



دانشگاه گیلان

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک (گرایش حالت جامد)

مدل آیزینگ عرضی اسپین-۱ با اندرکنش کاتوره ایی

از

غزاله جلیلیان جمع

استاد راهنما:

دکتر صابر فرجامی شایسته

مرداد ماه ۱۳۹۰

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم

از جناب آقای دکتر فرجامی، استاد راهنمای گرامی به دلیل راهنمایی های ارزنده و سودمند ایشان در تمام مراحل پروژه سپاسگزارم. از اساتید محترم جناب آقایان دکتر مهدوی فر و دکتر مشایخی به خاطر راهنمایی های مفیدشان تشکر می کنم. از دوستان مهربانم در دانشگاه گیلان و دانشگاه فردوسی مشهد برای کمک هایشان ممنونم. از خانواده عزیزم، مادرم، پدرم و خواهرانم که همواره در طول زندگی ام پشتیبانم بوده اند، متشکرم.

فهرست مطالب:

چکیده فارسی

چکیده انگلیسی

فصل اول

مقدمه

۱-۱ گذارهای فاز:

۱-۱-۱ طبقه بندی گذار فاز:

۲-۱ شکست تقارن:

۳-۱ پارامتر نظم:

۴-۱ نماهای بحرانی:

۵-۱ مواد مغناطیسی:

۱-۵-۱ رفتار مغناطیسی در مواد جامد:

فصل دوم

۱-۲ برهمکنش های تبادل:

۲-۲ مدل هایزبرگ:

۳-۲ میدان مولکولی وایس:

.....۱۷.....	۴-۲ تئوری میدان متوسط:
.....۲.....	۵-۲ مدل اسپینی آیزینگ:
.....۲۴.....	۶-۲ تقریب میدان موثر:
.....۲۵.....	۷-۲ تقریب اتحاد وان در وردن تعمیم یافته:
.....۳۱.....	فصل سوم
.....۳۱.....	۱-۳ مدل آیزینگ در میدان عرضی:
.....۴۵.....	۲-۳ مدل آیزینگ عرضی با اسپین های مختلط در یک میدان طولی:
.....۴۸.....	۳-۳ مدل آیزینگ Diluted:
.....۵۵.....	۴-۳ پدیده re-entrant:
.....۵۶.....	فصل چهارم
.....۵۶.....	۱-۴ بررسی مدل آیزینگ در میدان عرضی با برهمکنش های کاتوره ایی در تقریب میدان موثر:
.....۵۹.....	۲-۴ محاسبات تئوری:
.....۶۷.....	۳-۴ تحلیل و بررسی نمودارهای گذار فاز:
.....۸۴.....	نتیجه گیری:
.....۸۹.....	مراجع:
.....۹۱.....	ضمیمه A

فهرست نمودارها:

- نمودار (۱-۱). ساختار مکعبی ساده، مکعبی مرکز حجمی، مکعبی مرکز سطحی و شش گوشه تنگ پکیده. ۸.....
- نمودار (۱-۲). برهمکنش تبادلی بین نزدیک ترین اسپین ها در یک جامد مغناطیسی ۱۴.....
- نمودار (۲-۲). نمودار تراز انرژی ناشی از برهمکنش های تبادلی بین دو الکترون واقع بر روی یک اتم ۱۴.....
- نمودار (۳-۲). ۱- اسپین فرومغناطیسی و پاد فرومغناطیسی ۱۵.....
- نمودار (۴-۲). تغییرات پذیرفتاری با دما در سه ماده Fe, Co و Ni ۲۰.....
- نمودار (۵-۲). حل نموداری گشتاور دوقطبی مغناطیسی بر ذره در نظریه میدان میانگین برای میدان خارجی غیر صفر. ۲۲.....
- نمودار (۶-۲). حل نموداری گشتاور دوقطبی مغناطیسی بر ذره در نظریه میدان میانگین برای میدان خارجی صفر ۲۳.....
- نمودار (۱-۳). دمای بحرانی به صورت تابعی از میدان مغناطیسی عرضی برای شبکه مکعبی ۳۹.....
- نمودار (۲-۳). دمای بحرانی به صورت تابعی از میدان مغناطیسی عرضی برای شبکه مربعی ۴۰.....
- نمودار (۳-۳). دمای بحرانی به صورت تابعی از میدان مغناطیسی عرضی برای لانه زنبوری. ۴۰.....
- نمودار (۴-۳). وابستگی دمایی مغناطش طولی و مغناطش عرضی برای اسپین ۱/۲ در شبکه مکعبی ۴۱.....
- نمودار (۵-۳). وابستگی دمایی مولفه طولی و عرضی مغناطش برای اسپین ۱ در شبکه مکعبی ۴۱.....
- نمودار (۶-۳). وابستگی دمایی مولفه طولی و عرضی توان های مختلف گشتاور مغناطیسی اسپین ۳/۲ در شبکه مکعبی ۴۳.....
- نمودار (۷-۳). وابستگی دمایی مولفه طولی و عرضی توان های مختلف گشتاور مغناطیسی اسپین ۲ در شبکه مکعبی ۴۳.....
- نمودار (۸-۳). وابستگی دمایی مولفه طولی و عرضی توان های مختلف گشتاور مغناطیسی اسپین ۵/۲ در شبکه مکعبی ۴۴.....
- نمودار (۹-۳). وابستگی دمایی مغناطش طولی زیر لایه و مغناطش طولی کل و چهار قطبی مغناطیسی. ۴۶.....

-۴۶..... نمودار (۱۰-۳). وابستگی دمایی مغناطش عرضی زیر لایه و مغناطش کل عرضی
-۴۷..... نمودار (۱۱-۳). وابستگی دمایی مغناطش طولی و عرضی به میدان مغناطیسی عرضی
-۴۷..... نمودار (۱۲-۳). نمودار فاز در فضای (T_c-h) برای سیستم فرومغناطیسی با اسپین مختلط
-۵۳..... نمودار (۱۳-۳). وابستگی دمایی مغناطش برای شبکه مربعی و مکعبی ساده
-۵۴..... نمودار (۱۴-۳). وابستگی دمایی چهار قطبی مغناطیسی برای شبکه مربعی و مکعبی ساده.
-۵۴..... نمودار (۱۵-۳). نمودار فاز تغییرات دمای بحرانی نسبت به غلظت آلایندگی
-۶۸..... نمودار (۱-۴). نمودار فاز تغییرات دمای بحرانی بر حسب غلظت آلایندگی
-۷۰..... نمودار (۲-۴). نمودار فاز مدل آیزینگ اسپین-۱ در چند میدان عرضی خارجی متفاوت در فضای $(1-p, T_c/J)$
-۷۱..... نمودار (۳-۴). تغییرات دمای بحرانی نسبت به میدان مغناطیسی عرضی خارجی برای $\alpha=0.25$
-۷۲..... نمودار (۴-۴). تغییرات دمای بحرانی نسبت به $(1-p)$ ، برای مقادیر مختلف میدان عرضی در $\alpha=0$
-۷۳..... نمودار (۵-۴). تغییرات میدان مغناطیسی عرضی نسبت به غلظت آلایندگی در $\alpha=0$
-۷۴..... نمودار (۶-۴). نمودار فاز مدل آیزینگ اسپین-۱ برای چند میدان عرضی مختلف، در فضای $(1-p, T_c/J)$ در $\alpha=-0.1$
-۷۶..... نمودار (۷-۴). تغییرات دمای بحرانی بر حسب غلظت p برای حالت $\alpha=-0.75$
-۷۷..... نمودار (۸-۴). تغییرات دمای بحرانی بر حسب میدان مغناطیسی عرضی با $\alpha=-0.1$
-۷۸..... نمودار (۹-۴). وابستگی دمایی مغناطش طولی و عرضی به همراه وابستگی دمایی چهار قطبی مغناطیسی طولی و عرضی.
-۷۹..... نمودار (۱۰-۴). وابستگی دمایی مغناطش طولی و چهار قطبی مغناطیسی طولی برای شبکه مکعبی ساده
-۸۱..... نمودار (۱۱-۴). وابستگی دمایی پذیرفتاری مغناطیسی در غلظت $p=0$ و میدان خارجی عرضی صفر
-۸۲..... نمودار (۱۲-۴). وابستگی دمایی پذیرفتاری مغناطیسی در غلظت $p=0$ و میدان خارجی عرضی $\Omega/J=1$

.....۸۶

نمودار (۴-۱۳). وابستگی دمایی پذیرفتاری مغناطیسی در غلظت $p=0$ و میدان خارجی عرضی $\Omega/J=2$

.....۸۷

نمودار (۴-۱۴). وابستگی دمای بحرانی به پارامتر α برای شبکه مکعبی ساده در میدان مغناطیسی عرضی صفر

.....۸۸

نمودار (۴-۱۵). وابستگی دمای بحرانی به پارامتر α برای شبکه مکعبی مرکز حجمی در میدان مغناطیسی عرضی صفر

چکیده:

مدل آیزینگ عرضی اسپین-۱ با اندرکنش های کاتوره ایی

غزاله جلیلیان جمع

مدل آیزینگ یکی از پرکاربردترین مدل ها در مکانیک آماری است که می تواند گذار فاز در بسیاری از سیستم ها در عدم حضور میدان خارجی و یا تحت تاثیر میدان مغناطیسی عرضی، طولی خارجی و یا میدان کریستالی، را توضیح دهد.

در این کار مدل آیزینگ اسپین-۱ با برهمکنش های کاتوره ایی تحت تاثیر میدان مغناطیسی عرضی خارجی مورد بررسی قرار گرفته است. تاثیر میدان عرضی خارجی و همچنین میزان احتمال غلظت آلاینده p ، دمای بحرانی، نمودار های گذار فاز، مغناطش طولی و عرضی و همچنین پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دمای بحرانی برای دو شبکه مکعبی ساده با عدد هماهنگی ۶ و شبکه مکعبی مرکز حجمی با عدد هماهنگی ۸ در چهارچوب کلی تئوری میدان موثر و با استفاده از روش توزیع احتمال بررسی شده است.

یکی از بارزترین دستاوردهای این تحقیق مشاهده دو خط گذار فاز برای گستره از مقادیر غلظت آلاینده p در برخی از نمودار های گذار فاز و همچنین ظهور رفتار بازگشتی فاز از تقارن کمتر به تقارن بیشتر با کاهش تدریجی دما برای مقادیر منفی α (نسبت دو ثابت برهمکنش تبدالی فرومغناطیس و ناخالصی) می باشد.

کلید واژه: مدل آیزینگ، اسپین-۱، گذار فاز، پدیده بازگشتی

Abstract:

The transverse spin-1 Ising model with random interactions

Ghazale Jalilian Jame

Over several decades there has been considerable interest in the study of pure Ising models and their variants because they have been used to describe many physical situations in different fields of physics.

In this work the phase diagrams of the transverse spin-1 Ising model with random interactions are investigated using a new technique in the effective field theory that employs a probability distribution. Numerical results are presented for a simple cubic lattice with $N=6$ and body central cubic with $N=8$.

One of the important conclusions of this work is the influence of the parameter α and existence a reentrant phenomenon for negative value of α . When p increases higher to 0.4 the reentrant phenomenon disappears and two ferromagnetic areas marked by two critical lines.

Key words: Ising Model, Spin-1, phase transition, reentrant phenomenon

فصل اول

مقدمه

مکانیک آماری یکی از شاخه های قدیمی و مهم در فیزیک می باشد که توجه بسیاری از فیزیکدانان را از زمان گیبس^۱ تا کنون به خود جلب کرده است. تعداد مسائلی که دقیقاً قابل حل هستند کاملاً به موضوع و زمینه مساله وابسته است. برای مثال در مکانیک کلاسیک مسائل بی شماری حل دقیق دارند ولی در مقابل در مکانیک کوانتومی تعداد مسائل دقیقاً حل شده اندک است، این تعداد کم مدل های حل شده در مکانیک آماری و تئوری کوانتومی دقیقاً به تعداد بسیار زیاد ذرات سیستم بر می گردد که ممکن است با هم برهمکنش نیز داشته باشند.

سیستم های اسپینی نیز گروهی از سیستمهای کوانتومی هستند که خصوصیات میکروسکوپی موادی از قبیل فرومغناطیس ها را با استفاده از شبیه سازی برهمکنش های بین ذرات منفرد بیان می کنند. اصل کلی در سیستمهای اسپینی بررسی سیستمهای پیچیده با استفاده از روشهای تئوری ساده شده می باشد.

یکی از جنبه های بارز سیستمهای مکانیک آماری وجود گذار های فاز است که شناخته شده ترین آن گذار فاز بخار آب به آب و آب به یخ می باشد ولی گذار فازی که کمتر شناخته شده است، گذار فاز فرومغناطیس در دمای کوری است و از میان مدل های موجود که گذار فاز را نمایش می دهند، مدل آیزینگ مشهورترین آنهاست.

^۱ Gibbs

۱-۱- گذار های فاز:

وقتی آب می جوشد تحت یک گذار فاز از یک فاز مایع به یک فاز گازی قرار می گیرد. معادله حالت در هر یک از این فاز ها یک تابع منظم، پیوسته و با مشتقات پیوسته است؛ اما در رفتن از یک فاز به فاز دیگر معادله حالت به یک تابع منظم متفاوت دیگر تغییر می یابد. گذار مایع- گاز یک گذار فازی مرتبه اول است، زیرا مشتق اول پتانسیل گیبس در عبور از مرز فاز، گسسته است. از روابط ماکسول که در زیر آمده است نیز دیده می شود که چگالی و آنتروپی گسسته اند.

$$V = -\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T \quad (1-1)$$

$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P \quad (2-1)$$

در گذار های فاز مرتبه دوم، مشتق اول G پیوسته است اما مشتقات دوم بطور گسسته تغییر می کنند که به عنوان مثال می توان به گذار مایع- گاز در نقطه بحرانی، گذار فرومگناطیس و گذار ابر رسانایی اشاره کرد [۱].

۱-۱-۱ طبقه بندی گذار فاز:

۱- طبقه بندی اهرنفت^۲: گذار های فاز بر پایه درجه غیر تحلیلی بودنشان دسته بندی می شوند، به عبارتی همان گونه که قبلا نیز اشاره شد، گذار فاز توسط اولین مشتق انرژی آزاد که در طی گذار ناپیوسته است مشخص می شود.

- گذار فاز مرتبه اول که در مشتق اول انرژی آزاد نسبت به کمیت های ترمودینامیکی ناپیوستگی دارد.
- گذار فاز مرتبه دوم که مشتق اول انرژی آزاد پیوسته ولی در مشتق دوم نسبت به کمیت های ترمودینامیکی ناپیوستگی وجود دارد.

^۲ Ehernfest

۲- طبقه بندی جدید گذار فاز: در نظر نگرفتن واگرایی مشتق انرژی آزاد در حد ترمودینامیکی، یکی از معایب دسته بندی گذار ها توسط اهرنفتست می باشد که در طبقه بندی جدید به آن پرداخته شده است.

- گذار فاز مرتبه اول که گرمای نهان را شامل می شوند و معمولا سیستم فاز مختلط دارد.
- گذار فاز مرتبه دوم یا گذارهای پیوسته که پذیرفتاری مغناطیسی در نقطه گذار دارای واگرایی و طول همبستگی بی نهایت است.
- گذارهای فاز مرتبه بی نهایت که گذارهای پیوسته می باشند در آنها هیچ تقارنی شکسته نمی شود.

۲-۱ شکست تقارن:

به عنوان یک قاعده، ماده در دماها پایین به فازی می رود که تقارن ذاتی دستگاه را در آن فاز دارا نیست. آنها به یک شبکه بلوری جامد تبدیل می شوند، که این پدیده ناوردایی انتقالی هامیلتونی را نقض می کند. اسپین های اتمی در یک ماده فرو مغناطیسی در یک جهت معین همسو می شوند که منجر به نقض ناوردایی چرخشی می شود. وقتی هامیلتونی تحت تاثیر یک عمل تقارن ناورداست و حالت پایه ناوردا نیست، این تقارن اصطلاحا شکست خود بخودی نامیده می شود [۲].

فرض می کنیم P یک عمل تقارن که تحت تاثیر آن هامیلتونی H ناورداست، و Ψ یک تابع موج حالت پایه است، از این رو داریم؛

$$H\Psi_0 = E_0\Psi_0 \quad (3-1)$$

این بدان معنی است که؛

$$P^{-1}HP\Psi_0 = E_0\Psi_0 \quad (5-1)$$

$$H(P\Psi_0) = E_0(P\Psi_0) \quad (6-1)$$

اگر $P\Psi$ حالتی متفاوت با Ψ باشد، یک حالت پایه با همان اعتبار خواهد بود. بنابراین، اگر تقارن شکسته شود، حالت پایه باید تبهگن باشد.

در شکست یک تقارن پیوسته، حالت پایه باید تبهگنی بی نهایت گانه داشته باشد. برای یک فرومغناطیس، اسپین کل دستگاه باید در امتداد یک جهت معین-اما هر جهتی در فضا- باشد. پیامدی از این تبهگنی حضور برانگیختگی های موج اسپینی است و جهت اسپین از یک نقطه به نقطه دیگر در فضا به طور اندکی تغییر می کند.

منشا فیزیکی مغناطش خود بخودی عبارتست از جاذبه بین اسپین های موازی. این اسپین ها ترجیح می دهند به صورت گروهی جهت گیری نموده و بچرخند. با این همه، این تمایل به جهت گیری توسط افت و خیزهای گرمایی کاتوره ایی تضعیف می شود، و توازن بین این نیروهای مخالف، میانگین اندازه گروه در یک دمای معین را تعیین می کند. اندازه گروه در دمای بالا کوچک است، سمتگیری های کاتوره ایی اسپین ها یکدیگر را حذف می کنند و هیچ گونه مغناطش خالصی وجود ندارد. وقتی دما کاهش می یابد، گروه های بزرگ پایدار تر می شوند و بسیار بعید به نظر می رسد که جهت اسپین گروه در اثر حرکت گرمایی تغییر کند. این بدان دلیل است که لازمه تغییر جهت اسپین گروه، چرخش خودبخودی اسپین های انفرادی است، و این برای گروه های بزرگ بسیار بعید است. شکست تقارن به این دلیل رخ می دهد که دستگاه برای مدت بسیار طولانی در یک پیکر بندی گیر می افتد.

رقابت بین همسویی اسپینی و حرکات گرمایی را می توان در انرژی آزاد $A=U-TS$ مشاهده کرد، که در آن U از طریق همسویی اسپینی، کمینه را ترجیح می دهد، حال آنکه S با کاتوره ایی نمودن سمتگیری های اسپینی به دنبال بیشینه است. وقتی T کاهش می یابد، نیروهای همسو ساز قوی می شوند و در $T=T_c$ که در آنجا $T_c S=0$ است، کاملاً مشهود است.

ظهور مغناطش خود بخودی در حد ترمودینامیکی منجر به یک گذار فاز تیز می شود. در فاز دمایی پایین، تقارن چرخشی می شکند، و در فاز دمایی بالا دوباره برقرار می شود.

از مغناطش خود بخودی یک پارامتر نظم بیرون می آید که ظهور آن در پایین تر از یک دمای بحرانی، یک گذار فاز شکست تقارن را نشان می دهد. در یک دستگاه فرومغناطیس، مغناطش به عنوان پارامتر نظم شناخته می شود و ناوردایی چرخشی همان شکست تقارن است.

۳-۱ پارامتر نظم:

به پارامتری گفته می شود که در یک فاز و معمولا بالای نقطه بحرانی مقدار صفر داشته و در فاز دیگر مقدار غیر صفر اختیار کند. در دماهای بالا ماده بی نظم بوده و پارامتر نظم صفر است و وقتی آن را سرد می کنیم پارامتر نظم رشد می کند تا اینکه در رسیدن به صفر مطلق مقدار آن ماکزیمم شده و ماده به حداکثر نظم می رسد.

برای مثال در فاز فرومغناطیس، مغناطش خالص که با سرد شدن سیستم در دمایی کمتر از دمای کوری جهت دلخواهی را انتخاب می کند، به عنوان پارامتر نظم شناخته می شود. با توجه به اینکه شروع نظم در اینگونه سیستم ها ناگهان است، لذا به انتقالات مزبور عموما انتقالات نظم- بی نظم گفته می شود. لازم به ذکر است دمای کوری یا دمای بحرانی در مواد فرومغناطیسی یا فری مغناطیسی به دمایی گفته می شود که ماده در دمایی بالاتر از آن به یک پارامغناطیس تبدیل می شود. کاهش و صفر شدن مغناطش در دمای کوری یک گذار فاز مرتبه دوم محسوب شده که در این نقطه بحرانی از لحاظ تئوری پذیرفتاری مغناطیسی بی نهایت بدست می آید.

۴-۱ نماهای بحرانی:

در دمای بحرانی یک تابع ترمودینامیکی عموما دارای یک جمله است که نسبت به دمای t منظم می باشد، همچنین یک بخش

تکین که مانند توان t رفتار می کند نیز وجود دارد. این نما را نمای بحرانی می نامند. در حضور میدان خارجی صفر، وقتی $t \rightarrow 0$ میل می کند، نماهای α و β و γ را به صورت زیر تعریف می کنیم؛

$$M \sim |t|^\beta \quad (\text{پارامتر نظم})$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (\text{پذیرفتاری})$$

$$C \sim |t|^{-\alpha} \quad (\text{ظرفیت گرمایی})$$

علامت ~ به معنی "بخش تکینه متناسب است با" می باشد. این نماها خواه از بالا به نقطه بحرانی نزدیک شویم و خواه از پایین، باید یکسان باشند ولی ثابت تناسب می تواند متفاوت باشد و حتی امکان دارد از یک طرف مساوی صفر باشد.

نماهای بحرانی از این نظر جالب توجه هستند که جهانی اند و توسط رده ایی از دستگاه ها به اشتراک گذاشته می شوند.

۱-۵ مواد مغناطیسی:

وقتی میدان مغناطیسی اعمال شده بر هر ماده از صفر رو به افزایش باشد، باعث پیدایش یک emf القایی در آن می شود (قانون فارادی)، که الکترونها درون ماده را شتاب می دهد. براساس قانون لنز، جریان الکتریکی حاصل در جهتی است که میدان اعمال شده را کاهش می دهد (استتار می کند). وقتی میدان اعمال شده ثابت نگه داشته می شود، با آنکه emf القایی صفر خواهد شد، ولی جریان الکتریکی ایجاد شده باقی می ماند و از این رو ماده، مغناطشی در خلاف جهت میدان کسب می کند. این پدیده به **دیامغناطیس** معروف است. پذیرفتاری مغناطیسی برای مواد دیامغناطیس منفی است و معمولاً فوق العاده کوچک نیز هست. مقدار پذیرفتاری برای یخ برابر $-8/1 \times 10^{-6}$ است.

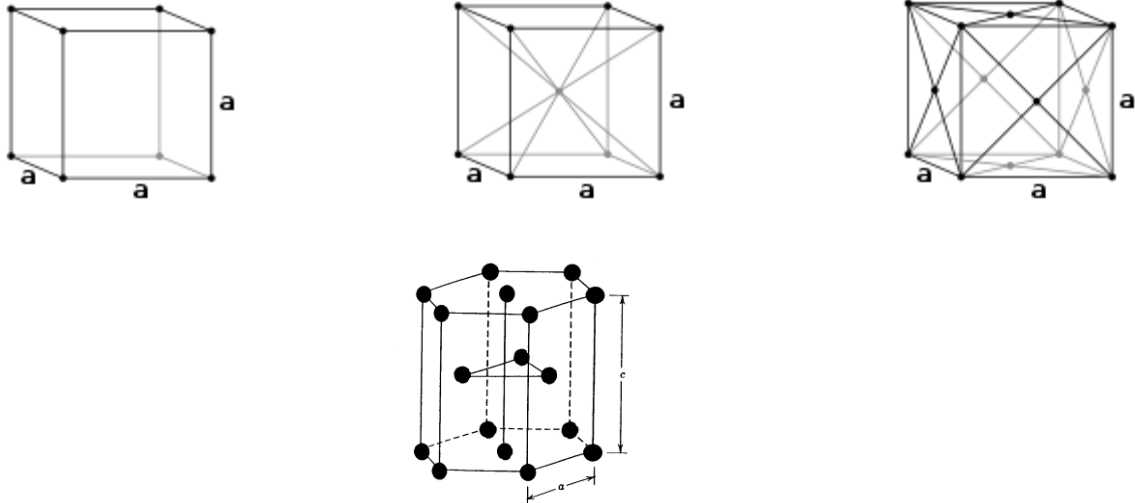
در موادی که در آنها برخی از اتمها یا تمامی آنها گشتاور دو قطبی دائمی دارند، یعنی گشتاور دو قطبی آنها در غیاب میدان اعمال شده غیر صفر است، اثر های دیامغناطیسی معمولاً در مقایسه با اثرهای پارامغناطیسی وابسته به گشتاور های دائمی، کوچک است. در میدان صفر، گشتاورهای دائمی سمتگیری کاتوره ایی دارند و مغناطش خالص صفر می شود. در میدان های کوچک، رقابتی بین اثر هم خط سازی میدان و بی نظمی گرمایی وجود دارد، ولی بطور متوسط تعداد گشتاورهای مولفه های موازی با میدان بیش از گشتاورهای مولفه های پاد موازی با میدان است. لذا پذیرفتاری مغناطیسی مثبت است و با افزایش دما، که در اثر آن بی نظمی گرمایی زیاد می شود، کاهش می یابد. مقدار نوعی پذیرفتاری مغناطیسی χ برای یک جامد پارامغناطیسی مانند $CuSO_4$ در دمای اتاق، برابر $3/8 \times 10^{-4}$ است.

در دماهای پایین، دیگر نمی توان از برهمکنش های بین گشتاورهای دو قطبی دائمی صرفنظر کرد. انرژی گرمایی آنقدر نیست که سبب شود دو قطبها، در میدان اعمالی صفر، در جهت کاتوره ایی قرار گیرند. جهت دو قطبی ها طوری به هم وابسته می شود که انرژی برهمکنش را کمینه می کند. از این رو دو قطبی های دائمی در تمامی ماده پارامغناطیس با کاهش دما، گذاری از حالت منظم، در میدان اعمالی صفر، انجام می دهند [۳].

۱-۵-۱ رفتار مغناطیسی در مواد جامد:

در برخی از مواد جامد، اتمها منظم کنار یکدیگر قرار گرفته و تشکیل کریستال می دهند. معمول ترین ساختارهای کریستالی، ساختار مکعبی مرکز حجمی (bcc) مانند Fe، مکعبی مرکز سطحی (fcc) مانند Ni، مکعبی ساده (sc) و شش گوشه تنگ پکیده (hcp) مانند Co می باشند.

در جامد های مغناطیسی انواعی از نیروهای بین اتمی وجود دارند که باعث همردیفی گشتاور مغناطیسی اتمها در حوزه های مغناطیسی می شوند. با اینکه در یک ماده فرومغناطیسی اسپین تمام اتم های حوزه با یکدیگر موازی هستند، اما در یک ماده غیر مغناطیده این حوزه ها بطور تصادفی جهت گیری نموده اند و محور های مغناطیسی در جهت های مختلف دارند، به گونه ایی که اثر مغناطیسی برآیند، صفر است. اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی، سبب هم جهت شدن محور حوزه ها در راستای میدان شده و از این رو منجر به ایجاد اثر مغناطیسی در یک ماده فرومغناطیسی می شود.



نمودار (۱-۱). به ترتیب از چپ به راست: ساختار مکعبی ساده، ساختار مکعبی مرکز حجمی، ساختار مکعبی مرکز سطحی و ساختار شش گوشه تنگ پکیده.

افزایش قابل توجه دمای یک ماده فرومغناطیسی باعث ایجاد آشفتگی بین اتمها می گردد تا هنگامی که در دمای بحرانی یا دمای کوری T_c ، آشفتگی آنقدر شدید شده که توازن موجود در بین گشتاورهای مغناطیسی اتمهای مجاور، حوزه را تخریب می کند و از این رو باعث از بین رفتن خاصیت مغناطیسی آن می شود.

برای درک رفتار مغناطیسی مواد لازم است که یک دیدگاه میکروسکوپی از ماده داشته باشیم. در ماده به دلیل حرکت الکترونها، مدارهای میکروسکوپی وجود دارد که مسئول اثرات مغناطیسی در مواد مغناطیسی هستند. در اوایل قرن بیستم این ایده مطرح شد که هر الکترون حول یک محور گذار از مرکز خود می چرخد که به اسپین الکترونی معروف است. این الکترونها که در لایه های معینی نشسته اند، برخی در یک جهت و برخی دیگر در جهت مخالف می چرخند و فزونی چرخش یک گروه در یک جهت نسبت به گروه دیگر که در جهت مخالف می چرخند، باعث می شود که هر اتم به صورت مجزا به عنوان یک آهنربای دائمی کوچک عمل کند. از این رو هر الکترون مداری می تواند یک میدان مغناطیسی را به وجود آورد.

حرکت مداری و ذاتی هر یک از الکترونها در یک اتم یا مولکول را می توان بر حسب یک گشتاور مغناطیسی توصیف کرد:

$$m = -g\mu_B J \quad (۷-۱)$$

μ_B مگنتون بوهر است و می توان آن را به عنوان واحد کوانتش گشتاور مغناطیسی در نظر گرفت. مقدار μ_B به مقدار گشتاور مغناطیسی اسپینی الکترون آزاد بسیار نزدیک است. J اندازه حرکت زاویه ای کل، مجموع اندازه حرکت زاویه ای اسپینی و مداری می باشد؛

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (۸-۱)$$

g ضریب شکافتگی طیف نمایی است که از معادله لانده [۴] بدست می آید:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (۹-۱)$$

برای الکترون $g=2/0.03$ است که معمولا به صورت $g=2$ در نظر گرفته می شود. بطور تجربی ثابت شده است که اندازه حرکت زاویه ای مداری در فلزات واسط d^3 صفر است. بنابراین در این گروه از فلزات، صرفا اسپین در محاسبات در نظر گرفته می شود. در نتیجه داریم؛

$$m = -g\mu_B S \quad (۱۰-۱)$$

S برابر با $1/2$ ، 1 ، $3/2$ و... است.

در دماهای پایین و در غیاب یک میدان مغناطیسی خارجی، تعداد زیادی از مواد پارامغناطیسی دارای یک مغناطش متناهی هستند. این مغناطش خود بخودی ناشی از همخط شدن گشتاور های دوقطبی دائمی است و نمایشگر آن است که هر دوقطبی از جهت دو قطبی های دیگر آگاهی دارد.

گذار به حالتی که در آن دو قطبی ها هم خط می شوند نشانگر افزایش درجه نظم دورن جامد و در نتیجه کاهش آنتروپی است. ساده ترین نوع نظم مغناطیسی، نظم فرو مغناطیسی است که در آن تمامی گشتاورها به طور مساوی در مغناطش خود بخودی سهیم اند. نظم در پادفرومغناطیس ها چنان است که هیچ مغناطش خود بخودی در آنها وجود ندارد، زیرا نیمی از دو قطبی ها در یک