

# Modely Isingovho antiferomagnetu a spinového řadu na nanoklastri tvaru Dávidovej hviezdy



Marek Semjan

*Školiteľ: doc. RNDr. Milan Žukovič, PhD.*

*Katedra teoretickej fyziky a astrofyziky, Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ*



- ▶ Objav pyrochlórových oxidov  $A_2B_2O_7$ , napr.:  $Ho_2Ti_2O_7$  a  $Dy_2Ti_2O_7$
- ▶ Vysokofrustrovaný systém<sup>1</sup>
- ▶ Konečné systémy, ktoré sú modelom molekulárnych magnetov, sú málo preskúmané<sup>2</sup>

---

<sup>1</sup>ZHITOMIRSKY, M. E. (2003). *Enhanced magnetocaloric effect in frustrated magnets*. In Physical Review B, vol. 67, pp. 104421.

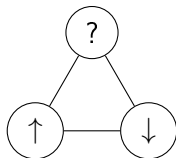
<sup>2</sup>VIITALA, E., MERIKOSKI, J., MANNINEN, M., TIMONEN, J. (1997). *Antiferromagnetic order and frustration in small clusters*. In Physical Review B, vol. 55, pp. 11541.

# Geometrická frustrácia a Magnetokalorický jav



*Geometrická frustrácia* - neschopnosť minimalizovať energiu vplyvom geometrického tvaru. Príklady: Isingov antiferomagnet, vodný ľad, spinový ľad (feromagnet)

*Magnetokalorický jav* (MCE) - zmena teploty vyvolaná aplikovaním vonkajšieho magnetického poľa. Charakterizuje ho  $\Delta S_{izo}$  a  $\Delta T_{ad}$

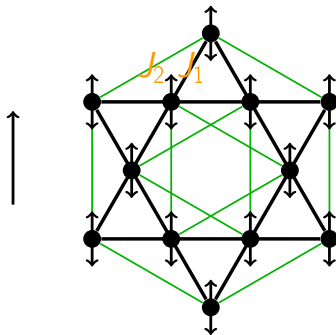


# Isingov antiferomagnet



Hamiltonián:

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1/2 \quad (1)$$



# Model spinového řádu

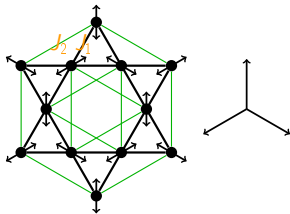


Hamiltonián:

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - h \sum_i \vec{e}_h \cdot \vec{s}_i \quad (2)$$

Vztah s modelom Isingovho antiferomagnetu:

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = \frac{J_1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j.$$



# Metóda exaktného výpočtu



**Základný stav ( $T=0$ ):**

$$\frac{S_{GS}}{N} = k_B \frac{\ln W(h)}{N}$$

$$m_{GS}(h) = \frac{1}{NW(h)} \sum_{W(h)} \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

**Konečné teploty ( $T>0$ ):**

$$\frac{S(h, T)}{N} = -\frac{T}{N} \ln Z_\beta(h, T)$$

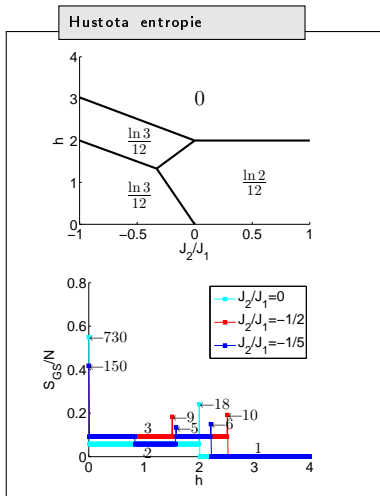
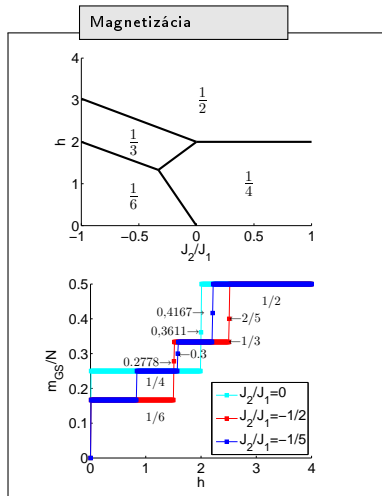
$$Z_\beta = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\vec{\sigma})}$$

$$\langle A \rangle_\beta = \frac{\sum_{\{\sigma\}} A(\vec{\sigma}) e^{-\beta \mathcal{H}(\vec{\sigma})}}{Z_\beta}$$

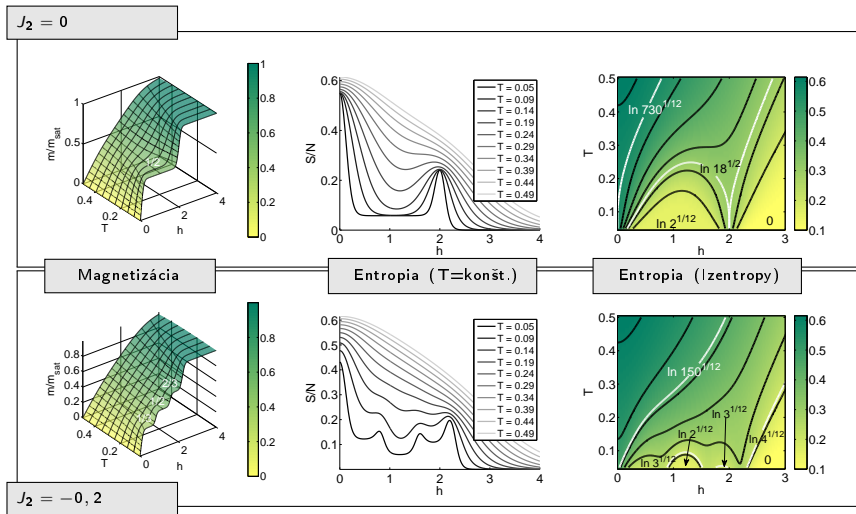
$$m = \langle M \rangle / N$$

$$\beta = 1/(k_B T) \text{ a } \vec{\sigma} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$$

# Isingov antiferomagnet - základný stav

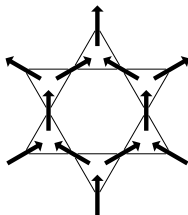
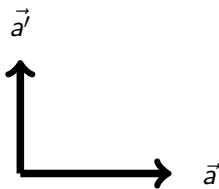


# Isingov antiferomagnet - konečné teploty

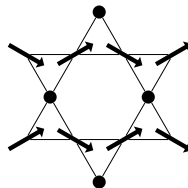




# Model spinového řadu

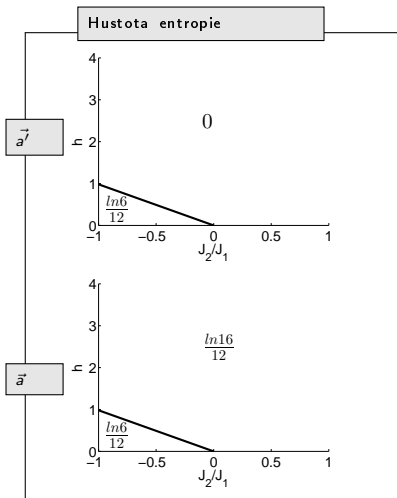
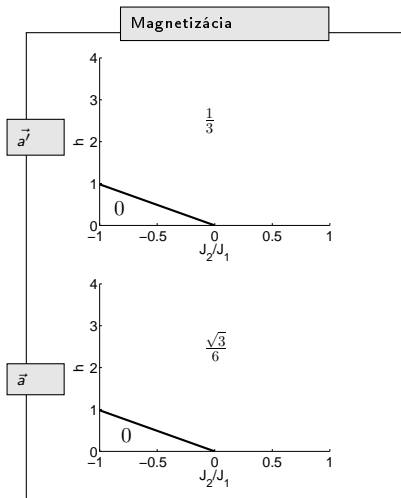


(a)  $\vec{a}'$   
 $m_{sat} = 1/3$

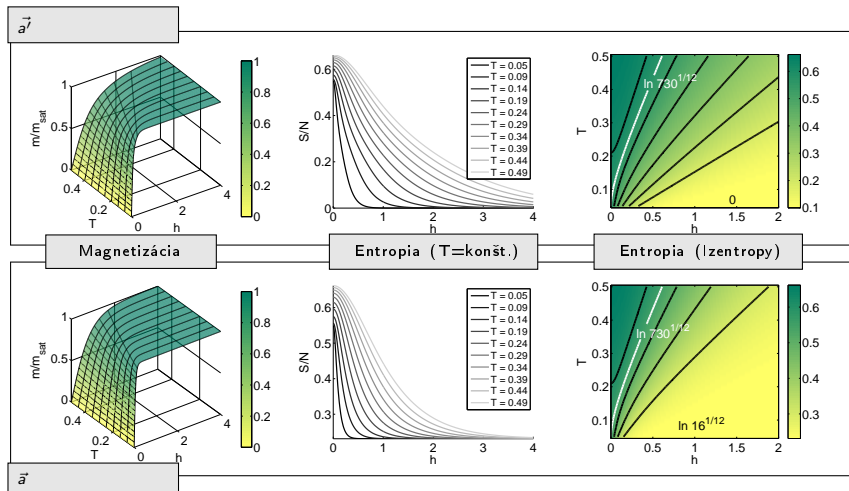


(b)  $\vec{a}'$   
 $m_{sat} = \sqrt{3}/6$

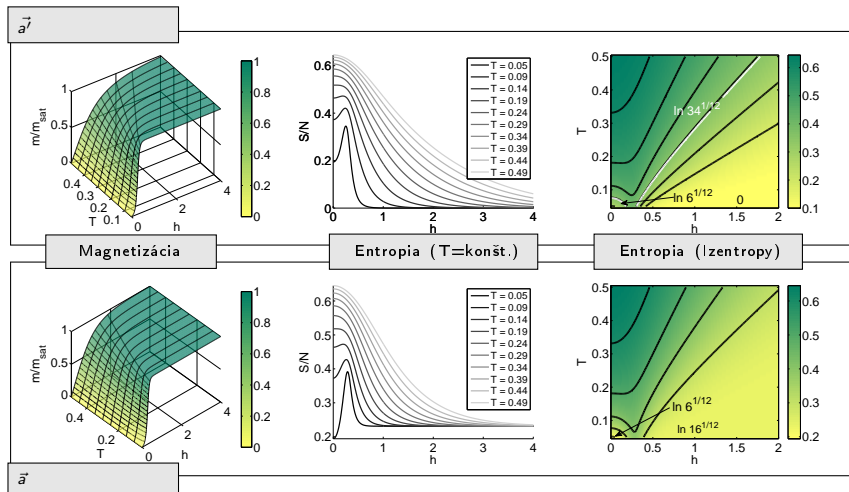
# Spinový ľad - základný stav



# Spinový ľad - konečné teploty - Pre $J_2 = 0$



# Spinový ľad - konečné teploty - Pre $J_2 = -0,5$



# Zhrnutie



- ▶ Malé  $J_2$  = Veľké zmeny v správaní
- ▶ Nemonotónne správanie entropie
- ▶ Veľké zmeny  $\Delta S_{izo}$  a  $\Delta T_{ad}$
- ▶ Priamy aj inverzný magnetokalorický jav
- ▶ Zvýšený MCE pre nízke polia

Ďakujem za pozornosť!