



Санкт-Петербургский государственный университет
Физический факультет
Кафедра ядерно-физических методов исследования



Сыромятников

Арсений Владиславович

*Физика магнетизма и
рассеяние поляризованных и
неполяризованных нейтронов*

Лекция 2. Парамагнетизм при $J \neq 0$. Влияние окружения магнитных ионов. Явление «замораживания» орбитального момента. Эффект Яна-Теллера. Адиабатическое размагничивание.

Парамагнетизм при $J \neq 0$. Квазиклассическое рассмотрение.

$$J = \infty$$

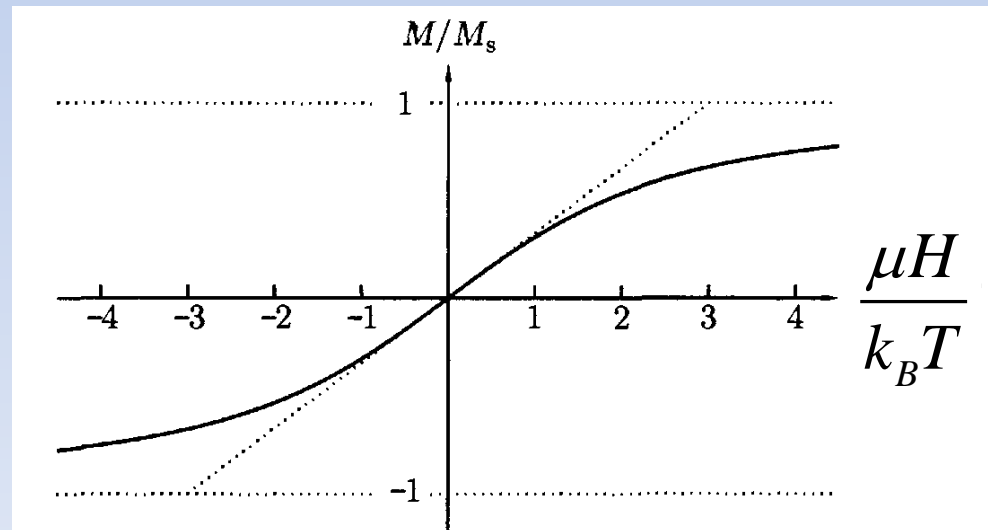
$$E_z = -\mu_z H$$

$$\langle \mu_z \rangle = \frac{\int_0^\pi \mu \cos \theta e^{\mu H \cos \theta / k_B T} \frac{1}{2} \sin \theta d\theta}{\int_0^\pi e^{\mu H \cos \theta / k_B T} \frac{1}{2} \sin \theta d\theta} = \mu \frac{\int_{-1}^1 x e^{yx} dx}{\int_{-1}^1 e^{yx} dx}$$

$$y = \frac{\mu H}{k_B T}$$

$$\frac{\langle \mu_z \rangle}{\mu} = \frac{M}{M_s} = L(y) = \coth y - \frac{1}{y}$$

$$\mu H \ll k_B T \quad \coth y - \frac{1}{y} \approx \frac{y}{3}$$



$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{n \mu^2}{3 k_B T}$$

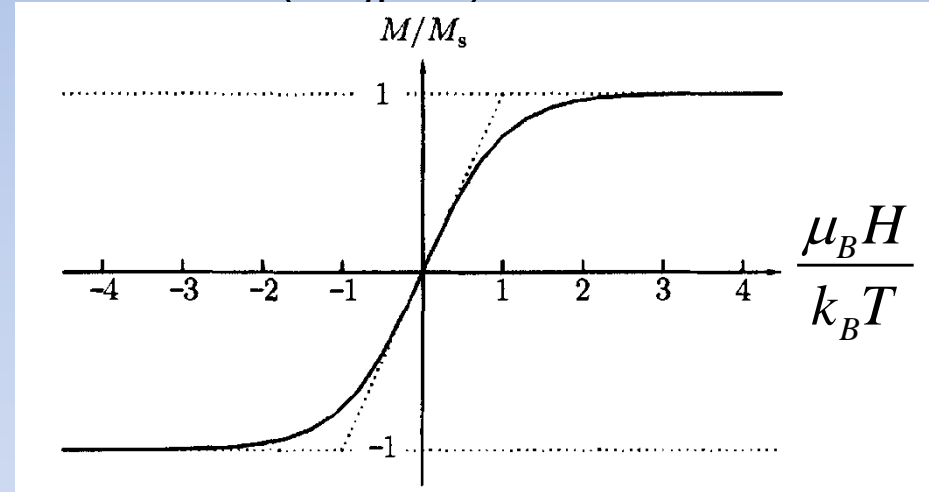
Закон Кюри

Парамагнетизм при $J \neq 0$. $J=1/2$.

$$J = \frac{1}{2} \quad m_J = \pm \frac{1}{2} \quad E_Z = -\mu_{JH} H = g_J \mu_B m_J H$$

$$\langle \mu_{JH} \rangle = \frac{\mu_B e^{\mu_B H / k_B T} - \mu_B e^{-\mu_B H / k_B T}}{e^{\mu_B H / k_B T} + e^{-\mu_B H / k_B T}} = \mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right)$$

$$\frac{M}{M_S} = \frac{\langle \mu_{JH} \rangle}{\mu_B} = \tanh\left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right)$$



$$\mu_B H \ll k_B T \quad \tanh\left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right) \approx \frac{\mu_B H}{k_B T}$$

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

$$Z = e^{\mu_B H / k_B T} + e^{-\mu_B H / k_B T} = 2 \cosh \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right)$$

$$F = -nk_B T \ln \left(2 \cosh \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right) \right)$$

$$M = - \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T = \mu_B \tanh \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right)$$

$$E = n \frac{-\mu_B H e^{\mu_B H / k_B T} + \mu_B H e^{-\mu_B H / k_B T}}{e^{\mu_B H / k_B T} + e^{-\mu_B H / k_B T}} = -n \mu_B H \tanh \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right)$$

$$C = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_H = nk_B \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right)^2 \cosh^{-2} \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right)$$

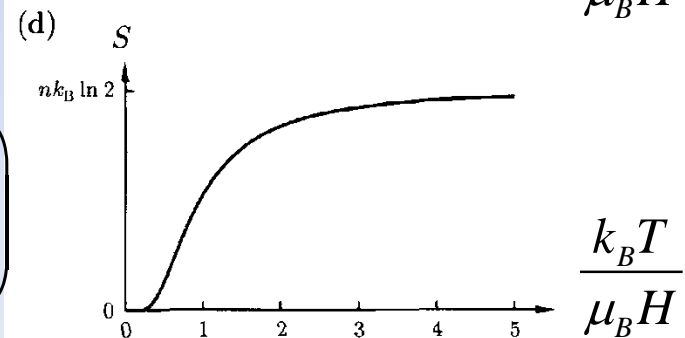
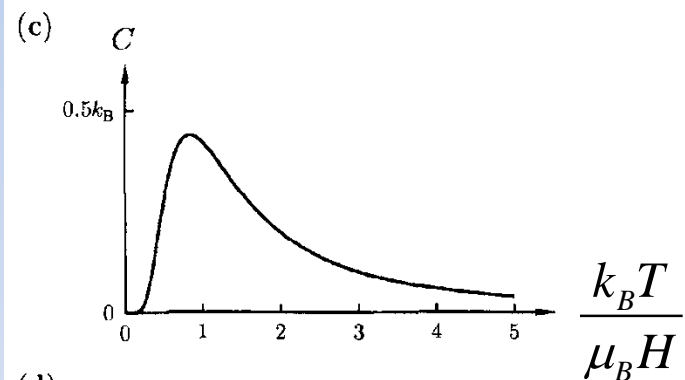
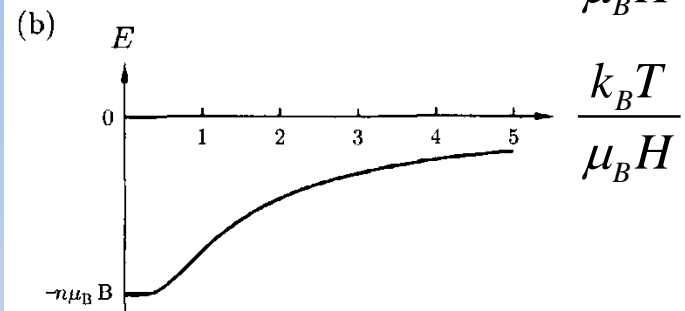
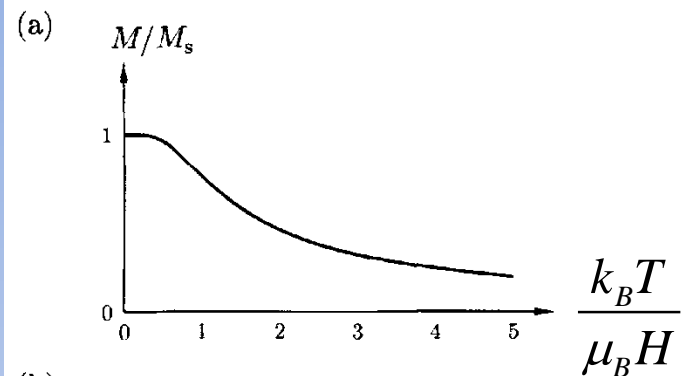
$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_H = -nk_B \left(\ln \left(2 \cosh \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right) \right) - \frac{\mu_B H}{k_B T} \tanh \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right) \right)$$

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

$$E = -n\mu_B H \tanh\left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right)$$

$$C = nk_B \left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right)^2 \cosh^{-2}\left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right)$$

$$S = -nk_B \left(\ln \left(2 \cosh \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right) \right) - \frac{\mu_B H}{k_B T} \tanh \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right) \right)$$



Парамагнетизм при $J \neq 0$. $\infty > J > 1/2$.

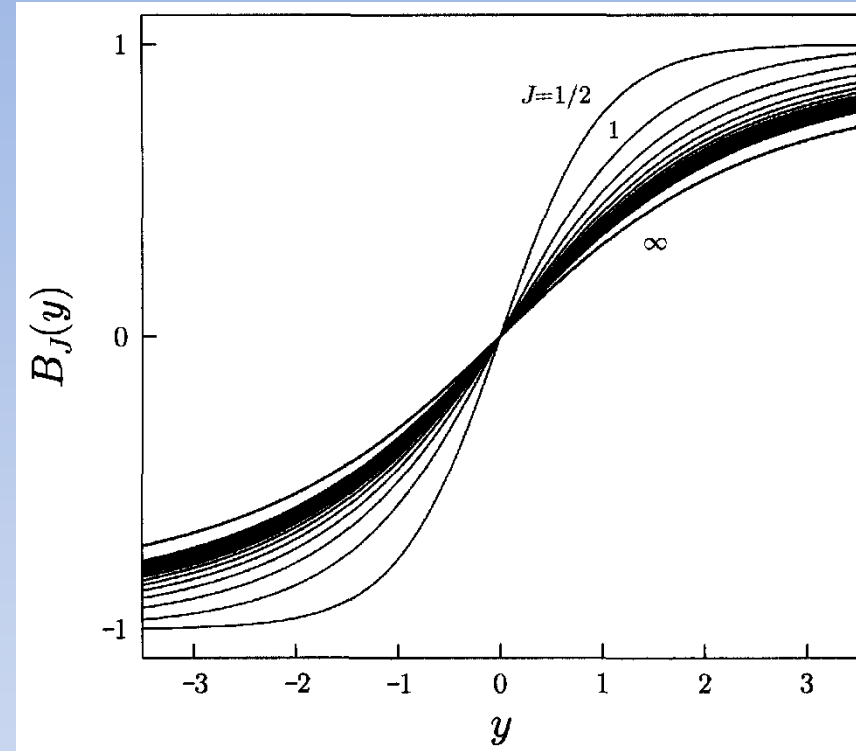
$$Z = \sum_{m_J=-J}^J e^{m_J y} = \frac{\sinh\left((2J+1)\frac{y}{2}\right)}{\sinh\left(\frac{y}{2}\right)}$$

$$\frac{\langle \mu_{JH} \rangle}{g_J \mu_B} = \frac{\sum_{m_J=-J}^J m_J e^{m_J g_J \mu_B H / k_B T}}{\sum_{m_J=-J}^J e^{m_J g_J \mu_B H / k_B T}} = J B_J(y)$$

$$y = \frac{g_J \mu_B J H}{k_B T}$$

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

$$y \ll 1 \quad B_J(y) \approx \frac{J+1}{3J} y$$



$$\begin{aligned} B_\infty(y) &= L(y) \\ B_{1/2}(y) &= \tanh(y) \end{aligned}$$

$$\chi = \frac{n g_J^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3k_B T}$$

Парамагнетизм солей редкоземельных элементов $\text{La}^{3+} - \text{Lu}^{3+}$

Z	Элемент	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s	Терм основного состояния
57	La	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6	1		2				${}^2D_{3/2}$
58	Ce	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2	6			2				3H_4
59	Pr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	3	2	6			2				${}^4I_{9/2}$
60	Nd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	4	2	6			2				5I_4
61	Pm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	5	2	6			2				${}^6H_{5/2}$
62	Sm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	6	2	6			2				7F_0
63	Eu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6			2				${}^8S_{7/2}$
64	Gd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6	1		2				9D_2
65	Tb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	8	2	6	1		2				${}^8H_{17/2}$
66	Dy	2	2	6	2	6	10	2	6	10	10	2	6			2				5I_8
67	Ho	2	2	6	2	6	10	2	6	10	11	2	6			2				${}^4I_{15/2}$
68	Er	2	2	6	2	6	10	2	6	10	12	2	6			2				3H_6
69	Tm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	13	2	6			2				${}^2F_{7/2}$
70	Yb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6			2				1S_0
71	Lu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	1		2				${}^2D_{3/2}$

Современная периодическая система элементов Д.И.Менделеева

Group 1 Группа 1	1a	2																
Период 1	1.00794 1 H 1s ¹ -259.14 -252.87 2.02/-																	
Hydrogen Водород																		
Hydrogenium																		
2	6.941 3 Li [He]2s ¹	9.012182 4 Be 2s ²																
Lithium Литий		Beryllium Бериллий																
3	22.989770 11 Na [Ne]3s ¹	24.3050 12 Mg 3s ²																
Sodium Натрий		Magnesium Магний																
(Natrium)																		
4	39.0983 19 K [Ar]4s ¹	40.078 20 Ca 4s ²	44.955910 21 Sc 3d ¹ 4s ²	47.867 22 Ti 3d ² 4s ²	50.9415 23 V 3d ³ 4s ²	51.9961 24 Cr 3d ⁵ 4s ¹	54.938046 25 Mn 3d ⁵ 4s ²	55.845 26 Fe 3d ⁶ 4s ²	58.933200 27 Co 3d ⁷ 4s ²	58.6934 28 Ni 3d ⁸ 4s ²	63.546 29 Cu 3d ¹⁰ 4s ¹	65.39 30 Zn 3d ¹⁰ 4s ²	69.723 31 Ga 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	72.61 32 Ge 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	74.92160 33 As 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	78.96 34 Se 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	79.904 35 Br 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	83.80 36 Kr 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶
Rubidium Рубидий		Strontium Стронций	Yttrium Иттрий	Zirconium Цирконий	Niobium Ниобий	Molybdenum Молибден	Technetium Технеций	Ruthenium Рутений	Rhodium Родий	Palladium Палладий	Silver Серебро	Cadmium Кадмий	Indium Индий	Tin Олово	Antimony Сурьма	Tellurium Теллур	Iodine Иод	Xenon Ксенон
(Caesium)		(Strontium)	(Yttrium)	(Zirconium)	(Niobium)	(Molybdenum)	(Technetium)	(Ruthenium)	(Rhodium)	(Palladium)	(Silver)	(Cadmium)	(Indium)	(Tin)	(Antimony)	(Tellurium)	(Iodine)	(Xenon)
5	85.4678 37 Rb [Kr]5s ¹	87.62 38 Sr 5s ²	88.90585 39 Y 4d ¹ 5s ²	90.9073 40 Zr 4d ² 5s ²	92.90638 41 Nb 4d ⁴ 5s ¹	95.94 42 Mo 4d ⁵ 5s ¹	(97) 43 Tc 4d ⁵ 5s ²	101.07 44 Ru 4d ⁷ 5s ¹	102.90550 45 Rh 4d ⁸ 5s ¹	106.42 46 Pd 4d ¹⁰	107.8682 47 Ag 4d ¹⁰ 5s ¹	112.411 48 Cd 4d ¹⁰ 5s ²	114.818 49 In 4d ¹⁰ 5s ² 5p ¹	118.710 50 Sn 4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	121.760 51 Sb 4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	127.60 52 Te 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	126.90447 53 I 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	131.29 54 Xe 4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶
Rubidium Рубидий		Strontium Стронций	Yttrium Иттрий	Zirconium Цирконий	Niobium Ниобий	Molybdenum Молибден	Technetium Технеций	Ruthenium Рутений	Rhodium Родий	Palladium Палладий	Silver Серебро	Cadmium Кадмий	Indium Индий	Tin Олово	Antimony Сурьма	Tellurium Теллур	Iodine Иод	Xenon Ксенон
(Caesium)		(Strontium)	(Yttrium)	(Zirconium)	(Niobium)	(Molybdenum)	(Technetium)	(Ruthenium)	(Rhodium)	(Palladium)	(Silver)	(Cadmium)	(Indium)	(Tin)	(Antimony)	(Tellurium)	(Iodine)	(Xenon)
6	132.90545 55 Cs [Xe]6s ¹	137.327 56 Ba 6s ²	138.9055 57 La 5d ¹ 6s ²	178.46 72 Hf 4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	180.9479 73 Ta 4f ¹⁴ 5d ³ 6s ²	183.84 74 W 4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ²	186.207 75 Re 4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ²	190.23 76 Os 4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ²	192.217 77 Ir 4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²	195.078 78 Pt 4f ¹⁴ 5d ⁹ 6s ¹	196.96655 79 Au 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ¹	200.59 80 Hg 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ²	204.3833 81 Tl 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ¹	207.2 82 Pb 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ²	208.98038 83 Bi 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ³	(210) 84 Po 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁴	(210) 85 At 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁵	(222) 86 Rn 4f ¹⁴ 5d ¹⁰ 6s ² 6p ⁶
Caesium Цезий		Barium Барий	Lanthanum Лантан	Hafnium Гафний	Tantalum Тантал	Wolfram Вольфрам	Rhenium Рений	Osmium Осмий	Iridium Иридий	Platinum Платина	Gold Золото	Mercury Ртуть	Thallium Таллий	Lead Свинец	Bismuth Висмут	Polonium Полоний	Astatine Астат	Radon Радон
(Caesium)		(Barium)	(Lanthanum)	(Hafnium)	(Tantalum)	(Wolfram)	(Rhenium)	(Osmium)	(Iridium)	(Platinum)	(Gold)	(Mercury)	(Thallium)	(Lead)	(Bismuth)	(Polonium)	(Astatine)	(Radon)
7	(223) 87 Fr [Rn]7s ¹	(226) 88 Ra 7s ²	(227) 89 Ac 6d ¹ 7s ²	(261) 104 Rf 5f ¹⁴ 6d ² 7s ²	(262) 105 Db 5f ¹⁴ 6d ³ 7s ²	(263) 106 Sg 5f ¹⁴ 6d ⁴ 7s ²	(264) 107 Bh 5f ¹⁴ 6d ⁵ 7s ²	(265) 108 Hs 5f ¹⁴ 6d ⁶ 7s ²	(268) 109 Mt 5f ¹⁴ 6d ⁷ 7s ²	(269) 110 Uun 5f ¹⁴ 6d ⁸ 7s ²	() 111 Uuu 5f ¹⁴ 6d ⁹ 7s ²	() 112 Uub 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ²	() 113 Unt 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ¹	() 114 Uuq 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ²	() 115 Uup 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ³	() 116 Uuq 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ⁴	() 117 Uuh 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ⁵	() 118 Uuo 5f ¹⁴ 6d ¹⁰ 7s ² 7p ⁶
Franium Франций		Radium Радий	Actinium Актиний	Rutherfordium Рутерфордий	Dubnium Дубний	Seaborgium Сиборгий	Bohrium Борий	Hassium Хассий	Melnerium Мейтнерий	Ununnilium Унуннилий	Ununnilium Унуннилий	Ununnilium Унуннилий	Ununnilium Унуннилий	Ununnilium Унуннилий	Ununnilium Унуннилий	Ununnilium Унуннилий	Ununnilium Унуннилий	Ununnilium Унуннилий
(Francium)		(Radium)	(Actinium)	(Rutherfordium)	(Dubnium)	(Seaborgium)	(Bohrium)	(Hassium)	(Melnerium)	(Ununnilium)	(Ununnilium)	(Ununnilium)	(Ununnilium)	(Ununnilium)	(Ununnilium)	(Ununnilium)	(Ununnilium)	(Ununnilium)

Атомная масса, относительная
Атомный номер. Обозначение
Распределение электронов
Температура плавления (°C)
Температура кипения (°C)
Электроотрицательность
(по Полингу/по Аллреду и Рохову)
Название
Латинское название

186.207
75 Re
[Xe] 4f¹⁴5d⁵6s²
3180
5627
1.9/1.46
Rhenium
Рений
Rhenium

Atomic mass, relative
Atomic No. Symbol
Electron configuration
Melting point (°C)
Boiling point (°C)
Electronegativity
(Pauling/Allred & Rochov)
Name
Latin name

* Element has no stable nuclides. For radioactive elements the value in parentheses refers to the number of nucleons (mass number) of the most stable isotope (IUPAC, 1995)
* Элемент не имеет устойчивых изотопов. Для него в скобках приведено значение массового числа (число нуклонов в ядре) наиболее долгоживущего изотопа (ИЮПАК, 1995).
[] Alternative english name
[] American spelling of the element's name
[] Альтернативное английское название
[] Американское написание названия элемента

140.116 58 Ce 4f ⁶ 6s ²	140.90765 59 Pr 4f ⁶ 6s ²	144.24 60 Nd 4f ⁶ 6s ²	(145) 61 Pm 4f ⁶ 6s ²	150.36 62 Sm 4f ⁶ 6s ²	151.964 63 Eu 4f ⁷ 6s ²	157.25 64 Gd 4f ⁷ 6s ²	158.92534 65 Tb 4f ⁷ 6s ²	162.50 66 Dy 4f ⁷ 6s ²	164.93032 67 Ho 4f ⁷ 6s ²	167.26 68 Er 4f ⁷ 6s ²	168.93421 69 Tm 4f ⁷ 6s ²	173.04 70 Yb 4f ⁷ 6s ²	174.967 71 Lu 4f ⁷ 6s ²
Cerium Церий	Praseodymium Празеодим	Neodymium Неодим	Promethium Прометий	Samarium Самарий	Europium Европий	Gadolinium Гадолиний	Terbium Тербий	Dysprosium Диспрозий	Holmium Гольмий	Erbium Эрбий	Thulium Тулий	Ytterbium Иттербий	Lutetium Лютеций
(232) 90 Th 6d ² 7s ²	(231) 91 Pa 5f ⁶ 6d ¹ 7s ²	(238) 92 U 5f ⁶ 6d ¹ 7s ²	(239) 93 Np 5f ⁶ 6d ² 7s ²	(239) 94 Pu 5f ⁷ 7s ²	(243) 95 Am 5f ⁷ 7s ²	(247) 96 Cm 5f ⁶ 6d ² 7s ²	(247) 97 Bk 5f ⁷ 7s ²	(252) 98 Cf 5f ⁷ 7s ²	(251) 99 Es 5f ⁷ 7s ²	(257) 100 Fm 5f ⁷ 7s ²	(258) 101 Md 5f ⁷ 7s ²	(259) 102 No 5f ⁷ 7s ²	(260) 103 Lr 5f ⁶ 6d ¹ 7s ²
Thorium Торий	Protactinium Протактиний	Uranium Уран	Neptunium Нептуний	Plutonium Плутоний	Americium Америций	Curium Кюриум	Berkelium Берклиум	Californium Калифорний	Einsteinium Эйнштейний	Fermium Фермий	Mendelevium Менделевий	Nobelium Нобелиум	Lawrencium Лоуренсий

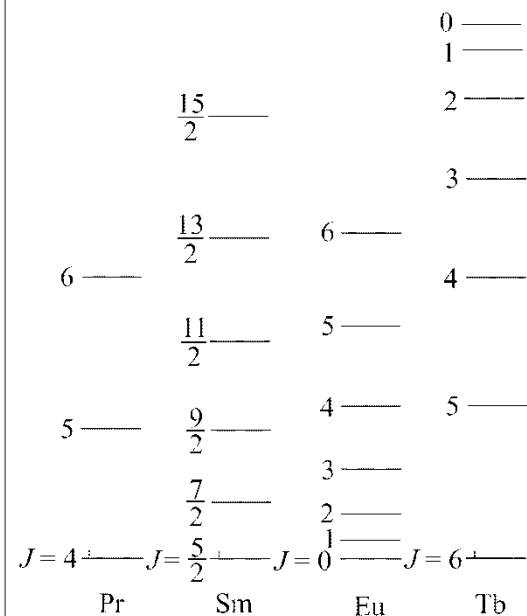
Mar. 2004

P.S. Сайфуллин,
A.P. Сайфуллин, 2004
© R.S. Сайфуллин,
A.R. Saifullin, 2004

18
0
4.002602
2 He
1s ² -272.2 -268.93
12.3 eV
Helium Гелий
20.1797
10 Ne
2s ² 2p ⁶ -248.7 -246.05
10.6 eV
Neon Неон
39.948
18 Ar
3s ² 3p ⁴ -189.2 -185.7
7.7 eV
Argon Аргон

Парамагнетизм солей редкоземельных элементов $Ce^{3+} - Lu^{3+}$

Ион	Число $4f$ -электронов	Терм основного состояния	S	L	J	g	$\mu_{ат}$ $T = 0$	$\mu_{ат}$ 300 К	$\mu_{ат}$ ЭКСП.
La^{3+}	0	1S_0	0	0	0	—	0	0	0
Ce^{3+}	1	$^2F_{5/2}$	1/2	3	5/2	6/7	2,54	2,56	2,4
Pr^{3+}	2	3H_4	1	5	4	4/5	3,58	3,62	3,5
Nd^{3+}	3	$^4J_{9/2}$	3/2	6	9/2	8,11	3,62	3,68	3,5
Pm^{3+}	4	5J_4	2	6	4	3/5	2,68	2,83	—
Sm^{3+}	5	$^6H_{5/2}$	5/2	5	5/2	2/7	0,84	1,6	1,5
Eu^{3+}	6	7F_0	3	3	0	—	0	3,45	3,6
Gd^{3+}	7	$^8S_{7/2}$	7/2	0	7/2	2	7,94	7,94	8,0
Tb^{3+}	8	7F_6	3	3	6	3/2	9,72	9,7	9,5
Dy^{3+}	9	$^6H_{15/2}$	5/2	5	15/2	4/3	10,65	10,6	10,7
Ho^{3+}	10	5J_8	2	6	8	5/4	10,61	10,6	10,3
Er^{3+}	11	$^4J_{15/2}$	3/2	6	15/2	6/5	9,58	9,6	9,5
Tm^{3+}	12	3H_6	1	5	6	7/6	7,56	7,6	7,3
Yb^{3+}	13	$^7F_{7/2}$	1/2	3	7/2	8/7	4,54	4,5	4,5
Lu^{3+}	14	1S_0	0	0	0	—	0	0	0

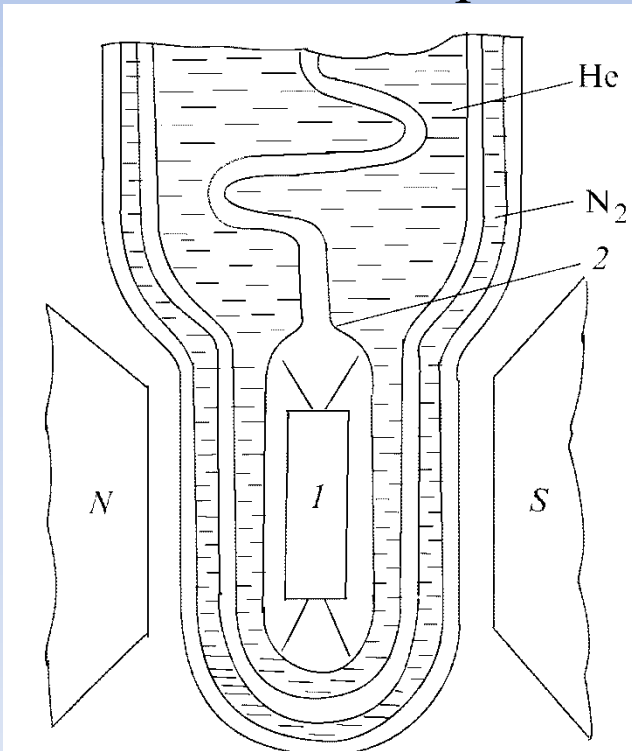


$$\mu_{ат}^{(T=0)} = g_J \sqrt{J(J+1)}$$

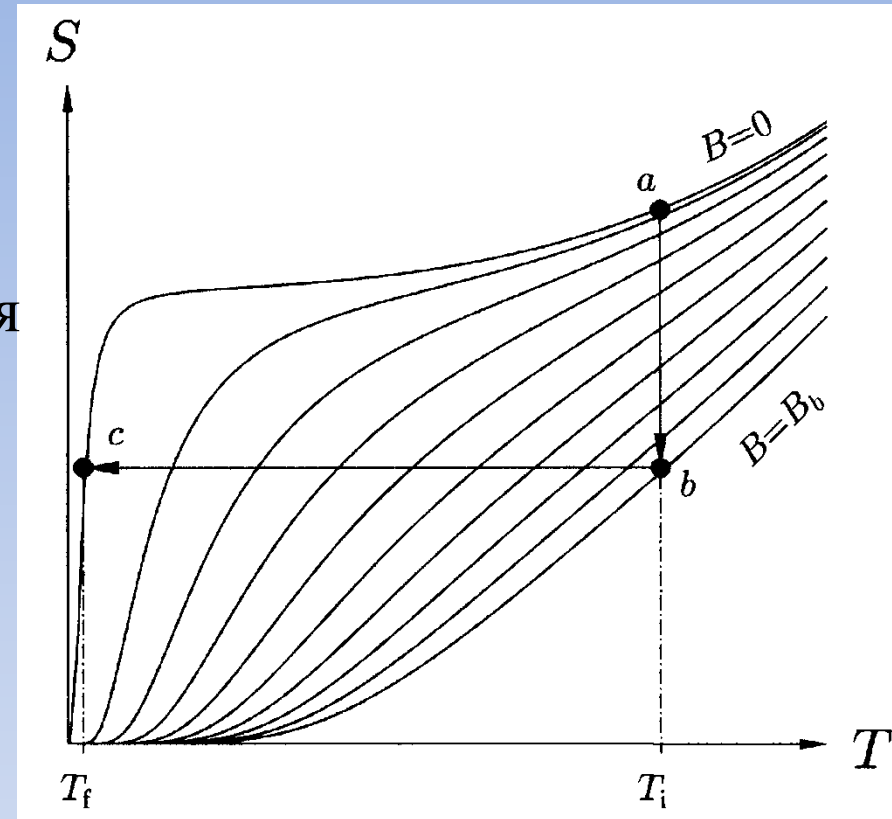
Адиабатическое размагничивание

$$dS = \frac{1}{T}(dE + pdV - HdM) = 0$$

до 3-4 К за счет расширения
 до 1 мК за счет ад. размагничивания
 до 0.01 мК за счет размаг-я ядер



$$(S_{\text{фононы}} + S_{\text{спин}})_{b \rightarrow c} = \text{const}$$



$$S_{\text{спин}} = -Nk_B \sum_{m_J} p(m_J) \ln p(m_J)$$

$$p(m_J) = \frac{1}{Z} e^{m_J g_J \mu_B H / k_B T}$$

$$S_{\text{спин}} = \begin{cases} 0, & g_J \mu_B H \gg k_B T \\ Nk_B \ln(2J + 1), & g_J \mu_B H \ll k_B T \end{cases}$$

Магнитное рассеяние нейтронов в парамагнетике

$$\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f} = \frac{(\gamma r_0)^2}{2\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} |F(\mathbf{Q})|^2 N \sum_{\chi\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^\eta \hat{Q}^\chi \right) \sum_l e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_l} \times \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{u}_0(0)} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{u}_l(t)} \right\rangle \left\langle S_0^\chi(0) S_l^\eta(t) \right\rangle e^{-i\omega t} dt$$

1. $H = 0$

$$\left\langle S_0^\chi(0) S_l^\eta(t) \right\rangle = \left\langle S_0^\chi S_l^\eta \right\rangle = \begin{cases} \left\langle S_0^\chi \right\rangle \left\langle S_l^\eta \right\rangle = 0, & l \neq 0 \\ \left\langle S_0^\chi S_0^\eta \right\rangle = \delta_{\chi\eta} \left\langle \left(S_0^\chi \right)^2 \right\rangle = \delta_{\chi\eta} \frac{1}{3} \left\langle \mathbf{S}^2 \right\rangle \end{cases}$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f} \right)_{el} = (\gamma r_0)^2 |F(\mathbf{Q})|^2 e^{-2W} N \frac{2S(S+1)}{3}$$

Магнитное рассеяние нейтронов в парамагнетике

2. $H \neq 0$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f} \right)_{el} &= (\gamma r_0)^2 |F(\mathbf{Q})|^2 e^{-2W} N \\ &\times \left(\left(1 - (\hat{Q}^z)^2 \right) \langle S^z \rangle^2 \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta(\mathbf{Q} + \boldsymbol{\tau}) \right. \\ &+ (\hat{Q}^z)^2 \left(\frac{1}{2} S(S+1) - \frac{3}{2} \langle (S^z)^2 \rangle + \langle S^z \rangle^2 \right) \\ &\left. + \left(\frac{1}{2} S(S+1) + \frac{1}{2} \langle (S^z)^2 \rangle - \langle S^z \rangle^2 \right) \right) \end{aligned}$$

Магнитные свойства ионов переходных элементов

- Группа железа – от Sc (Z=21) до Ni (Z=28) (заполняется 3d-оболочка)
- Группа палладия– от Y (Z=39) до Pd (Z=46) (заполняется 4d-оболочка)
- Группа платины– от Lu (Z=71) до Pt (Z=78) (заполняется 5d-оболочка)
- Группа актинидов– от Ra (Z=88) до Md (Z=101) (заполняются 6d- и 5f-оболочки)

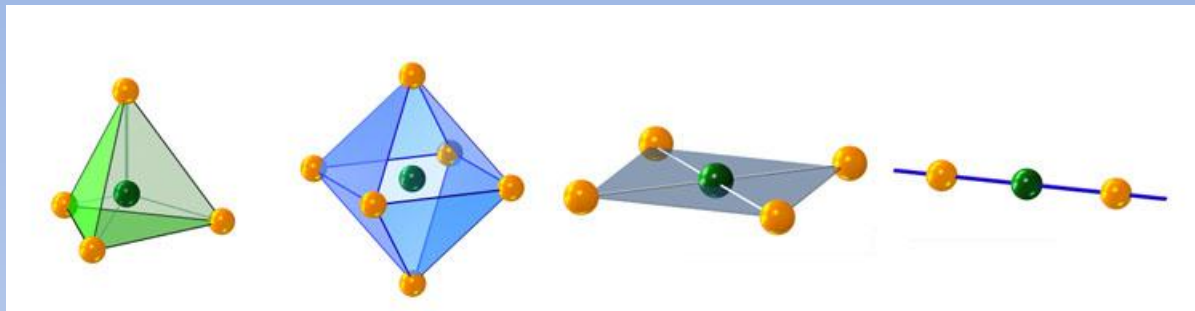
Эффект
«замораживания»
орбитального
момента

$$\mu_1 = g_J \sqrt{J(J+1)}$$

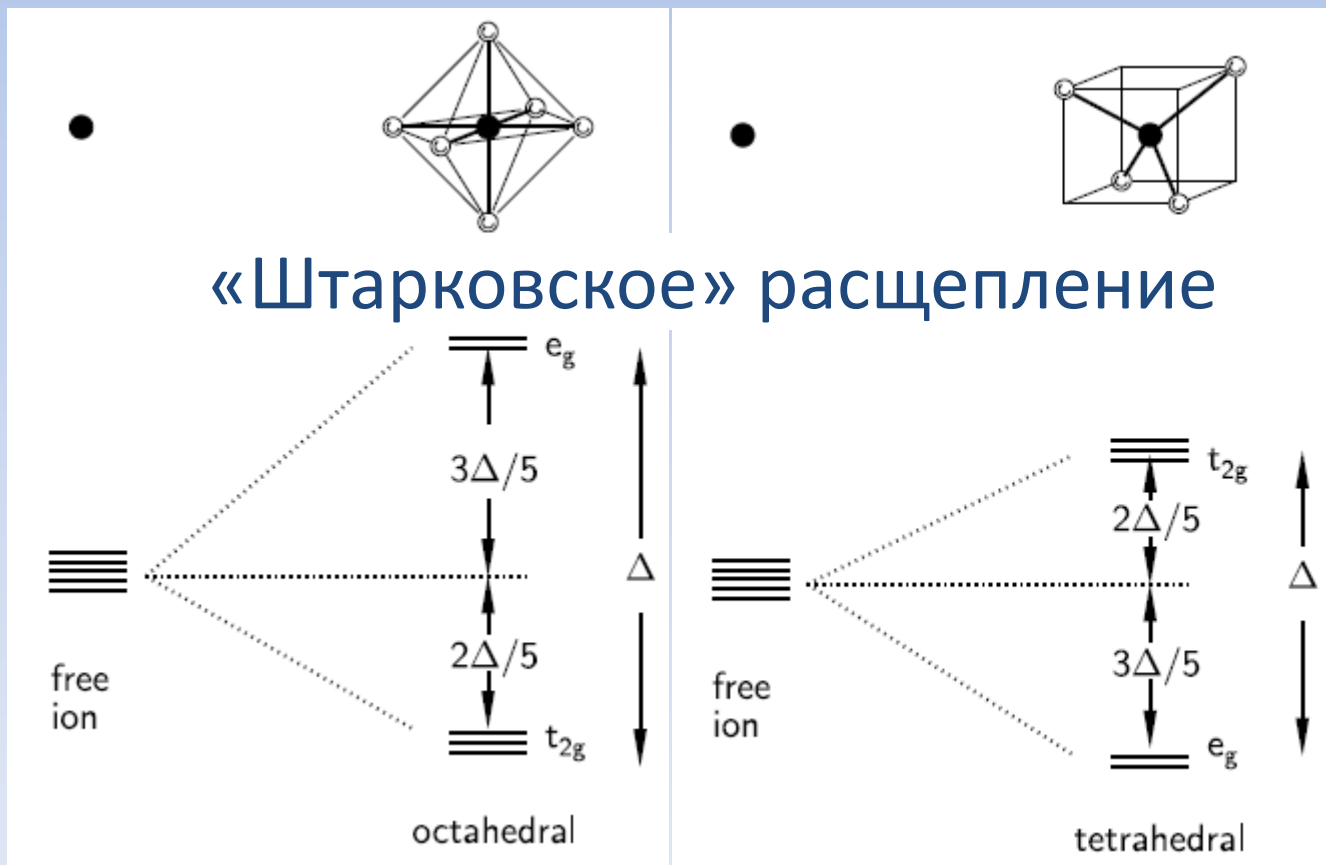
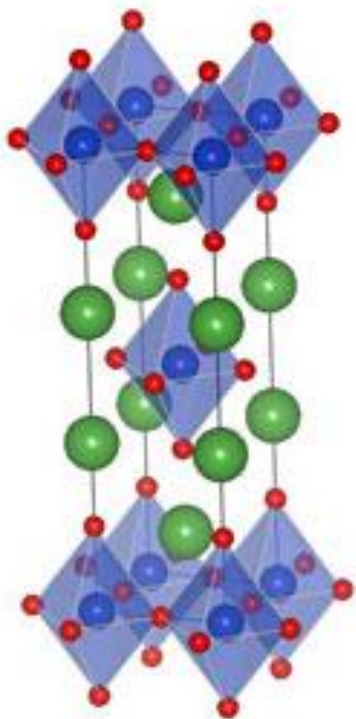
$$\mu_2 = 2\sqrt{S(S+1)}$$

ion	shell	S	L	J	term	μ_1	μ_{exp}	μ_2
Ti ³⁺ , V ⁴⁺	3d ¹	$\frac{1}{2}$	2	$\frac{3}{2}$	² D _{3/2}	1.55	1.70	1.73
V ³⁺	3d ²	1	3	2	³ F ₂	1.63	2.61	2.83
Cr ³⁺ , V ²⁺	3d ³	$\frac{3}{2}$	3	$\frac{3}{2}$	⁴ F _{3/2}	0.77	3.85	3.87
Mn ³⁺ , Cr ²⁺	3d ⁴	2	2	0	⁵ D ₀	0	4.82	4.90
Fe ³⁺ , Mn ²⁺	3d ⁵	$\frac{5}{2}$	0	$\frac{5}{2}$	⁶ S _{5/2}	5.92	5.82	5.92
Fe ²⁺	3d ⁶	2	2	4	⁵ D ₄	6.70	5.36	4.90
Co ²⁺	3d ⁷	$\frac{3}{2}$	3	$\frac{9}{2}$	⁴ F _{9/2}	6.63	4.90	3.87
Ni ²⁺	3d ⁸	1	3	4	³ F ₄	5.59	3.12	2.83
Cu ²⁺	3d ⁹	$\frac{1}{2}$	2	$\frac{5}{2}$	² D _{5/2}	3.55	1.83	1.73
Zn ²⁺	3d ¹⁰	0	0	0	¹ S ₀	0	0	0

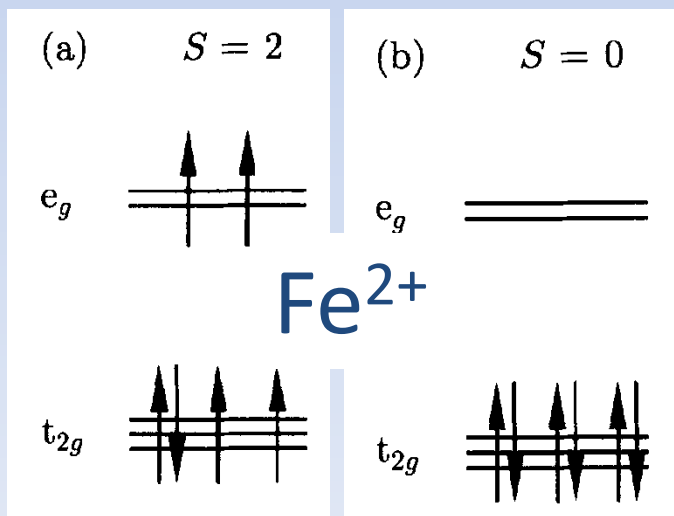
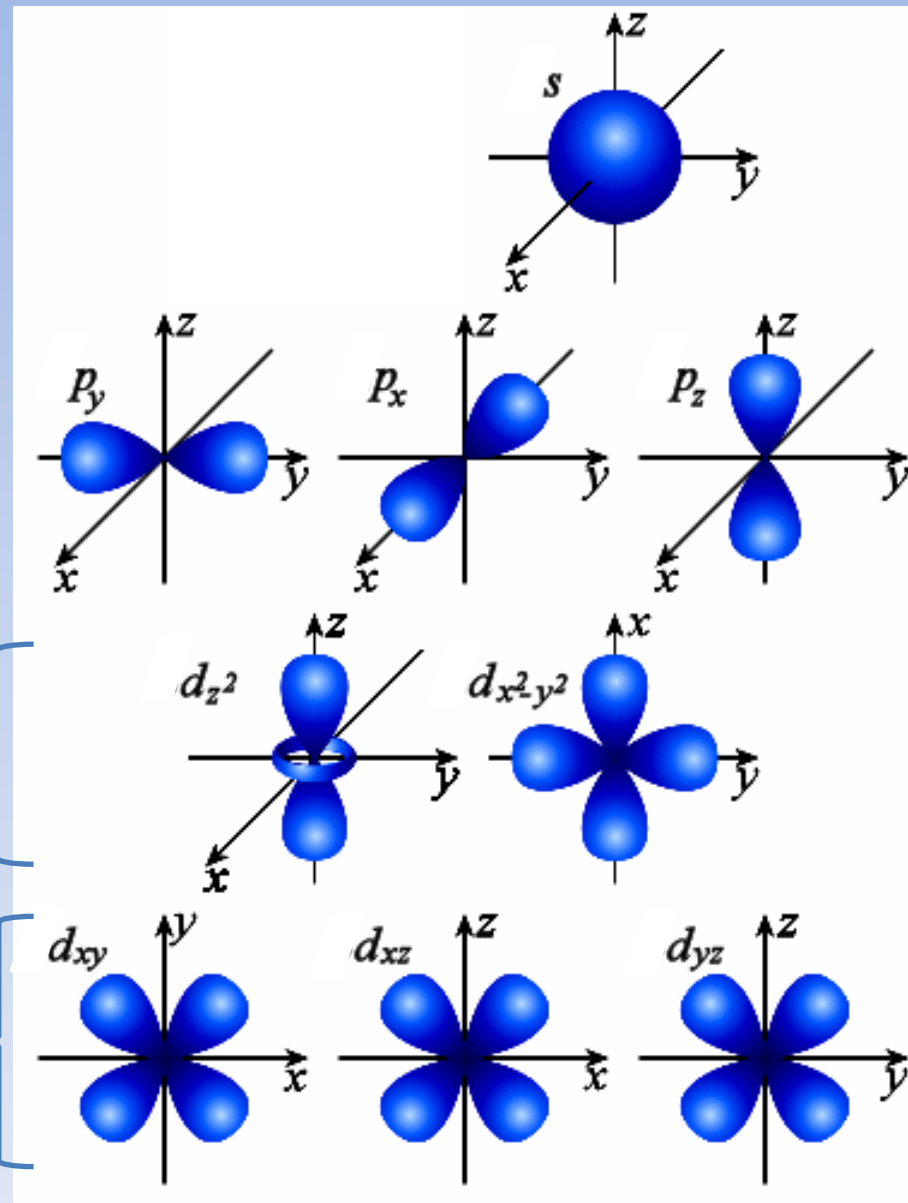
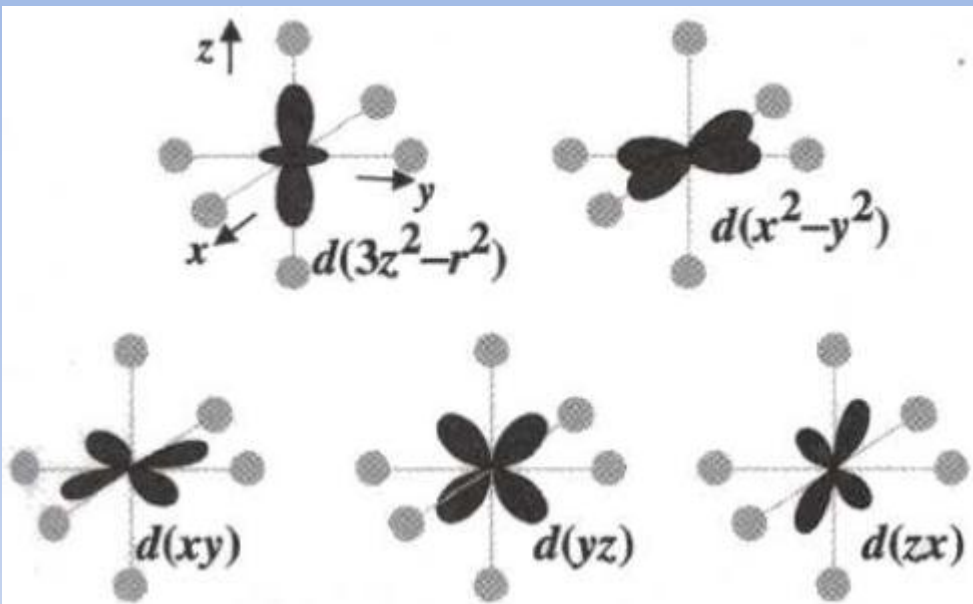
Влияние окружения магнитных ионов



Энергия вз-я с внутр. электростат. полем $\sim 10^{-2} - 10^{-4}$ К



Влияние окружения магнитных ионов



«Замораживание» орбитального момента (orbital quenching)

$$U = A(x^2 + y^2) - 2Az^2 \quad \Delta U = 0$$

$$\psi_0(\mathbf{r}) = (x^2 - y^2) f(r) = \frac{|2\rangle + |-2\rangle}{\sqrt{2}} \quad \langle \psi_0 | L_{x,y,z} | \psi_0 \rangle = 0$$

$$\psi_1(\mathbf{r}) = (3z^2 - r^2) f(r) = |0\rangle$$

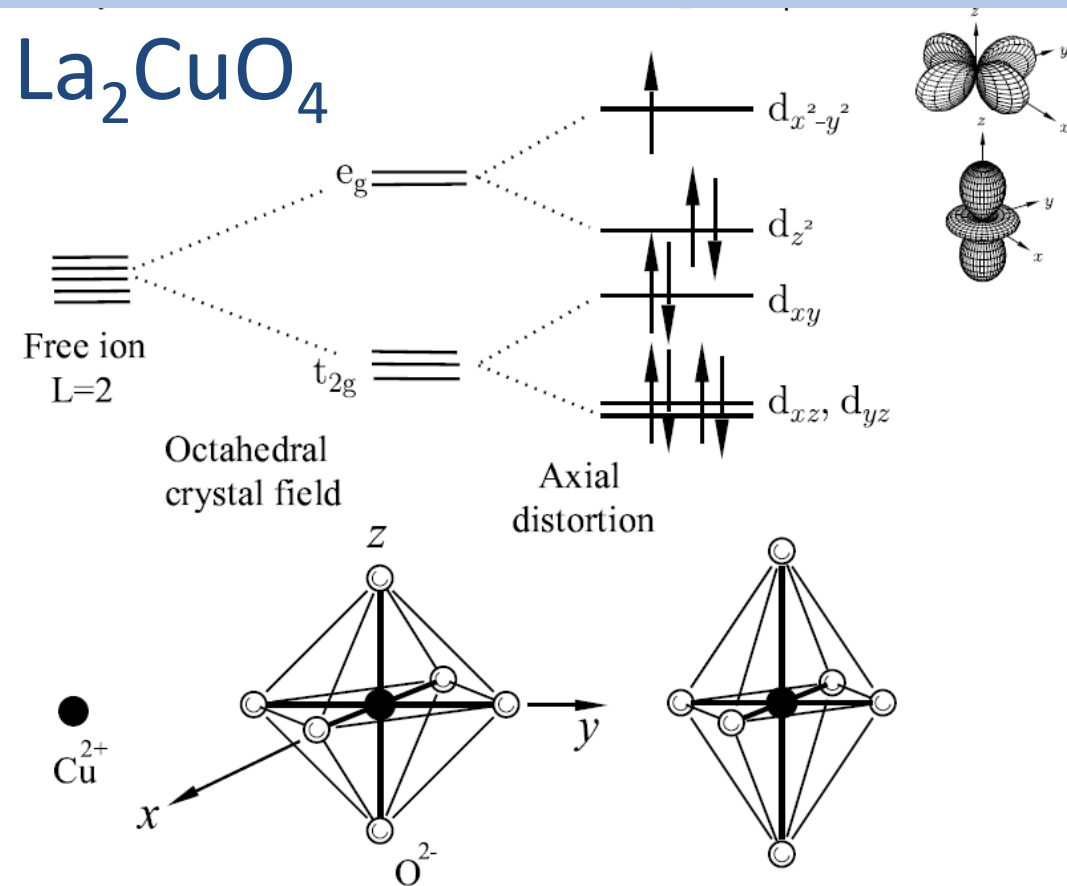
$$\psi_2(\mathbf{r}) = xyf(r) = \frac{|2\rangle - |-2\rangle}{\sqrt{2}i}$$

$$\psi_3(\mathbf{r}) = xzf(r) = \frac{|1\rangle + |-1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\psi_4(\mathbf{r}) = yzf(r) = \frac{|1\rangle - |-1\rangle}{\sqrt{2}i}$$

$$L_z |m\rangle = m |m\rangle$$

La₂CuO₄



Эффект Яна-Теллера (Jahn-Teller)

Статический

Пример: Mn^{3+} ($3d^4$,
есть вырождение)
но не Mn^{4+} ($3d^3$, нет
вырождения)

Динамический

(вибронные возбуждения в
молекулярных кристаллах)

