$2P_{3/2} \rightarrow 1S_{1/2}$$

$$2P_{1/2} \rightarrow 1S_{1/2}$$

Spin-orbitální štěpení
Jemná struktura
(23)

Štěpení mgt. polem
Zeemanovo štěpení

Platí výběrové pravidlo

$$\Delta m_l = 0; \pm 1$$

1. Magnetizmus pevných látok -úvod

Pole a magnetizace

Vakuum: $\vec{B} = \mu_0 \vec{H} \quad [T] \quad \mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$

Ve vakuu jsou oba vektory až na faktor μ_0 totožné

(Pevná) látka: $\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M})$

V materiálu mohou být oba vektory velmi rozdílné i ve směru vektorů

Za předpokladu, že M je přímo úměrné H $\vec{M} = \chi \vec{H} \quad [Am^{-1}]$

$$\vec{B} = \mu_0 (1 + \chi) \vec{H} \quad \vec{B} = \mu_0 \mu_r \vec{H}$$

$\chi = [-]$ je mgt. susceptibilita $\mu_r = [-]$ je mgt. permeabilita

1. Magnetizmus pevných látok -úvod

Pole a magnetizace

Pohled na magnetizaci materiálu

$$\vec{M} = \frac{\sum \vec{\mu}}{V} \quad \left[= \frac{Am^2}{m^3} \right]$$

Je to magnetický moment vztažený na objem = koncentrace mgt. momentu

Magnetizace je veličina, která se váže na mikroskopické magnetické momenty atomů

To znamená, že i na mgt. intenzitu H lze pohlížet jako na koncentraci mgt. momentu.

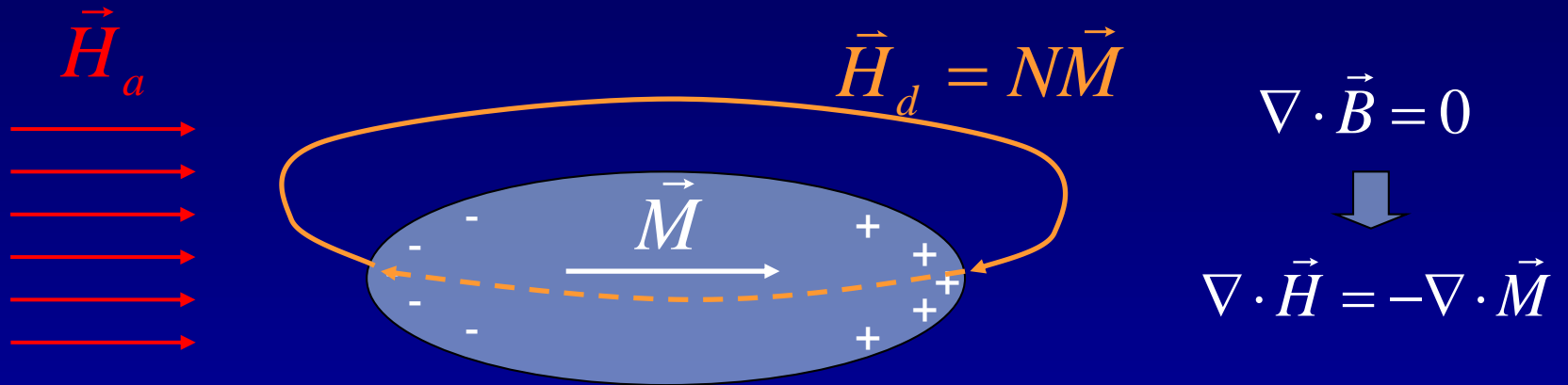
$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad \left[Am^{-1} \right] \quad \text{Lineární magnetika}$$

Přes tento pohled je třeba mít na paměti,
že magnetický dipól je zdrojem mgt. pole! (13)

1. Magnetismus pevných látek - úvod

Při měření susceptibility musíme být opatrní kvůli demagnetizačnímu poli !

Vnitřní pole \vec{H}_i , které působí na měřený vzorek může být jiné než pole aplikované.



$$\vec{H}_i = \vec{H}_a - N\vec{M}$$

N ...Demagnetizační faktor

Můžeme zapomenout

pro $\chi \ll 1$

$$\chi_{\text{experiment}} = \frac{M}{\vec{H}_a - N\vec{M}} = \frac{\chi_{\text{vlastni}}}{1 + N\chi_{\text{vlastni}}}$$

Pozor na geometrii vzorku!

1. Magnetizmus pevných látok - úvod

Mechanický moment \vec{M} pôsobící na magnetický moment $\vec{\mu}$ v magnetickém poli \vec{B}

$$\vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

Energie magnetického momentu v magnetickém poli

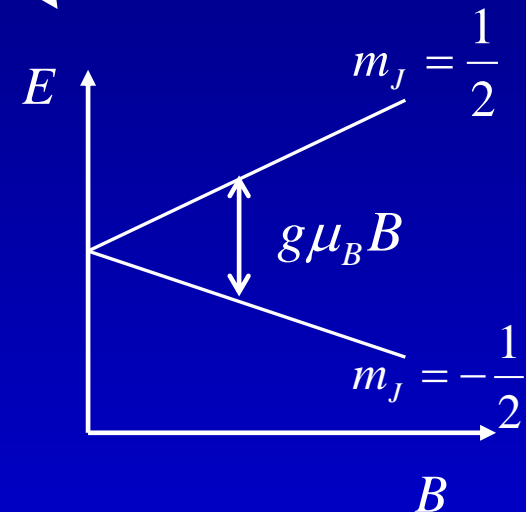
$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Magnetická indukce v místě r od magnetického momentu $\vec{\mu}$ umístěného v počátku

$$\vec{B}(\vec{r}) = \mu_0 \nabla \left(\frac{\vec{\mu} \cdot \vec{r}_0}{4\pi r^2} \right)$$

Pole klesá s r^3 !

Zeemanův efekt



2. Izolované magnetické momenty

Atom v magnetickém poli

Předpokládejme Hamiltonian atomu se Z elektrony v základním stavu

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^Z \left(\frac{p_i^2}{2m_e} + V_i \right)$$

Einsteinův – de Haasův efekt
Kanonická hybnost

$$p_C = p_i + eA$$

V magnetickém poli B se Hamiltonian změní na

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_B (\vec{L} + g\vec{S}) \cdot \vec{B} + \frac{e^2}{8m_e} \sum_{i=1}^Z (\vec{B} \times \vec{r}_i)^2$$

Změna energie v důsledku
paramagnetismu

Jen když nejsou elektrony spárované

Změna energie v důsledku
diamagnetismu

Vždy

2. Izolované magnetické momenty

Diamagnetismus (Všechny elektrony spárovány)

Posun energie základního stavu v důsledku přítomnosti pole B

$$\Delta E_0 = \frac{e^2}{8m_e} \sum_{i=1}^Z (\vec{B} \times \vec{r}_i)^2 \quad \vec{B} = (0, 0, B_z) \quad \rightarrow \quad (\vec{B} \times \vec{r}_i)^2 = B^2 (x_i^2 + y_i^2)$$

Kulová symetrie

$$\langle x_i^2 \rangle = \langle y_i^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r_i^2 \rangle$$

Helmholtzova volná energie F pro mgt. látky

$$dF = -SdT - pdV - MdB$$

$$\Delta E_0 = \frac{e^2 B^2}{12m_e} \sum_{i=1}^Z \langle r_i^2 \rangle$$

$$-\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_{T,V} = M = -\frac{N}{V} \frac{\partial \Delta E}{\partial B} = \frac{-Ne^2 B}{6m_e V} \sum_{i=1}^Z \langle r_i^2 \rangle \quad M \neq f(T) !$$

2. Izolované magnetické momenty

Diamagnetismus

$$M = - \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_{T,V}$$

$$\Delta E_0 = \frac{e^2}{12m_e} \sum_{i=1}^Z \langle r_i^2 \rangle$$

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{\mu_0 M}{B}$$

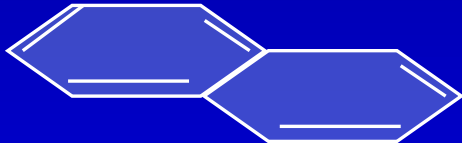
N atomů se Z elektrony v objemu V

$$\chi = - \frac{N}{V} \frac{e^2 \mu_0}{6m_e} \sum_{i=1}^Z \langle r_i^2 \rangle$$

$$\sum_{i=1}^Z \langle r_i^2 \rangle = Z_{eff} r^2$$

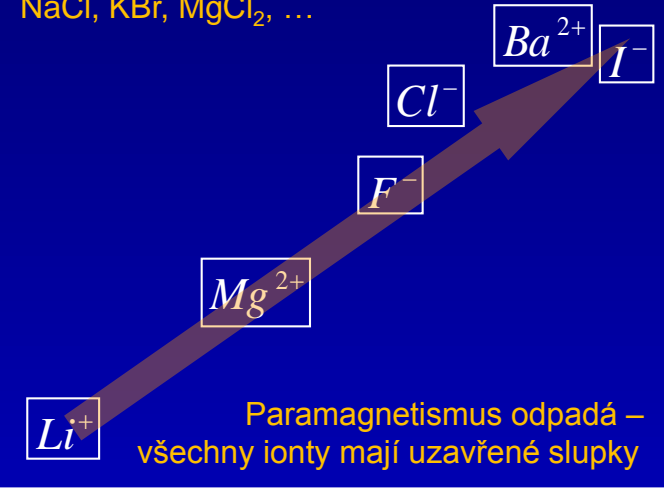
Uvažujeme jen poslední slupku

*Delokalizované π -elektrony = velké r
velký diamagnetismus*



$-\chi$

NaCl, KBr, MgCl₂, ...



$$Z_{eff} r^2$$

2. Izolované magnetické momenty

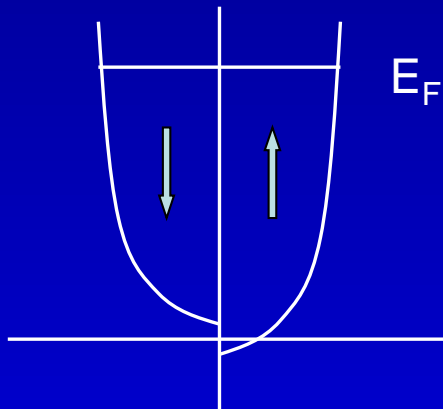
Diamagnetismus -shrnutí

1. Diamagnetismus je velmi slabý efekt
2. Vyskytuje se u všech prvků (atomů)
3. Na diamagnetickou látku působí v nehomogenním mgt. poli síla směrem do míst nižšího pole = χ je záporná
4. Většina látek skládajících se z atomů se spárovanými elektrony
5. Některé polokovy (Bi), **pozor na příspěvek nelokalizovaných elektronů**

Pauli paramagnetismus

vs.

Landau diamagnetismus



2. Izolované magnetické momenty

Paramagnetismus $J = 1/2$

(Nespárované elektrony)

Celkový moment hybnosti atomu J s nespárovanými elektrony je dán součtem orbitálního L a spinového S momentu hybnosti

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad [\hbar]$$

Pro počítání J platí Hundova pravidla – (níže)

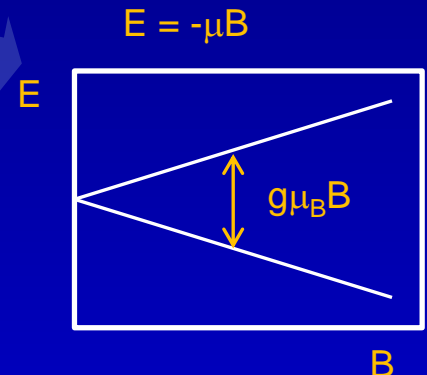
Hledáme střední hodnotu magnetického momentu atomu v mgt. poli. Nejprve pro $J = 0,5$ ($m_J = \pm 0,5$) tj. máme jen dvě možnosti $+\mu_B$ a $-\mu_B$

(Např. $L=0$ a $S=0,5$)

$$\langle g\mu_B m_J \rangle = \frac{\mu_B e \frac{\mu_B B}{k_B T} - \mu_B e \frac{-\mu_B B}{k_B T}}{e \frac{\mu_B B}{k_B T} + e \frac{-\mu_B B}{k_B T}} = \mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$$

Střední hodnota mgt. momentu

$$m_J = \sqrt{J(J+1)}$$



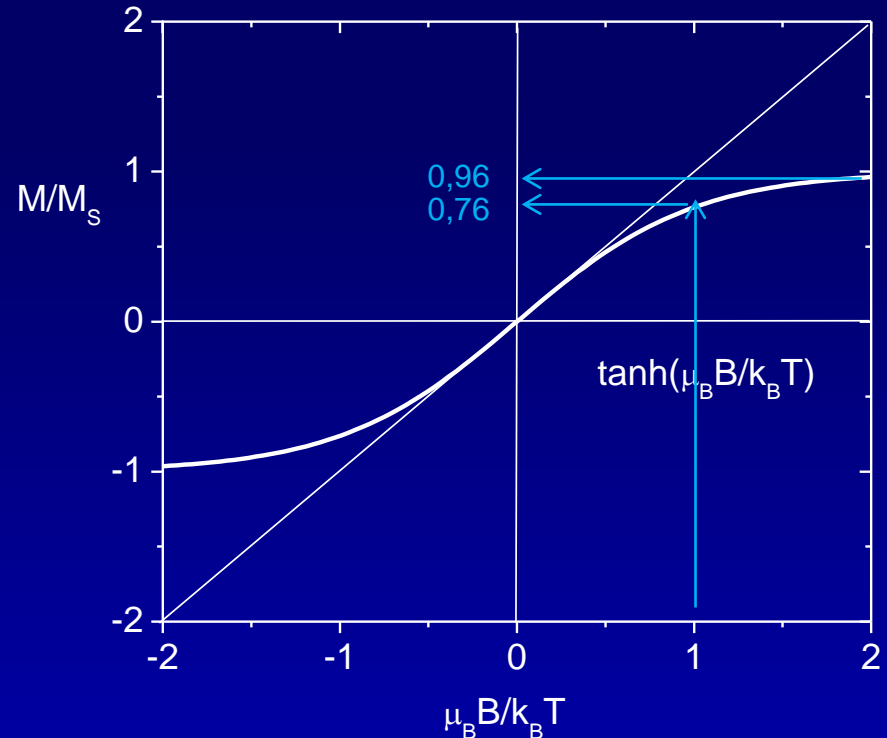
2. Izolované magnetické momenty

Paramagnetismus $J = 1/2$

$$\langle g\mu_B m_J \rangle = \mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$$

$$m_J = \sqrt{J(J+1)}$$

Jaká část mgt. momentu se zorientovala do směru pole?



$$\frac{M}{M_S} = \frac{n \cdot \mu}{n \cdot \mu_{\max}} = \frac{g\mu_B \langle m_J \rangle}{g\mu_B J} = \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$$

Pro $M/M_S = 0,5$
při 300K se musí
 $B \approx 250 \text{ T} !!!$

2. Izolované magnetické momenty

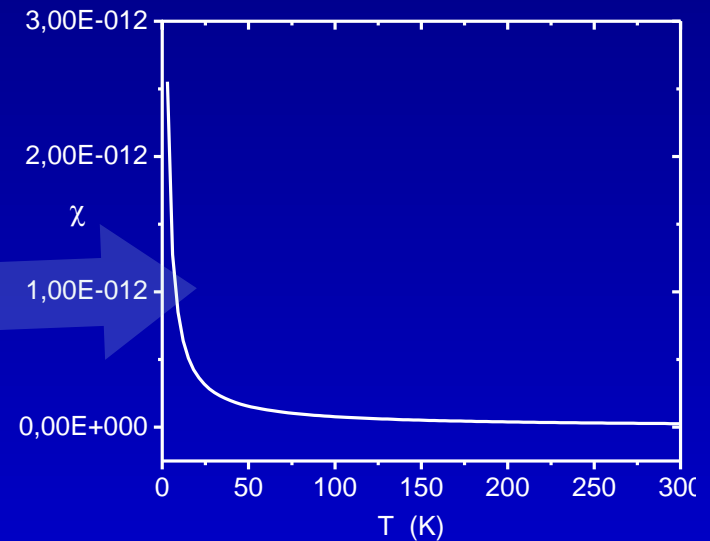
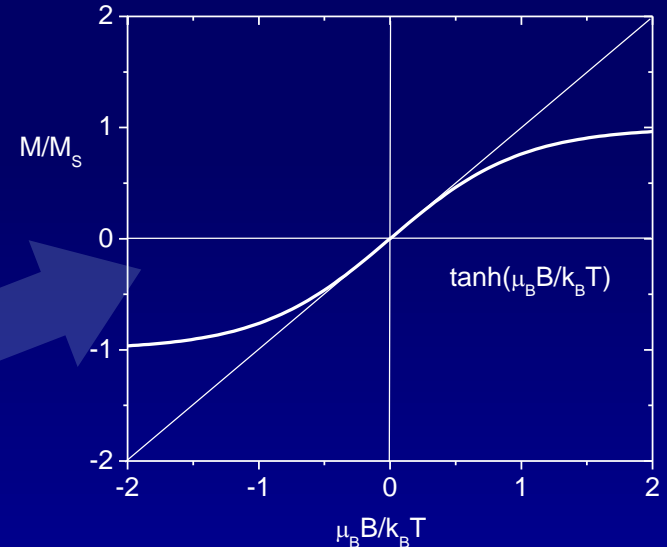
Paramagnetismus $J = 1/2$

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{M_S}{H} \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right)$$

Pro malé pole $\tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right) \approx \frac{\mu_B B}{k_B T}$

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{n\mu_B}{H} \cdot \frac{\mu_B B}{k_B T} = \frac{n\mu_0\mu_B^2}{k_B T}$$

Curieův zákon



2. Izolované magnetické momenty

Paramagnetismus $J = x$

Jaká část mgt. momentu se narovnalá do směru pole?

$$B_J(y) = \frac{M}{M_S} = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} \cdot y\right) - \frac{1}{2J} \coth \frac{y}{2J}$$

$$M_S = n g_J \mu_B J$$

$$y = g_J \mu_B J B / k_B T$$

$$\mu_{eff} = g_J \mu_B \sqrt{J(J+1)}$$

Brillouinova funkce

Maclaurin pro coth

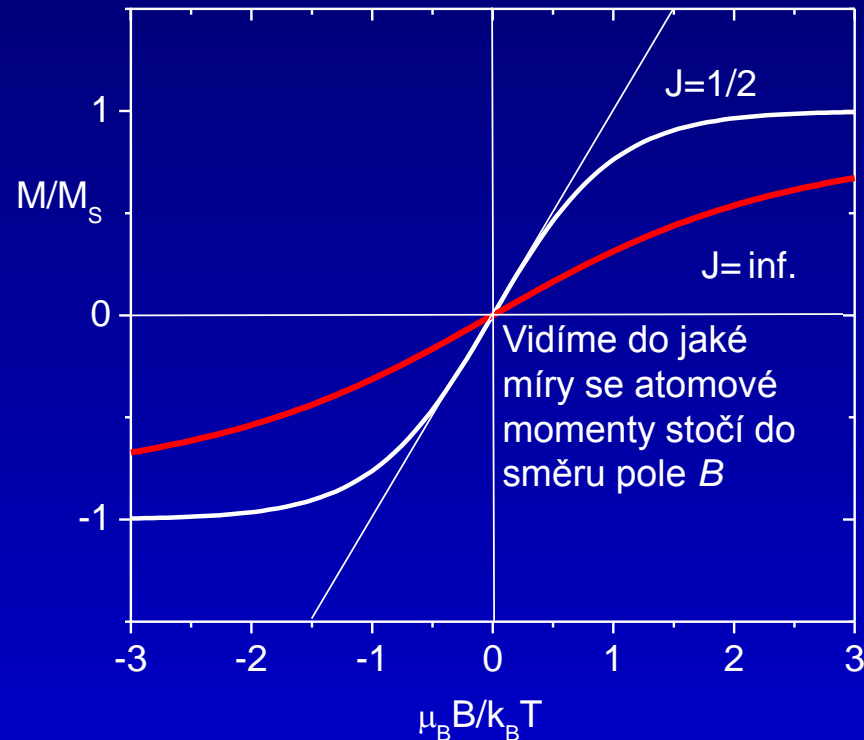
$$\chi = \frac{n \mu_0 \mu_{eff}^2}{3 k_B T}$$

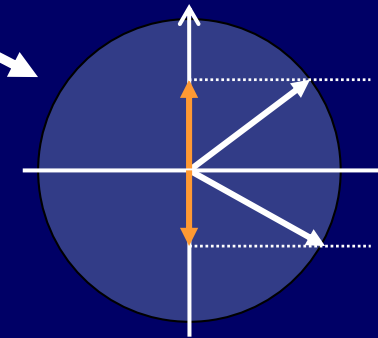
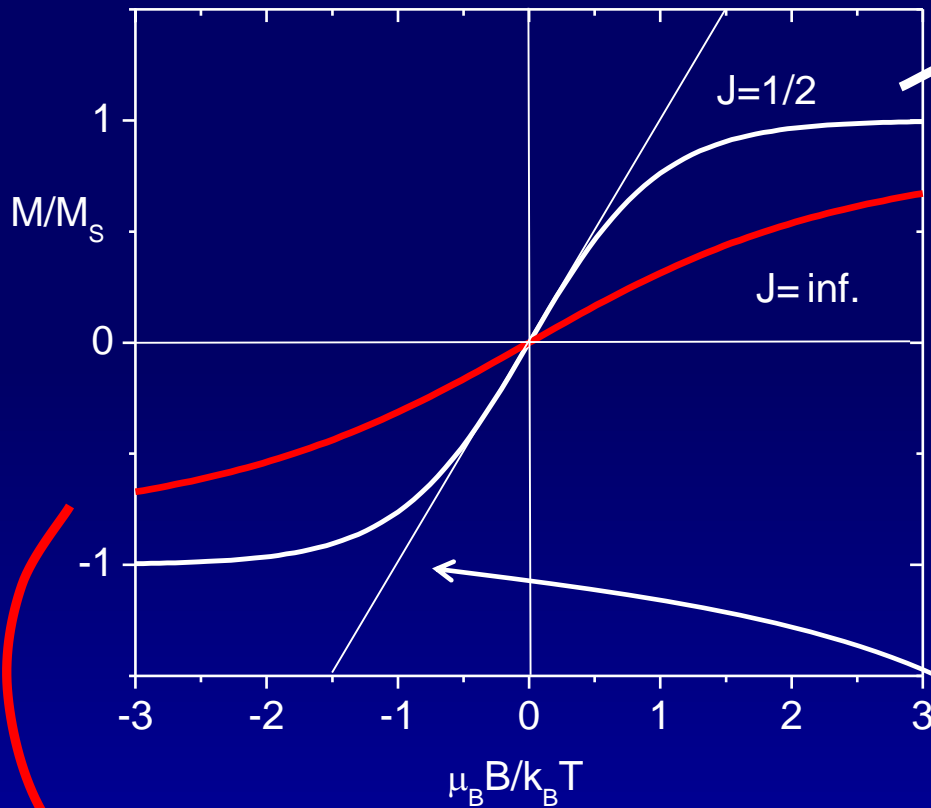
Curieův zákon

$$\chi = \frac{C}{T} + \chi_0$$

Curieův zákon paramagnetické látky + magnetismus pozadí

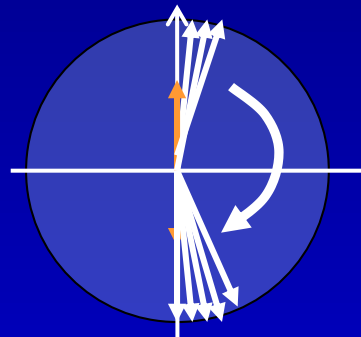
Klasický limit





Hledáme pravděpodobnost výskytu jednotlivých orientací atomových momentů, tedy pravděpodobnost výskytu jednotlivých $m_J =$ **kvantový pohled**

Hledáme do jaké míry se atomové momenty stočí m do směru pole = **klasický pohled**



$J = \infty$

Pozn. Maclaurin $\rightarrow B_J$ pro malá y

$$B_J(y) = \frac{(J+1)y}{3J} + \dots$$

2. Izolované magnetické momenty

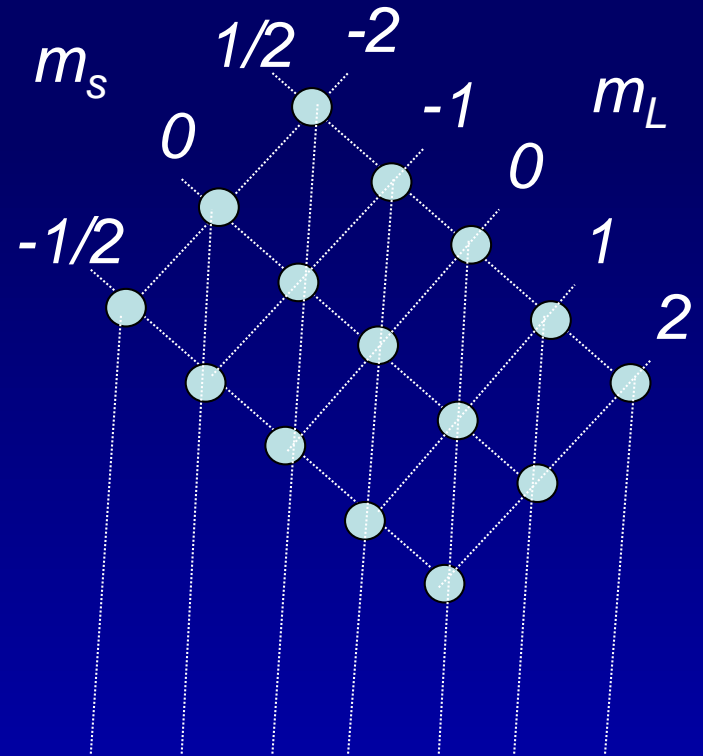
Spin-orbitální interakce - jemná struktura

Každý atom s nezaplňenou slupkou může mít nenulovou hodnotu S a L . Oba tyto vektory se mohou kvantově měnit od $-S$ do $+S$, resp. Od $-L$ do $+L$.

To znamená, že pokud mezi spinovým momentem a orbitálním momentem existuje interakce mohou se tyto dva momenty kombinovat do

$$(2S + 1) \cdot (2L + 1) \text{ kombinací.}$$

Tak se vytváří mnohem jemnější krok pro změnu celkového momentu hybnosti J atomu. Vytváří se jemná struktura. To, co se zachovává, je J a nikoli S a L .



Který stav je základní?



2. Izolované magnetické momenty

Hundova pravidla = jaký je základní stav atomu

- 1) Uspořádat elektrony tak, aby se maximalizoval spin $S =$
minimalizujeme Coulombickou repulzi
- 2) Uspořádat elektrony tak, aby se maximalizoval $L =$
rotace ve stejném směru minimalizuje Coulombickou repulzi
- 3) Spin orbitální interakce způsobí:

$$J = \begin{cases} = |L - S| & \text{Do p\u016flky} \\ = |L + S| & \text{P\u0159es p\u016flku} \end{cases}$$

Ho³⁺, 4f¹⁰

$$S = 2 \\ L = 6$$

Termy: ${}^5 6_8 \equiv {}^5 I_8$

K označení iontu
vytvoříme term

$$2S+1 L_J$$

Počet kombinací

m_l	↑	↓
3	0	0
2	0	0
1	0	0
0	0	0
-1	0	0
-2	0	0
-3	0	0

0 1 2 3 4 5 6...

S P D F G H I...

2. Izolované magnetické momenty

Adiabatická demagnetizace - chlazení

Výměna entropie S mezi spiny a fonony

$$S = k_B \ln W \quad W \text{ je počet uspořádání mgt. momentů}$$

$$S = k_B \ln 2^N \quad \text{Pro } J = \pm 1/2 \text{ a } N \text{ atomů}$$

Variace s opakováním

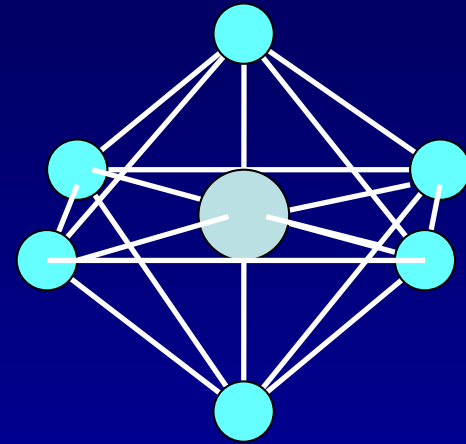
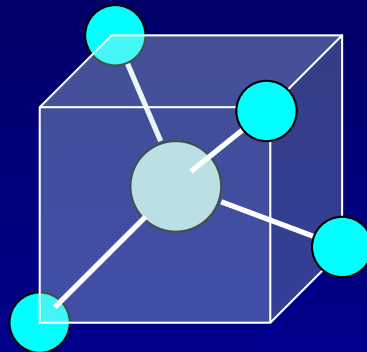
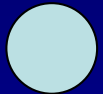
Látku ochladíme např. He ve zmagnetovaném stavu ($B \neq 0$) = entropie spinů je minimální

Pomalou snižujeme mgt. pole = entropie spinů roste, ale na úkor fononů = látka se ochlazuje

3. Prostředí

Krystalové pole

Interakce orbitalů obklopujících atomů s orbitaly atomu magnetického



Volný atom/iont

Tetraedrická koordinace

Oktaedrická koordinace

d-orbitaly se štěpí



t_{2g}



e_g

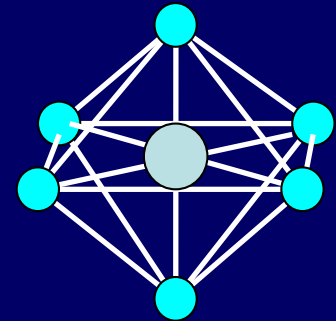


e_g



t_{2g}

3. Prostředí Krystalové pole



Vysokospinové a nízkospinové uspořádání

Volný iont

PŘÍKLAD Fe^{2+}

d-orbitaly se štěpí



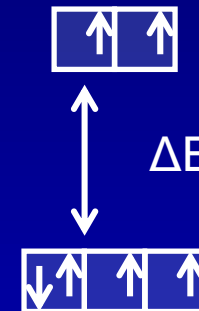
= snímáme degeneraci

nízkospinové



$S = 0$

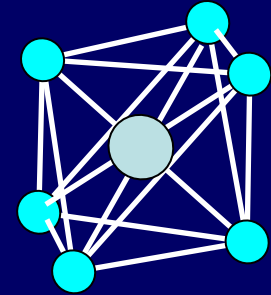
vysokospinové



$S = 2$

3. Prostředí

Krystalové pole



Zamrzání orbitálního momentu – orbital quenching

Krystalové pole vyřadí 3. Hundovo pravidlo (spinorbitální interakce) platné pro volný ion. Pro koordinovaný d-ion je energeticky výhodnější takové uspořádání, že orbitální příspěvek elektronů k mgt. momentu iontu je nulový. Jejich z-složky se navzájem všechny vynulují a tedy $\langle L_z \rangle = 0$.

$$\mu_{eff} = g_J \mu_B \sqrt{J(J+1)}$$

Teoreticky bez zamrzání

$$\mu_{eff} = g_J \mu_B \sqrt{J(J+1)}$$

μ_{exp}

Se zamrzáním

$$\mu_{eff} = g_J \mu_B \sqrt{S(S+1)}$$

		S	L	J	μ_{eff}	μ_{exp}	
Ti ³⁺ , V ⁴⁺	3d ¹	0,5	2	1,5	1,55	1,70	1,73
V ³⁺	3d ²	1	3	2	1,63	2,61	2,83
Cr ³⁺ , V ²⁺	3d ³	1,5	3	1,5	0,77	3,85	3,87
Cu ²⁺	3d ⁹	0,5	2	2,5	3,55	1,83	1,73

3. Prostředí

Krystalové pole

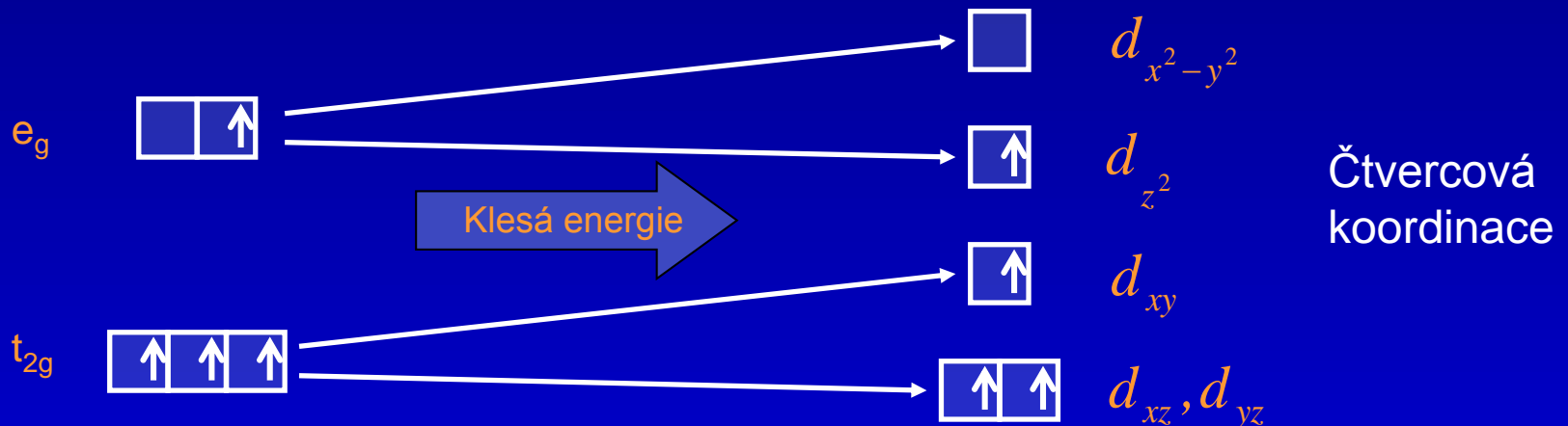
Jahnův - Tellerův jev

Elektrony (nositele magnetismu) se snaží snížit energii atomu skrze změnu symetrie



Oktaedrická koordinace

d^9 , low-spin d^7 nebo high-spin d^4



4. Interakce (mezi magnetickými momenty)

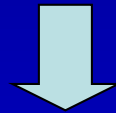
Magnetická dipolární interakce

Energie E dvou magnetických momentů

$$E = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left[\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 - \frac{3}{r^2} (\vec{\mu}_1 \cdot \vec{r})(\vec{\mu}_2 \cdot \vec{r}) \right]$$

Pro magnetický moment $\approx \mu_B$ a vzdálenost momentů $\approx 0,1 \text{ nm}$

$$E \approx 10^{-23} \text{ J} \quad \approx T = 1 \text{ K}$$



Příliš slabá interakce pro většinu teplot nevede k magnetickému uspořádání

4. Interakce

Výměnná interakce

Operátor spinového momentu setrvačnosti je

$$\hat{\mathbf{S}} = i\hat{S}_x + j\hat{S}_y + k\hat{S}_z$$

definice

Užitečnější je jeho druhá mocnina (DM) je

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

Vlastní hodnota DM operátoru spinového momentu setrvačnosti je

$$\hat{\mathbf{S}}^2|\psi\rangle = \hat{S}_x^2|\psi\rangle + \hat{S}_y^2|\psi\rangle + \hat{S}_z^2|\psi\rangle = \left(\frac{1}{2}\right)^2|\psi\rangle + \left(\frac{1}{2}\right)^2|\psi\rangle + \left(\frac{1}{2}\right)^2|\psi\rangle = \frac{3}{4}|\psi\rangle$$



Vlastní hodnota DM operátoru spinového momentu setrvačnosti je tedy

$$\hat{\mathbf{S}}^2|\psi\rangle = s(s+1)|\psi\rangle$$

4. Interakce

Výměnná interakce

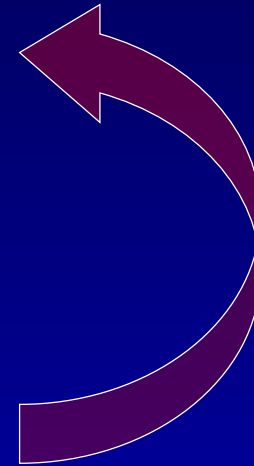
Interakci dvou elektronů (spinů) a a b lze nejlépe popsat ve formě
Heisenbergův typ interakce

$$\hat{H} = A \hat{\mathbf{S}}^a \cdot \hat{\mathbf{S}}^b$$

Dvojice spinů je tedy reprezentována operátorem

$$\hat{\mathbf{S}}^{ab} = \hat{\mathbf{S}}^a + \hat{\mathbf{S}}^b$$

$$\left(\hat{\mathbf{S}}^{ab}\right)^2 = \left(\hat{\mathbf{S}}^a\right)^2 + \left(\hat{\mathbf{S}}^b\right)^2 + 2 \hat{\mathbf{S}}^a \cdot \hat{\mathbf{S}}^b$$



Vlastní
hodnoty

$$\left(\hat{\mathbf{S}}^{ab}\right)^2 = 0 \quad \text{nebo} \quad 2 \quad s = 0 \quad \text{nebo} \quad 1$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2 |\psi\rangle = s(s+1) |\psi\rangle$$

$$\left(\hat{\mathbf{S}}^a\right)^2 = \frac{3}{4}$$

$$\left(\hat{\mathbf{S}}^b\right)^2 = \frac{3}{4}$$

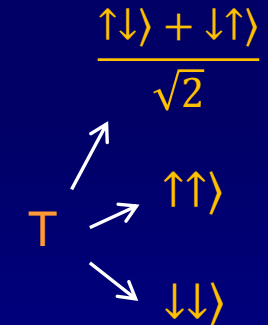
4. Interakce

Výměnná interakce

Z toho plynou vlastní hodnoty operátoru dvojice elektronů

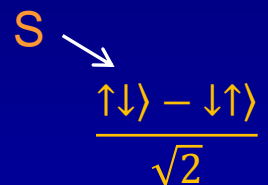
$$\hat{S}^a \cdot \hat{S}^b = \frac{1}{4}$$

báze $\uparrow\downarrow, \uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow, \downarrow\uparrow$
pro $s = 1$ tři možná uspořádání spinů = triplet



$$\hat{S}^a \cdot \hat{S}^b = -\frac{3}{4}$$

pro $s = 0$ jedno možné uspořádání = singlet



Dvojice spinů může být tedy reprezentována operátorem

$$\hat{H}^{spin} = -J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

O tom, který stav nastane rozhoduje

$$J = E_S - E_T$$

$$J < 0 \quad \text{pro } S$$

$$J > 0 \quad \text{pro } T$$

4. Interakce

Výměnná interakce

Pro interakci více elektronů

$$\hat{H}^{spin} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

(Heisenberg)

Obecné poznámky:

1) Dva elektrony na stejném atomu (atomový orbital) = triplet

Hundovo pravidlo

2) Dva elektrony na různých atomech (molekulový orbital) = singlet

Vazebný kontra proti-vazebný orbital, větší energetická úspora je pro vazebný, což upřednostňuje singlet

Často v pevných látkách volíme $J_{ij} = J$ pro nejbližší sousedy a $J_{ij} = 0$ pro ostatní vzdálenější sousedy

4. Interakce

Výměnná interakce - přímá výměna

Malý překryv “magnetických“ orbitalů d a především f snižuje šanci na přímou interakci dvou spinů. (“atomy se nevidí“, výměna je málo pravděpodobná).

Je pravděpodobné, že i u Fe, Co, Ni, se přímá interakce pouze podílí na feromagnetismu a důležitou roli zde hrají volné elektrony.



Ve většině materiálů musíme uvažovat nějakou formu **nepřímé interakce**.

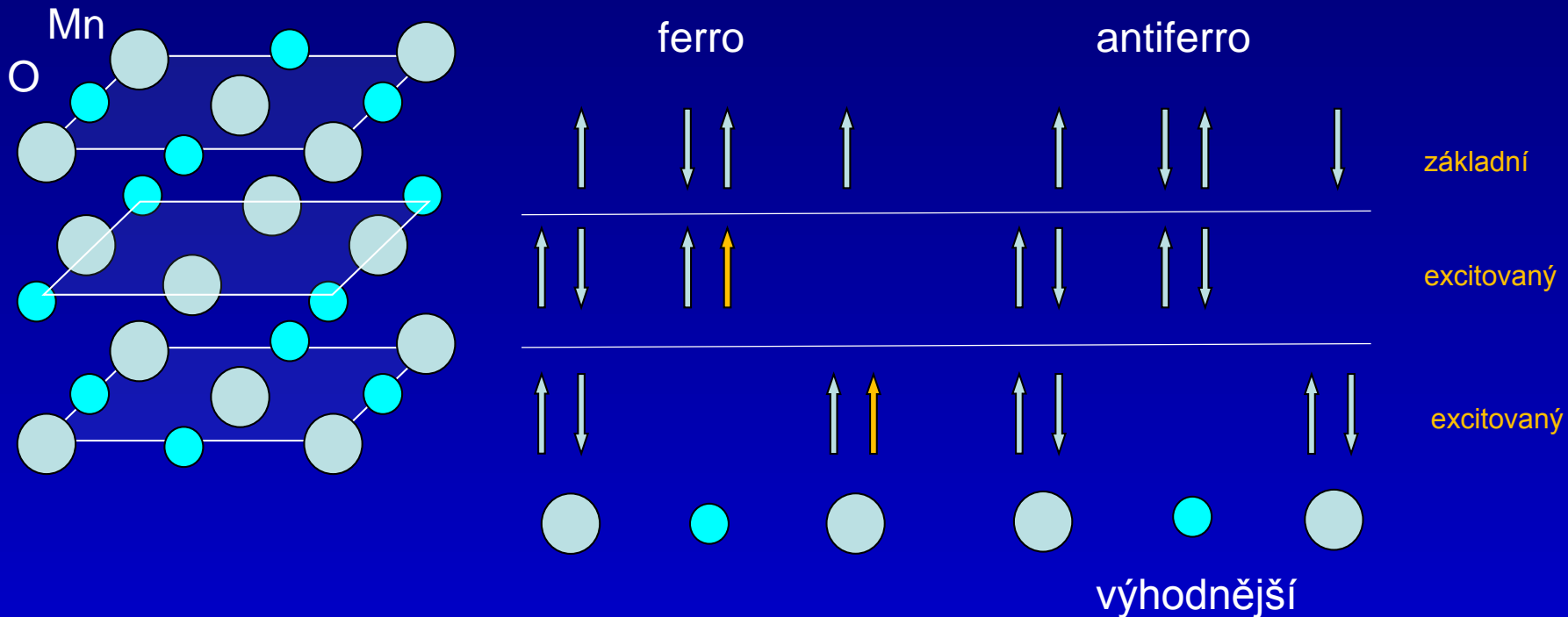
4. Interakce

Výměnná interakce – nepřímá výměna

Supervýměna - superexchange

Mnoho oxidů a fluoridů přechodných kovů a vzácných zemin má v základním stavu nějakou formu magnetického uspořádání (MnO, MnF₂, FeO,...)

“magnetické atomy se přímo nevidí a pro komunikaci používají prostředníka“

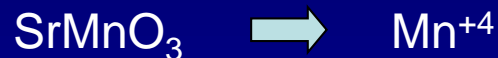
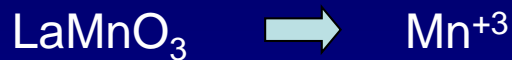


4. Interakce

Výměnná interakce - nepřímá výměna

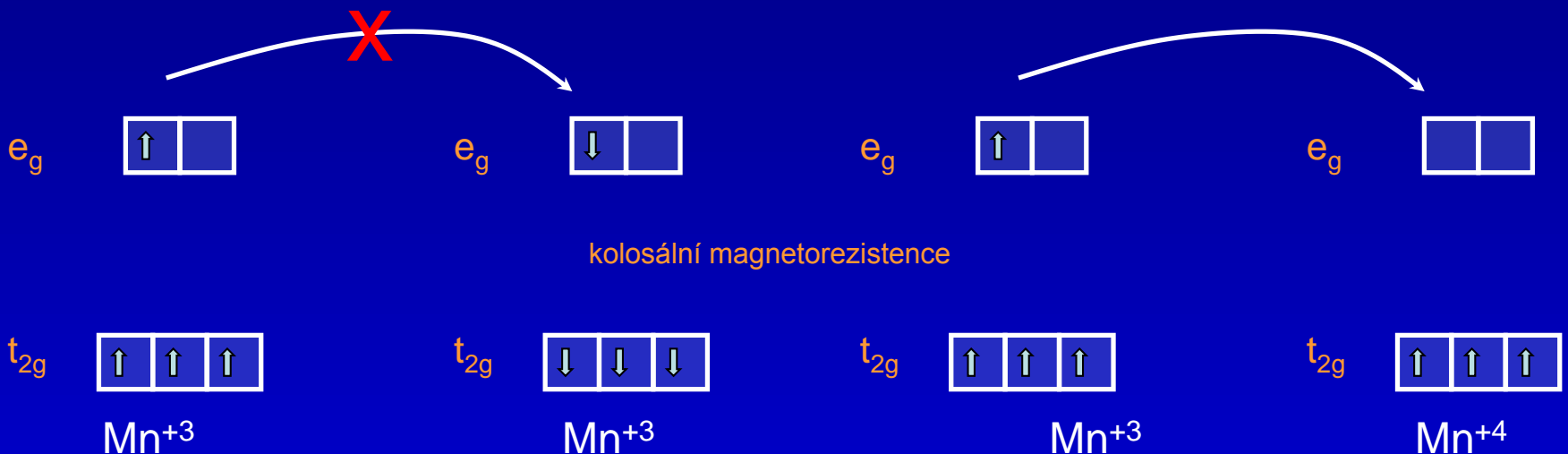
Double exchange

Týká se především sloučenin kovů, které vykazují více oxidačních stavů (Mn, Fe,...). Jako příklad nám poslouží $(\text{La,Sr})\text{MnO}_3$



Při všech teplotách
antiferromagnetický **izolant** (superexchange)

Pod kritickou teplotou T_c
ferromagnetický **vodič** (double exchange)



4. Interakce

Výměnná interakce - nepřímá výměna

RKKY

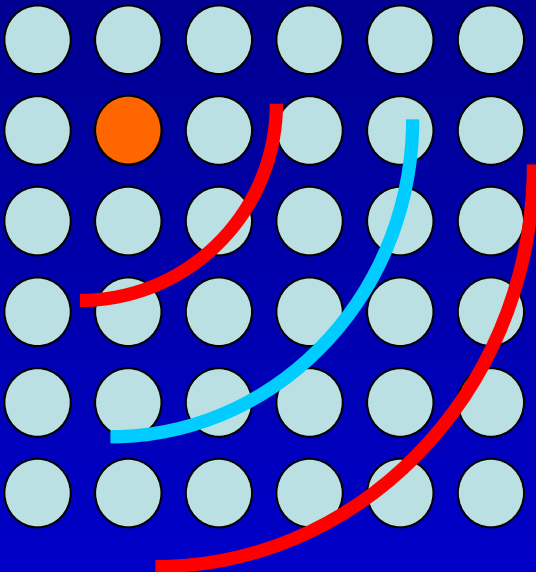
“magnetické atomy komunikují nepřímo přes volné nositele proudu“
(kovy a polovodiče)

$$\hat{H}^{spin} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

(Heisenberg)

$$J_{i,j} = -\frac{2mk_F^4}{\pi h^2} J_{pd}^2 F(2k_F r_{ij}) \exp\left(-\frac{r_{ij}}{l_h}\right)$$

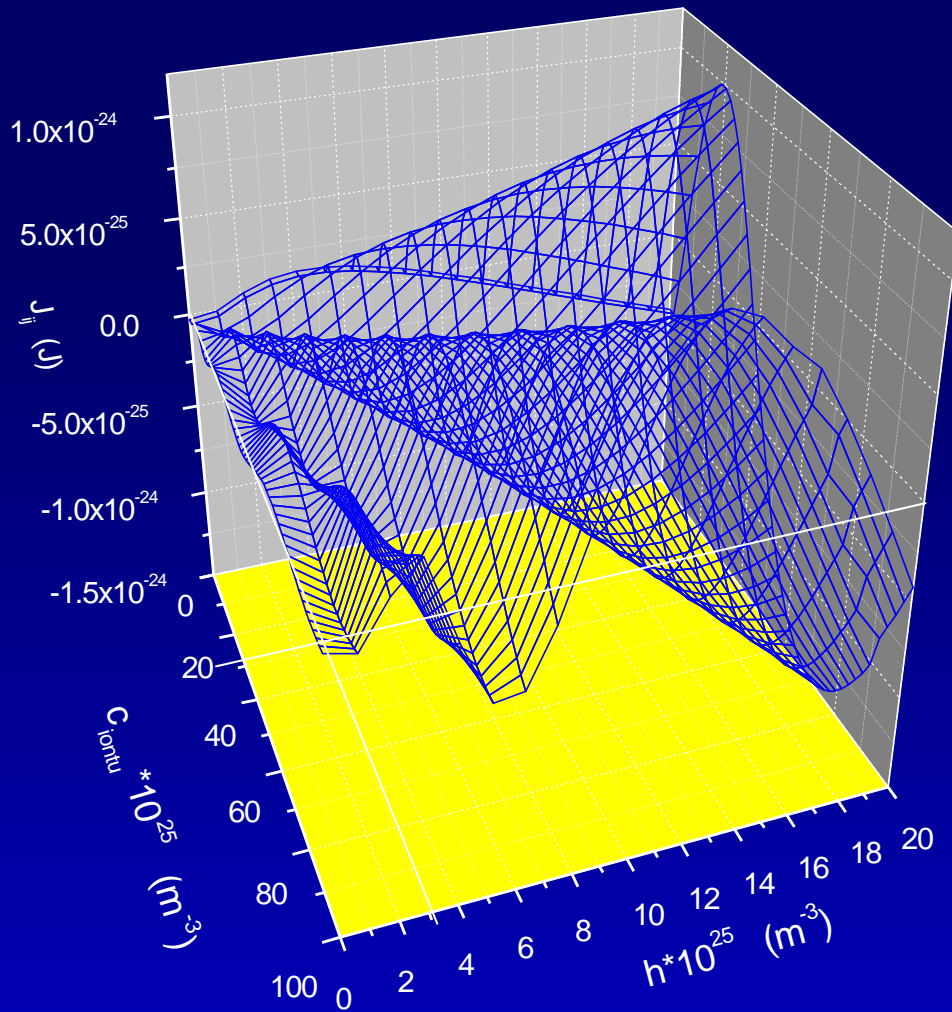
$$F(x) = \frac{-x \cos x + \sin x}{x^4}$$



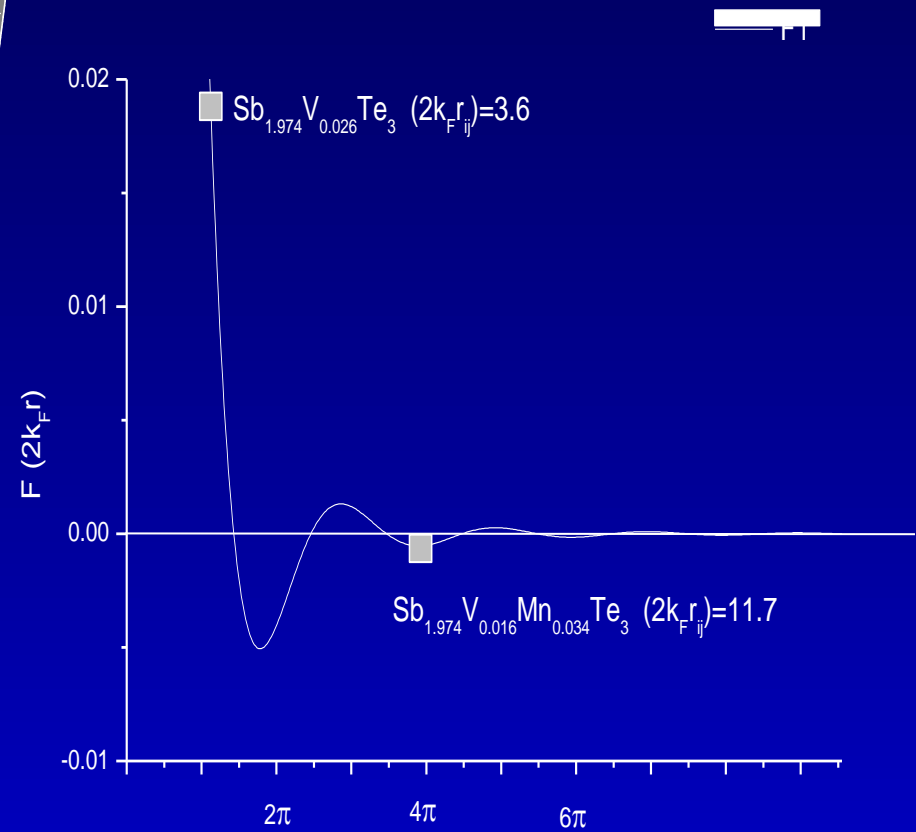
Magnetický ion polarizuje okolní volné elektrony. Protože ale polarizace/susceptibilita elektronů vykazuje *q*-disperzi, dochází k interferenčním jevům.



4. Interakce



RKKY - nepřímá výměna



5. Magnetické struktury

Ferromagnetismus – Weissův model

Interakce i-tých mgt. momentů s j-tými :

$$\hat{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + g\mu_B \sum_j \vec{S}_j \cdot \vec{B} \quad \text{prozatím } L=0$$

(Heisenberg ex. - ferro) (Zeeman - para)

Pro i-tý iont:

$$\hat{H}_i = -2\vec{S}_i \cdot \sum_j J_{ij} \vec{S}_j + g\mu_B \vec{S}_i \cdot \vec{B}$$

Předpokládejme, že v důsledku výměnné interakce existuje na místě *i-tého* iontu molekulární pole ($B_{mp\ i}$), které se přidává k vnějšímu poli B

$$\vec{B}_{mp\ i} = - \frac{2}{g\mu_B} \sum_j J_{ij} \vec{S}_j$$


$$\hat{H} = g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \cdot (\vec{B} + \vec{B}_{mp})$$

Potom máme paramagnet v celkovém poli $B_{mp} + B = \textit{Weissův model}$

B_{mp} pochází z výměnné interakce

5. Magnetické struktury

Ferromagnetismus – Weissův model

Celkové pole $\vec{B}_C = \vec{B} + \vec{B}_{mp}$  $\vec{B}_C = \vec{B} + \lambda \vec{M}$

Molekulární pole můžeme považovat za úměrné magnetizaci

$\vec{B}_{mp} = \lambda \vec{M}$

Ferromagnet pak řešíme jako paramagnet s vnitřním / molekulárním polem:

Brillouinova fce

$$B_J(y) = \frac{M}{M_S} = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} \cdot y\right) - \frac{1}{2J} \coth \frac{y}{2J}$$

$$y = g_J \mu_B J B / k_B T$$

paramagnet

$$y = g_J \mu_B J (B + \lambda M) / k_B T$$

ferromagnet

Celý proces je uzavřená smyčka – vnitřní pole polarizuje magnetické momenty a ty naopak vytvářejí vnitřní pole ! Materiál se sám zmagnetuje bez účinku vnějšího pole! = spontánní magnetizace

5. Magnetické struktury

Ferromagnetismus – Weissův model

Řešíme dvě rovnice $B_J(y) = \frac{M}{M_S} = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} \cdot y\right) - \frac{1}{2J} \coth \frac{y}{2J}$

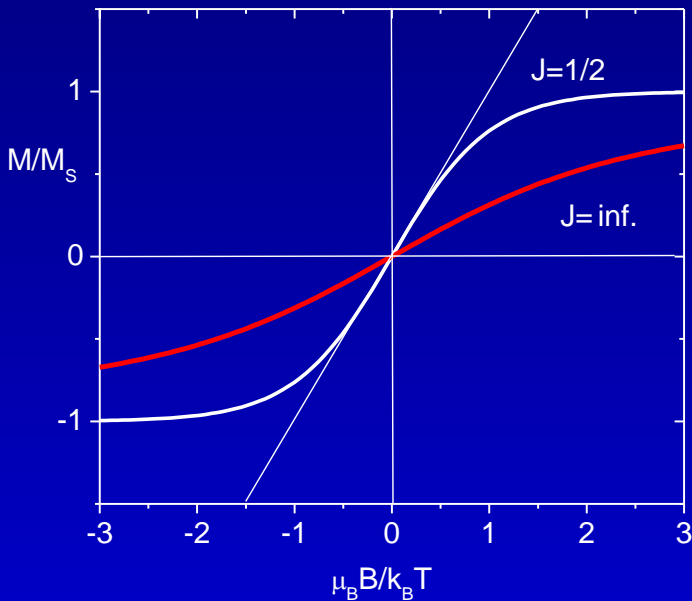
$y = g_J \mu_B J (B + \lambda M) / k_B T$

nejnáznornější je grafické řešení pro $B=0$

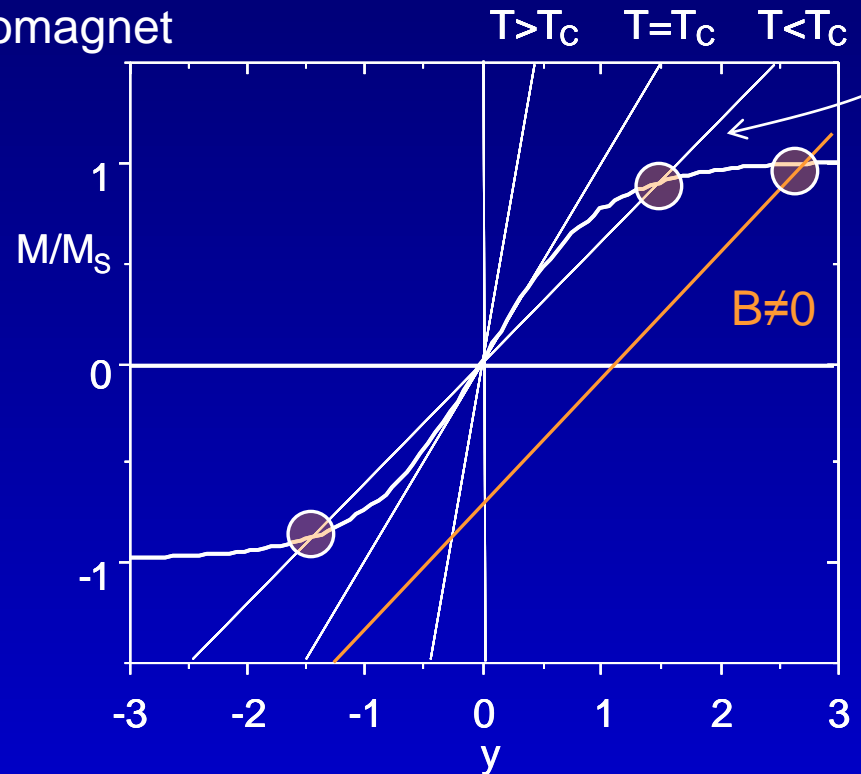
$M = k_B T y / g_J \mu_B J \lambda$
přímka

paramagnet

$y = g_J \mu_B J B / k_B T \quad M_S = n g_J \mu_B J$



ferromagnet



5. Magnetické struktury

Ferromagnetismus – Weissův model

Kritická teplota znamená, že obě funkce mají v počátku stejnou směrnici

$$M = \frac{k_B T y}{g_J \mu_B J \lambda} \qquad M = M_S B_J(y) = \frac{(J+1)y}{3J} M_S$$

$$\frac{\partial M}{\partial y} = \frac{k_B T_C}{g_J \mu_B J \lambda} = \frac{\partial M}{\partial y} = \frac{(J+1)}{3J} M_S$$

$$T_C = \frac{g_J \mu_B (J+1) \lambda}{3k_B} M_S = \frac{n \lambda \mu_{eff}^2}{3k_B}$$

$$B_{mp} = \lambda M_S = \frac{3k_B T_C}{g_J \mu_B (J+1)} \approx 1000\text{T pro běžný ferromagnet !!!}$$

5. Magnetické struktury

Ferromagnetismus – Weissův model

$$\chi = \frac{C}{T} + \chi_0$$

Curieův zákon -
paramagnetické látky

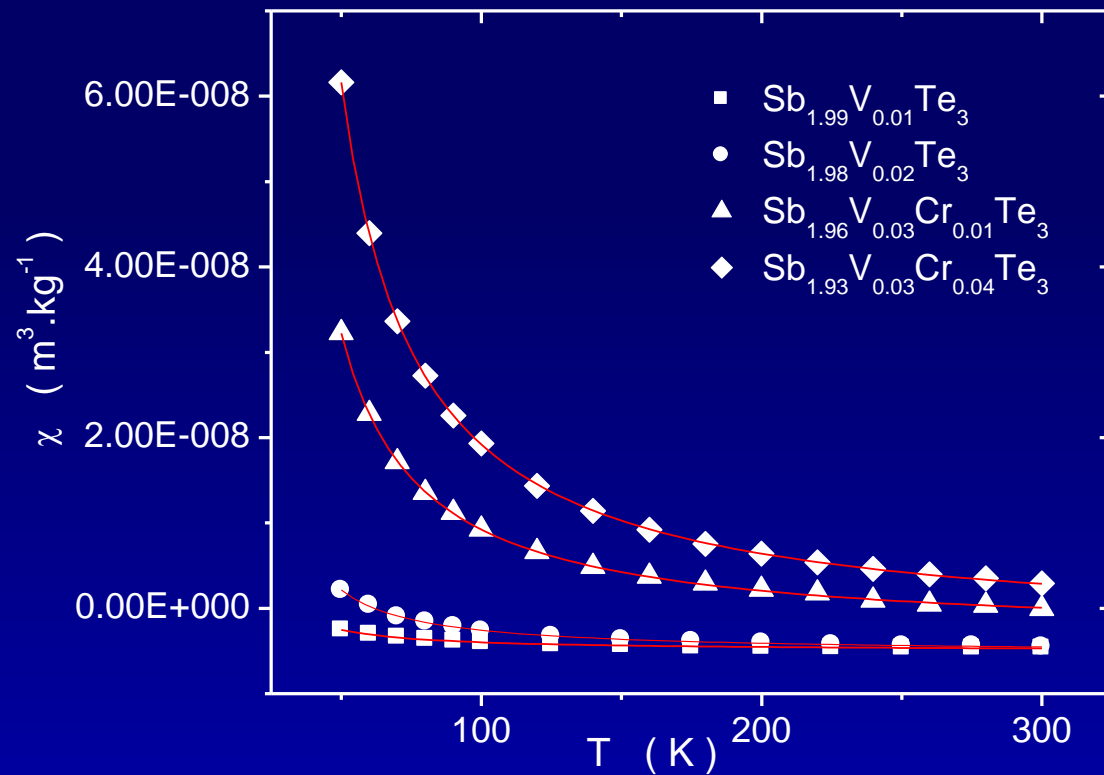
$$\chi = \frac{C}{(T - T_{CW})} + \chi_0$$

Curieův Weissův zákon -
ferromagnetické látky v
paramagnetickém stavu

$$T_C \equiv T_{CW}$$

5. Magnetické struktury

Ferromagnetismus



Fity susceptibility podle Curie-Weissova zákona (pod 50K už se projevuje ferromagnetismus)

$$\chi = \frac{P_1}{(T - P_2)} + P_3$$

Parameter	Value	Error

P1	9.8543E-8	5.6718E-9
P2	10.15535	1.64419
P3	-5.0554E-9	3.6803E-11

Parameter	Value	Error

P1	0.00003	6.2162E-6
P2	-4.97547	1.42669
P3	-3.0698E-7	1.0479E-7

Parameter	Value	Error

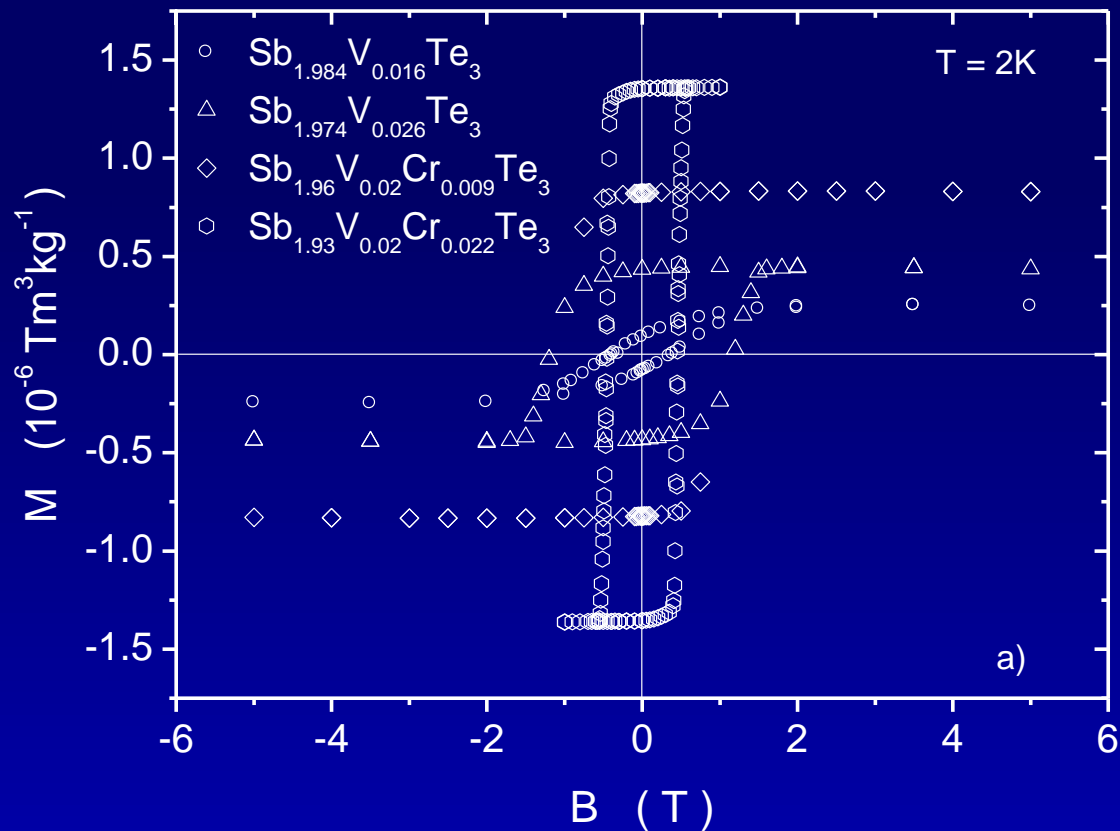
P1	1.0312E-6	6.9414E-9
P2	21.65234	0.05909
P3	-3.8174E-9	1.0873E-10

Parameter	Value	Error

P1	1.7226E-6	5.6295E-9
P2	23.53905	0.05483
P3	-3.3581E-9	5.2771E-11

5. Magnetické struktury

Ferromagnetismus



Koercitivní pole H_C , B_C

Remanentní magnetizace M_R

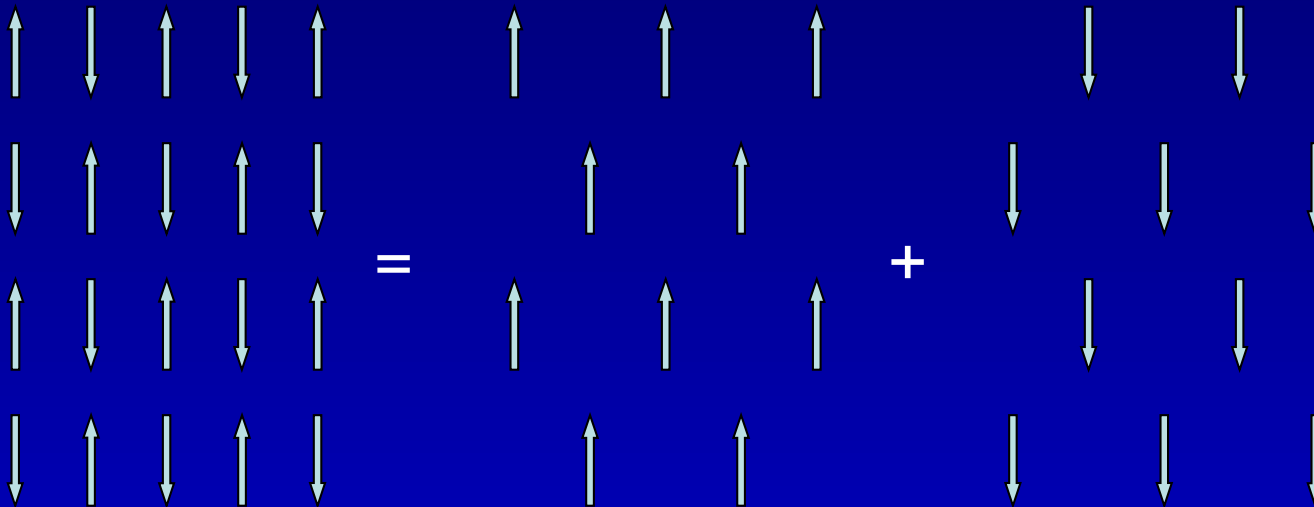
Hysterézní smyčky jsou jasným důkazem ferromagnetismu.

5. Magnetické struktury

Antiferromagnetismus

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad \text{Pro } J < 0$$

Nejčastěji dvě podmřížky, které jsou orientovány proti sobě

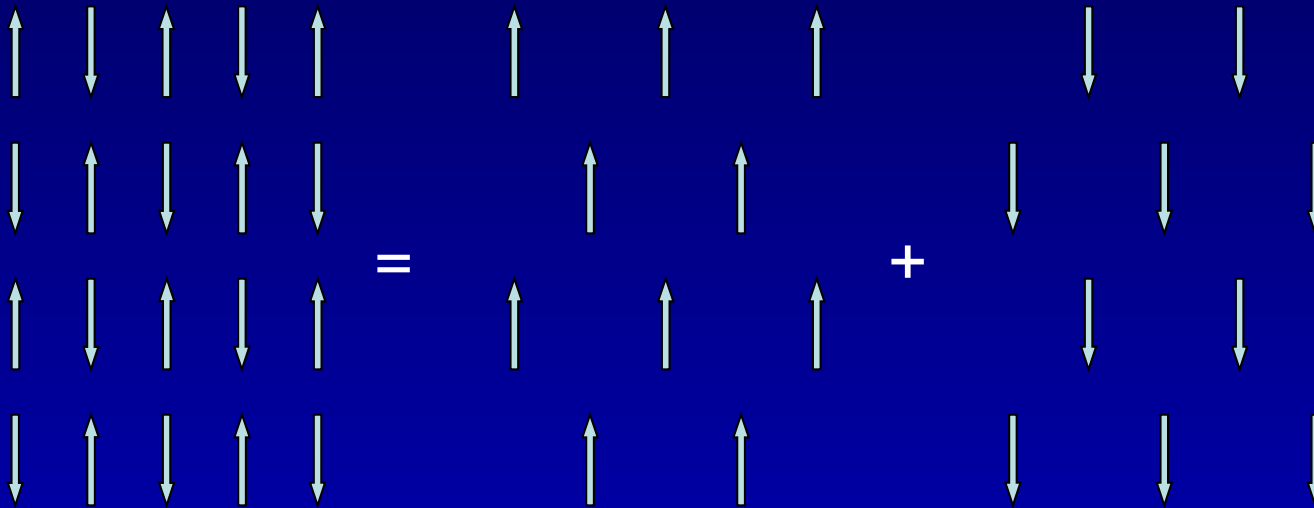


5. Magnetické struktury

Antiferromagnetismus

Předpokládejme, že jedna mřížka magnetizuje tu druhou bez přítomnosti vnějšího pole.

$$\vec{B}_{\uparrow} = -\lambda \vec{M}_{\downarrow} \quad \vec{B}_{\downarrow} = -\lambda \vec{M}_{\uparrow}$$



Ten to předpoklad není úplně realistický, lepe by bylo předpokládat, že obě podmřížky přispívají k magnetizaci každé podmřížky = přesnější výpočet teoretické T_C :

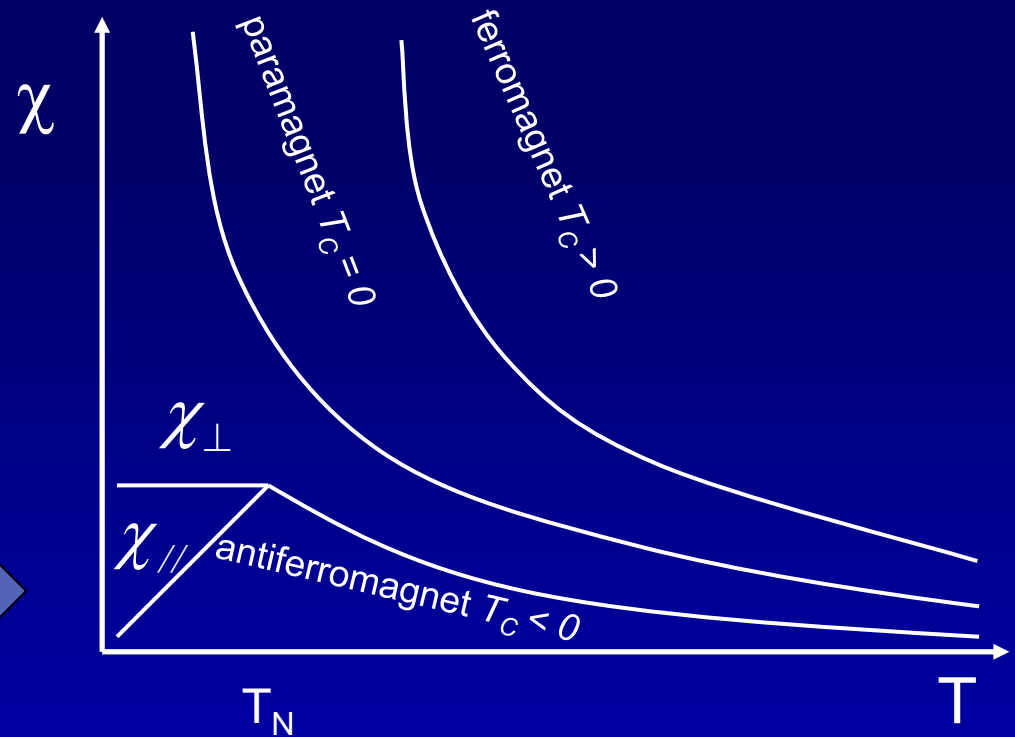
$$\vec{B}_{\uparrow} = -\lambda_1 \vec{M}_{\uparrow} - \lambda_2 \vec{M}_{\downarrow} \quad \vec{B}_{\downarrow} = -\lambda_2 \vec{M}_{\uparrow} - \lambda_1 \vec{M}_{\downarrow}$$

5. Magnetické struktury

Antiferromagnetismus

$$\chi = \frac{C}{(T + T_N)} + \chi_0$$

U antiferromagnetu závisí susceptibilita na vzájemné orientaci B a m (mřížky)



$$T_{CW} = \frac{n\lambda\mu_{eff}^2}{3k_B}$$

$$T_N = \frac{n\lambda\mu_{eff}^2}{3k_B}$$

$$\mu_{eff} = g_J\mu_B\sqrt{J(J+1)}$$

5. Magnetické struktury

Ferrimagnetismus

Magnetické momenty podmřížek se neshodují

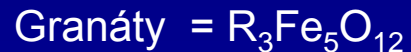


1) Počet atomů v obou podmřížkách se neshoduje

2) Magnetický moment atomů v obou podmřížkách se neshoduje

3) Obojí

Příklady:



M = Mn, Fe, Co, Ni, Cu,
Zn

R = vzácné zeminy

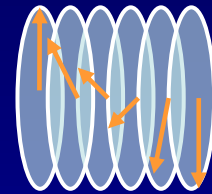
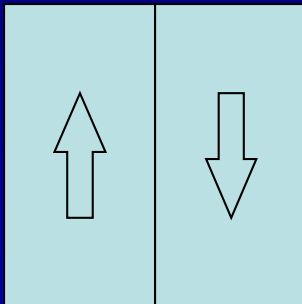
Ferity jsou izolanty \Leftrightarrow nemají ztráty vířivými proudy \Leftrightarrow jsou vhodné pro vysokofrekvenční aplikace = tlumivky, invertory.....

6. Doménová struktura a magnetizace

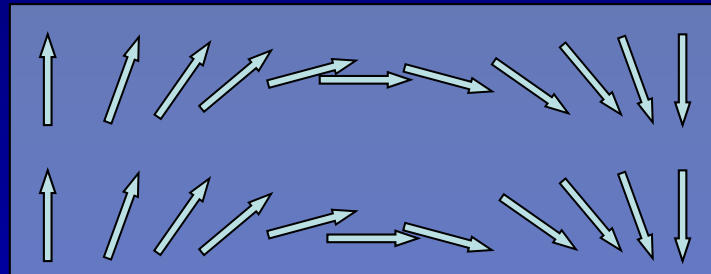
DOMÉNY

Pokud spontánní uspořádání začne ve více místech vzorku najednou, nemusí být všechny oblasti vzorku zpolarizovány shodným směrem. Vzniká doménová struktura.

Hranice domén mohou mít podobu



Blochova hranice



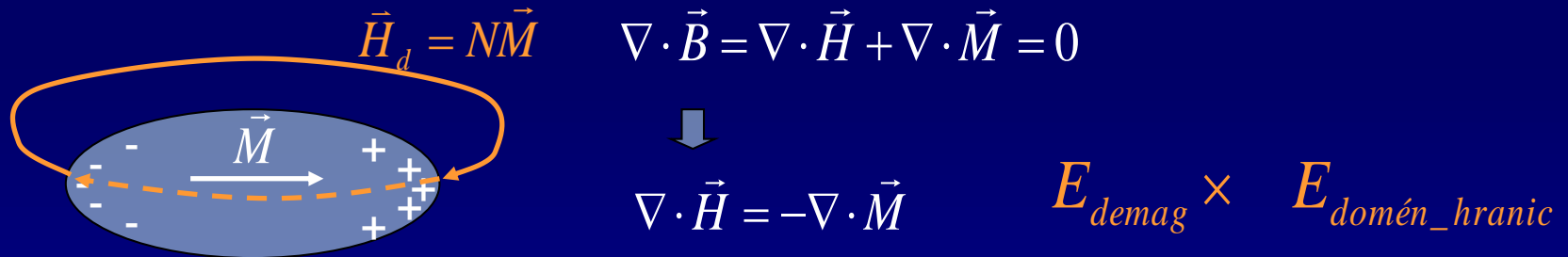
Néelova hranice

Je zřejmé, že z hlediska výměnné interakce je tvorba domén **nevýhodná**.
Měly by se samy rozmotat až do stavu jedno-doménového vzorku.

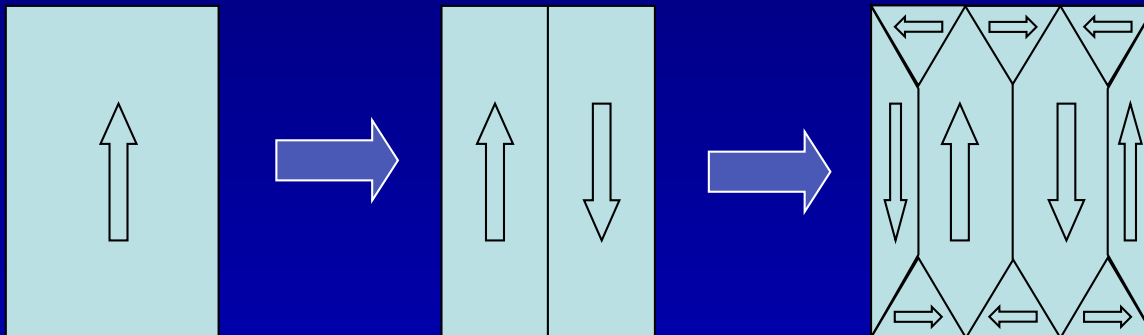
5. Magnetické struktury

DOMÉNY

To, co energeticky zvyhodňuje tvorbu domén, je demagnetizační energie



Pokud \vec{H} nemusí divergovat ze vzorku ušetříme energii na tvorbu pole mimo vzorek.



Jakou doménovou strukturu má vzorek (nemusí to být ta energetický nejvýhodnější) závisí na jeho **magnetické, tepelné a mechanické historii**. Posun doménové hranice je blokován vždy přítomnou **anisotropií magnetických vlastností**, takže daná **doménová struktura se nemění spontánně**, ale vlivem pole a teploty.

5. Magnetické struktury

DOMÉNY

Změna doménové struktury je proces spojený se změnou energie vzorku. Tvorba, posun a zánik doménových hranic je ale pro různé materiály různě náročný. To určuje, jestli se doménová struktura mění **téměř** spontánně nebo jen s použitím pole, teploty a

podobně. S tím jsou spojeny pojmy remanentní magnetizace M_R a koercitivní pole H_C

Podle toho dělíme materiály na magneticky

tvrdé

měkké.

