

١٧/١٠/٧٣٢١
١٧/١٢/٢٦

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

١١٥٧٢٤



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش آزاد

تأثیر جانمایی روی با منیزیم بر ویژگی‌های مغناطیسی فریت منیزیم نانومتری

استاد راهنما:

دکتر مرتضی مظفری

استاد مشاور:

مهندس مهدی کمالی

پژوهشگر:

یاسر زارع

تیرماه ۱۳۸۷

۱۱۰۷۷۲

۸۷/۱۱۰۷۳۲۸
۸۷/۱۲۲۶

کتابخانه مرکزی دانشگاه اصفهان
شماره ثبت کتاب: ۱۳۸۷/۱۲/۱۰

۱۳۸۷ / ۱۲ / ۱۰

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و
نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه
متعلق به دانشگاه اصفهان است.



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه ی کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک گرایش آزاد آقای یاسر زارع تحت عنوان

تأثیر جانمایی روی با منیزیم بر ویژگی های مغناطیسی فریت منیزیم نانومتری

در تاریخ ۸۷/۴/۲۵ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه عالی به تصویب نهایی رسید.

امضا
امضا

۱- استاد راهنمای پایان نامه دکتر مرتضی مظفری با مرتبه ی علمی استادیار

۲- استاد مشاور پایان نامه مهندس مهدی کمالی

امضا
امضا

۳- استاد داور داخل گروه دکتر جمشید عمیقیان با مرتبه ی علمی استاد

۴- استاد داور خارج از گروه دکتر مهدی علوی با مرتبه ی علمی استاد



سپاسگزاری

از زحمات جناب آقای دکتر مظفری که با راهنمایی‌های خود مرا یاری نمودند کمال تشکر را دارم. همچنین از جناب آقای دکتر عمیقیان و دکتر علوی که زحمت داوری این پایان‌نامه را بر عهده داشتند تشکر می‌نمایم. از جناب آقای مهندس مهدی کمالی که مشاوره‌ی پایان‌نامه را بر عهده داشتند و زحمات فراوان و بی‌دریغی را متحمل شدند نیز تشکر می‌کنم. در پایان از کمک‌های صادقانه‌ی دوستان عزیزم در طول انجام این پایان‌نامه سپاسگزاری می‌نمایم.

تقدیم به

پدر و مادر

عزیز و بزرگوارم.

چکیده

یکی از روش‌های کارا برای تهیه‌ی نانوذرات روش مکانوشیمیایی است. مواد تهیه شده به این روش ویژگی‌های نوینی را از خود بروز می‌دهند.

در این پژوهش فریت آمیخته‌ی $Zn_xMg_{1-x}Fe_2O_4$ ($x=0.4, 0.6, 0.8, 1.0$) به روش مکانوشیمیایی تک‌گام، بدون پخت تهیه شدند. برای رسیدن به فاز نهایی، مواد اولیه از ۱۵ ساعت تا ۷۵ ساعت آسیاب کاری شدند. همان فریت‌ها با روش متداول سرامیکی با مخلوط کردن مواد اولیه و پخت به مدت ۵ ساعت در دمای ۱۱۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد به گونه‌ی کپه‌ای تهیه شدند.

بازتوزیع کاتیونها در جایگاه‌های شبکه‌ای چهار و شش وجهی اسپینلی با توجه به تغییر در نسبت شدت قله‌های پراش پرتو ایکس نمونه‌های نانومتری از صفحه‌های (222) و (220) مربوط به ساختار شبکه‌ای اسپینلی تحقیق شد. نتایج نشان می‌دهد که پخش کاتیونها در نمونه‌های نانومتری تهیه شده به روش مکانوشیمیایی با نمونه‌های کپه‌ای متفاوت است.

در نمونه‌های کپه‌ای با افزایش مقدار روی، ثابت شبکه به طور خطی افزایش می‌یابد که با قانون ویگارد سازگار است. در نمونه‌های نانومتری تهیه شده به روش مکانوشیمیایی ثابت‌های شبکه در مقایسه با نمونه‌های کپه‌ای کاهش می‌یابد که با توجه به اندازه‌ی کوچک‌تر و نیز حضور یونهای Zn^{2+} در جایگاه B قابل توجیه است.

روند تغییرات مغناطش در نمونه‌های کپه‌ای با توجه به کاهش مغناطش در نمونه‌های با $x \geq 0.6$ تایید کننده‌ی کج-شدگی اسپینی آن نمونه‌هاست، که با نظریه‌ی یافیت - کیتل توجیه‌پذیر است. مغناطش نمونه‌های نانومتری در مقایسه با همانند کپه‌ای آنها، بالاتر است. که این امر نیز به بازتوزیع کاتیونی نسبت داده می‌شود. با حضور یون های Zn^{2+} در جایگاه های B، یون های Fe^{3+} به جایگاه های A کوچ می‌کند. این بازپخش به کاهش کج‌شدگی اسپینی و نیز افزایش اختلاف مغناطش در دو جایگاه منجر می‌گردد که پیامد آن افزایش مغناطش نمونه‌هاست. همچنین جا به جایی یون‌های Mg^{2+} از مکان‌های B به مکان‌های A نیز می‌تواند با افزایش اختلاف مغناطش در دو جایگاه، منجر به افزایش مغناطش نمونه‌ها شود.

کاهش دمای کوری نمونه‌های کپه‌ای با افزایش جانشینی Zn^{2+} با توجه به افزایش ثابت شبکه قابل توجیه است. دمای کوری نمونه‌های نانومتری در مقایسه با همانند کپه‌ای آنها افزایش یافته است که این افزایش نیز با کاهش ثابت شبکه در نمونه‌های نانومتری مورد قبول است.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
فصل اول: مروری بر نظریه‌ی فریتها	
۱	۱-۱) میدان مولکولی وایس
۲	۲-۱) برهم کنش تبادلی
۵	۳-۱) برهم کنش ابرتبادلی
۶	۴-۱) فریت‌های نرم
۷	۵-۱) ساختار فریت‌های اسپینلی
۱۲	۶-۱) مغناطش در فریت‌ها
۱۲	۱-۶-۱) مدل Neel
۱۲	۲-۶-۱) مدل یافیت-کیتل (Y-K)
۱۴	۳-۶-۱) مدل کج‌شدگی اسپینی جایگزیده (LCS)
فصل دوم: نانو ذرات مغناطیسی	
۱۷	۱-۲) مقدمه
۱۸	۲-۲) تغییر ثابت شبکه
۱۹	۳-۲) تغییرات نیروی وادارندگی ذرات ریز
۲۱	۴-۲) اثرهای سطح
۲۳	۵-۲) مدل پوسته - هسته
فصل سوم: مروری بر فریت منیزیم-روی	
۲۷	۱-۳) مقدمه
۲۸	۲-۳) فریت منیزیم-روی کپه‌ای
۲۸	۱-۲-۳) توزیع کاتیونی
۳۰	۲-۲-۳) دمای کوری
۳۱	۳-۲-۳) مغناطش
۳۴	۳-۳) بررسی ویژگیهای فریت منیزیم-روی نانومتری به دست آمده از روش هم‌سویی

۳-۴) نتایجی از روش مکانوشیمیایی تک گام ۳۶

فصل چهارم: آلیاژسازی مکانیکی

۳۸	۱-۴) مقدمه
۳۹	۲-۴) برخوردهای گلوله-پودر-گلوله
۴۰	۳-۴) مرحله‌های گوناگون فرآیند
۴۱	۱-۳-۴) مرحله نخست فرآیند
۴۱	۲-۳-۴) مرحله میانی فرآیند
۴۲	۳-۳-۴) مرحله نهایی فرآیند
۴۳	۴-۴) تحول اندازه ذره
۴۶	۱-۴-۴) ترکیبات چکش خوار - چکش خوار
۴۸	۲-۴-۴) ترکیبات شکننده - چکش خوار
۵۰	۳-۴-۴) ترکیبات شکننده-شکننده
۵۱	۵-۴) کاربردهای آلیاژسازی مکانیکی
۵۱	۱-۵-۴) سنتز بین فلزیها
۵۲	۲-۵-۴) آمورف سازی حالت جامد
۵۲	۳-۵-۴) سنتز مکانوشیمیایی

فصل پنجم: مبانی تجربی

۵۴	۱-۵) وسایل مورد استفاده
۵۴	۱-۱-۵) ترازوی دیجیتال
۵۵	۲-۱-۵) کوره لوله‌ای
۵۵	۳-۱-۵) قالب
۵۶	۴-۱-۵) پرس
۵۶	۵-۱-۵) آسیاب گلوله‌ای پر انرژی اسپکس
۵۷	۶-۱-۵) دستگاه پراش سنج پرتو ایکس
۵۷	۷-۱-۵) پرمیتر
۵۸	۸-۱-۵) دستگاه LCR سنج

عنوان	صفحه
بیناب سنجی مادون قرمز	۵۹ (۲-۵)
محاسبه‌ی اندازه‌ی بلورکها	۶۰ (۳-۵)
فرایند آماده سازی نمونه ها	۶۰ (۴-۵)
روش متداول سرامیکی	۶۱ (۱-۴-۵)
روش مکانوشیمیایی تک گام	۶۱ (۲-۴-۵)

فصل ششم: نتایج و بحث

فازبایی نمونه ها	۶۲ (۱-۶)
اندازه‌ی بلورکها	۶۶ (۲-۶)
چگونگی بازتوزیع کاتیونها درنمونه‌های نانومتری	۶۶ (۳-۶)
تغییرات ثابت شبکه	۶۸ (۳-۶)
تغییرات مغناطش اشباعی	۶۹ (۴-۶)
دمای کوری	۷۲ (۵-۶)

منابع و مأخذ	۷۷
--------------------	----

فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۵.....	شکل ۱-۱: طرح‌واره‌ی برهم‌کنش تبادلی و برهم‌کنش ابرتبادلی
۶.....	شکل ۱-۲: طرح‌واره‌ی ساز و کار برهم‌کنش ابرتبادلی در پیوند بین دو یون فلز واسطه و اکسیژن
۸.....	شکل ۱-۳: دوره شدن کاتیون با یونهای اکسیژن در جایگاه هشت وجهی و جایگاه چهاروجهی
۹.....	شکل ۱-۴: پارامتر اکسیژنی u
۱۰.....	شکل ۱-۵: نزدیکترین همسایگان یک آنیون اکسیژن
۱۱.....	شکل ۱-۶: زاویه بین کاتیون‌ها با یک آنیون اکسیژن در یک ساختار اسپینلی
۱۴.....	شکل ۱-۷: چگونگی جهت‌گیری گشتاورها در زیرجایگاههای یک ساختار اسپینلی
۱۶.....	شکل ۱-۸: نمودار مغناطش با توجه به مقادیر Zn در دستگاه Zn-Mg-Mn
۱۹.....	شکل ۱-۲: انقباض شبکه بر حسب وارون اندازه‌ی ذره برای خوشه‌های مس
۱۹.....	شکل ۲-۲: تغییرات نیروی وادارندگی بر حسب اندازه‌ی ذرات
۲۰.....	شکل ۲-۳: جدا شدن حالت‌های مغناطش یک ذره مغناطیسی تک محور با یک سد انرژی ($K_u V$)
۲۴.....	شکل ۲-۴: الف) حلقه‌ی پسماند برای یک ذره $NiFe_2O_4$ با $BBD=0$ و $RMS=1.8\text{\AA}$ ب) حلقه‌ی پسماند برای همان ذرات با $BBD=0.8$ و $RMS=2.1\text{\AA}$
۲۵.....	شکل ۲-۵: حلقه‌ی پسماند برای یک ذره $NiFe_2O_4$ با $BBD=0.8$ و $RMS=4\text{\AA}$
۲۶.....	شکل ۲-۶: نظم مغناطیسی برای فریت منیزیم نانومتری در هسته و پوسته
۲۹.....	شکل ۳-۱: تغییر ثابت شبکه با افزایش مقدار روی در فریت آمیخته‌ی منیزیم-روی
۳۰.....	شکل ۳-۲: الف) جابه‌جایی در روند خطی ثابت شبکه و ب) روند کاهشی و افزایشی چگالی در فریت منیزیم-روی بر حسب مقدار روی
۳۱.....	شکل ۳-۳: نمودارهای پذیرفتاری ac بر حسب دما در ترکیب‌های مختلف منیزیم و روی
۳۲.....	شکل ۳-۴: تغییر مقادیر مغناطش نسبی بر حسب مقدار Zn در فریت منیزیم-روی در محاسبه و تجربه
۳۶.....	شکل ۳-۵: تغییرات ثابت انرژی ناهمسانگردی در اندازه‌های گوناگون بر حسب مقدار روی
۳۹.....	شکل ۴-۱: اثر یک تک برخورد بر روی ذرات یک پودر
۴۰.....	شکل ۴-۲: برخورد گلوله-پودر-گلوله
۴۲.....	شکل ۴-۳: نمایی از تغییرات در مرحله‌های گوناگون آلیاژسازی مکانیکی

- شکل ۴-۴: توزیع گسترده‌ای از اندازه‌های ذرات در یک نمونه پودری Al-Mg که به مدت ۲ ساعت آلیاژسازی مکانیکی شده است. ۴۳
- شکل ۴-۵: توزیع باریکی از اندازه‌ی ذرات به دلیل تمایل ذرات کوچک به جوش خوردن با هم و خرد شدن ذرات بزرگ تر در شرایط حالت مانا حاصل می شود. ۴۵
- شکل ۴-۶: بهبود اندازه‌ی ذره/دانه/بلورک با زمان آسیاب (آهنگ بهبود با افزایش انرژی آسیاب، نسبت وزنی گلوله به پودر، و کاهش دما افزایش می یابد). ۴۶
- شکل ۴-۷: تصویر SEM از یک دستگاه چکش خوار-چکش خوار (Ag-Cu)، که ساختار لایه لایه ای در طول آسیاب کاری حاصل شده است. ۴۷
- شکل ۴-۸: نمایی از تحول ریزساختاری در طول آسیاب کاری یک ترکیب چکش خوار-شکننده. ۴۹
- شکل ۴-۹: TEM یک پاشیدگی یکنواخت از ذرات Er_2O_3 در یک زمینه ی آلیاژسازی شده ی مکانیکی $\alpha_2 - titanium$. ۴۹
- شکل ۴-۱۰: SEM آلیاژسازی مکانیکی مخلوط Si-Ge. ۵۱
- شکل ۵-۱: ترازوی دیجیتالی. ۵۴
- شکل ۵-۲: کوره‌ی الکتریکی کنترل اتمسفر. ۵۵
- شکل ۵-۳: نمایی از سمبه و ماتریس یک قالب. ۵۵
- شکل ۵-۴: پرس هیدرولیکی. ۵۶
- شکل ۵-۵: آسیاب اسپکس مدل 8000M. ۵۶
- شکل ۵-۶: اجزا مختلف دستگاه پرمیتر. ۵۸
- شکل ۵-۷: یک دستگاه LCR سنج و وسایل جانبی آن برای اندازه‌گیری دمای کوری. ۵۹
- شکل ۶-۱: الگوهای پراش پرتو ایکس نمونه‌های با مقادیر مختلف روی، در فریت آمیخته‌ی منیزیم-روی به دست آمده با روش مکانوشیمیایی تک‌گام. ۶۳
- شکل ۶-۲: الگوهای پراش پرتو ایکس نمونه‌های کپه‌ای، با مقادیر مختلف روی در فریت آمیخته‌ی منیزیم-روی. ۶۴
- شکل ۶-۳: بیناب سنجی FT-IR در در نمونه‌های تهیه شده به روش مکانوشیمیایی. ۶۵
- شکل ۶-۴: بیناب سنجی FT-IR در نمونه‌های تهیه شده به روش متداول سرامیکی. ۶۵
- شکل ۶-۵: نمودار تغییرات ثابت شبکه برحسب x در $Zn_xMg_{1-x}Fe_2O_4$. ۶۹
- شکل ۶-۶: چرخه‌ی پسماند مربوط به فریت روی به دست آمده با روش مکانوشیمیایی تک‌گام. ۶۹
- شکل ۶-۷: چرخه‌ی پسماند مربوط به فریت کپه‌ای و نانومتری $Zn_{0.8}Mg_{0.2}Fe_2O_4$. ۷۰

عنوان

صفحه

شکل ۶-۸: چرخه‌ی پسماند مربوط به فریت کپه‌ای و نانومتری $Zn_{0.6}Mg_{0.4}Fe_2O_4$ ۷۰

شکل ۶-۹: چرخه‌ی پسماند مربوط به فریت کپه‌ای و نانومتری $Zn_{0.4}Mg_{0.6}Fe_2O_4$ ۷۱

شکل ۶-۱۰: تغییرات مغناطش اشباعی در نمونه‌ها برای نمونه‌ی $Zn_xMg_{1-x}Fe_2O_4$ تهیه شده به روش متداول
 سرامیکی و روش مکانوشیمیایی بر حسب مقادیر روی ۷۱

شکل ۶-۱۱: تغییرات تراوایی بر حسب دما در فریت نانومتری $ZnFe_2O_4$ ۷۳

شکل ۶-۱۲: تغییرات تراوایی بر حسب دما در فریت کپه‌ای $Zn_{0.8}Mg_{0.2}Fe_2O_4$ ۷۳

شکل ۶-۱۳: تغییرات تراوایی بر حسب دما در فریت نانومتری $Zn_{0.8}Mg_{0.2}Fe_2O_4$ ۷۳

شکل ۶-۱۴: تغییرات تراوایی بر حسب دما در فریت کپه‌ای $Zn_{0.6}Mg_{0.4}Fe_2O_4$ ۷۴

شکل ۶-۱۵: تغییرات تراوایی بر حسب دما در فریت نانومتری $Zn_{0.6}Mg_{0.4}Fe_2O_4$ ۷۴

شکل ۶-۱۶: تغییرات تراوایی بر حسب دما در فریت کپه‌ای $Zn_{0.4}Mg_{0.6}Fe_2O_4$ ۷۴

شکل ۶-۱۷: تغییرات تراوایی بر حسب دما در فریت نانومتری $Zn_{0.4}Mg_{0.6}Fe_2O_4$ ۷۵

شکل ۶-۱۸: نمودار تغییرات دمای کوری برای نمونه‌های تهیه شده به روش متداول سرامیکی و روش مکانوشیمیایی
 بر حسب x در $Zn_xMg_{1-x}Fe_2O_4$ ۷۵

فهرست جدول‌ها

عنوان	صفحه
جدول ۱-۱: مقادیر محاسبه شده و تجربی n_B در دستگاه $Zn_xMg_{1.5-x}Mn_{0.5}FeO_4$ ۱۶	۱۶
جدول ۱-۳: مقادیر تجربی و محاسبه‌ای زاویه‌های Y-K بر اساس تغییرات تجربی n_B در $Zn_xMg_{1-x}Fe_2O_4$ ۳۳	۳۳
جدول ۲-۳: مقادیر n_B و M_s بر حسب مقدار Zn جانشانی شده به عنوان تابعی از زمان تفجوشی ۳۴	۳۴
جدول ۱-۶: اندازه‌های بلورکهای فریت‌های آمیخته‌ی منیزیم-روی به دست آمده از فرمول شرر ۶۶	۶۶
جدول ۲-۶: عامل پراکندگی کاتیونها در موقعیت صفحه‌های (220) و (220) ۶۷	۶۷
جدول ۳-۶: مقادیر به دست آمده برای نسبت شدت قله‌های پراش از صفحه‌های (220) و (222) برای نمونه‌های تهیه شده به روش متداول سرامیکی و روش مکانوشیمیایی ۶۸	۶۸

فصل اول

مروری بر نظریه‌ی فریت‌ها

۱-۱) میدان مولکولی وایس^۱

برهم‌کنش‌های قوی‌ای که منجر به یک نظم‌گیری در مواد مغناطیسی می‌شوند را می‌توان هم‌ارز یک میدان مغناطیسی درونی H_m در نظر گرفت. انرژی گرمایی با نظم ناشی از این میدان مخالفت می‌کند و سرانجام در دمای کوری این انرژی مغناطش خودبه‌خودی را به طور کامل به هم می‌زند. بدین ترتیب می‌توانیم H_m را تخمین بزنیم. برای اتم‌هایی با گشتاور دو قطبی مغناطیسی به اندازه یک مگنتون بوهر داریم:

$$\mu_B H_m \approx k_B T_c \quad (1-1)$$

اگر دمای کوری را از مرتبه‌ی 10^3 کلوین (نزدیک به دمای کوری آهن) در نظر بگیریم، $H_m \approx 10^7$ Oe به دست می‌آید. در نتیجه این میدان خیلی بزرگتر از آن است که ما در آزمایشگاه‌ها بتوانیم آن را حتی با روش‌های پالسی تولید کنیم. همچنین از مقدار تولید شده توسط یک برهم‌کنش دو قطبی - دو قطبی از مرتبه 10^3 Oe $\mu_B / a^3 \approx$ نیز خیلی بزرگ‌تر است (a ثابت شبکه).

^۱ Weiss

اگرچه وایس نمی‌توانست سرچشمه‌ی میدان مغناطیسی درونی H_m را توضیح دهد، اما او با فرض اینکه H_m متناسب با مغناطش M است، یک نظریه‌ی پدیده‌ی شناختی را برای فرومغناطیس‌ها گسترش داد [۱]:

$$\vec{H}_m = N_w \vec{M} \quad (۲-۱)$$

در این رابطه N_w ثابت میدان مولکولی نامیده می‌شود و از مرتبه‌ی $۱۰^۴$ است. به H_m میدان مولکولی، میدان وایس یا میدان تبدلی نیز گفته می‌شود.

۲-۱) برهم‌کنش تبدلی

سرچشمه میدان مولکولی وایس تا پیش از پدید آمدن مکانیک کوانتمی ناشناخته بود. هایزنبرگ نشان داد که این میدان نتیجه‌ی برهم‌کنش تبدلی در مکانیک کوانتمی است [۲۴ و ۱]. این برهم‌کنش همانند کلاسیکی ندارد. هایزنبرگ نظریه‌ی خود را طبق روش Heitler-London که در مورد مولکول هیدروژن به کار رفته بود بنیان نهاد، که ما در این بخش به آن می‌پردازیم.

نخست دو الکترون را در نظر می‌گیریم، که در میدان پتانسیل همانندی در حرکت‌اند. نمونه‌ی معمول آن اتم هلیوم یا مولکول هیدروژن است. اگر از برهم‌کنش بین الکترون‌ها چشم‌پوشی شود با حل معادله‌ی شرودینگر می‌توان جواب‌های کلی زیر را به دست آورد:

$$\Psi_{sym}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_a(1)\Psi_b(2) + \Psi_a(2)\Psi_b(1)] \quad (۳-۱)$$

$$\Psi_{anti}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_a(1)\Psi_b(2) - \Psi_a(2)\Psi_b(1)]$$

اما توابع موج الکترون تنها بخش مختصات فضایی ندارند و باید بخش اسپینی آن را نیز در نظر گرفت. با توجه به اینکه الکترون‌ها فرمیون‌اند و بایستی توابع موج کل آنها پادمتقارن باشد، توابع موج الکترونی باید به یکی از دو شکل زیر باشد:

$$\Phi_{sym}(1,2)\chi_{Anti}(1,2) \quad \text{و} \quad \Phi_{Anti}(1,2)\chi_{Sym}(1,2) \quad (۴-۱)$$

فرض می‌کنیم که بین دو دستگاه الکترونی برهم‌کنش وجود دارد، که با هامیلتونی H_{12} نشان داده می‌شوند. برای مثال مولکول هیدروژن را با دو هسته‌ی a و b و دو الکترون ۱ و ۲ در نظر می‌گیریم:

$$H_{12} = \frac{e^2}{r_{ab}} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{1a}} \quad (۵-۱)$$

که در آن I_{ab} فاصله دو هسته و I_{12} فاصله الکترون‌ها از یکدیگرند، I_{2a} و I_{1b} نیز فاصله‌ی هر کدام از الکترون‌های ۱ و ۲ از هسته‌ی دیگر است. برای هر کدام از توابع موج (I) و (II) با توجه به $E = \int \Psi^* H_{12} \Psi d\tau$ انرژی‌های مربوط، به صورت زیر به دست می‌آید:

$$E_I = A^2(K_{12} + J_{12}) \quad \text{و} \quad E_{II} = B^2(K_{12} - J_{12}) \quad (6-1)$$

که در آن K_{12} و J_{12} به صورت زیر است:

$$K_{12} = \int \Phi_a^*(1)\Phi_b^*(2)H_{12}\Phi_a(1)\Phi_b(2)d\tau_1d\tau_2 \quad (7-1)$$

$$J_{12} = \int \Phi_a^*(2)\Phi_b^*(1)H_{12}\Phi_a(2)\Phi_b(1)d\tau_1d\tau_2$$

K_{12} انرژی برهم‌کنش میانگین کولنی است، در حالیکه J_{12} به عنوان انتگرال تبادل شناخته می‌شود و نتیجه‌ی مستقیمی از تمیزناپذیری الکترون‌هاست.

حال دو حالت دستگاه دو الکترونی را (معادله‌ی ۶-۱) بر اساس اسپین الکترون‌ها بسط می‌دهیم. E_{II} و E_I انرژی مربوط به حالت‌های متقارن و پادمقارن هستند. بنابراین تقارن مداری و سمت گیری اسپینی هم بسته‌اند و دو الکترون می‌توانند بر اساس اسپین‌هایشان جفت شده در نظر گرفته شوند. این جفت شدگی باید متناسب با ویژه مقادیر ضرب نرده‌ای \vec{s}_1, \vec{s}_2 باشد.

سرانجام انرژی‌های E_{II} و E_I را می‌توان به شکل عملگری زیر نوشت:

$$E = K - \frac{1}{2}J_{12} - 2J_{12}\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \quad (8-1)$$

اگرچه این معادله وجود یک جفت شدگی مستقیم بین اسپین‌ها را نشان می‌دهد، اما مهم است که به‌خاطر داشته باشیم که این انرژی برهم‌کنشی در واقع سرچشمه‌ی الکترواستاتیکی دارد.

در توضیح مغناطش خودبه‌خودی مواد، همیشه جمله آخر در معادله بالا (۸-۱) با اهمیت است و این جمله را هامیلتونی تبدالی دو الکترون می‌نامند. برای دو اتم i و j که هر کدام یک الکترون دارند، هامیلتونی تبدالی به صورت زیر است:

$$H = -2J_{ij}\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (9-1)$$

که J_{ij} انتگرال تبادل دو الکترون است و این برهم‌کنش به نام برهم‌کنش هایزنبرگ شناخته می‌شود.

از فرمول J_{12} دیده می‌شود که وقتی علامت انتگرال تبادل منفی است ($J < 0$)، انرژی تبادل طبق هامیلتونی بالا به شرطی منفی است که اسپین‌های S_i و S_j الکترون‌های شرکت کننده در پیوند تبادل، ناهمسو باشند، در این صورت انرژی E دستگاه کمتر از مجموع انرژی اتم‌های تک‌تک خواهد بود (معادله‌ی ۸-۱). این وضعیت به تشکیل پیوند شیمیایی بین اتم‌ها و به وجود آمدن مولکول‌ها منجر می‌شود. همچنین این امر شرط لازم برای پدیدارشدن پدیده‌ی پادفرومغناطیس را نیز نشان می‌دهد.

وقتی علامت انتگرال تبادل مثبت است ($J > 0$)، انرژی تبدالی در صورتی منفی خواهد بود و همچنین در صورتی انرژی E دستگاه کمتر از انرژی اتم‌ها به طور مجزا خواهد بود که اسپین‌های الکترون‌های شرکت کننده در پیوند تبادل همسو باشند. بنابراین اگر انتگرال تبادل اتم‌های همسایه از لحاظ انرژی مثبت باشند، برتری در این است که اسپین‌های اتم‌های مجاور به صورت همسو قرار گیرند. این امر شرط لازم نظم فرومغناطیس است، زیرا همسو شدن اسپین‌ها به همسو قرار گرفتن گشتاورهای مغناطیسی اتم‌های همسایه و در نتیجه پدید آمدن مغناطش ذاتی می‌شود که ویژگی اجسام فرومغناطیس است.

۲ اتم را در نظر می‌گیریم که هر کدام از آنها بیشتر از یک الکترون با یک اسپین جفت نشده دارند. پس برای هامیلتونی تبدالی داریم:

$$H = -2J_{ij} \sum_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - 2J_{ij} \sum_i \vec{s}_i \cdot \sum_j \vec{s}_j = -2J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (10-1)$$

که \vec{S}_i و \vec{S}_j اسپین‌های کل دو اتم‌اند.

حال با در نظر گرفتن یک جامد و تنها با در نظر گرفتن برهم‌کنش تبدالی برای نزدیک‌ترین همسایه‌ها با انتگرال تبدالی J_e ، هامیلتونی تبادل یک اتم داده شده‌ی \vec{A} به صورت زیر است:

$$H = -2J_e \sum_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (11-1)$$

در ادامه رابطه بین انتگرال تبادل J_e و ثابت میدان مولکولی وایس N_w را با کاربرد روابط بالا به دست می‌آوریم. اگر مغناطش ماده طبق فرض در راستای Z باشد ($M = Ng\mu_B \langle S_{zi} \rangle$)، هامیلتونی تبادل به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = -2n \frac{S_{zi} J_e M}{Ng\mu_B} \quad (12-1)$$

از سوی دیگر هامیلتونی بر اساس نظریه‌ی میدان وایس ($N_w M$) نیز به صورت زیر است:

$$H = -gS_{zi} \mu_B N_W M \quad (13-1)$$

با برابر قرار دادن این دو معادله رابطه‌ی موردنظر به صورت زیر به دست می‌آید:

$$N_W = \frac{2nJ_e}{Ng^2 \mu_B^2} \quad (14-1)$$

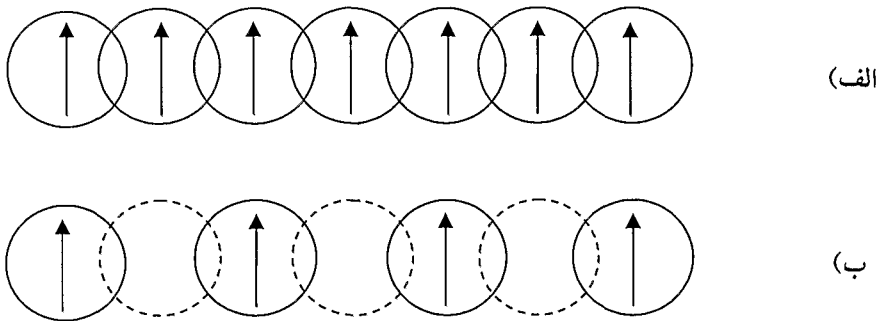
n تعداد نزدیک‌ترین همسایه‌ها، N تعداد اتم‌ها در واحد حجم و g عامل لاندائو است.

۳-۱) برهم‌کنش ابرتبادلی

انتظار داریم که میدان مولکولی در پادفرومغناطیس‌ها و فری مغناطیس‌ها نیز سرچشمه‌ی همانندی مانند آنچه در فرومغناطیس‌ها وجود دارد، که همان برهم‌کنش تبادلی کوانتوم مکانیکی است، داشته باشد. با به‌کارگیری نظریه‌ی هایزنبرگ، هامیلتونی تبادل با معادله‌ی زیر داده می‌شود:

$$H = -2J_e \sum_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (15-1)$$

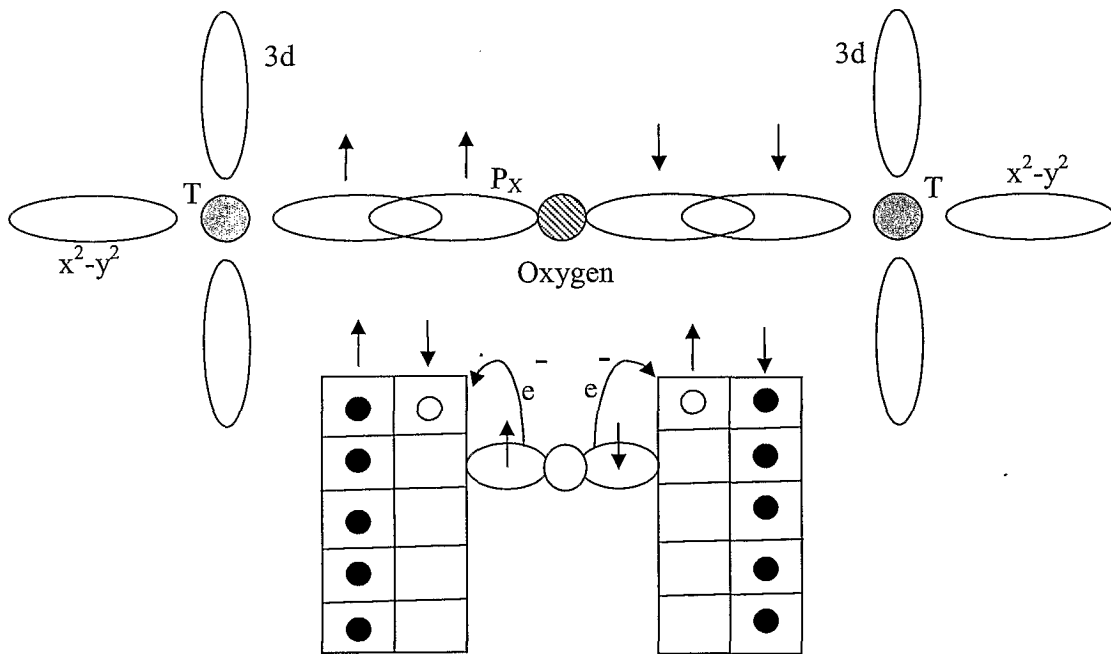
به‌جز اینکه در اینجا $J_e < 0$ است. در این دستگاه‌ها برهم‌کنش تبادلی به کمک یک یون نامغناطیسی صورت می‌گیرد که به اصطلاح به آن برهم‌کنش ابرتبادلی گفته می‌شود (شکل ۱-۱).



شکل ۱-۱: الف) طرح‌واره‌ی برهم‌کنش تبادلی و ب) برهم‌کنش ابرتبادلی که به کمک یک یون نامغناطیسی انجام می‌گیرد.

برای مثال دو یون فلز واسطه (T) در شکل ۱-۲ با یک یون p (که در اینجا اکسیژن است)، از یکدیگر جدا شده‌اند. اوربیتال P که در حالت زمینه پر شده است، می‌تواند با هر یک از اوربیتال‌های 3d همسایه‌ی خود یک الکترون تبادل نماید. این نوع پیوند بیشتر یک پیوند یونی است، اما تعدادی جهش الکترونی مجاز نیز وجود دارد.

اوربیتال p_x دارای دو الکترون با اسپین مخالف است، در این پیوند به دلیل روی هم قرار گرفتن اوربیتال‌های فلز واسطه و اکسیژن امکان برانگیخته شدن الکترون‌های اکسیژن به تراز d یون فلز واسطه وجود دارد و در این گذار برهم کنش تبدلی تمایل دارد که اسپین الکترون گذار را در جهتی قرار دهد که یون فلزی، بیشترین گشتاور اسپینی را داشته باشد (قانون هوند). به همین دلیل و نیز اینکه الکترون‌های اوربیتال p باید اسپین‌های مخالف هم داشته باشند، هنگام ایجاد پیوند، دو یون فلز واسطه باید به صورتی که در شکل ۱-۲ نشان داده شده قرار گیرند. برهم کنش‌های ابرتبدلی بیشتر در اکسیدهای فلزهای واسطه و همچنین در ساختارهای اسپینی و گارنتی وجود دارند. در برهم کنش‌های ابرتبدلی هر چه زاویه $T-O-T$ بزرگ‌تر باشد، هم‌پوشانی بیشتر و برهم کنش قوی‌تر است.



شکل ۱-۲: طرح‌واره‌ی ساز و کار برهم کنش ابرتبدلی در پیوند بین دو یون فلز واسطه و اکسیژن

۴-۱) فریت‌های نرم

از دیدگاه ویژگی‌های مغناطیسی، مواد مغناطیسی به دو دسته نرم و سخت تقسیم می‌شوند [۲-۳]. مواد مغناطیسی نرم، موادی هستند که در غیاب یک میدان مغناطیسی کاربرتی، دارای هیچگونه مغناطش برآیندی نیستند و مساحت محصور شده توسط حلقه‌ی پسماند در این مواد ناچیز است. اتلاف پسماندی در این مواد ایجاد اتلاف انرژی گرمایی چشمگیری نمی‌کنند. به زبان دیگر اتلاف انرژی ناشی از سطح چرخه‌ی پسماند مغناطیسی در این