

$$\chi = \chi_{CW} + \chi_{const}$$

$$\chi_{CW} = \frac{C}{T - \theta_W}$$

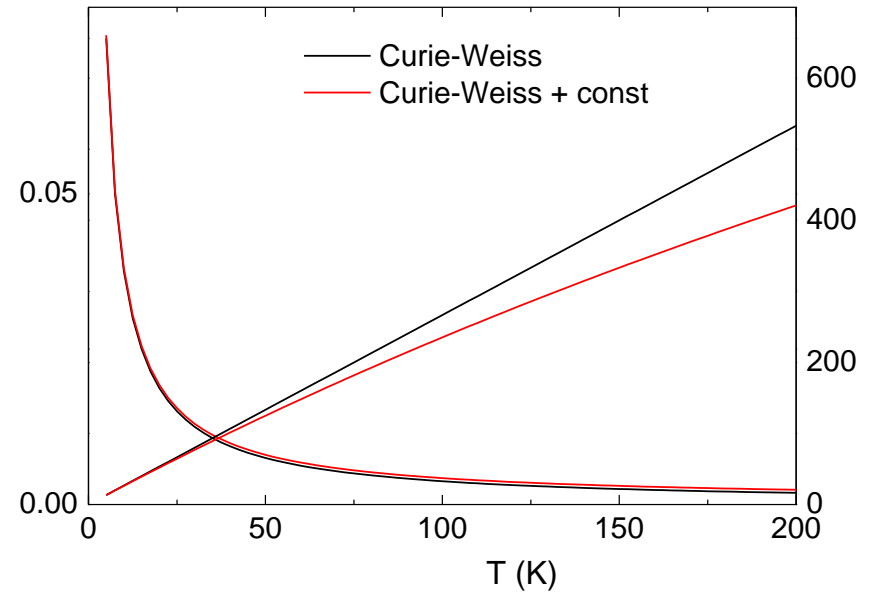
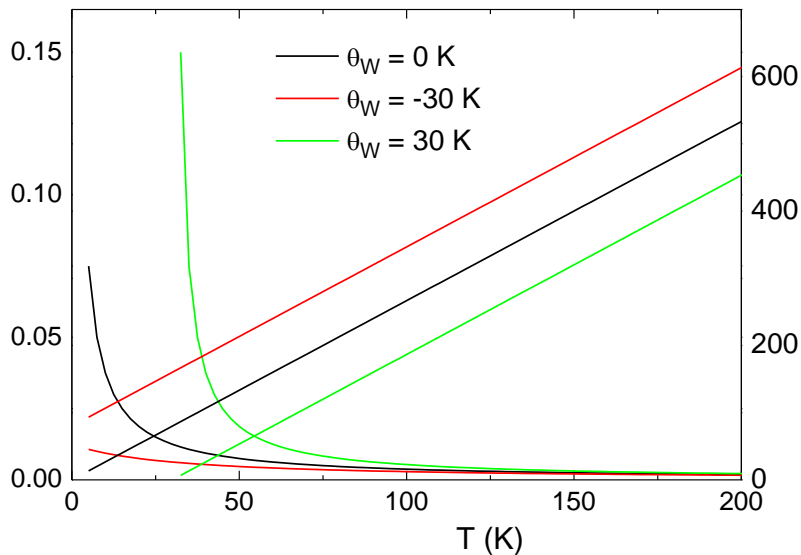
$$C = \frac{N_A \mu_B^2}{3k_B} \mu_{eff}^2 = \frac{1}{8} \mu_{eff}^2$$

$$\mu_{eff}^2 = \sum_i g_i^2 J_i (J_i + 1) x_i$$

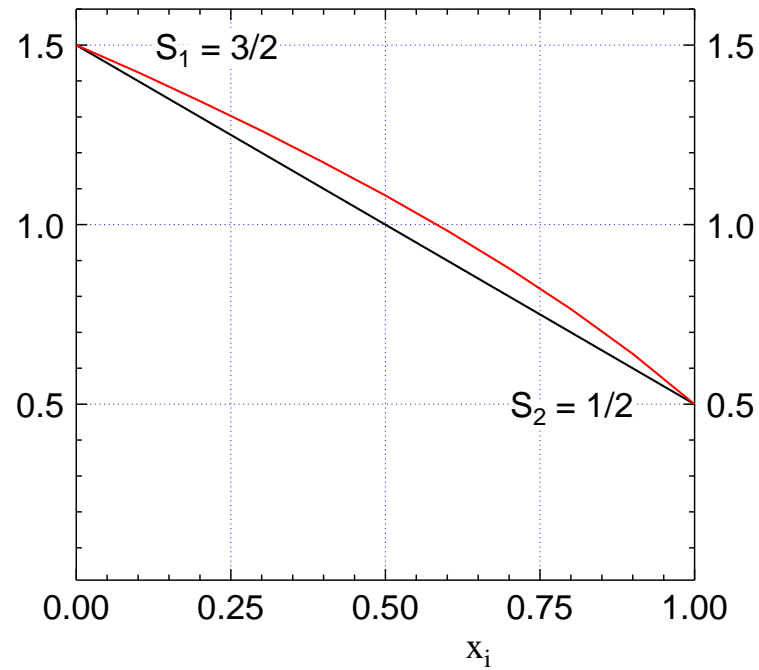
χ_{CW} : Curie-Weissova susceptibilita

χ_{const} : teplotně nezávislá susceptibilita

$$\frac{1}{\chi_{CW}} = \frac{1}{C} T - \frac{\theta_W}{C}$$



$$\mu_{eff}^2 = \sum_i g_i^2 J_i (J_i + 1) x_i$$



$$\chi_{const} = \chi_{dia} + \chi_{Pauli} + \chi_{Landau} + \chi_{VanVleck}$$

χ_{dia} : diamagnetismus vnitřních elektronů (suma příspěvků jednotlivých atomů)

χ_{Landau} : Landauova susceptibilita – diamagnetismus itinerantních elektronů

χ_{Pauli} : Pauliho susceptibilita – paramagnetismus itinerantních elektronů

$\chi_{VanVleck}$: Van-Vleckova susceptibilita – přímíchání stavů s vyšší energií v magn.poli

$$\chi_{dia} = -\frac{N\mu_0 Z e^2}{6m_e} \langle r^2 \rangle \quad \langle r^2 \rangle : \text{průměrná vzdálenost vnitřních elektronů od jádra}$$

$$\chi = M / B$$

$$[M] = JT^{-1} = Am^2 = 10^3 emu$$

$$[B] = T$$

$$[\chi] = JT^{-2}$$

$$1J = 6.2415 \times 10^{18} eV$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.274 \times 10^{-24} JT^{-1}$$

$$E = \mu_B B; \quad E = k_B T$$

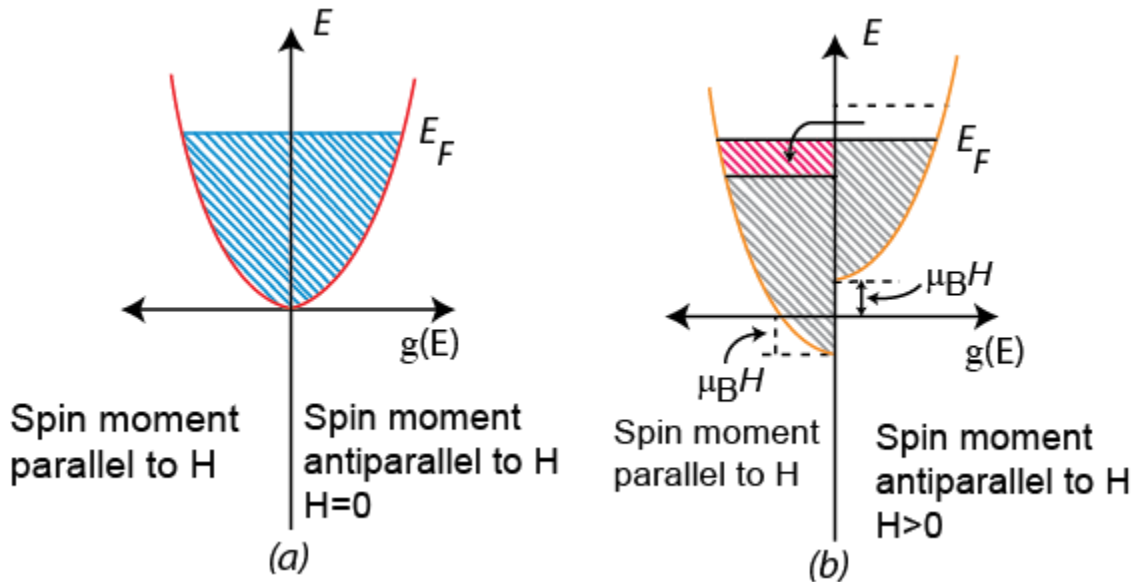
$$1T = \frac{\mu_B [JT^{-1}]}{k_B [JK^{-1}]} = 0.67K$$

$$\chi_{const} = \chi_{dia} + \chi_{Pauli} + \chi_{Landau} + \chi_{VanVleck}$$

$$\chi_{Pauli} = \frac{3 N \mu_B^2}{2 k_B T_F}$$

T_F – teplota na E_F ; $k_B T_F$ – Fermiho energie

N – počet elektronů



$$\chi_{Landau} = -\frac{1}{3} \chi_{Pauli} \left(\frac{m}{m^*} \right)^2$$

m^* : efektivní hmotota

$$E = \frac{mv^2}{2}$$

$$p = mv = \hbar k$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

energie / k

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\hbar^2 k}{m}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{\hbar^2}{m}$$

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$$

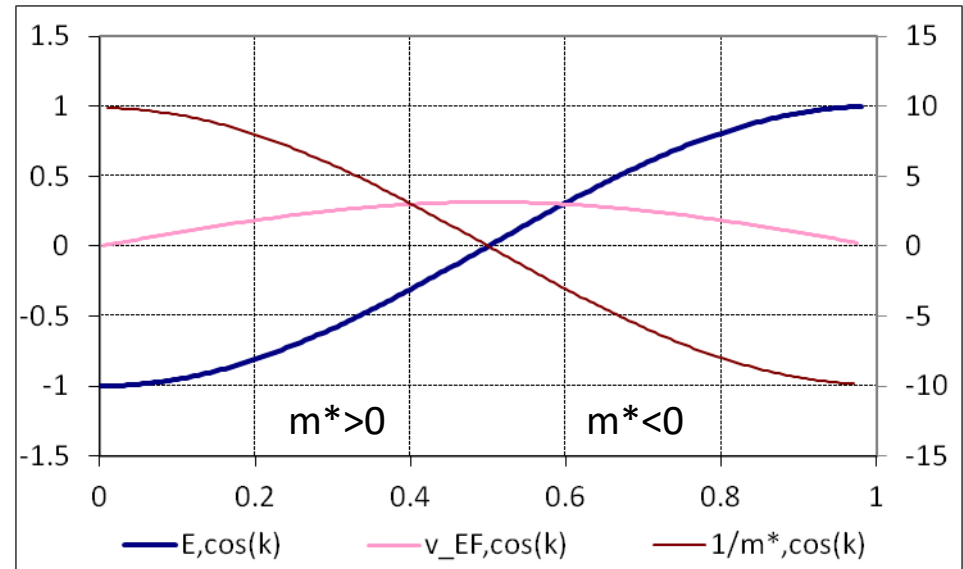
$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

efektivní hmota

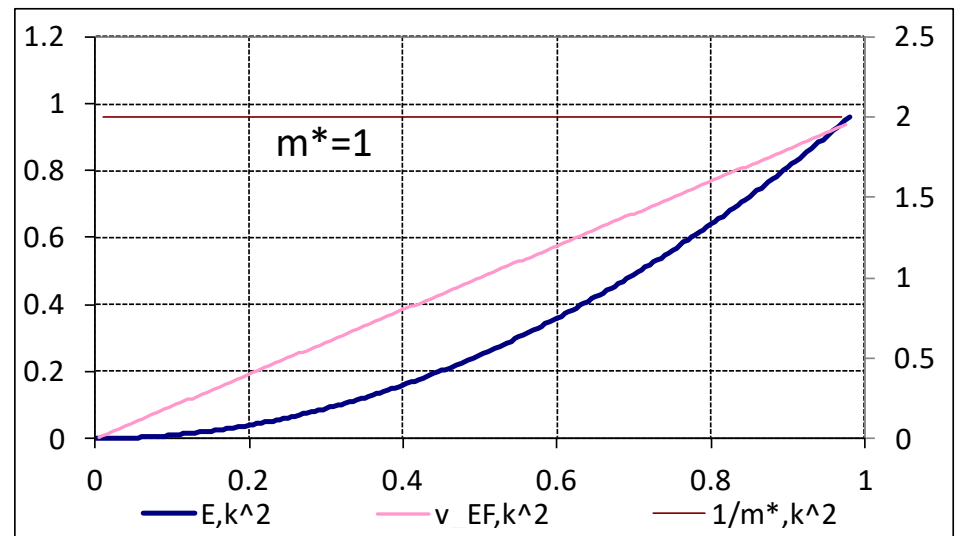
$$DOS^{-1} = \frac{\partial E}{\partial k} = \hbar v$$

$$Fermi - Dirac = \left[e^{\frac{E}{kT}} + 1 \right]^{-1}$$

$E = \cos(k\pi/a)$ Těsná vazba



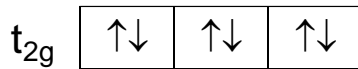
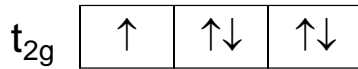
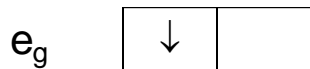
$E = k^2$ Volný elektron



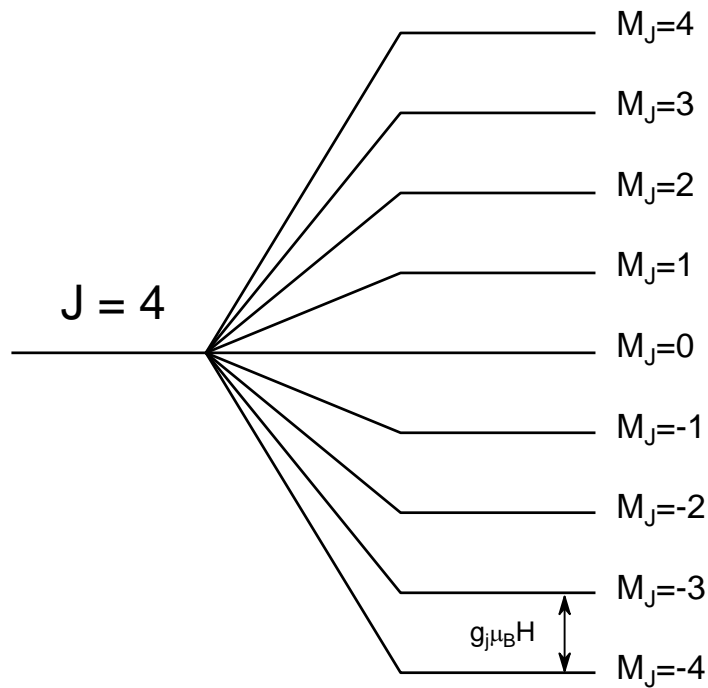
$$\chi_{const} = \chi_{dia} + \chi_{Pauli} + \chi_{Landau} + \chi_{VanVleck}$$

$\chi_{VanVleck}$: Van-Vleckova susceptibilita – přímíchání stavů s vyšší energií v magn. poli

d orbitaly, např. Co^{3+} (d^6)
ve stavu nízkého spinu.



f orbitaly, např. Eu^{3+} , Sm^{3+} ,



$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$$g_S = 1 + \frac{S(S+1) + S(S+1)}{2S(S+1)} = 2 \quad (L=0 \rightarrow J=S)$$

$$g_L = 1 + \frac{L(L+1) - L(L+1)}{2L(L+1)} = 1 \quad (S=0 \rightarrow J=L)$$

f^n	GS
f^1	$2\text{F}_{5/2}$
f^2	3H_4
f^3	$4\text{I}_{9/2}$
f^4	5I_4
f^5	$6\text{H}_{5/2}$
f^6	7F_0
f^7	$8\text{S}_{7/2}$
f^n	GS
f^8	7F_6
f^9	$6\text{H}_{15/2}$
f^{10}	5I_8
f^{11}	$4\text{I}_{15/2}$
f^{12}	3H_6
f^{13}	$2\text{F}_{7/2}$
f^{14}	1S_0

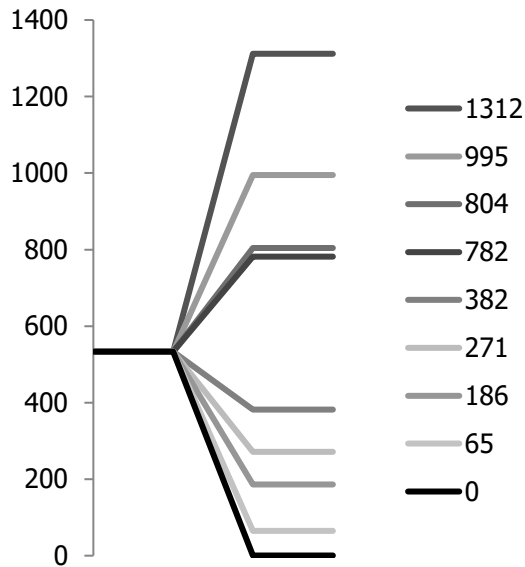
3+	2S+1	L	J	L	S	J	g_J	μ_{eff}
La	1	S	0	0	0	0		0.00
Ce	2	F	2.5	3	0.5	2.5	0.86	2.54
Pr	3	H	4	5	1	4	0.80	3.58
Nd	4	I	4.5	6	1.5	4.5	0.73	3.62
Pm	5	I	4	6	2	4	0.60	2.68
Sm	6	H	2.5	5	2.5	2.5	0.29	0.85
Eu	7	F	0	3	3	0		0.00
Gd	8	S	3.5	0	3.5	3.5	2.00	7.94
Tb	7	F	6	3	3	6	1.50	9.72
Dy	6	H	7.5	5	2.5	7.5	1.33	10.65
Ho	5	I	8	6	2	8	1.25	10.61
Er	4	I	7.5	6	1.5	7.5	1.20	9.58
Tm	3	H	6	5	1	6	1.17	7.56
Yb	2	F	3.5	3	0.5	3.5	1.14	4.54
Lu	1	S	0	0	0	0		0.00

Efektivní a nasycené momenty iontů vzácných zemin

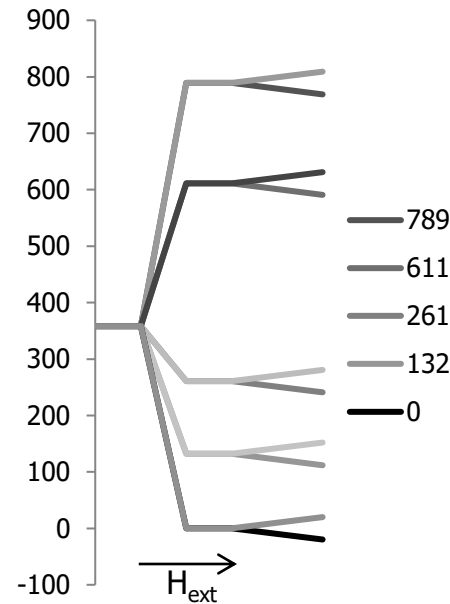
	J	g	g^J	$g\sqrt{J(J+1)}$	exp. μ_{eff}
La³⁺	0.0	-	0	0	diamagn.
Ce³⁺	5/2	0.86	2.14	2.54	2.4
Pr³⁺	4	0.80	3.20	3.58	3.5
Nd³⁺	9/2	0.73	3.27	3.62	3.5
Pm³⁺	4	0.60	2.40	2.68	---
Sm³⁺	5/2	0.29	0.71	0.85	1.5
Eu³⁺	0	-	0	0	3.4
Gd³⁺	7/2	2.00	7.00	7.94	8.0
Tb³⁺	6	1.50	9.00	9.72	9.5
Dy³⁺	15/2	1.33	10.00	10.65	10.6
Ho³⁺	8	1.25	10.00	10.61	10.4
Er³⁺	15/2	1.20	9.00	9.58	9.5
Tm³⁺	6	1.17	7.00	7.56	7.3
Yb³⁺	7/2	1.14	4.00	4.54	4.5
Lu³⁺	0.0	-	0	0	diamagn.

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$$\mu_{\text{eff}} = g_J \sqrt{J(J+1)}$$

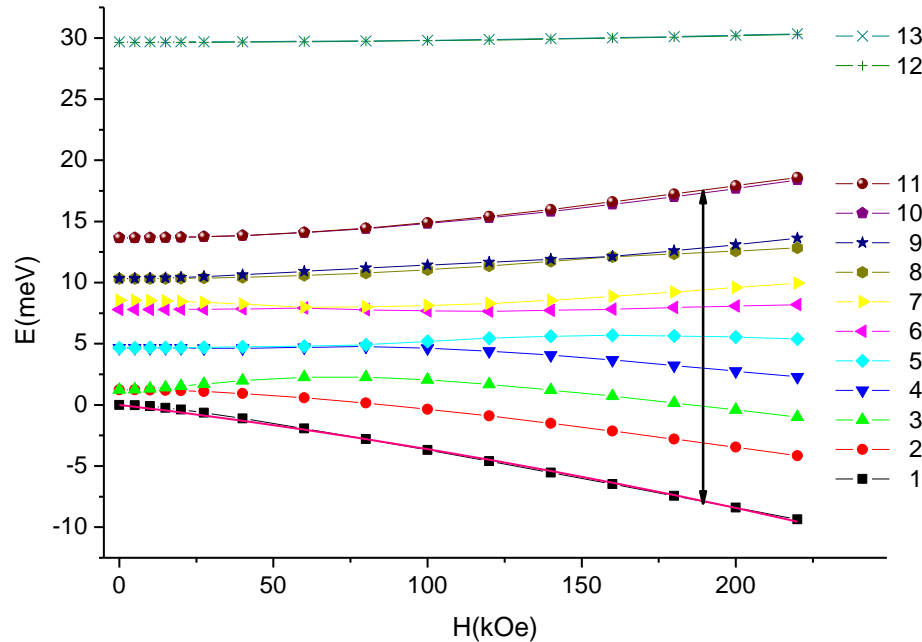
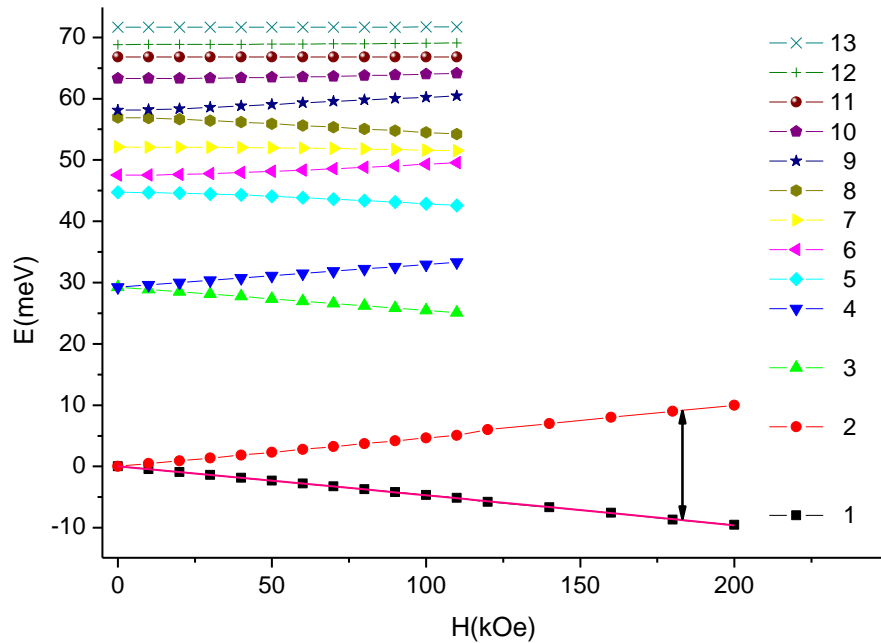


Pr^{3+} v
orthorombické
symetrii



Nd^{3+} v
orthorombické
symetrii

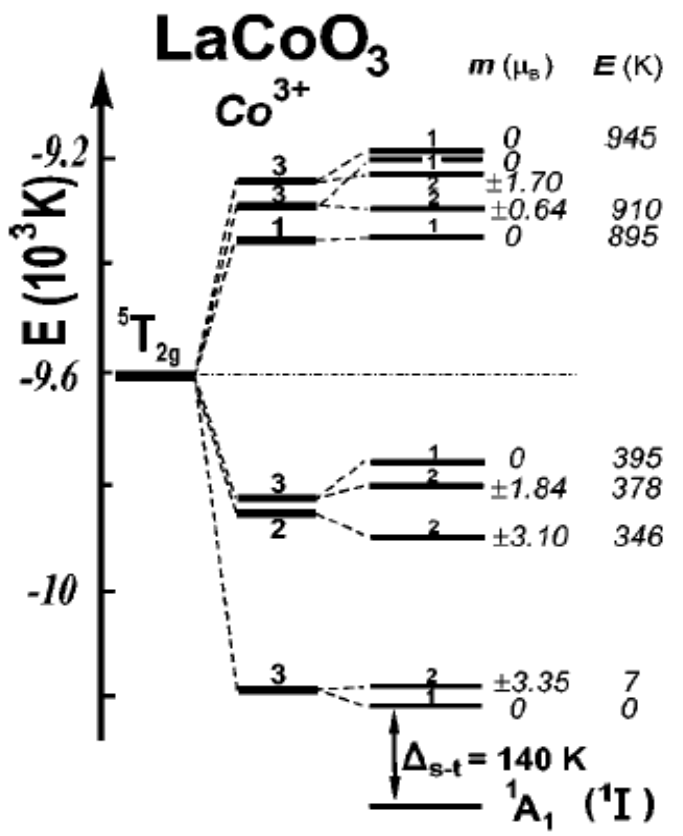
Z	val.e	f (3+)	Kramers	3+	4+	d(sing/dubl)	
57	3	0		La	Ce	singlet	1 sing 1S0
58	4	1	Kramers	Ce	Pr	dublet	3 dubl 2F5/2
59	5	2	non-Kramers	Pr	Nd	singlet	9 sing 3H4
60	6	3	Kramers	Nd	Pm	dublet	5 dubl 4I9/2
61	7	4	non-Kramers	Pm	Sm	singlet	9 sing 5I4
62	8	5	Kramers	Sm	Eu	dublet	3 dubl 6H5/2
63	9	6	non-Kramers	Eu	Gd	singlet	1 sing 7F0
64	10	7	Kramers	Gd	Tb	dublet	4 dubl 8S7/2
65	11	8	non-Kramers	Tb	Dy	singlet	13 sing 7F6
66	12	9	Kramers	Dy	Ho	dublet	8 dubl 6H15/2
67	13	10	non-Kramers	Ho	Er	singlet	17 sing 5I8
68	14	11	Kramers	Er	Tm	dublet	8 dubl 4I15/2
69	15	12	non-Kramers	Tm	Yb	singlet	13 sing 3H6
70	16	13	Kramers	Yb	Lu	dublet	4 dubl 2F7/2
71	17	14		Lu		singlet	1 sing 1S0



$$\varepsilon_{\pm} = \varepsilon(0) \pm \frac{1}{2} \mu_B |\vec{B}| g(\vec{n}) - \frac{1}{2} \vec{B} \hat{\chi}^{vV} \vec{B}; \quad \vec{n} = \frac{\vec{B}}{|\vec{B}|}$$

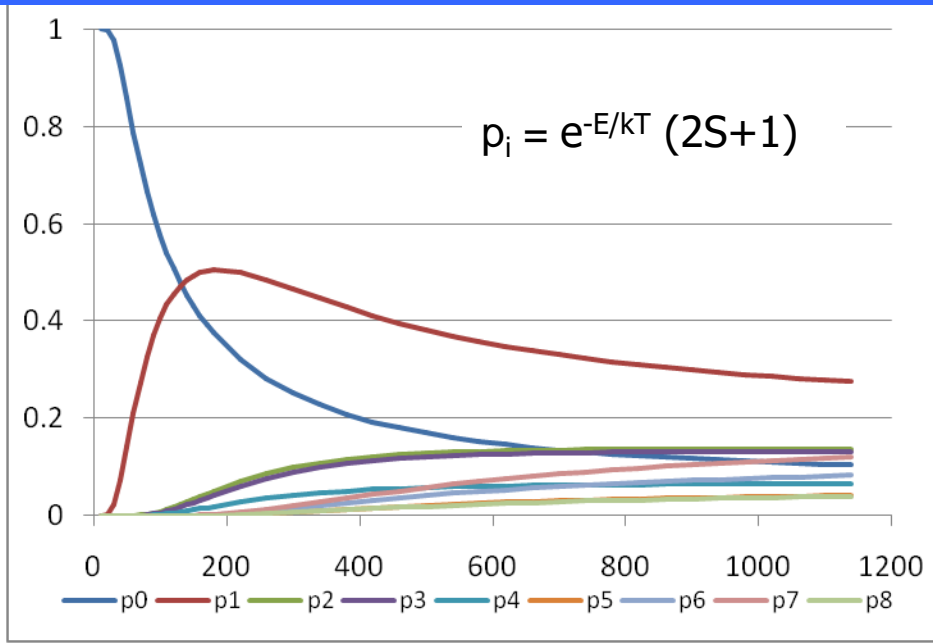
Tb^{3+} v distortované dodekaedrické koordinaci s bodovou grupou C_s , která je charakteristická pro ortoperovskity s prostorovou grupou $Pbnm$. Magnetické vlastnosti jsou určovány základním kvazi-dubletem (dva singletní stavy s prakticky shodnou energií), který se lineárně štěpí Zeemanovskou interakcí. Tento typ štěpení vede k paramagnetismu typu Curie-Weiss.

Tb^{3+} v trigonálně distortované koordinaci s bodovou grupou D_3 , která je charakteristická pro rhomboedrické perovskity. Vypočtené energetické schéma zobrazuje základní singlet, jehož energie kvadraticky klesá v magnetickém poli. Tento typ štěpení vede k paramagnetismu typu Van-Vleck.



octa B₄ = +200 K λ = 0 a)
 octa B₄ = +200 K λ = -185 K b)
 octa B₄ = +200 K λ = -185 K B₂⁰ = +7.2 K trigonal c)

0	3.35	3.1	1.84	0	0	0.64	1.7	0
0	1	0.5	0.5	0	0	0.5	1	0
1	3	2	2	1	1	2	3	1
-140	4.667	346	378	395	895	910	945	945



$$\mu_i^2 = (p_i / \sum_j p_j) \times g^2 \times S(S+1) \times \mu_B^2$$

$$\mu_{eff}^2 = \sum_j \mu_j^2 \quad \chi = C \cdot \mu_{eff}^2 / (T - \theta)$$

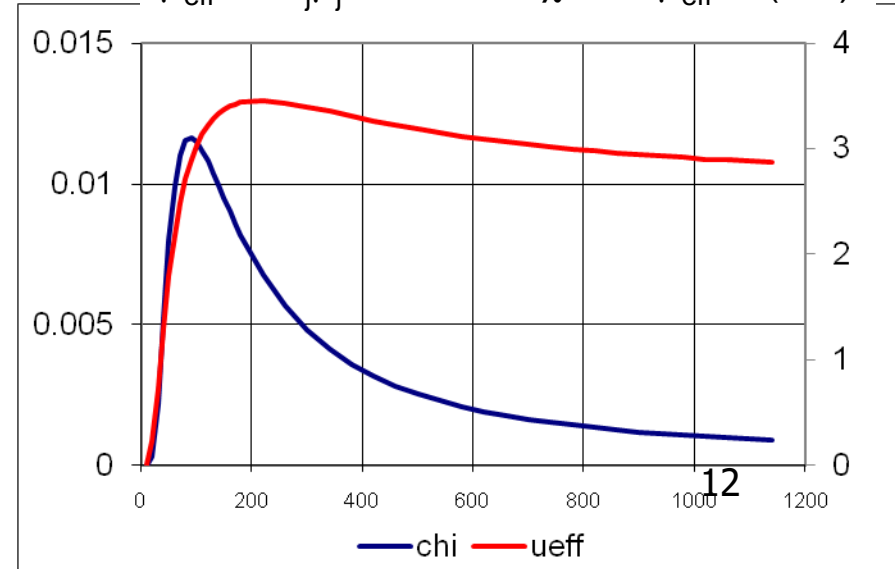
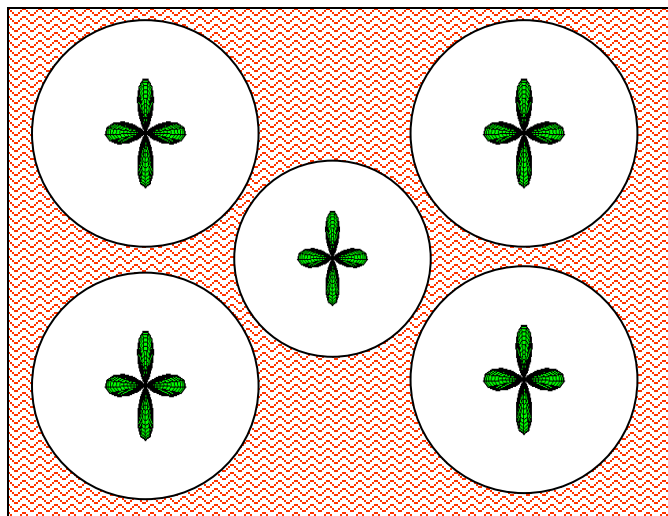


TABLE I. Charges and magnetic moments calculated for individual atoms using the AIM method [29]. *A* site: tetrahedral; *B* site: octahedral.

	Charges			Spin moments			
	Fe _A	Fe _B	S/O	Total	Fe(A)	Fe(B)	S/O
Fe ₃ S ₄	1.00	1.07	-0.79	3.73	-3.54	3.61	0.01
Fe ₃ O ₄	1.77	1.68	-1.28	4.00	-4.46	4.27	-0.02



experiment:

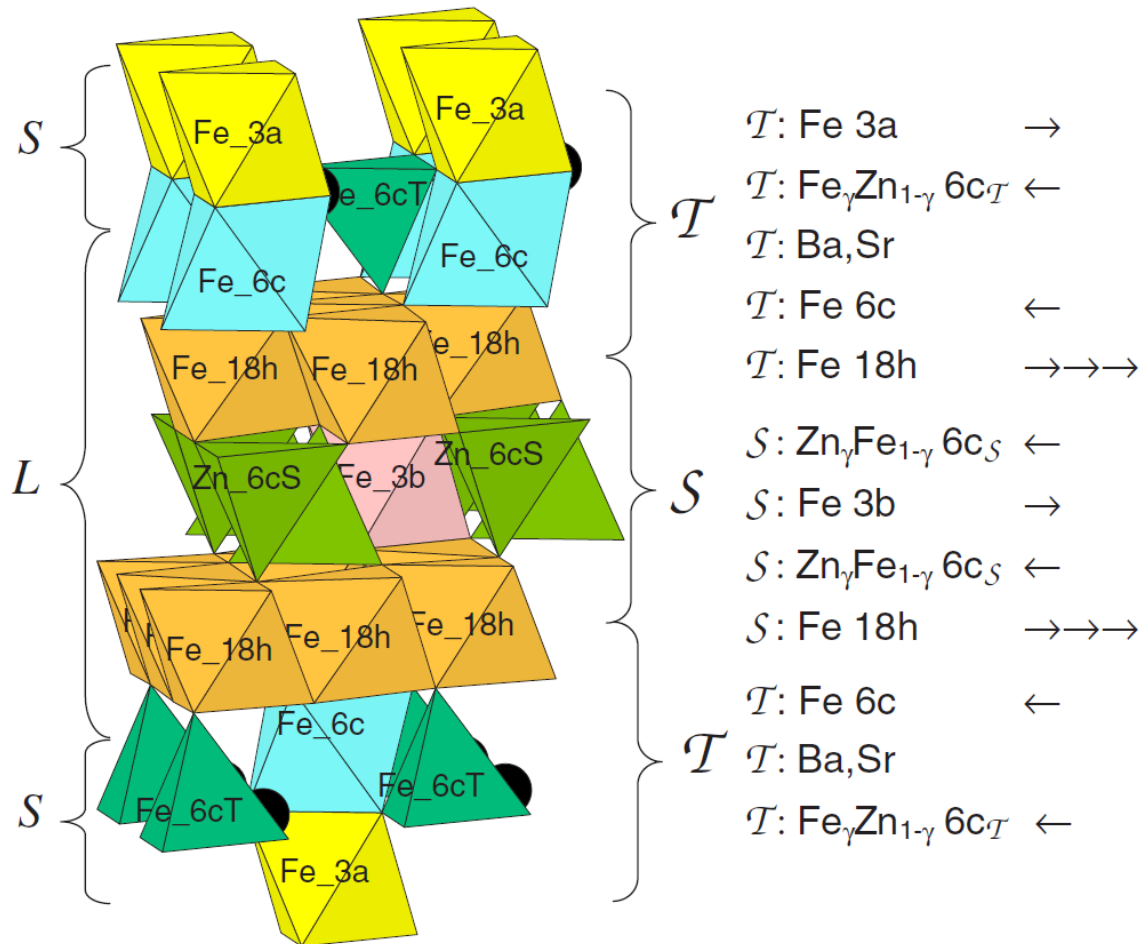
$$\text{Fe}_3\text{S}_4 : 3.39\text{--}3.74 \mu_{\text{B}}/\text{f.u.}$$

$$m_{\text{A}} = -3.0 \mu_{\text{B}}, m_{\text{B}} = 3.25 \mu_{\text{B}}$$

$$\text{Fe}_3\text{O}_4 : 3.9 \mu_{\text{B}}/\text{f.u.}$$

$$m_{\text{A}} = -4.44 \mu_{\text{B}}, m_{\text{B}} = 4.17 \mu_{\text{B}}$$

Výpočet energie všech možných orientací spinů v jednotlivých podmřížkách.



Aproximace středního pole

$$\underbrace{J_{ij}\vec{S}_i\vec{S}_j}_{\text{2částicový problém,}} = \underbrace{J_{ij}(\langle S_i \rangle \vec{S}_j + \vec{S}_i \langle S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle)}_{\text{1částicový problém, lze vyřešit iteračně}}$$

2částicový problém,
nelze řešit iterací. řeší se
metodami Monte-Carlo

1částicový problém, lze vyřešit iteračně

Výpočet energie všech možných orientací spinů v jednotlivých podmřížkách.

$$E_{ij} = -J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j$$

e_{ij} – energie magnetické interakce

J_{ij} – výměnný integrál magnetické interakce

$J_{ij} < 0$ – antiferomagnetická interakce $\uparrow\downarrow$

$J_{ij} > 0$ – feromagnetická interakce $\uparrow\uparrow$

$$E_0 : \downarrow \uparrow \downarrow \text{---} J_{iA} \text{---} \uparrow_i \text{---} J_{ij} \text{---} \downarrow_j \text{---} J_{jB} \text{---} \uparrow \downarrow \uparrow$$

$$E_i : \downarrow \uparrow \downarrow \text{---} J_{iA} \text{---} \downarrow_i \text{---} J_{ij} \text{---} \downarrow_j \text{---} J_{jB} \text{---} \uparrow \downarrow \uparrow$$

$$E_j : \downarrow \uparrow \downarrow \text{---} J_{iA} \text{---} \uparrow_i \text{---} J_{ij} \text{---} \uparrow_j \text{---} J_{jB} \text{---} \uparrow \downarrow \uparrow$$

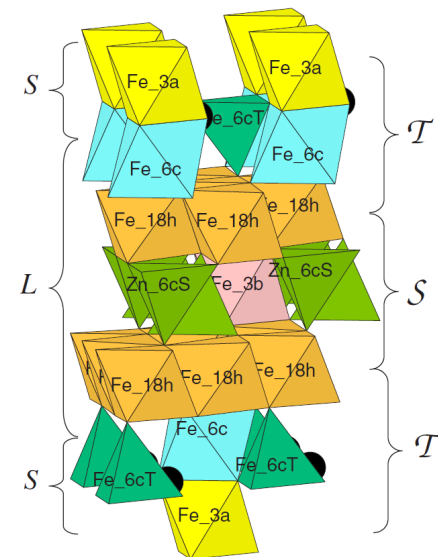
$$E_{ij} : \downarrow \uparrow \downarrow \text{---} J_{iA} \text{---} \downarrow_i \text{---} J_{ij} \text{---} \uparrow_j \text{---} J_{jB} \text{---} \uparrow \downarrow \uparrow$$

$$E_{ij} - E_i - E_j \sim J_{iA} + J_{jB} - J_{ij} - J_{iA} - J_{ij} - J_{jB} \sim -2J_{ij}$$

$$+ J_{ij} + J_{iA} \quad (+ E_{ij} + E_{iA})$$

$$+ J_{ij} + J_{jB} \quad (+ E_{ij} + E_{jB})$$

$$+ J_{iA} + J_{jB} \quad (+ E_{iA} + E_{jB})$$



energie E_i – otočené spiny pro i. podmřížku

energie E_j – otočené spiny pro j. podmřížku

energie E_{ij} – otočené spiny pro obě i. a j. podmřížky

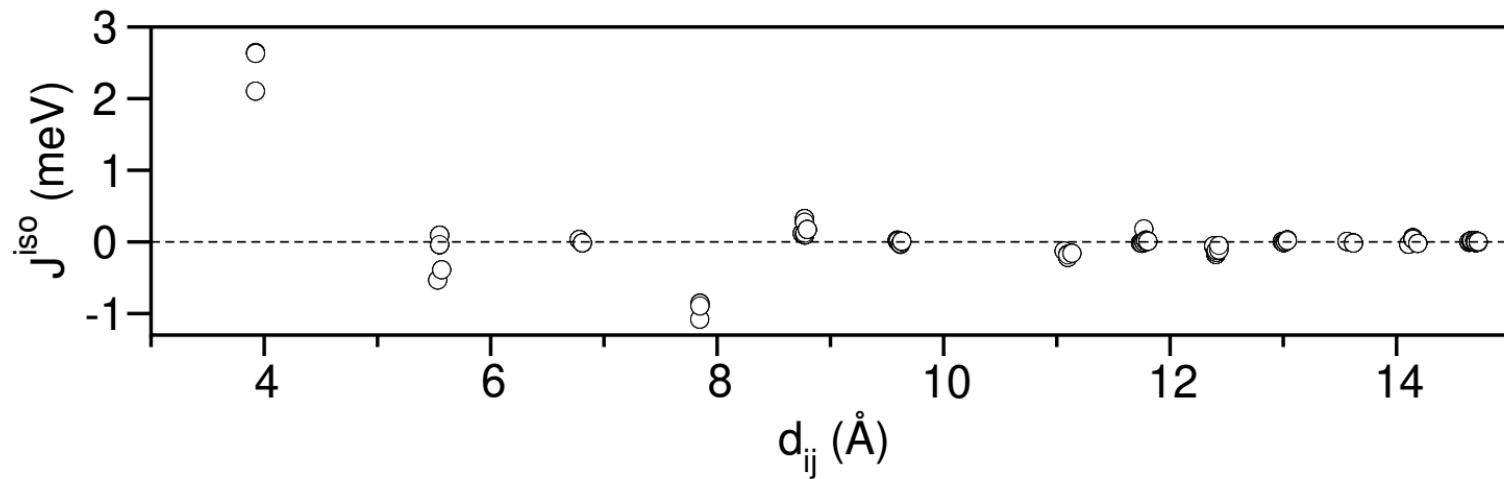
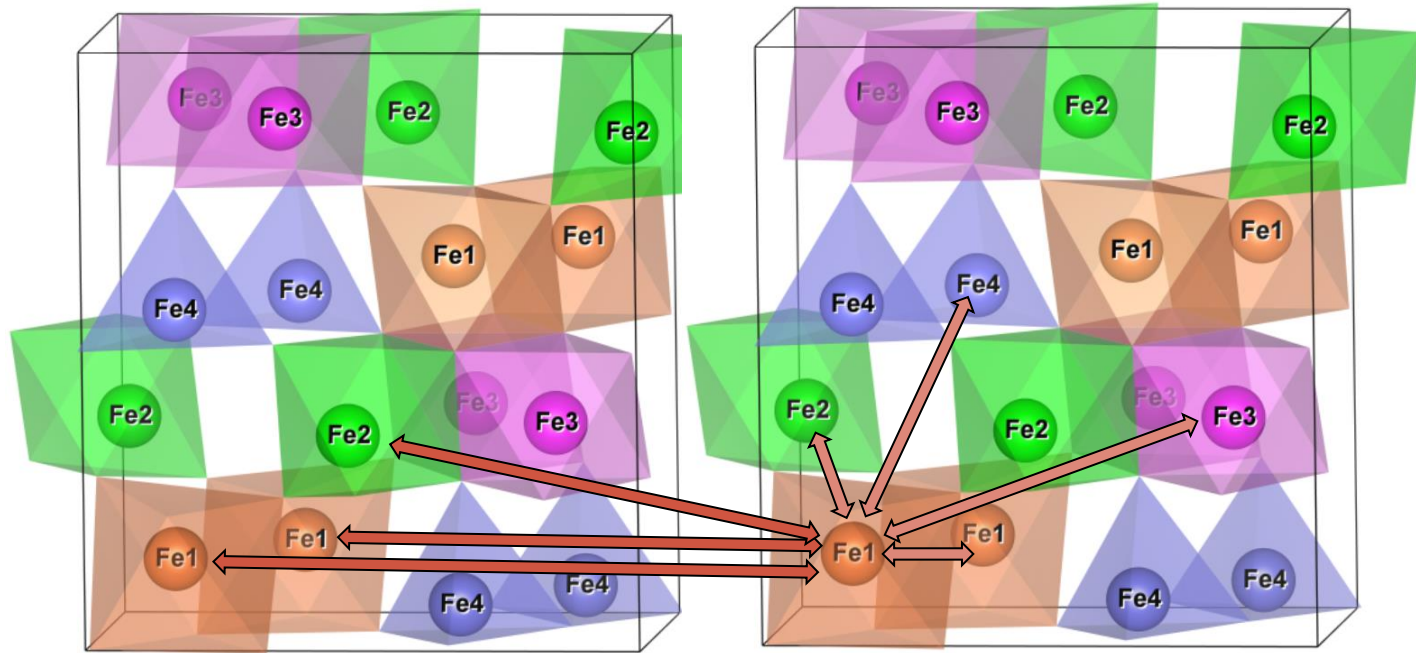
J_{ij} – výměnný integrál magnetické interakce

S_i, S_j – spin i. a j. podmřížky

σ_i, σ_j – orientace spinu (± 1) i. a j. podmřížky

$n_i Z_{ij}$ – počet atomů v podmřížce a počet sousedů

$$J_{ij} = \frac{E_{ij} - E_i - E_j}{4S_i S_j n_i Z_{ij} \sigma_i^{(0)} \sigma_j^{(0)}}$$



Aproximace středního pole

$$\underbrace{J_{ij}\vec{S}_i\vec{S}_j}_{\text{2částicový problém, nelze řešit iterací. řeší se metodami Monte-Carlo}} = \underbrace{J_{ij}(\langle S_i \rangle \vec{S}_j + \vec{S}_i \langle S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle)}_{\text{1částicový problém, lze vyřešit iteračně}}$$

2částicový problém,
nelze řešit iterací. řeší se
metodami Monte-Carlo

1částicový problém, lze vyřešit iteračně

$$H_i(T) = \frac{1}{g\mu_B} \sum_j Z_{ij} J_{ij} S_j(T) \quad \leftarrow \text{magn. pole působící na atom } i$$

\leftarrow iterace pro 1 teplotu

$$S_j(T) = S_j(0) B_S(g\mu_B H_i(T) S_j(0) / (k_B T)) \quad \leftarrow \text{magn. moment atomu } j$$

Brillouinova funkce ($J \sim S$):

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J}x\right) \quad x = \frac{g\mu_B J B}{k_B T}$$

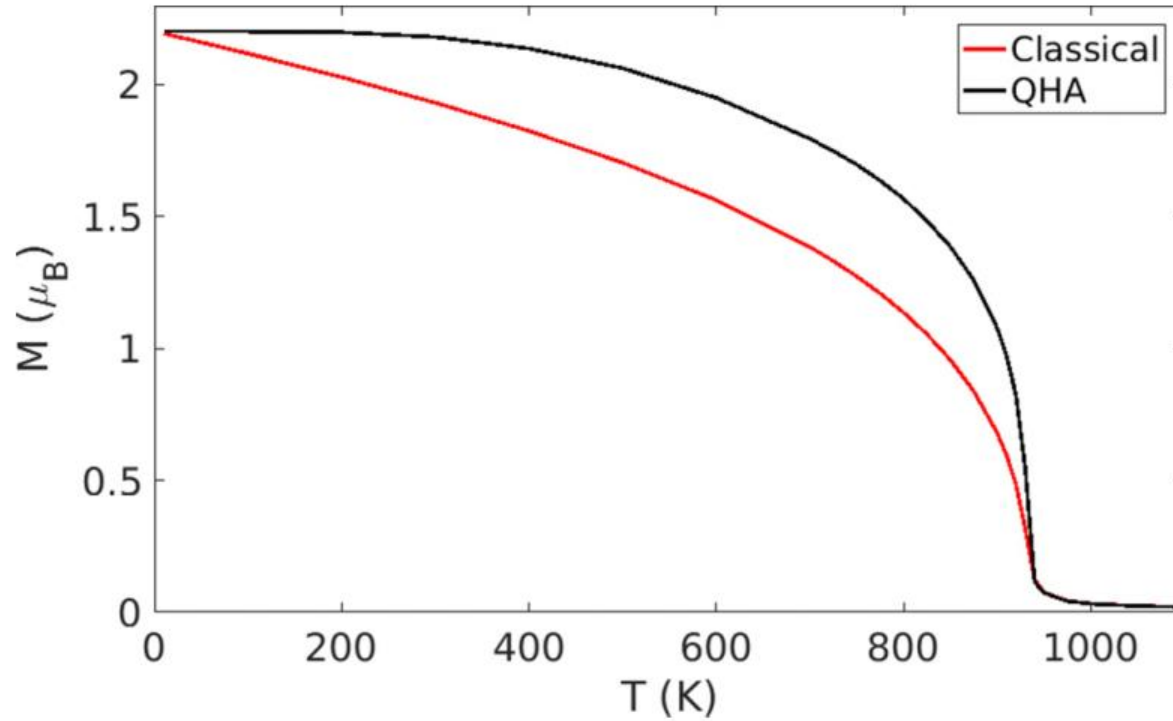
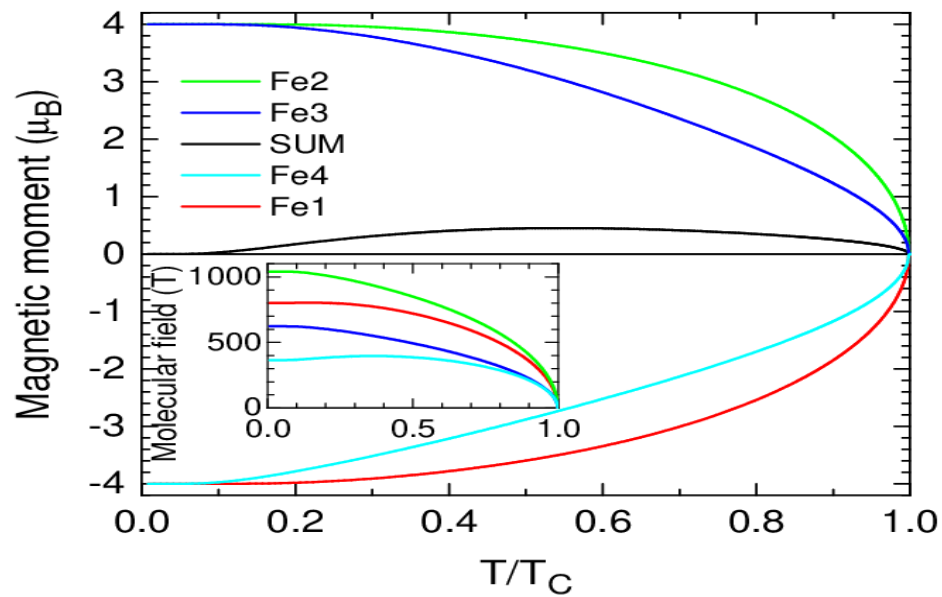
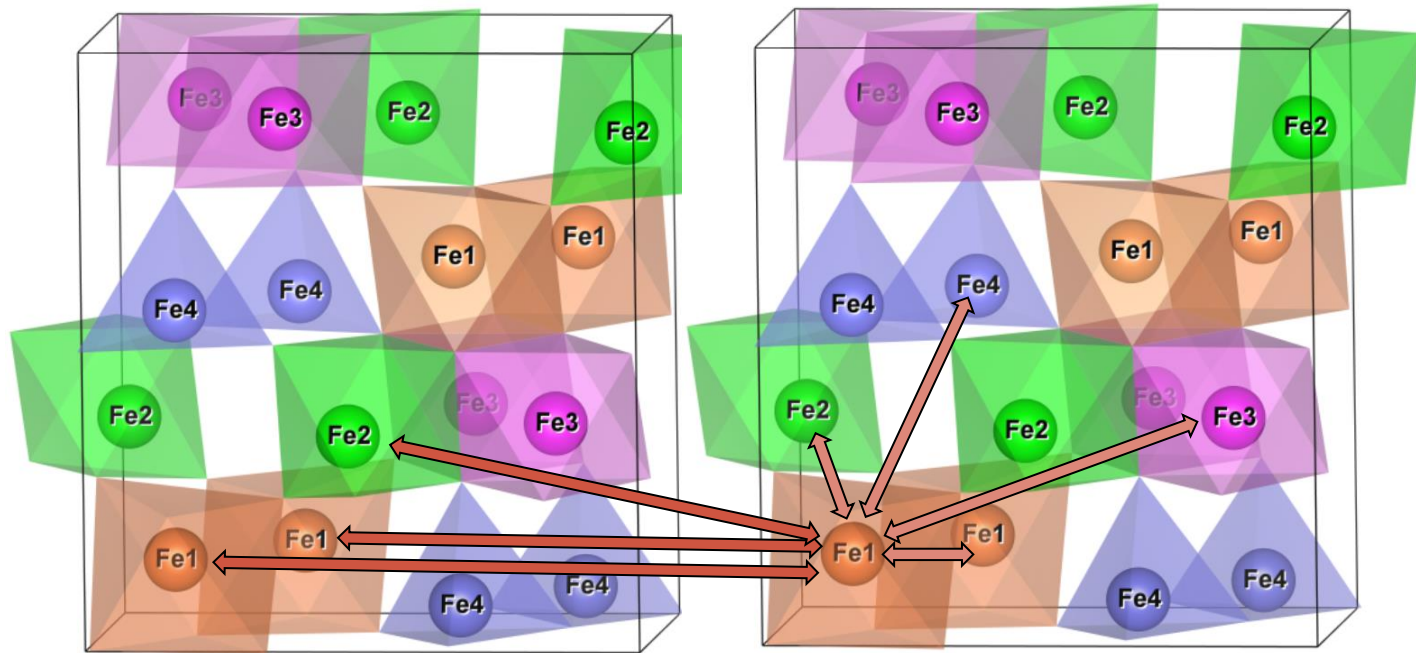


FIG. 1. Temperature-dependent magnetization from Monte Carlo simulations of Fe in the bcc structure using classical (red) and quantum (black) statistics and QHA.



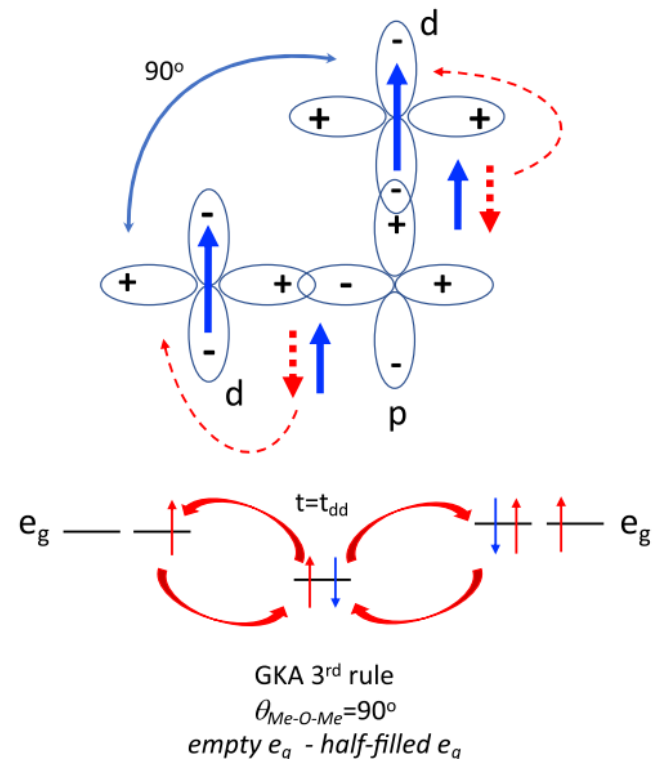
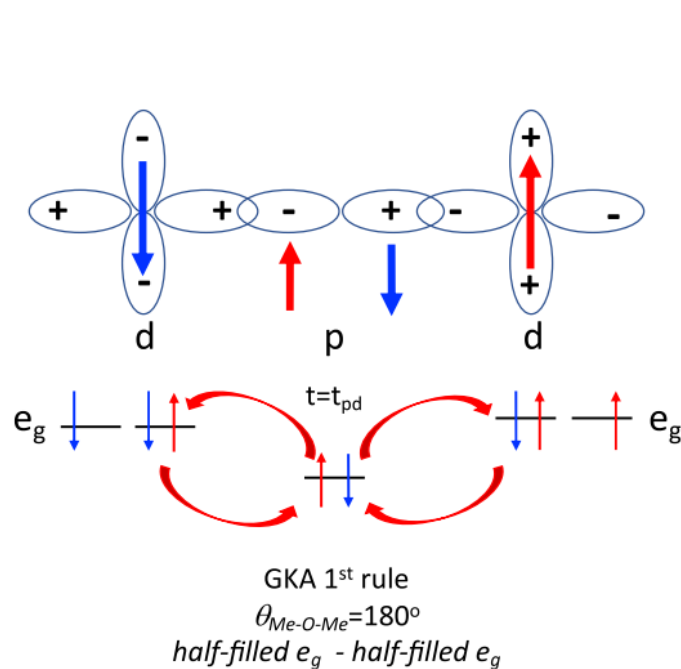
Virtuální přenos elektronů mezi orbitaly (d-orbitaly přechodných kovů přes sp-orbitaly ligandu)

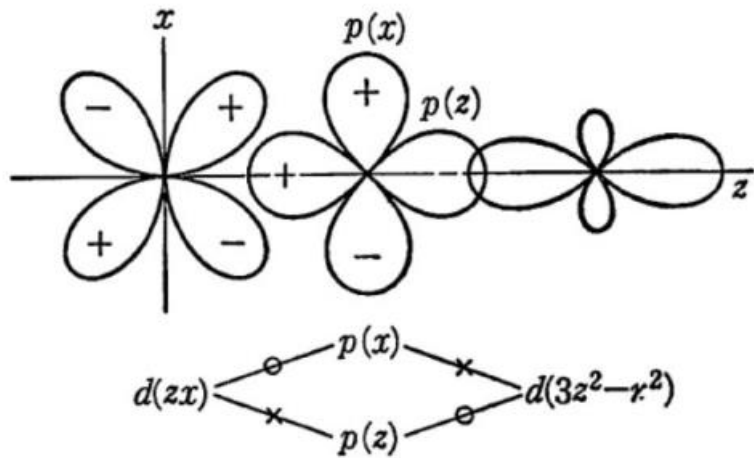
1. Pro úhel vazby $\theta(\text{Me-O-Me}) \sim 180^\circ$ je supervýměná interakce silná a vede k AF uspořádání, když dochází k virtuálnímu přenosu elektronů mezi překrývajícími se orbitaly, z nichž každý je z poloviny vyplněn.

(see Fig. 8a).

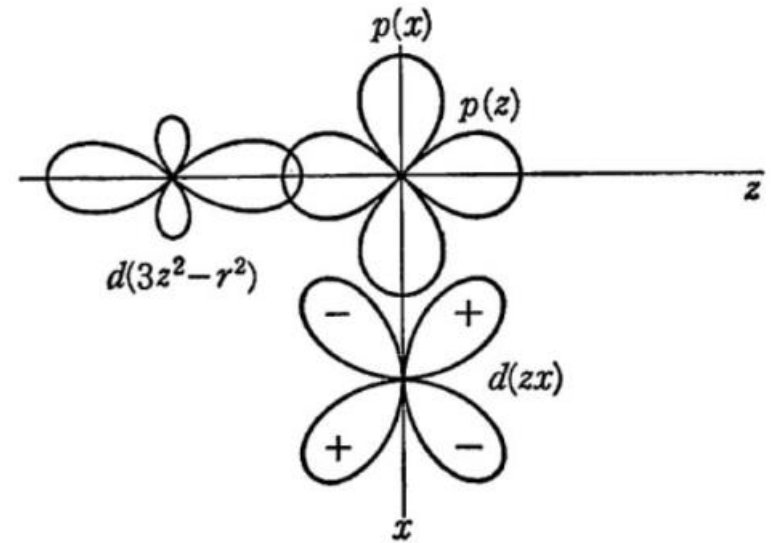
2. Pro úhel vazby $\theta(\text{Me-O-Me}) \sim 180^\circ$ je supervýměná interakce slabá a vede k FM uspořádání, když k přenosu elektronů dochází mezi obsazeným a prázdným orbitalem.

3. Pro úhel vazby $\theta(\text{Me-O-Me}) \sim 90^\circ$ je supervýměná interakce slabá a vede k FM uspořádání, když k přenosu elektronů dochází mezi prázdným a zcela zaplněným orbitalem, nebo mezi zcela a zcela zaplněným orbitalem.

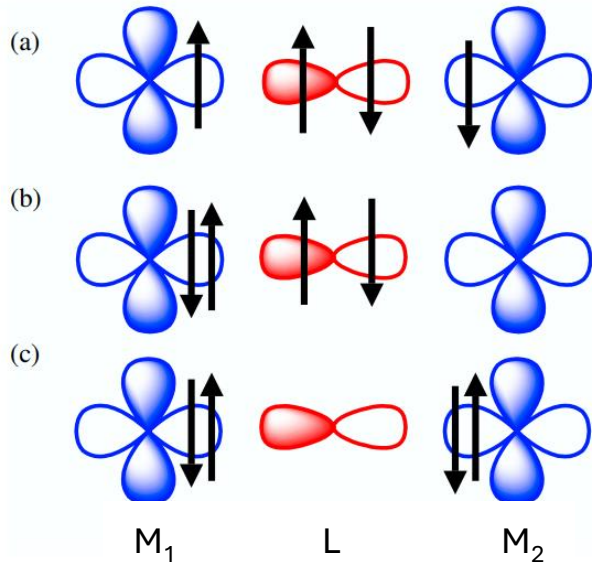




(a)



(b)



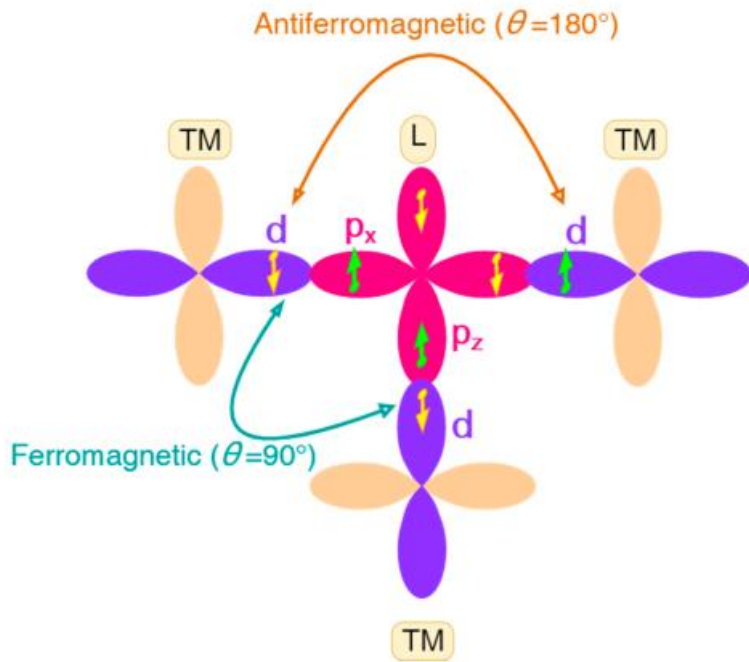
a) Základní stav.

Šířka pásu (t)

b) Excitace spojená s energií korelace elektronů (U) na přechodném kovu (M_1, M_2).

c) Excitace spojená s energií přenosu náboje (E_{CT}) mezi přechodným kovem (M_1, M_2) a ligandem (L).

$$J \approx -2t^2 \left[\frac{1}{U} + \frac{1}{E_{CT}} \right].$$



Schematický diagram supervýměnné interakce mezi ionty přechodného kovu (TM), d -orbitaly jsou méně než z poloviny zaplněné.

Podle Goodenough–Kanamori (GK) pravidel:

180° vazba: antiferomagnetické (AFM) uspořádání.

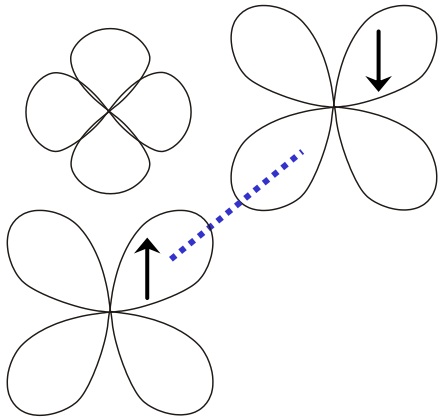
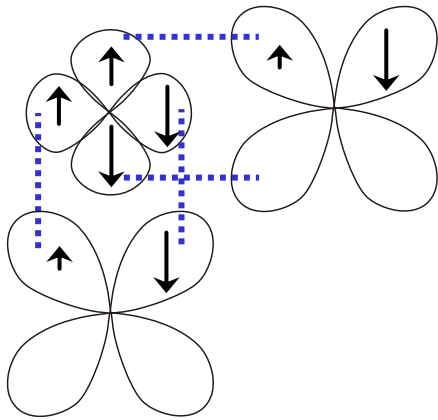
Oba elektrony na ligandu (L), které interagují s TM, jsou ze stejného orbitalu a jejich spiny jsou antiparalelně (Pauliho vylučovací princip).

90° vazba: feromagnetické (FM) uspořádání.

Elektrony na ligandu (L), které interagují s TM, jsou z různých orbitalů. Částečný přenos spinově polarizované elektronové hustoty z L na TM vyvolá spinovou polarizaci na orbitalech L, které se uspořádá paralelně (1. Hundovo pravidlo).

180° vazba: např. perovskity ABX_3 .

90° vazba: např. spinely AB_2X_4 .



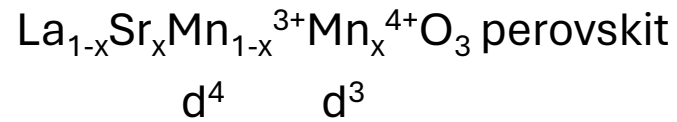
spinely AB_2X_4

např. Cr^{3+} (d^3)

Fáze ze skupiny spinelů typu $A^{2+}Cr_2^{3+}X_4$, kde A je nemagnetický kov s valencí 2+, a X je chalcogenid (A = Zn, Cd or Hg, X = O, S or Se), se uspořádávají FM nebo AFM.

Ferromagnetické (**FM**) uspořádání se pozoruje ve fázích s velkým kationtem A i aniontem X, jmenovitě v $CdCr_2S_4$ ($T_C \sim 85$ K), $CdCr_2Se_4$ ($T_C \sim 130$ K) and $HgCr_2Se_4$ ($T_C \sim 106$ K), díky FM **výměně typu SE pro úhel 90°** .

Pro menší A (v důsledku je Cr-Cr blíže) and menší X (je zároveň víc elektronegativní, tj. tvoří méně kovalentní vazbu d-p) např. $ZnCr_2O_4$, antiferromagnetický (**AFM**) příspěvek převládá díky **přímé výměně** mezi $Cr t_{2g}^3-t_{2g}^3$ stavy.



$\text{Mn}^{4+} - \text{Mn}^{3+}$

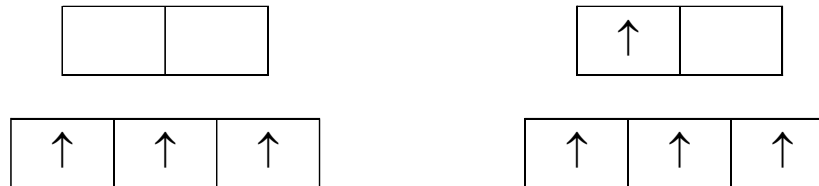
$d^3 - d^4$

Dvojitá výměna

itinerantní elektrony

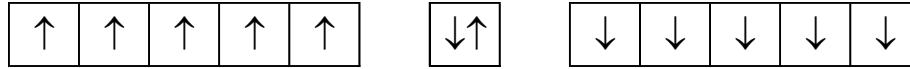
pohyb bez změny spinu

preferuje FM

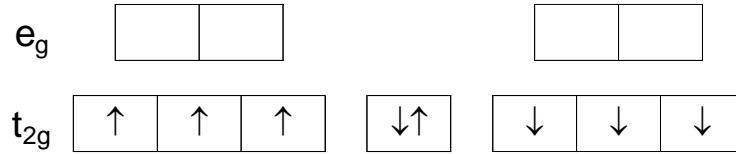


Perovskity

LaFeO₃ Fe³⁺ – Fe³⁺ d⁵-d⁵ AFM



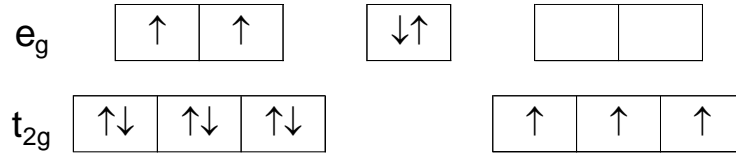
LaCrO₃ Cr³⁺ – Cr³⁺ t_{2g}³-t_{2g}³ AFM



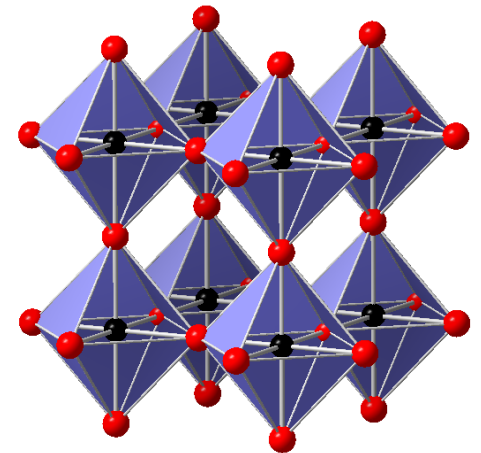
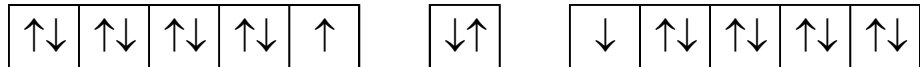
La₂NiMnO₆ Ni²⁺ – Mn⁴⁺ t_{2g}⁶e_g² - t_{2g}³e_g⁰ FM

t_{2g}⁶ - t_{2g}³ π-vazba

e_g² - e_g⁰ σ-vazba



La₂CuO₄ Cu²⁺ – Cu²⁺ d⁹-d⁹ AFM



Různé interakce pro Co^{3+} v závislosti na spinovém stavu

HS – vysoký spin

IS – střední spin

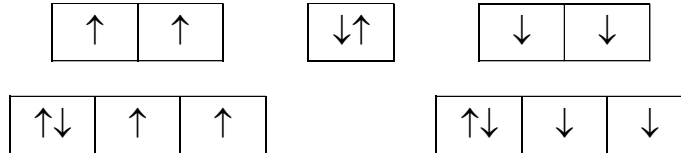
HS – nízký spin

LnCoO_3 (Ln=La,Y,Pr,Nd,...)

Co^{3+} HS – Co^{3+} HS

$t_{2g}^4 e_g^2 - t_{2g}^4 e_g^2$

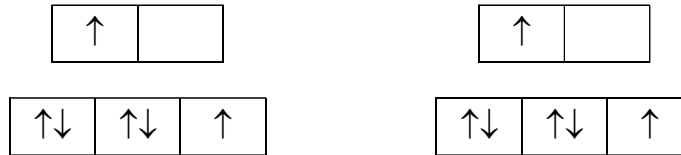
AFM supervýměna
isolantní



Co^{3+} IS – Co^{3+} IS

$t_{2g}^5 e_g^1 - t_{2g}^5 e_g^1$

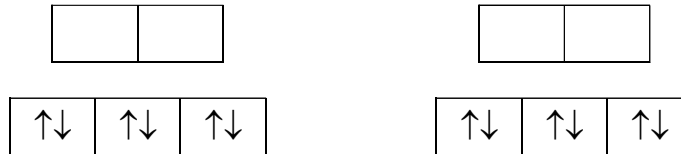
FM dvojitá výměna
vodivý



Co^{3+} LS – Co^{3+} LS

$t_{2g}^6 e_g^0 - t_{2g}^6 e_g^0$

nemagnetický
isolantní



$\text{Ln}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ – magnetické a orbitální uspořádání (Ln=La,Pr,..., A=Ca,Sr,...)

Mn^{3+}

$\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$

$\text{Mn}^{3.5+}$

$\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$

Mn^{4+}

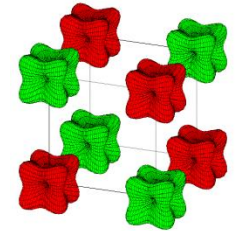
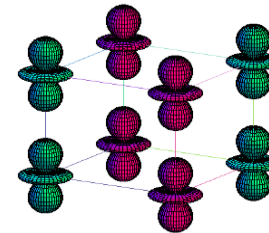
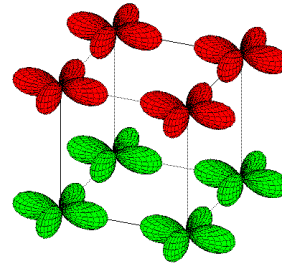
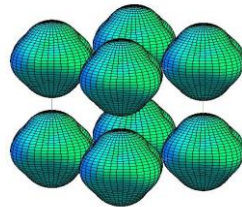
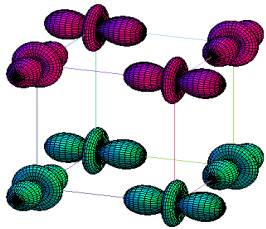
A typ izolantní

FM vodivý

A typ vodivý

C typ izolantní

G typ izolantní



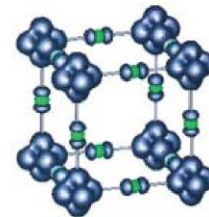
4×FM 2×AFM

6×FM 0×AFM

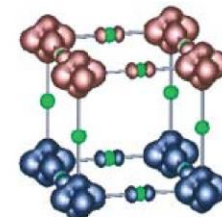
4×FM 2×AFM

2×FM 4×AFM

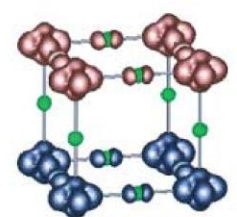
0×FM 6×AFM



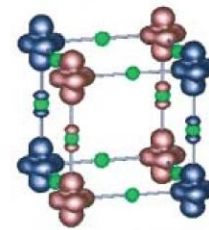
FM (F)



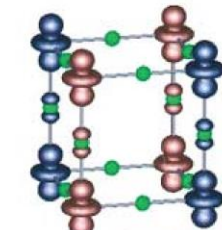
A-AF (A1)



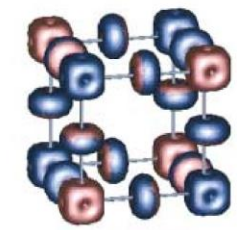
A-AF (A2)



C-AF (C1)



C-AF (C2)



G-AF (G)

FIG. 3 (color). The calculated charge density distribution for the energy window of 0.6 eV width just below the Fermi level

Table 2. The 180° interaction between cations in octahedral sites

Number of 3d-electrons of interacting cations	Species of interacting cations	Relevant bond and mechanism	Resultant superexchange interaction	Total superexchange interaction
d^3-d^3	$Mn^{4+}-Mn^{4+}$ $Cr^{3+}-Cr^{3+}$	σ -bond and π -bond A, G, A-H, S	Antiferro.	Antiferro.
d^8-d^8	$Ni^{2+}-Ni^{2+}$	σ -bond A, G, A-H, S	Antiferro.	Antiferro.
d^5-d^5	$Mn^{2+}-Mn^{2+}$ $Fe^{3+}-Fe^{3+}$	σ -bond A, G, A-H, S π -bond G, A-H, S π -bond A	Antiferro. Antiferro. (weak) Uncertain (weak)	Antiferro.
d^8-d^3	$Ni^{2+}-V^{2+}$	σ -bond and π -bond A, G, A-H, S	Ferro.	Ferro.

d^5-d^3	$\text{Fe}^{3+}-\text{Cr}^{3+}$	σ -bond A, G, A-H, S π -bond G, A-H π -bond A, S	Ferro. Antiferro. (weak) Uncertain (weak)	Ferro.
d^4-d^4	$\text{Mn}^{3+}-\text{Mn}^{3+}$	*		
d^6-d^6	FeO	σ -bond A, G, A-H, S π -bond	Antiferro. Uncertain (weak)	Antiferro.
d^7-d^7	CoO	σ -bond A, G, A-H, S π -bond	Antiferro. †	Antiferro.

* Depends on the direction of the line of superexchange.

† Weak, but dependent on the direction of the line of superexchange.

A=ANDERSON's mechanism, G=GOODENOUGH's mechanism, A-H=ANDERSON and HASEGAWA's mechanism, S=SLATER's mechanism.

Table 5. The 90° interaction between cations in octahedral sites

Number of 3d-electrons of interacting cations	Species of interacting cations	Relevant bond and mechanism	Resultant superexchange interaction	Total superexchange interaction
d^8-d^8	$Ni^{2+}-Ni^{2+}$	$p\sigma-d\gamma$ bond A, G S $s-d\gamma$ bond A, G, A-H, S	Ferro. Uncertain Antiferro.	Ferro.
d^5-d^5	$Mn^{2+}-Mn^{2+}$ $Fe^{3+}-Fe^{3+}$		Uncertain	*
d^3-d^3	$Cr^{3+}-Cr^{3+}$	$p\sigma-d\gamma$ and $p\sigma-d\epsilon'$ A, G, A-H, S $p\pi-d\epsilon$ and $s-d\gamma$ A, G, A-H, S	Ferro. Antiferro. (weak)	Ferro.
d^8-d^3	$Ni^{2+}-V^{2+}$	$p\sigma-d\gamma$ and $p\sigma-d\epsilon'$ A, G, A-H S $p\pi-d\epsilon'$ and $s-d\gamma$, $s-d\gamma'$ A, G, A-H	Antiferro. Uncertain (weak) Ferro. (weak)	Antiferro.

* Tendency towards antiferromagnetic interaction with decreasing number of 3d-electrons.

$$\text{Maxwell} - \text{Boltzmann} = \left[e^{\frac{E}{kT}} \right]^{-1}$$

$$\text{Fermi} - \text{Dirac} = \left[e^{\frac{E}{kT}} + 1 \right]^{-1}$$

$$\text{Bose} - \text{Einstein} = \left[e^{\frac{E}{kT}} - 1 \right]^{-1}$$

klasická fyzika

kvantová fyzika - fermiony

kvantová fyzika - bosony

