

*Univerza v Ljubljani  
Fakulteta za matematiko in fiziko  
Oddelek za fiziko  
Smer: naravoslovna fizika*

### **3. domača naloga iz Fizike trdne snovi**

*Barbara Horvat*

*27.05.2005*

# 1 Nihanja prednapete dvodimenzionalne mreže

Pri obravnavi nihanja prednapete dvodimenzionalne mreže v obliki čebeljega satovja (Slika1.1) sem potencial med atomi opisala z vzmetmi, ki povezujejo najbližje sosede.

## 1.1 Potencialna energija in enačbe gibanja za odmike pravokotno na ravnino

### 1.1.1 Potencialna energija

Energija ene vzmeti, ki povezuje dva sosednja atoma mreže:

$$W = \frac{1}{2}K(b-l)^2 = \frac{1}{2}K\left(d + \frac{1}{2}\frac{\Delta z^2}{d} - l\right)^2 = \frac{1}{2}K\left((d-l) + \frac{1}{2}\frac{\Delta z^2}{d}\right)^2 \sim \frac{1}{2}K\left((d-l)^2 + \frac{\Delta z^2}{d}(d-l)\right) = \frac{1}{2}K_{ef}\Delta z^2.$$

Tu je  $d = l + \Delta l$  dolžina prednapete vzmeti mreže,  $l$  dolžina neobremenjene vzmeti,  $\Delta z$  pravokotni odmik (glede na ravnino mreže),  $b = \sqrt{d^2 + \Delta z^2} \sim d + \frac{1}{2}\frac{(\Delta z)^2}{d}$ ,  $K$  je koeficient vzmeti,  $K_{ef} = K(1 - \frac{l}{d})$  efektivni koeficient vzmeti,  $(d-l)^2$  sem izpustila, ker je le konstanta in je vseeno kje začnemo šteti energijo.

Tako lahko zapišemo potencialno energijo (glej Sliko1.1):

Vsedemo se na  $(i^i, j^i)$ -to mesto in seštejemo vse tri vzmeti okoli le-tega atoma. To naredimo za vse  $(i^i, j^i)$ :

$$V = \sum_{i,j} \frac{1}{2}K_{ef}[(z_{i,j} - z_{i,j}^i)^2 + (z_{i-1,j+1} - z_{i,j}^i)^2 + (z_{i,j} - z_{i,j+1}^i)^2]$$

Kjer je  $z_{i^i, j^i} = z_{i,j}^i$ .

### 1.1.2 Enačbe gibanja

Kinetična energija vzmeti:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i,j} M(\dot{z}_{i,j}^2 + \dot{z}_{i,j}^{i2})$$

Kinetično ter potencialno energijo združim v Lagrangeov operator ( $L = T + V$ ) ter Iz Euler-Lagrangeovih enačb ( $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{z}_{i,j}} - \frac{\partial L}{\partial z_{i,j}} = 0$  ter  $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{z}_{i,j}^i} - \frac{\partial L}{\partial z_{i,j}^i} = 0$ ) dobim enačbe gibanja:

$$M\ddot{z}_{i,j} = K_{ef}(-3z_{i,j} + z_{i,j}^i + z_{i+1,j-1}^i + z_{i,j-1}^i) \quad (1)$$

$$M\ddot{z}_{i,j}^i = K_{ef}(-3z_{i,j}^i + z_{i,j} + (z_{i-1,j+1} + z_{i,j+1})) \quad (2)$$

## 1.2 Zvočna hitrost in disperzije frekvenc znotraj Brillouinove cone

### 1.2.1 Disperije frekvenc

Na Sliki1.1 so označeni vektorja Bravaisove mreže, razdalja med atomi ( $d$ ), baza:

Bazna vektorja:

$$\vec{r}_0 = 0$$

$$\vec{r}_1 = d(1, 0, 0)$$

Vektorji Bravaisove mreže:

$$\vec{a}_1 = d\sqrt{3}(0, 1, 0)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{d}{2}(3, \sqrt{3}, 0)$$

$$\vec{a}_3 = c(0, 0, 1)$$

Vektorji recipročne mreže (Slika1.2):

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}d}(\sqrt{3}, -3, 0)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{3d}(-1, 0, 0)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{c}(0, 0, -1)$$

Na Sliki1.2 je označena tudi Brillouinova cona (šestkotnik).

V enačbi gibanja (1) ter (2) vstavimo nastavka  $z_{i,j} = U_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}_{i,j})}$  ter  $z'_{i,j} = U'_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}'_{i,j})}$ :

$$\begin{aligned}\frac{\omega^2}{\omega_0^2} U_0 &= 3U_0 - U'_0 e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}'_{i,j} - \vec{r}_{i,j})} - U'_0 e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}'_{i+1,j-1} - \vec{r}_{i,j})} - U'_0 e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}'_{i,j-1} - \vec{r}_{i,j})} \\ \frac{\omega^2}{\omega_0^2} U'_0 &= 3U'_0 - U_0 e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_{i,j} - \vec{r}'_{i,j})} - U_0 e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_{i-1,j+1} - \vec{r}'_{i,j})} - U_0 e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_{i,j+1} - \vec{r}'_{i,j})}.\end{aligned}$$

Tu je  $\omega_0^2 = \frac{K_{ef}}{M}$ .

Zgornji enačbi lahko zapišemo tudi kot:

$$\left[ \begin{array}{c} \frac{\omega^2}{\omega_0^2} - 3 \\ e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}'_{i,j} - \vec{r}_{i,j})} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}'_{i+1,j-1} - \vec{r}_{i,j})} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}'_{i,j-1} - \vec{r}_{i,j})} \\ e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_{i,j} - \vec{r}'_{i,j})} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_{i-1,j+1} - \vec{r}'_{i,j})} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_{i,j+1} - \vec{r}'_{i,j})} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} U_0 \\ U'_0 \end{array} \right] = 0$$

Za netrivialno rešitev rečemo, da mora biti determinanta sistema enaka nič hkrati pa še upoštevamo, da je  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$  ter iz Slike1.1:

$$\begin{aligned}\vec{r}'_{i,j} - \vec{r}_{i,j} &= d(1, 0, 0) & \vec{r}_{i,j} - \vec{r}'_{i,j} &= -d(1, 0, 0) \\ \vec{r}'_{i+1,j-1} - \vec{r}_{i,j} &= \frac{d}{2}(-1, \sqrt{3}, 0) & \vec{r}_{i-1,j+1} - \vec{r}'_{i,j} &= \frac{d}{2}(1, -\sqrt{3}, 0) \\ \vec{r}'_{i,j-1} - \vec{r}_{i,j} &= -\frac{d}{2}(1, \sqrt{3}, 0) & \vec{r}_{i,j+1} - \vec{r}'_{i,j} &= \frac{d}{2}(1, \sqrt{3}, 0).\end{aligned}$$

Ko rešimo sistem, dobimo disperzije frekvenc:

$$\omega_{a,o} = \omega_0 \sqrt{3 \pm \sqrt{3 + 2(\cos(d(-\frac{3}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y)) + \cos(d(\frac{3}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y)) + \cos(d\sqrt{3}k_y))}}}. \quad (3)$$

Ta rezultat da dve frekvenčni veji: optično ter akustično. Akusična je tista, za katero velja, da ko  $k = 0$ , je  $\omega = 0$ ; v našem primeru je ta torej tista z minusom pred korenom.

Disperzije frekvenc so narisane na Sliku1.3 ter 1.4 (na  $z$  osi je  $\omega$ , na  $x$  ter  $y$  oseh pa  $k_x$  ter  $k_y$ ). Na Sliku1.3 so levi grafi izključno v notranjosti prve Brillouinove cone, desni pa še malo izven (periodičnost znotraj Brillouinove cone, ki se ponavlja tudi izven le-te), zgornja predstavljava optično vejo, spodnja pa akustično. Na Sliku1.4 pa sta obe veji prikazani skupaj.

### 1.2.2 Zvočna hitrost

Zvočno hitrost dobimo z uporabo dolgovalovne limite ( $k \rightarrow 0$ ) oz. da disperzijo frekvence akusične veje razvijemo za  $k_x \rightarrow 0$  ter  $k_y \rightarrow 0$  ( $\cos\{k_x, k_y\} \approx 1 + \frac{\{k_x^2, k_y^2\}}{2}$ ). Razvoj nam da:

$$\omega_a = \frac{\sqrt{3}}{2} d\omega_0 \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \frac{\sqrt{3}}{2} d\omega_0 k.$$

Zvočno hitrost pa je:

$$c_a = \frac{\omega}{k} = \frac{\sqrt{3}}{2} d\omega_0.$$

## 1.3 Gostota fononskih stanj v odvisnosti od frekvence ter nizkotemperaturna specifična toploplota

### 1.3.1 Gostota fononskih stanj

Skica gostote fononskih stanj je na Sliku1.5. Dobila sem jo numerično. Predvidevam pa, da bi morala gostota fonoskih stanj v sedlih divergirati in v maksimumu akustične oz. minimumu optične veje (ti dve točki sovpadata) popolnoma pasti na nič.

### 1.3.2 Nizkotemperaturna specifična toploplota

Specifično toploploto v 2D dobimo z:

$$c_V = \frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \frac{\hbar\omega_s(k_x, k_y)}{e^{\frac{\hbar\omega_s(k_x, k_y)}{k_B T}} - 1},$$

kjer se števamo po "normal modes" ( $s$ ) oz. v našem primeru le po akustičnih vejah oz. veji (optično zanemarimo). Disperzijsko relacijo za akustično vejo  $\omega_a$  zamenjamo z njegovo dolgovalovno limito ( $\omega_a = c_a(k_x, k_y)k$ ), integracijo po prvi Brillouinovi coni pa sem zamenjala z integracijo po celiem k-prostoru. Tako lahko zapišemo:

$$c_V = \frac{\partial}{\partial T} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \frac{\hbar c_a k}{e^{\frac{\hbar c_a k}{k_B T}} - 1} = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{k dk d\phi}{(2\pi)^2} \frac{\hbar c_a k}{e^{\frac{\hbar c_a k}{k_B T}} - 1} \right) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty k^2 c_a dk \frac{\hbar c_a k}{k_B T^2} \frac{e^{\frac{\hbar c_a k}{k_B T}} \frac{1}{T}}{(e^{\frac{\hbar c_a k}{k_B T}} - 1)^2} = \\ = \frac{k_B}{2\pi\hbar} \frac{1}{(\beta\hbar c_a)^2} \int_0^\infty x^3 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \frac{k_B}{2\pi\hbar} \frac{1}{(\beta\hbar c_a)^2} 6\zeta(3) = \frac{3}{\pi} \left( \frac{k_B}{\hbar} \right)^3 \left( \frac{T}{c_a} \right)^2 \zeta(3).$$

Kjer je  $x = \beta\hbar c_a k$ ,  $\zeta(3) = 1, 20206$ .

## 2 Ferimagnetna dvodimenzionalna mreža

Kot model ferimagnetne snovi sem obravnavala dvodimenzionalno mrežo, kjer so magnetni ioni s spinom  $\frac{1}{2}$  razpojeni kot kaže Slika2.1. Sklopitev sem opisala s Heisenbergovim modelom:  $H = -\frac{\mathcal{J}}{2} \sum_{\{i,j\}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ , kjer vsota teče le po najbližjih sosedih in je  $\mathcal{J} = -0,03\text{eV}$ .

### 2.1 Temperatura prehoda v urejeno stanje v približku povprečnega polja

V približku povprečnega polja lahko zapišemo efektivno polje kot:  $\vec{B}_{A,B}^{ef} = \vec{B}_0 - \lambda\mu_0 \vec{M}_{B,A}$ .

Magnetizacija v splošnem oz. za temperature pod temperaturo prehoda:

$$\vec{M}_{A,B} = \frac{1}{2} n_{A,B} g \mu_B \theta h \left( \frac{1}{2} \beta g \mu_B \mu_0 |\vec{H} - \lambda_{A,B} \vec{M}_{B,A}| \right) \frac{\vec{H} - \lambda_{A,B} \vec{M}_{B,A}}{|\vec{H} - \lambda_{A,B} \vec{M}_{B,A}|}.$$

Magnetizacija nad temperaturo prehoda:

$$M_{A,B} = \frac{1}{2} n_{A,B} g \mu_B \theta h \left( \frac{1}{2} \beta g \mu_B \mu_0 (H - \lambda_{A,B} M_{B,A}) \right). \quad (4)$$

Tu so:  $n_{A,B}$  številска gostota posameznih ionov na volumen,  $g$  Landejev faktor,  $\mu_B$  Bohrov magneton,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , kjer je  $k_B$  Boltzmanova konstanta.

Iz Slike2.1 je očitno, da ima vsak ion podmrežje A za sosedje 4 ione pomrežje B ter da ima vsak ion podmrežje B za sosedja 2 iona pomrežje A. Vidimo tudi, da je ionov podmrežje B enkrat vec kot ionov podmrežje A ( $n_B = 2n_A$ ). Vemo tudi:  $n = n_A + n_B$ , kjer je  $n$  celotna številска gostota ionov. Tako dobimo, da je  $n_A = \frac{n}{3}$  oz.  $n_B = \frac{2n}{3}$ .

Da lahko izračunamo temperaturo prehoda, potrebujemo še izraz za  $\lambda$ :

$$\vec{B}_{iA} = \frac{1}{g\mu_B} \frac{\partial H}{\partial \vec{S}_{iA}} = \frac{1}{g\mu_B} \left( -\frac{\mathcal{J}}{2} 2 \sum_{j=1}^N \vec{S}_j \right) = -\frac{\mathcal{J}}{g\mu_B} \sum_{j=1}^{N=4} \vec{S}_{jB} = 4\vec{s}_B \frac{\mathcal{J}}{g\mu_B} = 4 \frac{\mathcal{J}}{n_B(g\mu_B)^2} \vec{M}_B.$$

Pri drugem enačaju smo upoštevali podano sklopitev (Heisenbergov model), pri tretjem, da imajo ioni podmrežje A  $N = 4$  najbližjih sosedov (podmrežje B), pri četrtem, da  $\vec{s}_B = - < \vec{S}_{jB} >$ , kjer  $j = 1 : 4$ , pri zadnjem pa, da  $\vec{M}_B = n_B g \mu_B \vec{s}_B$ .

Podobno dobimo tudi v primeru podmrežje B. Tu moramo le upoštevati, da je  $N = 2$  oz., da imajo ioni B po dva sosedja ionov B z drugimi besedami:

$$\vec{B}_{iB} = 2 \frac{\mathcal{J}}{n_A(g\mu_B)^2} \vec{M}_A.$$

Ta dva izraza sedaj primerjamo z izrazom za povprečno polje in dobimo:

$$\lambda_A = \lambda_B = \lambda = \frac{6|\mathcal{J}|}{\mu_0 n (g\mu_B)^2}.$$

Da pa dobimo temperaturo prehoda oz. temperaturo, pri kateri spontana magnetizacija izgine, moramo enačbo (4) razviti po magnetizaciji do prvega reda (magnetizacija je majhna,  $B_0 = 0$ ):

$$M_A = -\frac{1}{2} \frac{n}{6} (g\mu_B)^2 \beta \mu_0 \lambda M_B$$

$$M_B = -\frac{1}{2} \frac{n}{3} (g\mu_B)^2 \beta \mu_0 \lambda M_A.$$

Ko rešimo sistem teh dveh enačb, dobimo za temperaturo prehoda:

$$T_c = \frac{|\mathcal{J}|}{\sqrt{2}k_B} = 246,1 K.$$

Če pa bi v Hamiltonjanu upoštevali, da gre vsota po najbližjih sosedih tako, da vsak par sosedov štejemo le enkrat, potem bi po istem postopku dobili za pol manjšo temperaturo prehoda.

## 2.2 Magnetna susceptibilnost nad temperaturo prehoda in magnetizacija v bližini temperature prehoda

### 2.2.1 Magnetna susceptibilnost nad temperaturo prehoda

Zanima nas magnetna susceptibilnost daleč stran od temperature prehoda oz. nad  $T_c$ . Zato razvijemo enačbo (4) po  $\beta \rightarrow 0$  do prvega reda in dobimo:

$$\begin{aligned} M_A &= D \frac{H}{T} - \frac{T_c}{\sqrt{2}T} M_B \\ M_B &= 2(D \frac{H}{T} - \frac{T_c}{\sqrt{2}T} M_A). \end{aligned}$$

Tu je  $D = \frac{n}{12} \frac{(g\mu_B)^2 \mu_0}{k_B}$ .

Rešimo sistem zgornjih enačb in dobimo:

$$\begin{aligned} M_A &= D \frac{H}{T} \frac{(1 - \sqrt{2} \frac{T_c}{T})}{(1 - (\frac{T_c}{T})^2)} \\ M_B &= D \frac{H}{T} \frac{(2 - \sqrt{2} \frac{T_c}{T})}{(1 - (\frac{T_c}{T})^2)}. \end{aligned}$$

Celotna magnetizacija je enaka vsoti magnetizacij podmrež oz.:

$$M_{>T_c} = M_A + M_B = D \frac{H}{T} \frac{(3 - 2\sqrt{2} \frac{T_c}{T})}{(1 - (\frac{T_c}{T})^2)}. \quad (5)$$

Vidimo, da je spontana magnetizacija ( $B_0 = 0$ ) nad  $T_c$  enaka nič. Susceptibilnost pa:

$$\chi_{>T_c} = \frac{\partial M_{>T_c}}{\partial H} = \frac{D}{T} \frac{(3 - 2\sqrt{2} \frac{T_c}{T})}{(1 - (\frac{T_c}{T})^2)} = \frac{n}{4} \frac{(g\mu_B)^2 \mu_0}{k_B} \frac{(T - \frac{2\sqrt{2}}{3} T_c)}{(T^2 - T_c^2)}.$$

Ta izraz velja za temperature večje od  $T_c$ . Odvisnost daleč stran je pravilna:  $\chi_{>T_c} \propto \frac{1}{T}$ .

Če bi imeli antiferomagnet (še na sredini kvadratov magnetne ione podmreže A), potem bi dobili rezultat  $\chi_{>T_c} \propto \frac{(T - T_c)}{(T^2 - T_c^2)} = \frac{1}{T + T_c}$ , kar pa je pravilno.

### 2.2.2 Magnetizacija v bližini temperature prehoda

Zanima nas spontana magnetizacija v bližini temperature prehoda; bolj točno, zanima nas magnetizacija malo pod kritično temperaturo, saj je le pod to temperaturo različna od nič (nad  $T_c$  smo videli že prej, da spontane magnetizacije ni; ostane le magnetizacija odvisna od polja; pod  $T_c$  pa je ta del magnetizacije manjši od spontane).

Pri polju  $B_0 = 0$  zapišemo enačbi (4) kot:

$$M_A = -\frac{n}{6} g\mu_B t h(\frac{1}{2} \beta g\mu_B \mu_0 \lambda M_B) = -\frac{n}{6} g\mu_B t h(\frac{3\sqrt{2}}{ng\mu_B} \frac{T_c}{T} M_B) \quad (6)$$

$$M_B = -\frac{n}{3} g\mu_B t h(\frac{1}{2} \beta g\mu_B \mu_0 \lambda M_A) = -\frac{n}{3} g\mu_B t h(\frac{3\sqrt{2}}{ng\mu_B} \frac{T_c}{T} M_A) \quad (7)$$

Na tem mestu sem vstavila izraz (7) v izraz (6) in razvila najprej notranji  $th$  do drugega reda (do magnetizacije  $M_A^3$ ), nato pa še zunanjega prav tako do drugega reda in zanemarila vse člene, ki so bili večji od  $M_A^3$ . Dobila sem:

$$M_A = \left(\frac{T_c}{T}\right)^2 M_A - \frac{6}{(ng\mu_B)^2} \left(\frac{T_c}{T}\right)^4 M_A^3 - 2 \frac{6}{(ng\mu_B)^2} \left(\frac{T_c}{T}\right)^6 M_A^3.$$

Ko sem rešila to enačbo, sem dobila:

$$M_A = \frac{ng\mu_B}{\sqrt{6}} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \frac{\sqrt{T_c^2 - T^2}}{\sqrt{2T_c^2 + T^2}}.$$

Za drugo mrežo pa dobim:

$$M_B = \frac{ng\mu_B}{\sqrt{3}} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \frac{\sqrt{T_c^2 - T^2}}{\sqrt{T_c^2 + 2T^2}}.$$

Celotna spontana magnetizacija pa je:

$$M = \begin{cases} 0 & \text{za } T > T_c \\ M_A + M_B & \text{za } T < T_c \quad \vec{M}_{A,B} \parallel \vec{H} \end{cases}$$

Če pa nas zanima magnetizacija v bližini temperature prehoda za majhna polja in majhne magnetizacije oz. magnetizacija nad  $T_c$ , kjer spontana magnetizacija izgine, razvijemo enačbi (4) do prvega reda. Sistem dobljenih enačb rešimo in dobimo isti rezultat kot za magnetizacijo pri temperaturah, ki so bistveno večje od temperature prehoda. Celotna magnetizacija nad  $T_c$  je tako enaka izrazu (5).

### 2.3 Temperatura prehoda ob upoštevanju sklopitev tudi z drugimi najbližjimi sosedji

Iz Slike 2.1 je očitno, da ima vsak ion podmrežje A za sosedje 4 ione pomrežje B ter da ima vsak ion podmrežje B za sosedje 2 iona pomrežje A ter 4 ione podmrežje B, ki pa so že drugi najbližji sosedji. Ionov podmrežje B je tudi tokrat enkrat vec kot ionov podmrežje A oz.  $n_A = \frac{n}{3}$  ter  $n_B = \frac{2n}{3}$ .

Efektivno polje je sedaj:

$$\vec{B}_A^{ef} = \vec{B}_0 - \lambda_A \mu_0 \vec{M}_B$$

$$\vec{B}_B^{ef} = \vec{B}_0 - \lambda_B \mu_0 \vec{M}_A - \eta \mu_0 \vec{M}_B.$$

Sklopitev pa zapišemo kot:

$$H = -\frac{\mathcal{J}}{2} \sum_{\{i,j\}1} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{\mathcal{J}'}{2} \sum_{\{i,j\}2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j.$$

Tu je  $\mathcal{J}'$  prekrivalni integral med drugimi najbližjimi sosedji in je nepozitiven.

Da lahko izračunamo temperaturo prehoda, potrebujemo še izraze za  $\lambda_{A,B}$  ter  $\eta$ , ki jih dobimo na enak način kot v poglavju 2.1:

$$\lambda_A = \lambda_B = \lambda = \frac{6|\mathcal{J}|}{\mu_0 n(g\mu_B)^2}$$

$$\eta = \frac{6|\mathcal{J}'|}{\mu_0 n(g\mu_B)^2}.$$

Magnetizacija pri polju nič:

$$M_A = -\frac{ng\mu_B}{6} th\left(\frac{1}{2}\beta g\mu_B \mu_0 \lambda M_B\right)$$

$$M_B = -\frac{ng\mu_B}{3} th\left(\frac{1}{2}\beta g\mu_B \mu_0 (\lambda M_A - \eta M_B)\right)$$

Da pa dobimo temperaturo prehoda, moramo zgornji dve enačbi razviti po magnetizaciji do prvega reda (magnetizacija je majhna). Tako dobimo:

$$M_A = -\frac{|\mathcal{J}| \beta_c'}{2} M_B$$

$$M_B = -\beta_c' (|\mathcal{J}| M_A - |\mathcal{J}'| M_B).$$

Ko rešimo sistem teh dveh enačb, dobimo za temperaturo prehoda:

$$T_c' = \frac{|\mathcal{J}|^2}{k_B (-|\mathcal{J}'| + \sqrt{|\mathcal{J}'|^2 + 2|\mathcal{J}|^2})}. \quad (8)$$

Iz Slike2.2 (modra krivulja je za mrežo d iz Slike2.3; rdeča pa je za vse ostale) vidimo, da  $T_c$  z naračajočim  $\mathcal{J}'$  raste od  $T_c$  dalje oz.  $T_c' = T_c$  le ko  $\mathcal{J}' = 0$ . Ko postane  $\mathcal{J}' > \mathcal{J}$ , pride do frustracije in se spini na sredini stranic kvadrata obrnejo kot v antiferomagnetu (Slika2.3), s spini na robovih pa ne vemo kaj se dogaja. Tako pa enačba (8) za  $\mathcal{J}' > \mathcal{J}$  ne velja več, saj se je mreža spremenila. Možne kombinacije so narisane na Sliki2.3 (sodnja desna slika velja v primeru, ko  $\mathcal{J}' >> \mathcal{J}$ , tako da spine v vogalih sploh ne rabimo upoštevati (lahko kažejo kamorkoli). Na enak način kot zgoraj sem izračunala temperaturo prehoda za vse primere mrež s Slike2.3:

mreža	$T_c$
prvotna ( $\mathcal{J}' = 0$ ) (ferimagnet)	$\frac{ \mathcal{J} }{\sqrt{2}k_B}$
prvotna ( $\mathcal{J}' \neq 0$ ) (ferimagnet), c (antiferomagnet) a,b (ferimagneta)	$\frac{ \mathcal{J} ^2}{k_B(- \mathcal{J}'  + \sqrt{ \mathcal{J}' ^2 + 2 \mathcal{J} ^2})}$
d (antiferomagnet)	$\frac{ \mathcal{J}' }{k_B}$