

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

Лекции будут перемежаться с практическими занятиями и семинарами. Будут домашние задания. Запланировано 18 лекций по 3 часа.

На экзамене можно пользоваться чем угодно. Во время ответа будем отвечать за каждую букву.

Это самозванная наука: компиляция из электродинамики и квантовой механики. Что из магнетизма будем рассматривать? В основном - магнетизм твёрдого тела: токи и спин. Спин органично получается в квантовой электродинамике. Типичный представитель - уравнение Дирака. От этого никуда не деться на микроуровне.

Начнем с квантовой механики. Первые лекции - будут экскурсом в неё, но с упором на магнитные явления.

1 Момент импульса. Орбитальное движение отдельной частицы.

Определяется момент импульса так:

$$\hbar \vec{l} = [\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}]; \quad (1)$$

В классической механике постоянной Планка нет.

Сам оператор \vec{l} действует в пространстве волновых функций. Из этого мы можем получить например матричные элементы оператора момента импульса.

Получим его правила коммутации:

$$[\hat{r}_k; \hat{p}_l] = i\hbar \delta_{k,l}; \quad k, l = x, y, z; \quad (2)$$

Из этих коммутационных соотношений следуют соотношения и для самого оператора момента импульса ($l_+ = l_x + il_y$, $l_- = l_x - il_y$):

$$[l_x; l_y] = il_z; \quad [l_y; l_z] = il_x; \quad [l_z; l_x] = il_y; \quad (3)$$

$$[l_+; l_-] = 2l_z; \quad [l_z; l_+] = l_+; \quad [l_z; l_-] = -l_-; \quad (4)$$

$$[\vec{l}^2; l_i] = 0; \quad i = x, y, z; \quad (5)$$

Дополнительное соотношение:

$$\vec{l}^2 = l_- l_+ + l_z^2 + l_z = l_+ l_- + l_z^2 - l_z; \quad (6)$$

Отсутствие коммутации операторов - эквивалентно тому, что мы не можем выбрать систему собственных функций для них.

Полезно знать связь в сферических координат:

$$\begin{aligned} z &= -i\partial_\phi; \\ l_\pm &= e^{\pm i\phi}(\pm\partial_\theta + i\cot\theta\partial_\phi); \\ l^2 &= -\left(\frac{\partial_{\phi\phi}}{\sin^2\theta} + \frac{1}{\sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta)\right); \end{aligned} \quad (7)$$

А как выглядят собственные функции? Начнем с оператора l_z :

$$l_z\psi = -i\partial_\phi\psi; \quad (8)$$

Тогда собственная функция (из требования однозначности и непрерывности функции):

$$\psi_m = e^{im\phi}/\sqrt{2\pi}; \quad m \in \mathbb{Z}; \quad (9)$$

Но собственная функция квадрата оператора момента импульса:

$$\Psi = f(r; \theta) \cdot \psi_{l_z}(\phi); \quad (10)$$

Из уравнения на коммутаторы следует, что существуют состояния, где одновременно две величины \vec{l}^2 , l_z - могут быть определены. Что здесь значит одновременно? Пусть дано:

$$\vec{l}^2\psi = l^2\psi; \quad (11)$$

А также можно подействовать на ту же функцию:

$$\hat{l}_z\psi = l_z\psi; \quad (12)$$

Вообще волновая функция - свойство ансамбля измерений, а не отдельной частицы. Отдельная частица коллапсирует во что - то.

Будем считать, что функция ψ - собственная \vec{l}^2 . Тогда получается:

$$\vec{l}^2 - l_z^2 = l_x^2 + l_y^2 \geq 0; \quad (13)$$

И это значит, что должно быть минимальное значение $\hat{l} = l$, такое, что при заданном l значения $l_z = -l; \dots; l$. Но из соотношения на коммутаторы следует:

$$\hat{l}_z\hat{l}_\pm\Psi_m = (m+1)\hat{l}_\pm\Psi_m; \quad (14)$$

А также:

$$\hat{l}_+\Psi_m = const \cdot \Psi_{m+1}; \quad (15)$$

$$\hat{l}_-\Psi_m = const \cdot \Psi_{m-1}; \quad (16)$$

Это значит, что операторы \hat{l}_\pm действуют как повышение или понижения квантового числа m на единицу. Однако действие повышающего оператора на ψ_l сведется к занулению в силу ограниченности его собственных чисел:

$$\hat{l}_+\psi_l = 0; \quad (17)$$

Отсюда можно видеть:

$$l_-l_+\psi_l = (\vec{l}^2 - l_z^2 - l_z)\psi_l = 0; \quad (18)$$

Важно отметить, что l , \vec{l} - отличаются. Тогда получим:

$$\vec{l}^2\psi_l - l^2\psi_l - l\psi_l = 0; \quad (19)$$

Это значит, что мы получили собственные числа оператора квадрата момента импульса:

$$\vec{l}^2 = l(l+1); \quad (20)$$

Удобно записать собственную функцию операторов \vec{l}^2 , l_z в виде:

$$\psi(r; \theta; \phi) = Y_{l,m}(\theta, \phi) f(r); \quad (21)$$

Тогда можно написать уравнение на это выражение:

$$\vec{l}^2 Y_{l,m}(\theta, \phi) f(r) = l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \phi) f(r); \quad (22)$$

Но и для оператора l_z тоже будет собственной функцией:

$$l_z Y_{l,m}(\theta, \phi) f(r) = m Y_{l,m}(\theta, \phi) f(r); \quad (23)$$

В силу эрмитовости оператора \vec{l} :

$$\langle Y_{l,m-1} | l_- | Y_{l,m} \rangle = \langle Y_{l,m} | l_+ | Y_{l,m-1} \rangle^*; \quad (24)$$

Откуда получаем важное следствие:

$$\langle Y_{l,m} | l_+ | Y_{l,m-1} \rangle = \langle Y_{l,m-1} | l_- | Y_{l,m} \rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}; \quad (25)$$

А для других компонент мы получим:

$$\langle l, m | l_x | l, m-1 \rangle = \langle l, m-1 | l_x | l, m \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(l+m)(l-m+1)}; \quad (26)$$

$$\langle l, m | l_y | l, m-1 \rangle = -\langle l, m-1 | l_y | l, m \rangle = -\frac{i}{2} \sqrt{(l+m)(l-m+1)}; \quad (27)$$

Также заметим, что соотношение на собственные функции оператора, получается и в явном виде. Можно показать, что $Y_{l,m}$ - так называемые сферические функции.

Литература:

- Ландау, Лифшиц "Том 3. Нерелятивистская квантовая теория"
- Блохинцев "Основы квантовой механики"
- Херми "Лекции по квантовой механике"
- Кринчик "Физика магнетизма"
- Ванцовский "Магнетизм"
- Вдовин, Левич, Мямлин "Курс теоретической физики"

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

Оператор момента импульса множества частиц, будет суммой операторов, для каждой:

$$\hat{\vec{L}} = \sum_i \hat{\vec{l}}_i; \quad (12)$$

При этом момент импульса разных частиц коммутирует - в силу зависимости от разных координат:

$$[\hat{L}_x; \hat{L}_y] = i\hat{L}_z; \quad (13)$$

И аналогично при циклических перестановках:

$$[\hat{L}_y; \hat{L}_z] = i\hat{L}_x; \quad [\hat{L}_z; \hat{L}_x] = i\hat{L}_y; \quad (14)$$

Можно показать, что справедливы все коммутационные соотношения для одной частицы, с заменой $\hat{l} \rightarrow \hat{L}$. Очевидно, что существуют такая $\psi_{L,M}$, что:

$$\hat{L}^2 \psi_{LM} = L(L+1) \psi_{LM}; \quad (15)$$

$$\hat{L}_z \psi_{LM} = M \psi_{LM}; \quad (16)$$

При этом могут быть значения: $M \in [-L, L] \in \mathbb{Z}$. И полностью аналогично Можно заменять $m \rightarrow M$.

3 Спин

Как показывает опыт задание волновой функции частицы, как описания ее положения в пространстве не исчерпывает все степени свободы частицы. При этом речь может идти как о сложной частице (ядре), так и об элементарной частице - например электроны.

Спин это фактически - внутренний момент частицы. В разделе 1 мы стартовали с того, что определили:

$$\hbar \hat{\vec{l}} = [\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}]; \quad (17)$$

Оператор момента импульса, действующий на координаты частицы. О спине заговорили после эксперимента Штерна-Герлаха - пропускали пучок электронов или других спиновых частиц через неоднородное магнитное поле и наблюдали его расщепление.

Значит то что у нас летело обладало каким то магнитным моментом. При том это наблюдалось даже в электронейтральных атомах - что значило, что момент внутренний, а не орбитальный.

Дальше идет сухая теория, которая описывает два состояния при одном орбитальном моменте. Введем формально операторы \hat{s}_x , \hat{s}_y , \hat{s}_z . И скажем что у них должны быть такие же коммутационные соотношения, что и у обычных проекций момента импульса:

$$[\hat{s}_x; \hat{s}_y] = i\hat{s}_z; \quad (18)$$

И аналогично с циклической перестановкой. однако обычно все это вводится через матрицы Паули:

$$\hat{s}_i = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_i; \quad (19)$$

И для него такие же коммутационные соотношения с циклическими перестановками:

$$[\hat{\sigma}_x; \hat{\sigma}_y] = i2\hat{\sigma}_z; \quad (20)$$

А на что должны действовать такие операторы? В данном случае, поскольку у нас всего 2 состояния - используются волновые функции в виде векторов (спиноров) и операторы в виде матриц 2×2 .

Т.е. операторы \hat{s} ($\hat{\sigma}$) действуют в каком-то неизвестном нам пространстве функций. Тогда совершенно формально, в случае, если у нас всего два состояния то и функции размером 2×1 .

Пусть базисные функции таковы, что матрица $\hat{\sigma}_z$ - диагональна, а её собственные значения ± 1 . Тогда получится:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}; \quad (21)$$

Естественно потребовать, чтобы собственные значения $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ аналогично равнялись ± 1 . Таким образом мы получим:

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{I}; \quad (22)$$

Но тогда из коммутационных соотношений следует:

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_z; \quad (23)$$

$$\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = -\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_x; \quad (24)$$

$$\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = -\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_y; \quad (25)$$

Тогда вид для остальных матриц в силу эрмитовости:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12}^* & a_{22} \end{bmatrix}; \quad (26)$$

$$\hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{12}^* & b_{22} \end{bmatrix}; \quad (27)$$

Но также можно показать:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{12}^* & 0 \end{bmatrix}; \quad (28)$$

Если возвести в квадрат:

$$\hat{\sigma}_x^2 = \begin{bmatrix} a_{12}a_{12}^* & 0 \\ 0 & a_{12}^*a_{12} \end{bmatrix}; \quad (29)$$

И из условия на квадраты имеем:

$$a_{12} = e^{i\phi}; \quad (30)$$

Иными словами:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{bmatrix}; \quad (31)$$

По аналогии:

$$\hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{bmatrix}; \quad (32)$$

А из условия на их умножение будем иметь:

$$e^{i(\phi-\beta)} = e^{-i(\phi-\beta)} = i; \quad (33)$$

Откуда с неизбежностью следует: $\phi = 0$, $\beta = -i\frac{\pi}{2}$.
Тогда получим:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad (34)$$

$$\hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \quad (35)$$

Надо напомнить, что настоящие операторы спина:

$$\hat{s}_i = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_i; \quad (36)$$

При этом собственные числа для спина будут равны $\pm\frac{1}{2}$, а квадрат спина:

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = \frac{3}{4}; \quad (37)$$

Что полностью соответствует формуле для оператора орбитального момента. Почему мы используем такой архаичный подход? Мы используем некоторую не единственность и собственный выбор. Однако этот выбор устоявшийся и не снижающий общности.

Таким образом существуют 2 состояния, в которых проекция спина на определённую остальных равна $\pm\frac{1}{2}$. В соответствии с матричным формализмом, операторы, выражаемые матрицами 2×2 действуют в фппространстве функций:

$$\Phi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}; \quad (38)$$

$$\Phi^* = [\psi_1^*; \psi_2^*]; \quad (39)$$

И можно получить, что такой спинор - собственная функция оператора \hat{s}_z . Тогда функция соответствующая проекции спина $\frac{1}{2}$:

$$\Phi_{1/2} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad (40)$$

А функция, соответствующая состоянию с $-\frac{1}{2}$:

$$\Phi_{-1/2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}; \quad (41)$$

Большая часть квантовой механики может быть проиллюстрирована такими спинорами. Но все это лишь часть более общего квантово-механического формализма. Твердотельный магнетизм практически целиком оказывается связан именно со спином.

4 Преобразование спина при преобразовании системы координат.

Рассмотрим просто поворот для начала. Для начала посмотрим на произвольную квантовую систему и мы её описываем в какой-то конкретной системе координат. Мы можем вращать саму физическую систему или вращать выбранную систему координат.

Пусть в определённой системе координат x, y, z волновая функция описывается спинором Φ . А в системе координат x', y', z' это же состояние описывается спинором: Φ' . Для простоты рассмотрим случай, где переход от одной системы к другой осуществляется поворотом вокруг оси z на угол γ .

При этом связь координат:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma \\ \sin \gamma & \cos \gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix}; \quad (42)$$

Т.е. такому преобразованию соответствует матрица преобразования спинора.

$$\Phi' = \hat{T}_z(\gamma)\Phi; \quad (43)$$

Тогда спиноры преобразуются (аналогично т для других координат):

$$\hat{s}'_x = \hat{T}_z(\gamma)\hat{s}_x\hat{T}_z^{-1}(\gamma); \quad (44)$$

Здесь $\hat{s}'_{x,y,z}$ - операторы, действующие в штрихованной системе координат. Это операторы проекции спина на старые оси координат x, y, z , нарисованные в новом представлении, связанном с x', y', z' .

А чем являются эти операторы ещё? Это операторы, соответствующие некоторым векторам \hat{S} . Тогда они должны преобразовываться по тем же законам.

$$\begin{bmatrix} \hat{s}_x \\ \hat{s}_y \\ \hat{s}_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{s}'_x \\ \hat{s}'_y \\ \hat{s}'_z \end{bmatrix}; \quad (45)$$

Здесь штрихованные операторы - соответствуют проекциям на оси x', y', z' , взятые в одном и том же представлении, связанном с x, y, z .

Но такая связь справедлива в любом представлении.

$$\begin{bmatrix} \hat{s}'_x \\ \hat{s}'_y \\ \hat{s}'_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{s}_{x'} \\ \hat{s}_{y'} \\ \hat{s}_{z'} \end{bmatrix}; \quad (46)$$

Тогда это будет равно (в силу независимости от представлений):

$$\begin{bmatrix} \hat{s}'_x \\ \hat{s}'_y \\ \hat{s}'_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{s}_x \\ \hat{s}_y \\ \hat{s}_z \end{bmatrix}; \quad (47)$$

Так как $\hat{s}'_{x'} = \hat{s}_x, \hat{s}'_{y'} = \hat{s}_y, \hat{s}'_{z'} = \hat{s}_z$. Тогда если сравнить это с тем, что мы писали преобразование через некоторые операторы поворота $\hat{T}_z(\gamma)$. Поскольку мы выбрали \hat{s}_z - диагональной, то и \hat{T}_z - диагональная (чтобы они коммутировали).

Тогда для неё можно написать:

$$\hat{T}_z = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}; \quad (48)$$

Поскольку по определению и в силу унитарности у нас должно быть:

$$\hat{T}_z \hat{T}_z^{-1} = \hat{I} = \hat{T}_z \hat{T}_z^\dagger; \quad (49)$$

В виде матричном виде:

$$\hat{I} = \begin{bmatrix} |a|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{bmatrix} \quad (50)$$

Отсюда можно видеть $\phi_1 - \phi_2 = \gamma$:

$$\hat{T}_z = \begin{bmatrix} e^{i\phi_2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi_1} \end{bmatrix}; \quad (51)$$

Поэтому можно выбрать симметрично:

$$\hat{T}_z = \begin{bmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{bmatrix}; \quad (52)$$

Рассмотрим волновую функцию для двух частиц, для каждой из которых волновая функция - простой спинор. Тогда полная волновая функция:

$$\Phi_0(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 - \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \right); \quad (53)$$

Здесь индексы у спиноров - соответствуют частицам. Вообще полная волновая функция будет антисимметричной, относительно перестановок частиц. А операторы останутся теми же в силу своей аддитивности:

$$\hat{A} = \sum_i \hat{A}_i; \quad (54)$$

Легко показать, что эта функция описывает состояние с полным спином $\hat{S} = 0$.

$$\sum_i (\hat{s}_{1i} + \hat{s}_{2i})^2 \Phi_0(1, 2) = 0; \quad (55)$$

Очевидно, что при вращении системы координат такая функция не должна изменяться. В виде формулы, где \hat{T} - произвольное вращение:

$$\hat{T} \Phi_0(1, 2) = \Phi_0(1, 2); \quad (56)$$

А сам оператор поворота запишется как:

$$\hat{T} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}; \quad (57)$$

Но каждый из электронов то может изменяться? Что с этим всем делать?

Как мы можем совместить эти два условия? Напишем:

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 - \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \right) = \left(\begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix}_2 - \begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix}_2 \begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix}_1 \right) = \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 - \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \right) \quad (58)$$

А последнее равенство выше из того, что мы хотим получить. Отсюда следует, что:

$$ad - bc = 1; \quad (59)$$

Сравнив матрицу и ее вид для вращения вокруг z получим:

$$e^{i(\phi_1 + \phi_2)} = 1; \quad (60)$$

Тогда например можно сделать так: $\phi_1 + \phi_2 = 0$. Так же как делали и в прошлый раз.

Вспомним про такую классную штуку как циклические координаты и симметрии из теоретической механике. Например импульс соответствует симметрии трансляции, а момент импульса - повороту вокруг оси, энергия - однородности времени.

Тогда чтобы проверить сохранение проекции момента (пусть даже спина) - нежно повернуть систему. Можно написать волновую функцию в повернутых координатах при помощи оператора момента импульса.

Задание: залезть в ЛЛ. Посмотреть на то, как трансляция связана с оператором момента импульса. Пользуясь этим знанием написать оператор поворота, записанный через оператор момента импульса или спиновые операторы.

Замечание: как пишется простой спинор? Обычно так:

$$\begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{bmatrix} \neq \psi(\vec{r}) \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}; \quad (61)$$

Единственный вариант, когда можно так написать - если операторы пространственные и спинорные действуют на разные координаты.

5 "Появление"спина.

Как спин вообще влияет на уравнение? В первом приближении это уравнение Паули. Чуть более продвинутый предел - спиноорбитальное взаимодействие. На самом деле все это сидит в уравнении Дирака, а все, что мы наблюдаем - некоторые его нерелятивистские приближения.

Уравнение Дирака для свободной частицы совпадает с уравнением Шредингера:

$$i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi; \quad (62)$$

А сам гамильтониан выглядит как:

$$\hat{H} = c\hat{\alpha}\hat{p} = mc^2\hat{\beta}; \quad (63)$$

Масс покоя и просто масс не существует. Есть просто масса.

Тогда получим:

$$\hat{H} = c(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_y\hat{p}_y) + \hat{\alpha}_z\hat{p}_z + mc^2\hat{\beta}; \quad (64)$$

А если писать альфа- и бета-матрицы:

$$\hat{\alpha}_i = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{bmatrix}; \quad (65)$$

$$\hat{\beta}_i = \begin{bmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{bmatrix}; \quad (66)$$

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

Задание: В некоторой системе координат задан спинор:

$$\begin{bmatrix} \sqrt{i} \\ 10^{27} \end{bmatrix} \quad (12)$$

Надо выяснить какое среднее значение проекции спина на ось, которая имеет углы α, β, γ с осями координат.

6 Появление спина

Он появился с одной стороны из эксперимента Штерна-Герлаха, а с другой - из эффекта Зеемана. И было видно, что есть не только пространственные координаты, но и что-то ещё.

Если же говорить про теорию - то это следствие уравнения Дирака.

Видно, что в соответствующем гамильтониане у нас фигурируют матрицы 4×4 . Соответственно и спиноры должны быть 4-х компонентными. Можно заметить, что производная по времени - первая. Значит задание волновой функции в начальный момент времени задаёт ее эволюцию на все оставшееся время.

А также в гамильтониан координаты входят так же, как и производная по-времени. С этой точки зрения время от координат не отличимо. Операторы \hat{a}, \hat{b} - такие, что:

$$\hat{H}^2 = c^2(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + m^2 c^4 = E^2; \quad (13)$$

То есть есть соблюдение релятивистского закона дисперсии. И эта связь не только для одной частицы, но и для целой системы.

Как преобразуется энергия при смене системы координат? Оказывается, что масса в этой записи остаётся неизменной - нет никаких масс покоя и масс движения.

Какая масса фотона? Их закона дисперсии фотона $E = \hbar\omega$. Тогда его масса равняется нулю.

Если мы возьмем два фотона, движущихся друг на встречу друг другу. Тогда её полный импульс $\vec{p} = 0$, а вот энергия $E = 2\hbar\omega$. Отсюда можно видеть, что масса получается отличной от нуля.

Задание: Проверить, что это утверждение справедливо и посмотреть соответствующий раздел в курсе теоретической физики ЛЛ.

Из уравнения Дирака видно, что волновая функция представляет собой 4-х компонентный столбец - биспинор Дирака.

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix}; \quad (14)$$

Тогда уравнение покомпонентно уравнение дирака имеет такой вид:

$$i\hbar\partial_t\psi_1 = c(p_x - ip_y)\psi_4 + cp_z\psi_3 + mc^2\psi_1; \quad (15)$$

$$i\hbar\partial_t\psi_2 = c(p_x + ip_y)\psi_3 - cp_z\psi_4 + mc^2\psi_2; \quad (16)$$

$$i\hbar\partial_t\psi_3 = c(p_x - ip_y)\psi_2 + cp_z\psi_1 - mc^2\psi_3; \quad (17)$$

$$i\hbar\partial_t\psi_4 = c(p_x + ip_y)\psi_1 + cp_z\psi_2 - mc^2\psi_4; \quad (18)$$

В случае, если частица с зарядом e движется в элетромагнитном поле $(\vec{A}; \psi)$, то уравнения Дирака записываются как:

$$i\hbar\partial_t\psi = \left(c\hat{\alpha}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right) + e\phi + mc^2\hat{\beta} \right) \psi; \quad (19)$$

И все это находится в полном соответствии с классической механикой.

Теперь зададимся вопросом: вернемся в классическую механику - когда сохраняется момент импульса? Только когда при поворотах вокруг какой-то оси ничего не меняется - то есть есть симметрия относительно поворота.

Что мы должны сделать в данном случае? проверить коммутативность какого-то оператора с гамильтонианом? То есть, если коммутатор какой-то величины с гамильтонианом зануляется - эта величина сохраняется.

Это можно объяснить при помощи Хейзенберговского представления:

$$\dot{\hat{A}} = [\hat{H}; \hat{A}]; \quad (20)$$

Вернемся к уравнению свободной частицы Дирака - например там будет коммутировать импульс с гамильтонианом, значит импульс будет сохраняться. Но также будет сохраняться и момент импульса в силу изотропности пространства. Соответствуют ли оператору $\hbar\hat{l} = [\hat{r} \times \hat{p}]$ - сохраняющаяся величина для свободной частицы? Рассмотрим произвольную компоненту z :

$$\hbar\dot{\hat{l}}_z = \hbar(\hat{H}\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{H}) = i\hbar c(\hat{a}_y\hat{p}_x - \hat{a}_x\hat{p}_y) \neq 0; \quad (21)$$

И аналогично для x , y компонент. Отсюда следует, что орибитальный момент - не является интегралом движения.

Но также ясно, что какой-то момент, назовём его полным - будет сохраняться. Определим его как:

$$\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{\square}_z; \quad (22)$$

Аналогично будет и для x , y . Мы хотим найти эту неизвестную величину. Чтобы полный момент сохранялся, нужно, чтобы коммутатор гамильтониана с этой добавкой был равен:

$$[\hat{H}; \hat{\square}_z] = i\hbar c(\hat{a}_x\hat{p}_y - \hat{a}_y\hat{p}_x); \quad (23)$$

Можно убедиться, что это удовлетворяется когда:

$$\hat{\square}_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_z & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_z \end{bmatrix} = \hat{S}_z; \quad (24)$$

Аналогично (тоже диагональные матрицы такого же вида) для оставшихся координат x , y . При этом гамильтониан оказался одновременно релятивистским и линейным по импульсам и времени.

Таким образом мы получаем \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z - операторы спина, действующие в пространстве биспиноров. Таким образом оператор полного момента для частицы - сумма орбитального и собственного момента импульса:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}; \quad (25)$$

Что мы с этого имеем? Как это влияет на классическую квантовую механику. Решим уравнение Дирака для свободной частицы, подставив вид плоской волны:

$$\psi_i = \psi_{i0} \exp\left\{-i\frac{Et}{\hbar}\right\} \exp\left\{i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right\}; \quad (26)$$

Таким образом получим систему алгебраических уравнений:

$$E\psi_{10} = c(p_x - ip_y)\psi_{40} + cp_z\psi_{30} + mc^2\psi_{10}; \quad (27)$$

$$E\psi_{20} = c(p_x + ip_y)\psi_{30} - cp_z\psi_{40} + mc^2\psi_{20}; \quad (28)$$

$$E\psi_{30} = c(p_x - ip_y)\psi_{20} + cp_x\psi_{10} - mc^2\psi_{30}; \quad (29)$$

$$E\psi_{40} = c(p_x + ip_y)\psi_{10} - cp_x\psi_{20} - mc^2\psi_{40}; \quad (30)$$

Для наличия решения такой системы уравнений мы должны приравнять нулю детерминант - по сути мы получим связь между импульсами и энергией.

$$E^2 = c^2\vec{p}^2 + m^2c^4; \quad (31)$$

И формально у нас получится неоднозначная связь энергии и импульса.

$$E_+ = \sqrt{c^2\vec{p}^2 + m^2c^4}; \quad (32)$$

$$E_- = -\sqrt{c^2\vec{p}^2 + m^2c^4}; \quad (33)$$

Если перейти к нерелятивистскому пределу $p \ll mc$, то получим:

$$E_+ \approx mc^2, \quad E_- = -mc^2; \quad (34)$$

А что делают дальше? Можно подставить это в уравнения и получить чуть упрощенные уравнения. Тогда в результате такого действия в нерелятивистском пределе получим:

$$\Phi_+ = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ O(v/c) \\ O(v/c) \end{bmatrix}; \quad (35)$$

И аналогично для отрицательной энергии:

$$\Phi_- = \begin{bmatrix} O(v/c) \\ O(v/c) \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix}; \quad (36)$$

Тогда получим что-то вроде предела:

$$\Phi_+ \rightarrow \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}; \quad (37)$$

$$\Phi_- \rightarrow \begin{bmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix}; \quad (38)$$

И что же с этим делать? Наличие частиц с отрицательными энергиями соответствует тому, что есть какие-то античастицы - или отсутствие нормальных частиц.

Представим, что все состояние, имеющие отрицательную энергию - заняты. А у нас свой мир с частицами положительной энергии. И у нас своя жизнь, а у отрицательных - своя. Тогда можем ли мы вытащить эти частицы? Можем - эффектом Клейна или с помощью двух фотонов - там могут быть проблемы с сохранением импульса.

Задание: Каким образом можно вытащить электрон с нижних состояний?

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

8 Атом

Атомы есть и их не нужно искусственно создавать. Поскольку они нас всюду окружают, то к ним прикован пристальный интерес. Какое отношение это имеет к магнетизму?

Какие предположения мы делали на счет его природы? Для начала можно предположить отсутствие взаимодействия электронов друг-с другом и спиновое взаимодействие с ядром.

Почему мы можем так сделать? Потому что можно на время пренебречь релятивистскими эффектами, которыми и является спин.

Рассмотрение конкретных атомов начато с Be . Далее можно рассмотреть атом Al ($z = 13$). У нас есть 3 квантовых числа: n , l , m , s .

- $1s^2$ - два электрона с разным спином (как и всегда),
- $2s^2$ - $n = 2$, $l = 0$, 2 электрона,
- $2p^6$ - $n = 2$, $l = 1$, 6 электронов,
- $3s^2$ - $n = 3$, $l = 0$, 2 электрона,
- $3p$ - $n = 3$, $l = 1$, $n = 1$, 1 электрон

Основной терм связан именно с внешним электроном $^2P_{1/2}$. А вообще как определяется: $^{2s+1}(L)_J$, где $L = P, S, D, F, \dots$ орбитальное квантовое число, S - спин, J - полный момент.

Другой пример Fe ($z = 26$) - железо:

- $1s^2$,
- $2s^2$
- $2p^6$,
- $3s^2$,
- $2p^6$,
- $3d^6$,
- $4s^2$

Вопрос - почему мы, не заполнив d орбиталь перешли на следующую s орбиталь? Потому что это более энергетически выгодная ситуация. Сейчас мы запишем соответствующий основной терм: 5D_4 , который соответствует $s = 2$, $L = 2$, $J = 4$. Этот терм отвечает самой низкой энергии.

Рассмотренный выше подход: складываются в \vec{L} - орбитальные моменты электронов, в \vec{S} - собственные моменты электронов, а полный момент $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ соответствует связи Рассел-Сандерса, т.н. LS связи. Такая связь называется нормальной она законна лишь в приближении отсутствия релятивистских эффектов, т.е. когда электро-статические взаимодействия существенно превышают релятивистские.

А если бы мы написали $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ - будет ли это точной записью взаимодействия? Нет, потому, что если у нас есть набор частиц, то оператор полного орбитального и собственного момента будет:

$$\hat{L} = \sum_{i=1}^N \hat{l}_i; \quad (1)$$

$$\hat{S} = \sum_{i=1}^N \hat{s}_i; \quad (2)$$

Но почему мы можем их складывать? Дело в том, что полная волновая функция системы частиц: $\Phi(\vec{r}_i, \sigma_i, \forall i)$. Если мы захотим ее представить через волновые функции одночастичных состояний то получим какую-то символическую кашу:

$$\Phi \sim \phi_{l_1, s_1} \cdot \phi_{l_2, s_2} \dots; \quad (3)$$

Ни откуда не следует что эта функция будет собственной для наших операторов. Даже собственные числа одного электрона не могут быть получены.

А спин здесь вообще ни при чем - ибо мы забыли на релятивизм. Окажется, что для большинства атомов с высокой точностью это приближение будет справедливым.

А если посмотреть на релятивистский случай - всегда ли мы можем сказать что и спиновой оператор и орбитальный момент имеют конкретные значения? Очень не всегда. А "хорошим" квантовым числом является именно полный момент, а эти лишь приближенными.

Релятивистские взаимодействия можно учесть как поправку, в частности спин-орбитальное, как наиболее сильное. Для электронной оболочки можно учесть, сопоставив этому взаимодействию оператор:

$$\overline{\hat{V}_{sl}} = \overline{\sum_i \alpha_i \hat{l}_i \hat{s}_i}; \quad (4)$$

Это усреднение по всей электронной оболочке. Тогда с хорошей точностью:

$$\overline{\hat{V}_{sl}} \approx A \vec{L} \vec{S}; \quad (5)$$

Электростатические взаимодействия в основном определяют энергию оболочки с параметрами L, S . А спин-орбитальное взаимодействие $\hat{V}_{L,S}$ приводит к тому, что энергия становится "слабо"зависящей от взаимной ориентации L, S , таким образом $V_{L,S}$ - определяет **тонкую структуру** атомных уровней. Т.е. Уровни частично расщепляются, образуя мультиплеты.

Сколько при этом образуется состояний, отличающихся энергией? Т.е. сколько состояний можно скомпоновать из состояний с заданными L, S , но отличающихся J . Очевидно, что при $L \geq S$ - таких состояний найдется $2S + 1$, а если $S \geq L$ - тогда $2L + 1$. Такой подход хорошо иллюстрируется при помощи "векторной" модели атома - это иллюстративная классическая модель. $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, в котором при постоянном \vec{J} вектора \vec{L} и \vec{S} складываются и прецессируют.

При этом выполняются коммутационные соотношения:

$$[\hat{V}_{LS}; \vec{J}^2] = 0; \quad (6)$$

$$[\hat{V}_{LS}; J_i] = 0; \quad (7)$$

$$[\hat{V}_{LS}; \vec{S}^2] = 0; \quad (8)$$

$$[\hat{V}_{LS}; \vec{L}^2] = 0; \quad (9)$$

$$[\hat{V}_{LS}; S_i] \neq 0; \quad (10)$$

$$[\hat{V}_{LS}; L_i] \neq 0; \quad (11)$$

Оценки величины A показывают, что $A \sim Z^2$ - таким образом по мере увеличения порядкового номера атома релятивистские взаимодействия квадратично растут, а LS схема становится всё менее правдоподобной.

Т.е. для тяжёлых атомов, когда релятивистские взаимодействия сравнимы с электростатическими для отдельного электрона l, s - являются "плохими" квантовыми числами, а сравнительно "Хорошим" в этом случае является квантовое число $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$.

А полный момент \vec{J} складывается из \vec{j} отдельных электронов. Такая схема называется jJ связью.

9 Понятие об "обменной" энергии

Если мы говорим про малый релятивизм, то мы говорим о присутствии в операторе Гамильтониана только слагаемых с кинетической энергией и потенциальной. Операторов спина в этом уравнении нет.

Отсутствие в гамильтониане спиновых операторов казалось бы лишь означает, что полная волновая функция системы электронов может быть записана через произведение 2-х функций - 1-а зависит только от координат частиц, другая - лишь от спиновых переменных частиц.

Ну и что?

Волновая функция системы тождественных частиц на самом деле должна обладать определённой симметрией по отношению к перестановке любой пары частиц. Т.е. операция замены $\xi_i \leftrightarrow \xi_j$ должны приводить к тому что волновая функция будет умножаться на ± 1 (бозоны и фермионы). Для фермионов это приводит к принципу Паули.

Сказанное выше есть следствие математического выражения принципа неразличимости (тождественности) частиц.

Задача: подумать над тем как экспериментально можно проверить принцип тождественности.

Заметим, что если частиц ≥ 2 волновая функция частиц вообще говоря не есть произведение функций, зависящих лишь от координат и функции, зависящей лишь от спина.

Принцип тождественности приводит к важным физическим следствиям. Например пусть у нас есть гамильтониан:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + U(\vec{r}_1) + U(\vec{r}_2)}_{\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} + \underbrace{U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}_{\hat{H}_{int}}; \quad (12)$$

Пусть n - нумерует одночастичные состояния гамильтониана:

$$\hat{H}'_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}); \quad (13)$$

Составим волновые функции, соответствующие стационарному состоянию с двухчастичным гамильтонианом, без взаимодействия $\hat{H}_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ собственные функции такого гамильтониана должны быть произведением двух частей - пространственной и спиновой.

Также такие функции должны быть:

- Антисимметричными
- Должно соответствовать ортонормированному базису.

Рассмотрим для начала координатную часть. Так как $\hat{H}_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{H}_0(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$, то координатная часть может быть или симметричной:

$$\Phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n(r_1)\psi_m(r_2) + \psi_n(r_2)\psi_m(r_1)); \quad (14)$$

и соответствовать энергии $E_n + E_m$, или антисимметричной:

$$\Phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n(r_1)\psi_m(r_2) - \psi_n(r_2)\psi_m(r_1)); \quad (15)$$

Соответственно и спиновая часть также может быть или симметричной, или антисимметричной. Для антисимметричной $S = 0$:

$$\Phi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1/2}(1)\psi_{-1/2}(2) - \psi_{1/2}(2)\psi_{-1/2}(1)); \quad (16)$$

Кроме того могут быть и функции, отвечающие другим значениям полного спина:

$$\Phi_s^{+1} = \psi_{1/2}(1)\psi_{1/2}(2); \quad (17)$$

Что соответствует $S = 1$, $S_z = 1$, или например:

$$\Phi_s^0 = \psi_{1/2}(1)\psi_{1/2}(2); \quad (18)$$

Соответствует $S = 1$, $S_z = 0$, а также:

$$\Phi_s^{-1} = \psi_{1/2}(1)\psi_{-1/2}(2); \quad (19)$$

При всем при этом:

$$S_z\psi_{1/2,-1/2} = \pm\frac{1}{2}\psi_{1/2,-1/2}; \quad (20)$$

Используя это мы можем составить полные антисимметричные функции. Построим синглетную функцию:

$$\Phi_{sin} = \Phi_s(r_1, r_2)\Phi_a(1, 2); \quad (21)$$

Для триплета:

$$\Phi_{tri}^{+1} = \Phi_a(r_1, r_2)\Phi_s^{+1}(1, 2); \quad (22)$$

$$\Phi_{tri}^0 = \Phi_a(r_1, r_2)\Phi_s^0(1, 2); \quad (23)$$

$$\Phi_{tri}^{-1} = \Phi_a(r_1, r_2) \Phi_s^{-1}(1, 2); \quad (24)$$

Все триплетные функции соответствуют одной и той же энергии, если мы пренебрежем H_{int} .

В состоянии синглета спины пары электронов противонаправлены. Теперь учтем H_{int} по теории возмущений. В первом приближении нам нужно вычислить матричные элементы:

$$\langle \Phi_{sin} | \hat{H}_{int} | \Phi_{sin} \rangle = \langle H_{int} \rangle(\uparrow\downarrow) = \langle (\psi_n(r_1)\psi_m(r_2)) | U(|r_1 - r_2|) | (\psi_n(r_1)\psi_m(r_2)) \rangle + \langle (\psi_n(r_1)\psi_m(r_2)) | U(|r_1 - r_2|) | (\psi_n(r_2)\psi_m(r_1)) \rangle; \quad (25)$$

В таком случае полный матричный элемент:

$$\langle \hat{H}_{int} \rangle(\uparrow\downarrow) = E_0 + J'_{ex}; \quad (26)$$

А что получается с триплетом?

$$\langle \Phi_{tri} | \hat{H}_{int} | \Phi_{tri} \rangle = \langle H_{int} \rangle(\uparrow\downarrow) = \langle (\psi_n(r_1)\psi_m(r_2)) | U(|r_1 - r_2|) | (\psi_n(r_1)\psi_m(r_2)) \rangle - \langle (\psi_n(r_1)\psi_m(r_2)) | U(|r_1 - r_2|) | (\psi_n(r_2)\psi_m(r_1)) \rangle; \quad (27)$$

А энергия:

$$\langle \hat{H}_{int} \rangle(\uparrow\downarrow) = E_0 - J'_{ex}; \quad (28)$$

Т.е. поправка тоже кулоновская. Т.е. Один электрон с координатой r_1 в состоянии n, а другой с r_2 - в состоянии m. При этом оба электрона в обоих состояниях одновременно. J_{ex} - называется обменным интегралом.

Если бы $J_{ex} > 0$ Тогда $H_{int}(\uparrow\uparrow) < H_{int}(\uparrow\downarrow)$, тогда сонаправленная конфигурация была бы более энергетически выгодной. Это соответствовало ферромагнитному упорядочению спинов.

В случае, если $J_{ex} > 0$, тогда $H_{int}(\uparrow\uparrow) > H_{int}(\uparrow\downarrow)$ соответствовало бы антиферромагнитному упорядочению. Но легко показать, что:

$$J'_{ex} = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{grad} \phi \mathbf{grad} \phi^* dr > 0; \quad (29)$$

Где введено обозначение:

$$\phi(\vec{r}) = \int \psi_n^*(\vec{r}_1) \psi_m(\vec{r}_1) \frac{e d\vec{r}_1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}|}; \quad (30)$$

Эта модель качественно хорошо описывает ситуацию, когда оба электрона принадлежать одному и тому же атому. очевидно, что рассматриваемая модель хороша в той мере, в какой хорошо работает теория возмущений, т.е. удачно выбрано невозмущенное состояние.

Модель, например хорошо описывает атом.

Задача: рассмотреть атом гелия.

Примечание: если ψ_n, ψ_m , принадлежат атому, то $E_0 \sim J'_{ex}$.

А теперь попробуем рассмотреть задачу, когда 2-а электрона принадлежат разным атомам.

Соответствующий гамильтониан будет иметь вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + U(\vec{r}_1 - \vec{R}_1) + U(\vec{r}_1 - \vec{R}_2) + U(\vec{r}_2 - \vec{R}_1) + U(\vec{r}_2 - \vec{R}_2) + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}; \quad (31)$$

Здесь $R_{1,2}$ - координаты ядер атомов.

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

8 Обменная энергия

У нас была формула, которая описывает взаимодействие электронов в низком порядке по скорости. Т.е. влияние орбитального движения одного электрона на орбитальное движение другого.

Самая простая система - атом. Но ещё мы должны рассматривать обменное взаимодействие. При этом такое взаимодействие - должно учитывать тождественность частиц - симметрию гамильтониана при перестановке одинаковых частиц. На самом деле все это имеет корни в квантовой электродинамике.

Мы считали спин-спиновое взаимодействие. И оказалось, что например железо должно терять магнитные свойства при нагреве всего в пару градусов, если учитывать только спин - спиновое взаимодействие.

Был простейший пример - почти атом гелия. Для него запишем одноэлектронные волновые функции:

$$\psi_{n\uparrow}(\vec{r}_{1,2}) = \psi(\vec{r}_{1,2} - \vec{R}_n) \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}_{1,2} = \psi_n(\vec{r}_{1,2}) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_{1,2}; \quad (1)$$

И аналогично для другого центра m , и полностью аналогично, кроме спиновой части, для обратного спина: $\psi_{m\uparrow}(\vec{r}_{1,2}), \psi_{n\downarrow}(\vec{r}_{1,2}), \psi_{m\downarrow}(\vec{r}_{1,2})$. Здесь и ниже индексы m, n обозначают как центрированность волновых функций, так и какие-то квантовые числа. При этом координатные части таких волновых функций удовлетворяют уравнениям Шредингера:

$$\left(\frac{\hat{p}_{1,2}^2}{2m} + U(\vec{r}_{1,2} - \vec{R}_n)\right)\psi_n(\vec{r}_{1,2}) = \hat{H}_n(\vec{r}_{1,2})\psi_n = E_{0n}\psi_n; \quad (2)$$

И полностью аналогично для индекса m . При этом ψ_n, ψ_m - точные координатные волновые функции, соответствующие состояниям, при $|\vec{R}_n - \vec{R}_m| \rightarrow \infty$ - т.е. при отсутствии взаимодействия систем.

Из этих функций составим двухэлектронные функции, которые будем использовать в качестве функций нулевого приближения. В полной аналогии с тем, что мы уже делали.

Получаем одну функцию, являющуюся спиновым синглетом, и имеющую нулевой полный спин:

$$\Phi_{sin} = \Phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Phi_a(1, 2); \quad (3)$$

А также триплетные функции, имеющие разные спины $+1, 0, -1$:

$$\Phi_{tri}^{+1} = \Phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Phi_s^{+1}(1, 2); \quad (4)$$

$$\Phi_{tri}^0 = \Phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Phi_s^0(1, 2); \quad (5)$$

$$\Phi_{tri}^{-1} = \Phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Phi_s^{-1}(1, 2); \quad (6)$$

А как устроены симметричные и антисимметричные пространственные части? В данном случае так:

$$\Phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1+|l|^2)}} (\psi_n(r_1)\psi_m(r_2) + \psi_n(r_2)\psi_m(r_1)); \quad (7)$$

$$\Phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1-|l|^2)}} (\psi_n(r_1)\psi_m(r_2) - \psi_n(r_2)\psi_m(r_1)); \quad (8)$$

А спиновые части в точности совпадают с тем, что мы писали для случая атома гелия. Дадим определению коэффициенту l - это интеграл перекрытия волновых функций:

$$l = \int \psi_n^* \psi_m d^3\vec{r}; \quad (9)$$

Очевидно, что m, n - соответствуют разным центрам. Т.е. мы исключили из рассмотрения состояния, когда электроны находятся на одном центре. Эти состояния давали бы чрезмерно большую энергию возмущения $e^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$.

Используя такие приближенные функции, вычислим приближенные значения энергии, им соответствующие. Тогда получим:

$$E_{s(a)} = \int \Phi_{s(a)}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{H} \Phi_{s(a)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3\vec{r}; \quad (10)$$

Тогда получим для антисимметричной части:

$$E_a = E_{0n} + E_{0m} + \frac{K - A}{1 - |l|^2}; \quad (11)$$

А для симметричного получим:

$$E_s = E_{0n} + E_{0m} + \frac{K + A}{1 + |l|^2}; \quad (12)$$

Тогда у нас получается "довесок" к энергиям одноэлектронных состояний. При этом введены следующие обозначения:

$$K = \int |\psi_n(\vec{r})|^2 U(\vec{r} - \vec{R}_m) d^3\vec{r} + \int |\psi_m(\vec{r})|^2 U(\vec{r} - \vec{R}_n) d^3\vec{r} + \int |\psi_n(\vec{r}_1)|^2 |\psi_m(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}; \quad (13)$$

Т.е. K - описывает энергию взаимодействия электронов с противоположными центрами и между собой.

А другая компонента:

$$A = l^* \int \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) U(\vec{r} - \vec{R}_n) d^3\vec{r} + l \int \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) U(\vec{r} - \vec{R}_m) d^3\vec{r} + \int \psi_m^*(\vec{r}_1) \psi_n^*(\vec{r}_2) \psi_m(\vec{r}_2) \psi_n(\vec{r}_1) \frac{e^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}; \quad (14)$$

Используя это вычислим энергии состояний с сонаправленным расположением спина и с противоположенным спином.

$$E_s - E_a = 2 \frac{A - K|l|^2}{1 - |l|^4} = 2J_{ex}; \quad (15)$$

Важно, что величина энергии обменного взаимодействия может быть как положительной, так и отрицательной. В принципе это может послужить основой определения того, - будет ли основное состояние ферромагнитным или антиферромагнитным.

В отсутствии перекрытия отсутствует и обмен:

$$E_s \rightarrow_{l \rightarrow 0, A \rightarrow 0} E_a; \quad (16)$$

Замечание: в случае 2-х центров $E_0 \approx J_{ex}$.

Учет спинов электронов приводит к тому, что энергия системы электронов даже в нерелятивистском приближении (когда сам гамильтониан не зависит от спиновых переменных оказывается зависящей от спина). А именно - благодаря принципу Паули координатная часть ВФ (ее симметрия) оказывается зависящей от спина (неявно). Но вид координатной части волновой функции как раз и определяет величину Кулоновской энергии системы электронов.

Раньше мы выписывали полный спин системы, когда говорили о термах атомов. Это было сделано именно для учёта такой неявной зависимости от спина. Компануя пространственную часть со спиновой, в случае только кулоновского взаимодействия мы должны получить нечто, зависящее от спина.

А в случае 3-х электронных функций мы будем получать почти то же самое, только работать будем с детерминантами 3 на 3.

9 Магнитный момент электрона

Вернемся к гамильтониану уравнения Паули:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\sigma} \vec{\mathcal{H}}; \quad (17)$$

Можно раскрыть это как:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} (\hat{p} \vec{A} + \vec{A} \hat{p}) + \frac{e^2}{2mc} \vec{A}^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\sigma} \vec{\mathcal{H}}; \quad (18)$$

Если мы выберем калибровку:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{\mathcal{H}} \times \vec{r}]; \quad (19)$$

То сможем ещё упростить уравнение Паули:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2mc} \vec{\mathcal{H}} [\vec{r} \times \hat{p}] - \frac{e\hbar}{mc} \hat{s} \vec{\mathcal{H}} = \hat{H}_0 - \frac{e}{2mc} \vec{\mathcal{H}} \hat{l} - \frac{e\hbar}{mc} \hat{s} \vec{\mathcal{H}} \quad (20)$$

В таком случае можем написать в ещё более красивой форме, приведя к одному виду:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{|e|\hbar}{2mc} (\hat{l} + 2\hat{s}) \vec{\mathcal{H}}; \quad (21)$$

Отсюда видно, что орбитальному моменту электрона соответствует магнитный момент:

$$\hat{\mu}_l = -\frac{|e|\hbar}{2mc} \hat{l}; \quad (22)$$

Задача: Задача после §67 ЛЛЗ. С 3 p электронами. Найти полную волновую функцию.

Спиновому моменту также соответствует какой-то магнитный момент:

$$\hat{\mu}_s = -\frac{|e|\hbar}{mc}\hat{s}; \quad (23)$$

Таким образом полный магнитный момент электрона \hat{J} соответствует магнитный момент:

$$\hat{\mu}_j = \frac{|e|\hbar}{2mc}(\hat{l} + 2\hat{s}); \quad (24)$$

Можно это немного упростить введя обозначение магнетона Бора:

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc}; \quad (25)$$

Если рассматривать электронную оболочку атома, то аналогично имеем:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_B(\hat{L} + 2\hat{S})\vec{H}; \quad (26)$$

Поэтому магнитный момент электронной оболочки, связанный с орбитальным моментом:

$$\hat{\mu}_L = -\mu_B\hat{L}; \quad (27)$$

В таком случае вводится параметр:

$$\mu_L = \mu_B\sqrt{L(L+1)}; \quad (28)$$

Аналогично и со спином:

$$\hat{\mu}_S = -\mu_B 2\hat{S}; \quad (29)$$

Что порождает параметр:

$$\mu_S = 2\mu_B\sqrt{S(S+1)}; \quad (30)$$

Из этого следует, что:

$$g_L \equiv 1 = \frac{|\vec{M}_L|}{\hbar|\vec{L}|} \frac{2mc}{|e|}; \quad (31)$$

Спиновое же движение характеризуется:

$$g_S \equiv 2 = \frac{|\vec{M}_S|}{\hbar|\vec{S}|} \frac{2mc}{|e|}; \quad (32)$$

Очевидно, что и для полного магнитного момента, и для полного момента можно ввести соответствующее магнито- механическое соотношение. Будем считать, что справедлива L , S связь, т.е. L , S (по модулю) являются хорошими интегралами движения. Это значит что в стационарном состоянии они хорошо определены. А в свою очередь J , J_z - определены точно.

Кроме того будем считать, что ось z - по какой то причине выделена. Тогда можно написать для такого стационарного состояния:

$$\langle \hat{L} \hat{J} \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{J}^2 + \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \rangle = \frac{1}{2} (J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)); \quad (33)$$

И полностью аналогично для спина:

$$\langle \hat{S} \hat{J} \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2 \rangle = \frac{1}{2} (J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)); \quad (34)$$

Все эти средние - для удобного нам стационарного состояния. Тогда в рамках векторной модели мы получаем, что:

$$\langle \cos(\hat{L}; \hat{J}) \rangle = \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{L(L+1)J(J+1)}}; \quad (35)$$

$$\langle \cos(\hat{S}; \hat{J}) \rangle = \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2\sqrt{S(S+1)J(J+1)}}; \quad (36)$$

Тогда мы можем представить, что вектор \vec{J} - складывается из векторов \vec{S} , \vec{L} , которые "крутятся вокруг" \vec{J} . Сам же вектор \vec{J} - прецессирует вокруг оси z с фиксированным \vec{J}_z .

Из этой векторной модели можем найти проекцию на ось \vec{J} :

$$\langle \vec{M}_L \rangle_{\vec{J}} = -\mu_B \sqrt{L(L+1)} \langle \cos(\hat{L}; \hat{J}) \rangle = -\mu_B \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}}; \quad (37)$$

Полностью аналогично и для спиновой части:

$$\langle \vec{M}_S \rangle_{\vec{J}} = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)} \langle \cos(\hat{S}; \hat{J}) \rangle = -\mu_B \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{\sqrt{J(J+1)}}; \quad (38)$$

Таким образом получаем, что каждая из компонент магнитного момента в проекции на \vec{J} дает вклад в полный момент:

$$M_J \equiv \langle \vec{M} \rangle_{\vec{J}} = \langle \vec{M}_L \rangle_{\vec{J}} + \langle \vec{M}_S \rangle_{\vec{J}}; \quad (39)$$

В таком случае мы получаем по итогу:

$$N_J = -\mu_B \underbrace{\left(1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \right)}_{g_J} \sqrt{J(J+1)}; \quad (40)$$

А само g_J - называется фактором Ланде. Это полный аналог магнитомеханических соотношений. То, что $g_S \neq g_L$ - называется гиромагнитной аномалией спина. Из-за этой аномалии вектора \vec{M}_J , \vec{J} - не коллинеарны, в отличие от \vec{M}_L , \vec{L} и \vec{M}_S , \vec{S} .

Замечание: по поводу спинового магнетизма ядер, можно заметить следующее: в формуле для магнетона Бора можно подставить массу протона и получим ядерный магнетон:

$$\mu_n = \frac{|e|\hbar}{2m_p c} \approx \frac{1}{1836} \mu_B; \quad (41)$$

В этом причина малости ядерного магнитного момента, в сравнении с магнетизмом электронной оболочки.

Мы узнали, что отдельные атомы не обладают нескомпенсированным магнитным моментом. Стало понятно, что произойдет, если эти атомы выстроены в цепочку. Теперь можно перейти к коллективным явлениям.

10 Спиновой обменный оператор Дирака. Взаимодействие Ван-Флека-Гейзенберга.

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

11 Спиновой обменный оператор Дирака. Взаимодействие Ван-Флека-Гейзенберга.

К чему мы пришли? В основном мы занимались обменным взаимодействием. Это так причина, которая может объяснять эффективное взаимодействие частиц со спином. Это может объяснять ферромагнетизм и антиферромагнетизм.

В качестве объектов мы в основном рассматривали атом. И поняли почему может быть нескомпенсированный момент.

А что происходит в твердом теле? Есть ли какое-то упорядочение? Мы начнем с простых моделей.

Легко убедиться, что собственные значения и собственные функции оператора:

$$\hat{V}_{ex} = -\frac{1}{2}J_{ex}(1 + 4\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2); \quad (1)$$

Действующего в пространстве спиноров:

$$\Phi_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2; \quad (2)$$

$$\Phi_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2; \quad (3)$$

$$\Phi_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2; \quad (4)$$

$$\Phi_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2; \quad (5)$$

Тогда собственные значения получаются равными:

$$J_{ex} \rightarrow \Phi_2 - \Phi_3 = \Phi_a(1, 2); \quad (6)$$

$$-J_{ex} \rightarrow \Phi_1 = \Phi_s^{+1}(1, 2); \quad (7)$$

$$-J_{ex} \rightarrow \Phi_2 + \Phi_3 = \Phi_s^0(1, 2); \quad (8)$$

$$-J_{ex} \rightarrow \Phi_4 = \Phi_s^{-1}(1, 2); \quad (9)$$

Таким образом, при рассмотрении примера в разделе VIII мы интересовались бы лишь смещением уровней из-за обменного взаимодействия, то достаточно было бы рассмотреть оператор \hat{V}_{ex} - спиновой обменный оператор Дирака.

И у нас сейчас единственная степень свободы - просто спин. А дальше надо сделать другие шаги.

Из \hat{V}_{ex} видно, что *взаимодействие спинов изотропно и зависит лишь от взаимной ориентации спинов*. Т.е. состояния бесконечно вырождены по направлениям спинов.

Спиновой обменный оператор Дирака допускает важное обобщение. Пусть атомы с отличными от 0 спиновыми моментами располагаются в узлах кристаллической решётки. И пусть в следствии вида собственных значений между электронами соседних атомов существует обменное взаимодействие. Тогда, пользуясь усредненными величинами, оператор обменного взаимодействия между спиновыми моментами атомов может быть записан в виде Гейзенберговского гамильтониана:

$$\hat{H}_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j; \quad (10)$$

Т.е. мы считаем обменные энергии зависящими лишь от разницы координат частиц:

$$J_{ij} = J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|); \quad (11)$$

Такой гамильтониан 10 был введен Ван-Флеком, а ферромагнетизм был рассмотрен подробно Гейзенбергом. А что за полные операторы спина? Это должен быть оператор, действующий на атом целиком. В целом эта штука должна быть похожа на оператор полного момента. Если у нас n электронов в таком атоме, то матрицы \hat{S} должны быть размером $2n + 1$ - т.е. любому собственному орбитальному моменту мы сопоставляем отдельную "координату".

При этом ферромагнетизм отвечает $J_{ij} < 0$ - тогда энергия в состоянии со спинами в одну сторону будет наименьшей.

12 Локализованные невзаимодействующие моменты. Парамагнетизм.

Если есть невзаимодействующие спины но во внешнем поле. Пусть система состоит из N невзаимодействующих атомов, обладающих моментом J . Во внешнем статическом поле \vec{H} устроен следующим образом:

$$\hat{H} = \sum g_j \mu_B m_i \mathcal{H}; \quad (12)$$

Здесь $m = J_z = J \dots - J$ - проекция момента отдельного атома, а $\vec{z} \uparrow \vec{H}$. Здесь мы пользуемся неявно векторной моделью атома. Считаем, что точными интегралами являются J^2 , J_z , а хорошими интегралами L , S .

Понятно почему сохраняется J_z , а почему J^2 - ? Потому что здесь аналогия с вырожденной теорией возмущения - там мы берем в первом порядке возмущения функции соответствующие начальному вырожденному состоянию, не примешивая сторонние.

Как мы помним, при наложении внешнего поля у нас получалось:

$$\mu_B(\vec{L} + 2\vec{S})\vec{H} = \mu_B(\vec{J} + \vec{S})\vec{H} = \mu_B(\vec{J}_z + \vec{S}_z)\vec{H}; \quad (13)$$

Можем предположить:

$$S_z = |\vec{S}| \cos(\vec{S}; \vec{J}) \cos(\vec{J}; \vec{H}); \quad (14)$$

Раскладывая по проекциям можем получить:

$$\cos(\vec{J}; \vec{H}) = \frac{J_z}{|\vec{J}|}; \quad (15)$$

А также запишем, исходя из коммутационных соотношений:

$$|\vec{S}| |\vec{J}| \cos(\vec{S}; \vec{J}) = \frac{1}{2} (J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)); \quad (16)$$

В таком случае:

$$S_z = \frac{\sqrt{S(S+1)}}{\sqrt{S(S+1)}} \frac{J_z}{J(J+1)} \frac{1}{2} (J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)); \quad (17)$$

Тогда в итоге у нас получится:

$$\mu_B (\vec{L} + 2\vec{S}) \vec{\mathcal{H}} = \mu_B J_z \left(1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \right) \vec{\mathcal{H}}; \quad (18)$$

Это у нас получается фактор Ланде. Теперь попробуем вычислить статсумму.

$$Z_N = \left(\sum_{m=-J}^J \exp \left(-\frac{g_J \mu_B m \mathcal{H}}{T} \right) \right)^N; \quad (19)$$

Это в случае отсутствия взаимодействия - тогда статсумма полной системы - просто произведение статсумм отдельных элементов. Можно показать, что:

$$Z_N = \left(\frac{\sinh \left(\frac{2J+1}{2J} x \right)}{\sinh \left(\frac{x}{2J} \right)} \right)^N = (Z)^N; \quad (20)$$

При этом безразмерная величина:

$$x = \frac{g_J \mu_B J \mathcal{H}}{T}; \quad (21)$$

Отсюда видно понятие "высокой температуры когда $x \ll 1$.

В равновесии у нас проекция получится равной:

$$\langle M_z \rangle = \sum_{conf} \left(- \sum_{i=1}^N g_J \mu_B m_i \right) \exp \left(- \frac{\sum_{i=1}^N g_J \mu_B m_i \mathcal{H}}{T} \right) / Z_N; \quad (22)$$

И когда мы все это посчитаем, то увидим:

$$\langle M_z \rangle = \frac{N g_J \mu_B \sum_{m=-J}^J m \exp(mx/J)}{Z}; \quad (23)$$

Легко показать, что:

$$\langle M_z \rangle = N g_J \mu_B J B_J(x); \quad (24)$$

Где подразумевается т.н. функция Бриллюэна:

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth \left(\frac{2J+1}{2J} x \right) - \frac{1}{2J} \coth \left(\frac{x}{2J} \right); \quad (25)$$

Рассмотрим предельный случай высокой температуры $x \ll 1$. Тогда:

$$B_J(x) \approx \frac{J+1}{3J} x; \quad (26)$$

В таком случае средний момент:

$$\langle M_z \rangle \approx \frac{Ng_J^2 J(J+1)}{3T} \mathcal{H}; \quad (27)$$

Но есть еще и магнитная *восприимчивость*. В данном случае она подчиняется закону Кюри:

$$\chi = \frac{\partial \langle M_z \rangle}{\partial \mathcal{H}} = \frac{Ng_J^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3} \frac{1}{T}; \quad (28)$$

А что будет, когда температура низка?

$$\langle M_z \rangle \approx Ng_J \mu_B J \left(1 - \frac{1}{J} \exp\left(-\frac{g_J \mu_B \mathcal{H}}{T}\right) \right); \quad (29)$$

Можно видеть что при абсолютном нуле:

$$\langle M_z \rangle \rightarrow_{T \rightarrow 0} Ng_J \mu_B J; \quad (30)$$

Но тогда восприимчивость:

$$\chi = \frac{Ng_J^2 \mu_B^2}{T} \exp\left(-\frac{g_J \mu_B \mathcal{H}}{T}\right); \quad (31)$$

Видно, что она обращается в ноль. Это за счет того, что все атомы и так уже упорядочены.

А теперь попробуем все это упорядочить за счет еще и взаимодействия самих атомов.

13 Ферромагнетизм "на пальцах". Модель Кюри-Вейса. Приближение среднего (молекулярного) поля.

Первое, что можно предположить - пусть остальные частицы создают некоторое среднее поле, тогда все остальное идет уже по накатанной.

Гейзенберговский гамильтониан 10 является подходящей основой для теории магнетизма в диэлектриках, где электроны достаточно хорошо локализованы, а магнитный момент связан именно со спинами. Это предположение в точности выполняется в атомах или ионах, где $L = 0$, например в Mn^{2+} , Gd^{2+} . Кроме того, 10 может описывать магнетизм и в переходных металлах Fe , Co , Ni . Намагниченность этих металлов обусловлена спинами d электронов, которые хорошо локализованы.

Вспомним, что мы рассматривали Fe - последние 2-е оболочки d , s , причем d - не заполнено до конца, а еще она по радиусу меньше. Это в отдельном атоме. При этом в кристалле электронные состояния становятся делокализованными. Это - причина того, что энергетический уровень превращается в зону.

Когда делокализуется d электрон - зона получается очень узкой. У них оказывается очень большая масса, низкая подвижность, поэтому они оказываются практически неподвижными.

Поэтому в грубой модели есть 2-е группы электронов - легкие и подвижные s электроны, а еще и "локализованные" d электроны. Т.е. мы "забываем" про то, что они образуют зону.

Из 10 видно, что если $J_{ij} > 0$, то энергетически выгодным при $T = 0$ является состояние, где все спины \vec{S} сонаправлены - ферромагнитное упорядочение. В образце возникает

спонтанный магнитный момент \vec{M} . По мере роста температуры происходит расупорядочение спинов (спонтанный магнитный момент уменьшается).

Точка, при которой спонтанный магнитный момент обращается нуль $\vec{M} = 0$. Простейшее описание ферромагнетика можно получить в рамках среднего поля. Рассматривается спин отдельного атома. Все взаимодействие спина этого атома со спинами остальных атомов (в рамках Гейзенберговского гамильтониана) заменяется взаимодействием с некоторым эффективным полем. *По идее Вейса это эффективное (как бы магнитное) поле пропорционально среднему истинному магнитному моменту кристалла.*

Выделим в 10 спин отдельного атома. Т.е. запишем исходя из 10 гамильтонианов одного атома.

$$\hat{H}_{ex,i} = -\hat{S}_i J_0 \sum_{j=1}^Z \hat{S}_j; \quad (32)$$

В 32 учтено взаимодействие с ближайшими соседями. И положено $J_{ij} = J_0$. Если сопоставить этому гамильтониану взаимодействие с неким "магнитным" полем \mathcal{H}_{eff} , то:

$$\hat{H}_{ex} = g_s \mu_B \hat{S}_i \mathcal{H}_{eff}; \quad (33)$$

В соответствии с идеей Вейса в 32 заменим $\hat{S}_j \rightarrow \langle \hat{S}_j \rangle$. Тогда наше эффективное поле:

$$\mathcal{H}_{eff} = -\frac{J_0}{g_s \mu_B} \sum_{j=1}^Z \langle \hat{S}_j \rangle = -\frac{J_0 z}{g_s \mu_B} \langle \hat{S} \rangle; \quad (34)$$

Тогда для полного магнитного момента кристалла получим что-то вроде:

$$\vec{M} = -N g_s \mu_B \langle \hat{S} \rangle; \quad (35)$$

Из этих соотношений 34, 35 мы имеем:

$$\mathcal{H}_{eff} = \frac{z J_0}{N g_s^2 \mu_B^2} \vec{M} = \gamma \vec{M}; \quad (36)$$

Здесь γ - коэффициент молекулярного поля Вейса:

$$\gamma = \frac{z J_0}{N g_s^2 \mu_B^2}; \quad (37)$$

теперь мы сможем применять уже готовые формулы для внешнего магнитного поля.

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

Мы от атомных систем ушли к твердому телу. Теперь стали рассматривать систему спинов с обменным взаимодействием. Используем для этого гамильтониан Гейзенберга. Мы хотим объяснить ферромагнетизм и антиферромагнетизм в первую очередь.

Можем рассмотреть отсутствие прямого взаимодействия спинов. Однако предположим, что они создают общее среднее магнитное поле и взаимодействуют уже с ним.

Напрашивается соблазн использовать гамильтониан для диполя во внешнем поле:

$$\hat{H} = -\hat{\vec{P}}\vec{E}; \quad (1)$$

В классической физике показывается, что электрические диполи во внешнем поле начинают колебаться вокруг направления поля. А магнитные диполи будут двигаться по кругу относительно направления поля.

Задача: В чем отличие между поведением магнитных и электрических диполей в однородном внешнем поле. При том, что гамильтонианы у них одинаковые.

Дальше рассмотрим теорию среднего поля Вейса. Если система спинов находится во внешнем поле \mathcal{H}_f , то спин i -ого атома находится в поле:

$$\vec{\mathcal{H}}'_f = \vec{\mathcal{H}}_f + \vec{\mathcal{H}}_{ef}; \quad (2)$$

Если вспомнить, что получали в парамагнетизме. То заменив реальное поле на модифицированное, получим самосогласованное выражение - трансцендентное уравнение.

$$\langle M_z \rangle = Ng_s\mu_B S B_s(x); \quad (3)$$

В данном случае:

$$x = \frac{g_s\mu_B S(\mathcal{H}_{fz} + \gamma\langle M_z \rangle)}{T}; \quad (4)$$

Это т.н. уравнение Кюри-Вейса. Дальше мы немного с ним поработаем. Рассмотрим предельные случаи:

- **Высокие температуры:** $x \ll 1$, получим:

$$\langle M_z \rangle = \frac{Ng_s^2\mu_B^2 S(S+1)}{3T}(\mathcal{H}_{fz} + \gamma\langle M_z \rangle); \quad (5)$$

Разрешив его получим:

$$\langle M_z \rangle = \frac{\frac{Ng_s^2\mu_B^2 S(S+1)}{3}}{T - \frac{zJ_0 S(S+1)}{3}} \mathcal{H}_{fz}; \quad (6)$$

Здесь вводится величина - парамагнитная температура Кюри:

$$\theta = \frac{ZJ_0S(S+1)}{3}; \quad (7)$$

Соответствующая магнитная восприимчивость:

$$\chi = \partial_{\mathcal{H}_{fz}} \langle M_z \rangle = \frac{Ng_s^2\mu_B^2S(S+1)}{T - \theta}; \quad (8)$$

- **Спонтанная намагниченность:** Пусть внешнее поле отсутствует $\mathcal{H}_{fz} = 0$, тогда можно написать:

$$\langle M_z \rangle = Ng_s\mu_B S \left(\frac{2S+1}{S+1} \coth \left(\frac{2S+1}{2S} \frac{ZJ_0S}{Ng_s\mu_B T} \langle M_z \rangle \right) - \frac{1}{2S} \coth \left(\frac{1}{2S} \frac{ZJ_0S}{Ng_s\mu_B T} \langle M_z \rangle \right) \right); \quad (9)$$

Введем величину для оберазмеривания:

$$y = \frac{\langle M_z \rangle}{Ng_s\mu_B}; \quad (10)$$

Тогда подставляя увидим:

$$y = \frac{2S+1}{2} \coth \left(\frac{2S+1}{2S} \frac{ZJ_0S}{T} y \right) - \frac{1}{2} \coth \left(\frac{1}{2S} \frac{ZJ_0S}{T} y \right); \quad (11)$$

Это уравнение имеет решение, если:

$$\frac{2S+1}{2} \partial_y \coth \left(\frac{2S+1}{2S} \frac{ZJ_0S}{T} y \right) - \frac{1}{2} \partial_y \coth \left(\frac{1}{2S} \frac{ZJ_0S}{T} y \right) \geq 1; \quad (12)$$

Условие превращается в:

$$1 \leq \frac{ZJ_0S(S+1)}{3T}; \quad (13)$$

Отсюда получается условие на критическую температуру:

$$T \leq T_c = \frac{ZJ_0S(S+1)}{3}; \quad (14)$$

Она характеризует, когда пропадёт средняя намагниченность. В рамках теории среднего поля $T_c = \theta$. Z - число соседей. Из этой формулы например можно оценить интеграл взаимодействия.

- **Низкие температуры:** Разложим всё, что уже получили при больших значениях x .

$$\langle M_z \rangle = Ng_s\mu_B S - Ng_s\mu_B \cdot \exp \left(-\frac{ZJ_0S\langle M_z \rangle}{TNg_s\mu_B S} \right); \quad (15)$$

Тогда можно упростить:

$$\langle M_z \rangle|_{T=0} \approx Ng_s\mu_B S = M_0; \quad (16)$$

Подстав

$$\langle M_z \rangle = M_0 \left(1 - \frac{1}{S} \exp \left(-\frac{3}{S+1} \frac{T_c}{T} \right) \right); \quad (17)$$

Уравнение 17 показывает, что насыщение достигается только при нулевой температуре, однако сама эта зависимость не соответствует точному решению для гамильтониана Гейзенберга.

- **Намагниченность при температуре Кюри:** Разложение $B_s(x)$, $x \ll 1$.

$$B_s\left(\frac{\langle M_z \rangle}{Ng_s\mu_B} \frac{ZJ_0S}{T}\right) \approx \frac{(2S+1)^2 - 1}{4S^2} \frac{ZJ_0S}{3T} \frac{\langle M_z \rangle}{Ng_s\mu_B} - \frac{(2S+1)^4 - 1}{16S^3} \frac{1}{45} \left(\frac{ZJ_0S}{T} \frac{\langle M_z \rangle}{Ng_s\mu_B}\right)^3 = \alpha; \quad (18)$$

Используя это разложение и уравнение 9 при $T \sim T_c$ мы имеем:

$$\alpha \approx \frac{\langle M_z \rangle}{Ng_s\mu_B S} \approx \sqrt{\frac{10}{3} \frac{(S+1)^2}{(S+1)^2 + S^2}} \sqrt{\frac{T_c - T}{T}}; \quad (19)$$

Это неплохо согласуется с экспериментом, но не с каждым.

Если мы смотрим за движением атома в классической физике внутри твердого тела - получим модель грузиков на пружинках. Но в такой структуре возможны и волны - акустические и оптические.

Пусть вначале спины торчат в одну сторону. И можно полагать, что после возбуждения они будут прецессировать.

14 Динамика магнитной решетки ферромагнетика с обменным взаимодействием.

Рассмотрим **линейную** цепочку из спинов. Пусть система изолирована и находится в состоянии, когда все спины, которые рассматриваются как вектора, сонаправлены и неподвижны.

Вместо Гамильтониана Гейзенберга будем иметь:

$$H_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j; \quad (20)$$

Соответствующее механическое уравнение движения в формализме скобок Пуассона будет:

$$\dot{\vec{S}}_i = [H_{ex}; \vec{S}_i]; \quad (21)$$

Поскольку скобки Пуассона для компонент механического момента:

$$[M_\alpha; M_\beta] = -M_\gamma; \quad (22)$$

Где α, β, γ - соответствуют x, y, z с циклическими перестановками.

Тогда по аналогии мы должны получить такие же скобки Пуассона для спинов - в силу соответствия скобок Пуассона и коммутаторов, и спинов и момента.

$$[S_\alpha; S_\beta] = -\frac{1}{\hbar} S_\gamma; \quad (23)$$

Будем считать, что ось ОХ направлена вдоль цепочки, а в равновесном состоянии все спины направлены по оси ОZ. Ограничиваясь взаимодействием лишь с ближайшими соседями, получим:

$$\dot{S}_{ix} = \frac{1}{\hbar} JS_{iy}S_{(i+1)z} + \frac{1}{\hbar} JS_{iy}S_{(i-1)z} - \frac{1}{\hbar} JS_{iz}S_{(i+1)y} - \frac{1}{\hbar} JS_{iz}S_{(i-1)y}; \quad (24)$$

Аналогично и для других компонент:

$$\dot{S}_{iy} = \frac{1}{\hbar} JS_{iz}S_{(i+1)x} + \frac{1}{\hbar} JS_{iz}S_{(i-1)x} - \frac{1}{\hbar} JS_{ix}S_{(i+1)z} - \frac{1}{\hbar} JS_{ix}S_{(i-1)z}; \quad (25)$$

$$\dot{S}_{iz} = \frac{1}{\hbar} JS_{ix}S_{(i+1)y} + \frac{1}{\hbar} JS_{ix}S_{(i-1)y} - \frac{1}{\hbar} JS_{iy}S_{(i+1)x} - \frac{1}{\hbar} JS_{iy}S_{(i-1)x}; \quad (26)$$

Дальше можно всё это линеаризовать. Будем искать решение этого уравнения, соответствующее малому отклонению от основного состояния:

$$S_z^0 = S_0, \quad S_y^0 = S_z^0 = 0; \quad (27)$$

Тогда полный спин:

$$\vec{S} = \vec{S}^0 + \vec{\sigma}; \quad (28)$$

Тогда получим:

$$S_x = \sigma_x, \quad S_y = \sigma_y, \quad S_z = S_0; \quad (29)$$

Разложим в ряд Фурье, введем явную зависимость:

$$\sigma_{mx}(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \sigma_x(k, t) e^{ikma}; \quad (30)$$

Здесь a - расстояние между спинами, k - проекция волнового вектора на ось ОХ. Используя 29, 30, из 24 получаем:

$$\dot{\sigma}_x(k, t) = \frac{2S_0J}{\hbar} (1 - \cos(ka)) \sigma_y(k, t); \quad (31)$$

$$\dot{\sigma}_y(k, t) = -\frac{2S_0J}{\hbar} (1 - \cos(ka)) \sigma_x(k, t); \quad (32)$$

Решение ?? будем искать в виде:

$$\sigma_x(k, t) = \sigma_x(k, \omega_k) e^{-i\omega_k t}; \quad (33)$$

Из этого мы имеем однородную систему алгебраических уравнений:

$$-i\omega_k \sigma_x(k, \omega_k) = \frac{2S_0J}{\hbar} (1 - \cos(ka)) \sigma_y(k, \omega_k); \quad (34)$$

$$-i\omega_k \sigma_y(k, \omega_k) = -\frac{2S_0J}{\hbar} (1 - \cos(ka)) \sigma_x(k, \omega_k); \quad (35)$$

Решение уравнение на детерминант:

$$\omega_k^2 = \left(\frac{2JS_0}{\hbar} (1 - \cos ka) \right)^2; \quad (36)$$

И получится два вида связи:

$$\sigma_y(k, \omega) = \pm i \sigma_x(k, \omega); \quad (37)$$

Это какие-то спиновые волны. Рассмотрим волну, распространяющуюся в положительном направлении оси ОХ. Тогда:

$$S_x(\omega_k, k, t) = \frac{1}{2} (\sigma_0(\omega_k, k) e^{-i(\omega_k t - kx)} + \sigma_0(-\omega_k, -k) e^{i(\omega_k t - kx)}); \quad (38)$$

$$S_x(\omega_k, k, t) = \frac{1}{2} \left(-i\sigma_0(\omega_k, k)e^{-i(\omega_k t - kx)} + i\sigma_0(-\omega_k, -k)e^{i(\omega_k t - kx)} \right); \quad (39)$$

Здесь мы считаем $\omega_k > 0$, $k > 0$, и, поскольку все величины действительны:

$$\sigma_0(\omega_k, k) = \sigma_0^*(-\omega_k, -k) = \sigma_0 e^{i\phi_k}; \quad (40)$$

Из уравнения 38 будем иметь:

$$S_x = \sigma_0 \cos(\omega_k t - kx - \phi_k); \quad (41)$$

$$S_y = \sigma_0 \sin(\omega_k t - kx - \phi_k); \quad (42)$$

Можно видеть, что найденное решение описывает по цепочке спинов неоднородной прецессии спинов относительно исходного положения. Такая волна называется спиновой волной.

А что будет, если мы заменим время на обратное. Получим ли возможный процесс? При такой замене спины должны заменить на обратные, поскольку импульсы сменяются на обратные, а в моменте линейно входит импульс.

При достаточно малых волновых числах $ka \ll 1$, то получим:

$$\omega \approx \left(\frac{S_0 J a}{\hbar} \right) k^2; \quad (43)$$

В этом смысле это практически классическая частица (в силу квадратичности закона дисперсии). В ряде случаев при изучении таких волн в магнетиках можно перейти к приближению *сплошной среды*. В этом приближении обменная энергия, определяемая гамильтонианом Гейзенберга, определяемая при взаимодействии с ближайшими соседями принимает такой вид (α - направляющие косинусы):

$$H_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j \approx -JS_0^2 \sum_{i > j} \cos \phi_{ij} = -JS_0^2 \sum_{i > j} (\alpha_{xi} \alpha_{xj} + \alpha_{yi} \alpha_{yj} + \alpha_{zi} \alpha_{zj}); \quad (44)$$

В случае кубической решётки мы получаем:

$$E_{ex} = \int_V \frac{JS_0^2}{2a} \sum_{i=1}^3 (\mathbf{grad} \alpha_i)^2 d^3 r; \quad (45)$$

Тогда можем получить для кубических решёток:

$$E_{ex} = \int_V A \sum_{i=1}^3 (\mathbf{grad} \alpha_i)^2 d^3 r; \quad (46)$$

Тогда плотность обменной энергии:

$$\epsilon_{ex} = A \sum_{i=1}^3 (\mathbf{grad} \alpha_i)^2 d^3 r; \quad (47)$$

Это всё, что можно вытащить из гамильтониана Гейзенберга при классическом подходе.

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

Мы эксплуатируем гамильтониан Гейзенберга. Его форма - требует строгого доказательства, однако интуитивно мы его понимаем. Все зависимости от координат зашиты в константе.

В первом приближении мы посчитали спины просто векторами. Вообще мы можем вводить классическое описание далеко не всегда. Получились у нас уравнения движения в формализме скобок Пуассона, вместо коммутаторов.

Мы смогли получить некоторые особенности поведения таких систем из связанных спиновых частиц. Например смогли получить характер намагниченности и спиновые волны. На самом деле 1D цепочка спинов неустойчива.

А что нам даст квантовое рассмотрение?

При квантовом рассмотрении в гамильтониане Гейзенберга \hat{S}_i - оператор спина, действующий в пространстве спиноров, действующий на i -ом узле. Эти функции - функции столбцы, имеющие $2S_0 + 1$ компонент. S_0 - максимальное значение проекции спина на ось квантования. Матричные элементы операторов \hat{S}_i - аналогичны рассмотренным в самом начале.

Вернемся к обычной квантовой механике - к матричной её части. Вместо функций там столбцы, а вместо операторов - матрицы. А что есть базис? И нам нужно ещё знать, как оператор действует на этот базис. В нашем случае: $|Y_{i,S_0,M}\rangle$. Здесь i - номер частицы, S_0 - максимальное возможное значение проекции спина, M_S - точное значение проекции спина в данном случае. В данном случае:

$$\hat{S}_i^2 |Y_{i,S_0,M}\rangle = S_0(S_0 + 1) |Y_{i,S_0,M}\rangle; \quad (1)$$

$$\hat{S}_{iz} |Y_{i,S_0,M}\rangle = M_S |Y_{i,S_0,M}\rangle; \quad (2)$$

И аналогично обычной квантовой механике можно ввести:

$$\hat{S}_{i-} |Y_{i,S_0,M}\rangle = \sqrt{(S_0 + M)(S_0 - M + 1)} |Y_{i,S_0,M-1}\rangle; \quad (3)$$

$$\hat{S}_{i+} |Y_{i,S_0,M}\rangle = \sqrt{(S_0 - M)(S_0 + M + 1)} |Y_{i,S_0,M+1}\rangle; \quad (4)$$

Вместо $|Y_{i,S_0,M_S}\rangle$ введём $|n_i\rangle$ - это спиновая функция, описывающая состояние i -ого спина с определённой проекцией на ось OZ . Тогда $M_{is} = S_0 - n_i$. Оно принимает значение: $n_i = 0, 1, 2, \dots$, такие что $M_s = S_0 \dots - S_0$. Удобно ввести оператор:

$$\hat{a}_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle; \quad (5)$$

$$\hat{a}_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle; \quad (6)$$

Для этих операторов справедливы следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{a}_i; \hat{a}_i^\dagger] = 1; \quad (7)$$

Это привычные нам орператоры рождения и уничтожения. Они часто применяются в многочастичных задачах или, например, в параболической яме. Используя их можно ввести оператор отклонения спина:

$$\hat{n}_i = s_0 - \hat{M}_{is} = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i; \quad (8)$$

В таком случае получим:

$$\begin{aligned} \hat{S}_{i-} |Y_{i,S_0,M_S}\rangle &= \hat{S}_{i-} |n_i\rangle = \sqrt{(S_0 + M_{is})(S_0 - M_{is} + 1)} |n_i + 1\rangle = \\ &= \sqrt{(2S_0 - n_i)(n_i + 1)} |n_i + 1\rangle = \sqrt{2S_0 \hat{a}_i^\dagger} \sqrt{1 - \frac{\hat{n}_i}{2S_0}} |n_i\rangle; \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_{i+} |Y_{i,S_0,M_S}\rangle &= \hat{S}_{i+} |n_i\rangle = \sqrt{(S_0 + M_{is} + 1)(S_0 - M_{is})} |n_i - 1\rangle = \\ &= \sqrt{2S_0} \sqrt{1 - \frac{n_i - 1}{2S_0}} \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle = \sqrt{2S_0} \sqrt{1 - \frac{\hat{n}_i}{2S_0}} \hat{a}_i |n_i\rangle; \end{aligned} \quad (10)$$

$$\hat{S}_{iz} = S_0 - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i; \quad (11)$$

И мы хотели бы эту гадость линеаризовать. Если мы заинтересуемся состояниями, в которых M_s мало отличается от S_0 , тогда $n_i \ll 2S_0$, тогда мы имеем:

$$\hat{S}_{i+} \approx \sqrt{2S_0} \hat{a}_i; \quad (12)$$

$$\hat{S}_{i-} \approx \sqrt{2S_0} \hat{a}_i^\dagger; \quad (13)$$

Тогда гамильтониан Гейзенберга может быть записан в виде:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex} &= -\frac{1}{2} J \sum_i (S_0 \hat{a}_i \hat{a}_{i+1}^\dagger + S_0 \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} + S_0 \hat{a}_i \hat{a}_{i-1}^\dagger + S_0 \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i-1}) \\ &\quad - \frac{1}{2} J \sum_i (S_0 - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i)(S_0 - \hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_{i+1}) - \frac{1}{2} J \sum_i (S_0 - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i)(S_0 - \hat{a}_{i-1}^\dagger \hat{a}_{i-1}); \end{aligned} \quad (14)$$

Причем мы рассматриваем только ближайших соседей. Перейдём в Фурье-представление (N - число спинов в цепочке, R_i - дискретная координата спина):

$$\hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{a}_k e^{ikR_i}; \quad (15)$$

$$\hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{a}_k^\dagger e^{-ikR_i}; \quad (16)$$

Тогда вместо 14 мы имеем:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex} &= -\frac{1}{2} J \sum_k ((\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k)(e^{ika} + e^{-ika}) + (\hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger)(e^{ika} + e^{-ika})) \\ &\quad + 2S_0 J \sum_k ((\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) - S_0^2 JN) \end{aligned} \quad (17)$$

Чуть-чуть приведя:

$$\hat{H}_{ex} = \sum_k J(2S_0)(1 - \cos ka)(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) - S_0^2 JN; \quad (18)$$

И окончательно можно видеть:

$$\hat{H}_{ex} = \sum_k \hbar \omega_k (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) - S_0^2 J N = \sum_k \hbar \omega_k \hat{n}_k - S_0^2 J N; \quad (19)$$

А дисперсионка тут:

$$\omega_k = \frac{2S_0 J}{\hbar} (1 - \cos ka); \quad (20)$$

Это очень похоже на фононы. Константный член в уравнении 19 - соответствует энергии в основном состоянии, а член $\hbar \omega_k \hat{n}_k$ - описывает возбуждение волны с частотой ω_k , \hat{n}_k - определяет энергию такой волны.

Заметим, что 20 в точности совпадает с дисперсионным соотношением, полученным при классическом рассмотрении. В линейном разложении:

$$\omega_k \approx \frac{S_0 J a^2}{\hbar} k^2; \quad (21)$$

В таком случае операторы \hat{a}_k , \hat{a}_k^\dagger можно воспринимать, как операторы рождения и уничтожения кванта магнитной волны. такие кванты называются магнонами.

Так как \hat{a}_i , \hat{a}_i^\dagger - бозевские операторы, то и в случае волновых аналогов они тоже бозевские. таким образом в состоянии термодинамического равновесия:

$$n_k = (e^{\frac{\hbar \omega_k}{T}} - 1)^{-1}; \quad (22)$$

А что с химпотенциалом? Это не обычные частицы. Их число не фиксированно, тогда их химпотенциал равен нулю.

Используя 22 вычислим термодинамически равновесную намагниченность цепочки спинов.

$$N S_z = N S_0 - \langle \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle = N S_0 - \int_0^\infty \frac{dk}{e^{\frac{\hbar \omega_k}{T}} - 1} \frac{N a}{2\pi}; \quad (23)$$

При малых T число магнонов с большими k экспоненциально мало. Поэтому верхний предел заменён на ∞ . Так как в случае цепочки $\omega_k \sim k^2$, то интеграл 23 расходится в нижнем пределе. Это значит, что при сколь угодно малой температуре не может реализоваться ферромагнитное упорядочение в магнитной цепочке.

Проведённые нами рассуждения для цепочки можно провести и для 2D, и для 3D объектов спина. Закон дисперсии получился прежним: $\omega_k \sim k^2$, $ka \ll 1$. Тогда для 2D этот интеграл также разошёлся бы.

$$\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle_{2D} \sim \int_0^\infty \frac{2\pi k dk}{e^{\frac{\hbar \omega_k}{T}} - 1} \frac{N a^2}{(2\pi)^2}; \quad (24)$$

Таким образом на плоскости не возможен ферромагнетизм. Естественно перейти к тому, что встречается в природе само по себе. А именно к 3D случаю. Там такой интеграл не расходится: Рассмотрим для начала гамильтониан (здесь суммирование по импульсу):

$$\hat{H}_{ex} = \frac{1}{2} z J_0 a^2 k^2 \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - \frac{1}{2} N z J^2 S \quad (25)$$

$$\omega_k \approx \frac{1}{2\hbar} z J S_0 a^2 k^2; \quad (26)$$

В таком случае среднее значение:

$$NS_z = NS_0 - \int_0^\infty \frac{4\pi k^2 dk}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{T}} - 1} \frac{Na^3}{2\pi^3} = NS_0 \left(1 - \frac{T^{3/2}}{2^{-1/2}\pi^2 z^{3/2} S_0^{5/2} J^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^{x^2} - 1} \right); \quad (27)$$

Тогда с увеличением температуры у нас уменьшается упорядочение. 27 описывает изменение намагниченности трёхмерного ферромагнетика при низких температурах, обусловленные возбуждением спиновых волн (газа магнонов). Магноны ведут себя как идеальный газ - это следствие нашей линеаризации.

Теплоемкость газа магнонов. В рассматриваемом приближении газ магноно идеален. В состоянии термодинамического равновесия его энергия в соответствии с 19:

$$E_m = \sum_k \hbar\omega_k n_k \approx \int_0^\infty \frac{\hbar\omega_k}{e^{\frac{\hbar\omega_k}{T}} - 1} \frac{4\pi k^2 Na^3 dk}{(2\pi)^2} = \frac{NT^{5/2}}{2^{-1/2}\pi^2 (zJS_0)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^4 dx}{e^{x^2} - 1}; \quad (28)$$

Из 28 мы вычислим магнонную теплоёмкость:

$$C_m = \frac{\partial E_m}{\partial T} \sim T^{3/2}; \quad (29)$$

Таким образом теплоемкость металла, кроме теплоёмкости электронной и фононной части, содержит ещё и магнонную.

Мы говорим в основном про ферромагнетизм, но есть ещё и антиферромагнетизм. Там закон дисперсии для магнона другой. В остальном все похоже.

15 Релятивистские взаимодействия в ферромагнитном кристалле.

Обменное взаимодействие, описываемое гамильтонианом Гейзенберга является электростатическим по своей природе. Описание ферромагнетика приводит к тому, что за основное состояние мы принимаем такое, в котором все спины сонаправлены и направлены вдоль любой оси. Т.е. оси, направленной произвольно, относительно кристаллографических осей кристалла. Однако обменное взаимодействие не единственное взаимодействие в ферромагнетике. Учтём релятивистские, спин-спиновые и спин-орбитальные взаимодействия.

Спин-спиновое (дипольное) взаимодействие - энергия взаимодействия пары спинов уже была записана. В классической электродинамике, такое взаимодействие называется диполь-дипольным. Поэтому о соответствующей энергии говорят, как об энергии дипольного взаимодействия.

Важно подчеркнуть, что такое взаимодействие ведёт себя по закону $\sim 1/r^3$.

Рассмотрим это взаимодействие. Энергия каждой такой пары зависит от ориентации относительно прямой их соединяющей.

Такие прямые в кристалле обусловлены кристаллической решёткой. поэтому энергия дипольного взаимодействия зависит от ориентации намагниченности материала, относительно кристаллографических направлений. На лицо анизотропия. Можно показать, что в приближении сплошной среды выражение для энергии диполь-дипольного взаимодействия имеет вид:

$$E_m = -\frac{1}{2} \int_V d^3\vec{r} (\beta_{\alpha\gamma} M_\alpha(\vec{r}) M_\gamma(\vec{r}) + \frac{4\pi}{3} \vec{M}^2(\vec{r}) + \vec{M}(\vec{r}) \vec{H}_m(\vec{r})); \quad (30)$$

Здесь M - плотность магнитного момента, α, γ - координаты, $\beta_{\alpha\gamma}$ - тензор, зависящий от структуры кристалла.

Первый член 30 описывает эффекты анизотропии. Его Учёт объясняет взаимодействие между близкими спинами, а уже остальные члены связаны с дальнедействующим характером диполь-дипольного взаимодействия. Поэтому они не связаны с симметрией кристалла.

$\vec{\mathcal{H}}_m$ - напряжённость магнитного поля, соответствующая заданному распределению.

$$\mathbf{rot} \vec{\mathcal{H}}_m = 0; \quad (31)$$

$$\mathbf{div} (\vec{\mathcal{H}}_m + 4\pi\vec{M}) = 0; \quad (32)$$

Спин-орбитальное взаимодействие. По поводу спин-орбитального взаимодействия можно заметить следующее. В изолированном атоме энергия спин-орбитального взаимодействия определяется взаимной ориентацией спинового и орбитального моментов (LS связь).

И в атоме распределение электронной плотности в пространстве определяется \vec{L} . В кристалле же симметрия в распределении электронной плотности определяется симметрией кристалла. Поэтому в кристалле спин орбитальное взаимодействие определяется ориентацией спинового момента относительно кристаллографических осей.

Можно показать, что *эффективный гамильтониан взаимодействия между спинами*, обусловленный спин-орбитальным взаимодействием записывается в виде:

$$\hat{H}_{se} \sim \sum_{ij} \beta_{\alpha\gamma}(\vec{r}_{ij}) S_{i\alpha} S_{j\beta}; \quad (33)$$

Снова этот тензор оказывается привязанным к кристаллографическим направлениям. Гамильтониан 33 получен исключением орбитальных переменных и потому зависит лишь от спинов. Информация об орбитальных переменных содержится в тензоре и определяется симметрией кристалла.

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

Немного о терминологии. Спин-спиновое взаимодействие в лоб - это то, что мы рассматривали, когда говорили о релятивистских эффектах. Это непосредственно спин-спин. Но спин-орбитальное взаимодействие тоже присутствует и приводим гамильтониан к виду, где это похоже на спин-спиновое взаимодействие. Природа у него другая.

Мы все это получали в предположении, что интегралы, где стоит бозевская функция распределения, брались в пределе до бесконечности. Но строго говоря это так лишь при низкой температуре. Что это за низкая температура?

Задача: Что такое низкие температуры? Чем она обусловлена? Какую точность обеспечивает это приближение?

Мы рассматриваем релятивистские взаимодействия в кристалле. Главный прорыв до сих пор был в том, что мы объяснили спиновую упорядоченность при помощи обменного взаимодействия.

Есть однако более слабые взаимодействия. И, оказывается, они тоже важны. Мы писали, что есть некоторые члены, отвечающие кристаллической структуре, а есть члены, отвечающие чисто макроскопическим электродинамическим взаимодействиям.

Мы получили оператор, по форме совпадающим с первым членом. Этот оператор описывает эффекты анизотропии. Важно подчеркнуть, что этот тензор, как функция расстояния между спинами быстро спадает с увеличением расстояния. Т.е. это взаимодействие *не дальнего действия*.

При переходе к приближению сплошной среды можно записать:

$$E_{se} = \frac{1}{2} \int \beta_{\alpha\gamma} M_{\alpha}(\vec{r}) M_{\gamma}(\vec{r}) d^3\vec{r}; \quad (1)$$

15 Магнито кристаллографическая анизотропия

Рассмотрим предыдущие выражения. Видно, что первые члены везде имеют одну и ту же структуру. Объединим в один член, который будет содержать информацию о симметрии кристалл и направлении вектора намагниченности.

$$E_A = \int_V \frac{1}{2} \beta_{\alpha\gamma} M_{\alpha}(\vec{r}) M_{\gamma}(\vec{r}) d^3\vec{r}; \quad (2)$$

Здесь есть информация о кристаллографической структуре.

При таком определении энергии кристаллографической магнитной анизотропии под энергией магнито-дипольного взаимодействия следует понимать величину:

$$E_{MD} = -\frac{1}{2} \int \vec{M}(\vec{r}) \vec{H}_M(\vec{r}) d^3\vec{r}; \quad (3)$$

Мы здесь видим члены не зависящие непосредственно от кристалла. Это классическое описание.

16 Энергия кристаллографической анизотропии. Энергия магнитно-дипольного взаимодействия.

Количественно магнитокристаллографическую анизотропию ферромагнитного кристалла принято характеризовать соответствующими константами. Так из 2 видно, что плотность энергии магнитокристаллографической анизотропии в более общем виде можно записать как:

$$\epsilon_A = \sum_{n_x, n_y, n_z} K_{n_x, n_y, n_z} \alpha_x^{n_x} \alpha_y^{n_y} \alpha_z^{n_z}; \quad (4)$$

Здесь K - константы кристаллографической анизотропии, размерностью $\frac{\text{erg}}{\text{cm}^3}$. α - направляющие косинусов вектора намагниченности по направлению к кристаллографическим осям. Причем комбинация $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ - такие, что ϵ_A - инвариантно относительно элементов симметрии кристалла. n_x, n_y, n_z - (степени) могут принимать значения $0, 1, 2, \dots$. Причем $n_x + n_y + n_z$ - чётное число, т.к. в этом случае ϵ_A остаётся инвариантной относительно замены $t \rightarrow -t$, а $\alpha_{x,y,z}$ - меняют знак.

Пусть ось "лёгкого" намагничивания совпадает с z . Тогда:

$$\epsilon_A = K(\cos \theta)^2, \quad K < 0; \quad (5)$$

Очевидно, что тут есть 2-а минимума (и это почти всегда так).

А если у константы другой знак $K > 0$ - то у нас получается минимальное значение при $\pi/2$. Энергия магнитно-дипольного взаимодействия характеризуется своей плотностью. Из 3 мы можем получить:

$$\epsilon_{MD} = -\frac{1}{2} \vec{M} \vec{H}_M; \quad (6)$$

В случае однородно намагниченного ферромагнетика именно конкуренция этих двух плотностей энергии определяет направление намагниченности в состоянии равновесия.

Рассмотрим пример: пластину ферромагнетика с легкой осью, перпендикулярной плоскости пластины. Пусть намагниченность имеет с осью z (перпендикулярной плоскости) угол θ . Тогда полная плотность энергии:

$$\epsilon = \epsilon_A + \epsilon_{MD} = K(\cos \theta)^2 - \frac{1}{2} \vec{H}_M \vec{M}; \quad (7)$$

Так как вне пластины $\vec{B} = \vec{H}_M = 0$, то можно видеть:

$$\epsilon = K(\cos \theta)^2 + 2\pi M^2(\cos \theta)^2; \quad (8)$$

Поскольку у нас лёгкая ось. То $K < 0$, тогда если $|K| > 2\pi M^2$ - у нас намагниченность перпендикулярна, а если наоборот - то в плоскости пластины. Отсюда видно, что магнито-статическая энергия образца зависит от направления намагниченности. Т.е. анизотропия в этом случае вызвана анизотропией формы тела.

Тензор размагничивающих коэффициентов. Пусть ферромагнетик таков, что энергия магнитокристаллографической анизотропии много меньше магнито-дипольного взаимодействия.

Тогда если изначально ферромагнетик намагничен однородно, то направление намагниченности определяется лишь магнито-дипольного взаимодействия. А последнее определяется формой ферромагнитного тела.

Если форма тела - эллипсоид и тело однородно намагничено $\vec{M}(\vec{r}) = \text{const}$, то магнитное поле *внутри* магнетика - тоже однородное $\vec{H}_M = \text{const}$. Поэтому существует связь:

$$\mathcal{H}_{Mi} = -4\pi N_{ij} M_j; \quad (9)$$

При этом N - тензор размагничивания, определяемый геометрическими свойствами тела. В декартовой системе, где орты совпадают с главными осями эллипсоида - тензор диагонализуется.

$$N_{xx}^{\text{main}} \frac{1}{2} abc \int_0^\infty \frac{dS}{(a^2 + s)R_s}; \quad (10)$$

И аналогично для других осей yy , zz , а параметр:

$$R_s = \sqrt{(a^2 + s)(b^2 + s)(c^2 + s)}; \quad (11)$$

Тогда мы должны получить:

$$N_{xx}^{\text{main}} + N_{yy}^{\text{main}} + N_{zz}^{\text{main}} = 1; \quad (12)$$

В случае шара $N_{ii}^{\text{main}} = 1/3$ - все равны. Тогда в шарике: $\vec{\mathcal{H}}_M = -\frac{4\pi}{3}\vec{M}$. Если же образец имеет форму сильно вытянутого вдоль оси x цилиндра, то $N_{xx} = 0$, $N_{yy} = N_{zz} = \frac{1}{2}$ и энергия минимальна, если намагниченность направлена вдоль оси x .

Но однородная намагниченность - редкое явление, чаще весь предмет разбивается на кластеры (домены).

17 Доменная структура ферромагнетика

Легко показать что энергия магнито-дипольного взаимодействия представима в виде:

$$E_{\text{MD}} = -\frac{1}{2} \int \vec{\mathcal{H}}_M \vec{M} dV = \frac{1}{8\pi} \int \vec{\mathcal{H}}_M^2 dV; \quad (13)$$

Здесь интегрирование происходит по всему пространству. Поэтому если образец имеет макроскопические размеры, то при его намагничивании его энергия магнитодипольного взаимодействия будет велика.

Если же объект разобьется на домены с различным направлением намагниченности, то энергия магнитостатического взаимодействия станет меньше.

Пример: ферромагнитная пластина с лёгкой осью, перпендикулярной плоскости пластины.

Но эта штука может разбиться на домены и линии магнитного поля "закольцуются" в результате поле вне пластинки уменьшится. Но почему все не превращается в сплошные мелкие диполи? Мешает обменное взаимодействие.

Разбиение на домены приводит к снижению энергии. Область между 2-мя доменами называется доменной стенкой (или границей). В этой области происходит поворот вектора намагниченности. Тем самым в этой области энергия магнитной кристаллографической анизотропии выше, чем в самих доменах. Т.е. доменная стенка обладает энергией.

Поэтому размеры доменной стенки и домена при которых полная энергия ферромагнетика минимальна имеют определённые значения. Рассмотрим отдельно доменную стенку.

Рассмотрим ферромагнитный кристалл с анизотропией лёгкой оси z . Ось x перпендикулярна плоскости доменной стенки.

Намагниченность в соседних доменах направлена в противоположные стороны вдоль лёгкой оси. Переход от одного домена к другому сопровождается поворотом вектора намагниченности в плоскости yz . Такая стенка называется блоховской. Но есть и другой тип стенки - Неймановская (магнитное поле "рыбкой" меняет направление).

Начало координат находится в середине стенки. M_0 - намагниченность в домене вдали от стенки. Для простоты примем, что в доменной стенке вектор намагниченности "поворачивается" в одной атомной плоскости на один и тот же угол $\phi = \pi/N$, здесь N - число

атомных плоскостей в доменной стенке. Толщина такой стенки составляет в таком случае $\delta = Na$, где a - межатомное расстояние.

Энергия анизотропии, приходящаяся на один атом в междоменной стенке:

$$\epsilon = K(\cos \theta)^2 a^3; \quad (14)$$

Тогда поверхностная плотность энергии анизотропии доменной стенки (энергия на единицу площади стенки):

$$\sigma_A = \frac{1}{a^2} \int_0^\pi K(\cos \theta)^2 a^3 \frac{d\theta}{\pi N^{-1}} - \frac{1}{a^2} \int_0^\pi K a^3 \frac{d\theta}{\pi N^{-1}} = \frac{1}{2} Na |K|; \quad (15)$$

Можно легко написать выражение для обменной энергии:

$$\sigma_{\text{ex}} = \int_{-Na/2}^{Na/2} A(\partial_x \theta)^2 dx; \quad (16)$$

При этом $\theta = \frac{\pi}{N} \frac{x}{a} + \frac{\pi}{2}$, в таком случае интегрируя получим:

$$\sigma_{\text{ex}} = \frac{A\pi^2}{Na}; \quad (17)$$

В сумме видим:

$$\sigma_{\text{wall}} = \frac{1}{2} |K| \delta + \frac{a\pi^2}{\delta}; \quad (18)$$

Равновесная толщина стенки в таком случае:

$$\partial_\delta \sigma = 0 \rightarrow \delta = \pi \sqrt{2} \sqrt{\frac{A}{|K|}}; \quad (19)$$

Тогда равновесное значение поверхностной плотности энергии доменной стенки.

$$\sigma_{\text{wall}} = \pi \sqrt{2} \sqrt{A|K|}; \quad (20)$$

Можно видеть, что стенки увеличивают энергию ферромагнетика. Заметим, что в блоховской стенке магнитостатическая энергия равна нулю.

Энергия магнитодипольного взаимодействия многодоменного ферромагнетика. Рассмотрим анизотропию типа "лёгкая ось". При этом $|K| > 2\pi M_0^2$. Пусть толщина пленки составляет h , а характерный размер домена - d .

Получается stripe - структура. На поверхности намагниченность рвётся. В каждом домене намагниченности M_0 . Напишем уравнения магнитостатики:

$$\text{rot } \vec{\mathcal{H}}_M = 0; \quad \text{div } (\vec{\mathcal{H}}_M + 4\pi \vec{M}) = 0; \quad (21)$$

Они аналогичны электростатическим уравнениям ($\text{div } \vec{M} \rightarrow -\rho$, $\vec{\mathcal{H}}_M \rightarrow \vec{E}$, $M \rightarrow -\sigma$):

$$\text{rot } \vec{E} = 0; \quad \text{div } \vec{E} = 4\pi \rho; \quad (22)$$

Разложим в ряд Фурье:

$$\sigma(x) = \sum_0^\infty \frac{4M_0}{\pi(2n+1)} \sin \frac{(2n+1)\pi x}{d}; \quad (23)$$

А вне плоскости справедливо уравнение Лапласа:

$$\nabla\phi = 0 \rightarrow \partial_{xx}\phi + \partial_{zz}\phi = 0; \quad (24)$$

Решение, записанное в виде ряда имеет вид:

$$\phi(x, z) = \sum_0^{\infty} b_n \sin \frac{(2n+1)\pi x}{d} \exp \pm \frac{(2n+1)\pi z}{d}; \quad (25)$$

Знаки в показателе экспоненты говорят о структуре поля сверху и снизу пластины. Всё поле оказывается экспоненциально спадающим.

Граничные условия (здесь другое σ):

$$E_z(z+0) - E_z(z-0) = 4\pi\sigma; \quad (26)$$

Решая можно получить:

$$b_n = \frac{8Md}{\pi(2n+1)^2}; \quad (27)$$

Для простоты будем считать, что толщина пластины $h \gg d$. Это означает, что поле, создаваемое "зарядами" на одной поверхности пластины слабо взаимодействуют с зарядами на противоположной.

Вследствии этого энергию магнито-дипольного взаимодействия можно вычислить как:

$$E_{\text{MD}} = \frac{1}{8\pi} \int (\vec{H}_M)^2 dV = \int \sigma(x)\phi(x, z=0) dx dy; \quad (28)$$

Усредняя можем получить:

$$\bar{E}_{\text{MD}} = \frac{1}{2} \int_{-d}^d \sigma(x)\phi(x, z=0) dx = \frac{16dM_0^2}{\pi^2} \sum_0^{\infty} (2n+1)^{-3} \approx 1.75dM_0^2; \quad (29)$$

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

Восстановленно по чужим записям!

Энергия доменной стенки на единицу площади (h - толщина пластинки, d - период доменной структуры, считаем $h \gg d$ - границы пластинки не взаимодействуют):

$$E_w = \sigma_w \frac{h}{d}; \quad (1)$$

В таком случае энергия многодоменного ферромагнетика на единицу площади получится равной:

$$E_s = E_{md} + E_w \approx 1.75dM_0^2 + \sigma_w \frac{h}{d}; \quad (2)$$

Отыщем d - для минимума E_s . Будем искать:

$$\frac{\partial E_s}{\partial d} = 0; \quad (3)$$

В таком случае решением будет:

$$d = \sqrt{\frac{\sigma_w h}{1.75M_0^2}}; \quad (4)$$

Равновесное значение энергии (на единицу площади) в таком случае оказывается равным:

$$E_s = 2\sqrt{1.75h\sigma_w M_0^2}; \quad (5)$$

А на единицу объёма соответственно:

$$E_v = E_s/h = 2\sqrt{\frac{1.75\sigma_w M_0^2}{h}}; \quad (6)$$

Рассмотренная структура - пример доменной структуры с незамкнутым магнитным потоком, однако существуют структуры и с замкнутым, в том числе структуры Ландау-Лифшица.

Шестиугольники в толще, по краям - прямоугольные треугольники. За счёт замкнутости магнитостатическая энергия = 0. Однако энергия магнитокристаллографической анизотропии $\neq 0$.

Для таких структур аналогично можно записать:

$$E_s \approx \sigma_w \frac{h}{d} + \frac{Kd}{2}; \quad (7)$$

Аналогично толщина, реализующая минимум энергии:

$$d = \sqrt{\frac{2\sigma_w h}{K}}; \quad (8)$$

Тогда энергия на единицу площади:

$$E_s = \sqrt{2\sigma_w K h}; \quad (9)$$

Объёмная плотность энергии:

$$E_v = \frac{E_s}{h} = \sqrt{\frac{2\sigma_w K}{h}}; \quad (10)$$

Необходимо сравнить - какая структура на самом деле реализуется в равновесии: при сильном магнитном поле можно добиться того, что все домены сольются воедино. В таком масштабе полей квантовые эффекты не наблюдаются - только их макроскопические проявления. в противном случае необходимо рассматривать уравнение Гейзенберга.

Рассмотрим случай анизотропного ферромагнетика с лёгкой осью OZ. Его полная энергия (здесь $\vec{\mathcal{H}}_M$ - поле, созданное намагниченностью):

$$E = \underbrace{\int \sum_{i=x,y,z} (\nabla \alpha_i)^2}_{\text{Обменная энергия}} + K \alpha_z^2 - \underbrace{\frac{1}{2} \vec{M}(\vec{r}) \vec{\mathcal{H}}_M(\vec{r})}_{\text{магнито-дипольная энергия}} d^3 \vec{r}; \quad (11)$$

Если модуль намагниченности $|\vec{M}(\vec{r})| = M_0$ не изменяется вдоль образца, то виден характерный пространственный масштаб:

$$\lambda_1^2 = \frac{A}{|K|}; \quad (12)$$

При этом размерности прочих величин: $A \left[\frac{\text{эрг}}{\text{см}} \right]$; $K \left[\frac{\text{эрг}}{\text{см}^3} \right]$, $M_0^2 \left[\frac{\text{эрг}}{\text{см}^3} \right]$. По физическому смыслу λ_1 - контролирует толщину доменной стенки.

По аналогии может быть и другая величина:

$$\lambda_2^2 = \left(\frac{A}{M_0^2} \right)^3; \quad (13)$$

Если мы рассматриваем магнетик с $K \rightarrow 0$ - т.е. без выделенной анизотропии, тогда остаётся именно этот масштаб.

Очевидно, что если размеры ферромагнитной частицы $< \lambda_2$, то существенная неоднородная намагниченность частицы даёт увеличение обменной энергии, превосходящее соответствующее такой намагниченности уменьшение магнитостатической энергии. Энергия последнего члена будет убывать медленнее, чем расти первый член. Будет происходить мономенизация. Иначе говоря λ_2 - отвечает за мономенизацию частицы в случае $|K| \rightarrow 0$.

Рассмотрим 2-е сферические частицы одинакового радиуса R . Приготовленные из ферромагнетика с изотропией "лёгкая ось". В отличие от предыдущего случая будем считать, что K - большая величина.

Рассмотрим 2-е ситуации:

- Однородная намагниченность
- Частица разделена на 2-а одинаковых домена (с разным направлением намагниченности) с плоской доменной стенкой.

В первом случае есть только магнитостатическая энергия. Тогда:

$$E_1 = -\frac{1}{2} M_0 \left(-\frac{4\pi}{3} M_0 \right) \frac{4\pi}{3} R^3 = \frac{8}{9} \pi^2 M_0^2 R^3; \quad (14)$$

Здесь второй множитель - собственное поле частицы.

А во втором случае у нас есть ещё и энергия стенки (блоховской). Второй член здесь отвечает стенке.

$$E_2 \approx \frac{1}{2} \pi^2 M_0^2 R^3 + \pi R^2 \sigma_{\text{wall}} \approx \frac{4}{9} \pi^2 M_0^2 R^3 + \pi^2 \sqrt{|K| A} R^2; \quad (15)$$

Двухдоменная частица становится неустойчивой, при $E_1 < E_2$. Критический радиус:

$$R < R_{\text{cr}} \approx \frac{9}{4} \sqrt{\frac{A|K|}{M_0^4}} \sim \frac{\lambda_2^2}{\lambda_1}; \quad (16)$$

Это был иллюстрационный раздел.

15 Ферромагнетик во внешнем квазистатическом поле.

Если ферромагнетик помещен во внешнее поле $\vec{\mathcal{H}}_0$. То к его энергии должно быть добавлено слагаемое:

$$- \int \vec{\mathcal{H}}_0 \vec{M} dv; \quad (17)$$

В таком случае рассмотрим поведение однородно намагниченного ферромагнетика во внешнем однородном стационарном магнитном поле. Пусть это будет малая однодоменная ферромагнитная частица в форме эллипсоида вращения, вытянутого вдоль оси z . Из соображений симметрии видно, что вектор \vec{M} лежит в плоскости, проходящей через ось z и вектор $\vec{\mathcal{H}}_0$. Пусть это будет плоскость zx .

Вследствии однодоменности энергия частицы складывается из её собственной магнито-статической энергии и магнитостатической энергии во внешнем поле. Мы не учитываем обменную энергию, потому что намагниченность однородная.

$$E = -\frac{1}{2}M_z \mathcal{H}_{M,z} - \frac{1}{2}M_x \mathcal{H}_{M,x} - M_z \mathcal{H}_{0,z} - M_x \mathcal{H}_{0,x}; \quad (18)$$

С точностью до несущественного постоянного члена можно записать:

$$E = -\frac{\beta M_0^2}{2}(\cos \theta)^2 - M_0 \mathcal{H}_{0,z} \cos \theta - M_0 \mathcal{H}_{0,x} \sin \theta; \quad (19)$$

Здесь $\beta = 4\pi(N_{xx} - N_{zz}) > 0$, поскольку $N_{zz} < N_{xx}$. Несколько упростим задачу: $\mathcal{H}_{0,x} = 0$, $\mathcal{H}_{0,z} > 0$.

$$E = -\frac{\beta M_0^2}{2}(\cos \theta)^2 - M_0 \mathcal{H}_{0,z} \cos \theta; \quad (20)$$

Тогда попробуем найти минимум по θ :

$$\left. \frac{dE}{d\theta} \right|_{\theta=\theta_p} = 0; \quad (21)$$

Решение:

$$\sin \theta_p (\beta M_0^2 \cos \theta_p + M_0 \mathcal{H}_{0,z}) = 0; \quad (22)$$

В общем случае есть 3-и решения:

$$\theta_1 = 0, \quad \theta_2 = \pi, \quad \cos \theta_3 = -\frac{\mathcal{H}_{0,z}}{\beta M_0}; \quad (23)$$

Посмотрим какие состояния из этих устойчивы. Равновесие устойчиво, если:

$$\frac{d^2 E}{d\theta^2} = -\beta M_0^2 \sin^2 \theta_p + \beta M_0 \mathcal{H}_{0,z} \cos \theta_p > 0; \quad (24)$$

Таким образом $\theta = 0$ - устойчиво, при любых $\mathcal{H}_{0,z} > 0$; $\theta = \pi$ - устойчиво, при $\beta M_0 > \mathcal{H}_{0,z} > 0$ и неустойчиво, если $\beta M_0 < \mathcal{H}_{0,z}$; $\cos \theta = -\frac{\mathcal{H}_{0,z}}{\beta M_0}$ - неустойчиво, если $0 < \mathcal{H}_{0,z} < \beta M_0$. В таком случае соответствующие энергии состояний:

$$E(\theta = 0) = -\frac{\beta M_0^2}{2} - M_0 \mathcal{H}_{0,z}; \quad (25)$$

$$E(\theta = \pi) = -\frac{\beta M_0^2}{2} + M_0 \mathcal{H}_{0,z}; \quad (26)$$

$$E(\theta = -\frac{\mathcal{H}_{0,z}}{\beta M_0}) = \frac{\mathcal{H}_{0,z}^2}{2\beta}; \quad (27)$$

Допустим, что мы перемагничиваем частицу, т.е. увеличиваем магнитное поле от 0. А направление магнитного поля $\theta = \frac{\pi}{2}$. Если $T \rightarrow 0$, то намагниченность будет иметь первоначальное направление, т.е. частица не будет перемагничиваться, пока поле не достигнет величины $\mathcal{H}_{0,z} = \mathcal{H}_{0,z,\text{cr}} = \beta M_0$.

При $T \neq 0$ и при условии $0 < \mathcal{H}_{0,z} < \beta M_0 = \mathcal{H}_{0,z,\text{cr}}$.

При достижении $\mathcal{H}_{0,z,\text{cr}}$ направление намагниченности меняет направление с $\theta = \pi$ до $\theta = 0$. Зависимость намагниченности от магнитного поля имеет вид прямоугольника на плоскости \mathcal{H}_z, M_z . Т.е. тут наблюдается некий гистерезис. По оси \mathcal{H}_z у нас прямоугольник длится с $-\beta M_0 \dots \beta M_0$. А по оси M_z имеет размер $-M_0 \dots M_0$. Видно, что такое гистерезисное поведение, обусловленное тем, что состояния, отличающиеся направлением намагниченности отделены друг от друга энергетическим барьером.

Здесь это явление обусловлено формой, а бывает, что и кристаллографическими свойствами. Это чисто классическое рассмотрение. Если рассматривать спин квантовомеханически, то при малых размерах будет совершенно иное поведение.

Идём в хорошем темпе. Курс закончится в конце ноября. Поэтому можно сдать экзамен в первую неделю декабря.
Нужно распространить задачи. И разобрать их.

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

15 Магнитооптика

Взаимодействие электромагнитного поля с материей. Постоянные и переменные поля в магнетике.

Взаимодействие с зарядом (которые связаны с магнитным порядком) в твёрдом теле. Прежде чем углубляться в глубокие материи рассмотрим самое простое.

Рассмотрим следующую модель: Некая среда - набор одинаковых заряженных осцилляторов. Осцилляторы с *исчезающе малым затуханием*. На эту среду наложено постоянное магнитное поле $\mathcal{H}_0 \uparrow \uparrow OZ$. Исследуем диэлектрические свойства такой среды в пренебрежении пространственной дисперсии. Декларация без точного математического описания - бесполезна.

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = \frac{e}{m} E_{0x} e^{-i\omega t} + \frac{e\mathcal{H}_0}{mc} \dot{y}; \quad (1)$$

$$\ddot{y} + \omega_0^2 y = \frac{e}{m} E_{0y} e^{-i\omega t} - \frac{e\mathcal{H}_0}{mc} \dot{x}; \quad (2)$$

$$\ddot{z} + \omega_0^2 z = \frac{e}{m} E_{0z} e^{-i\omega t}; \quad (3)$$

Стационарное решение:

$$x = \alpha_{xx} E_{0x} e^{-i\omega t} + \alpha_{xy} E_{0y} e^{-i\omega t}; \quad (4)$$

$$y = \alpha_{yy} E_{0y} e^{-i\omega t} + \alpha_{yx} E_{0x} e^{-i\omega t}; \quad (5)$$

$$z = \alpha_{zz} E_{0z} e^{-i\omega t}; \quad (6)$$

Это решение на временах, много меньше времени затухания. Рассмотрим компоненты тензора поляризуемости.

$$\alpha_{xx} = \alpha_{yy} = \frac{e}{m} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - 4\omega^2\omega_0^2}; \quad (7)$$

$$\alpha_{xy} = -\alpha_{yx} = -i \frac{e}{m} \frac{2\omega\omega_L}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - 4\omega^2\omega_0^2}; \quad (8)$$

$$\alpha_{zz} = \frac{e}{m} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2)}; \quad (9)$$

Соответствующий тензор диэлектрической проницаемости:

$$\epsilon_{ij} = \delta_{ij} + 4\pi N \alpha_{ij}; \quad (10)$$

Если записывать как матрицу:

$$\hat{\epsilon} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(\epsilon_+ + \epsilon_-) & \frac{i}{2}(\epsilon_+ - \epsilon_-) & 0 \\ -\frac{i}{2}(\epsilon_+ - \epsilon_-) & \frac{1}{2}(\epsilon_+ + \epsilon_-) & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_0 \end{bmatrix}; \quad (11)$$

Здесь подразумевается:

$$\epsilon_{\pm} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega \pm 2\omega_L) - \omega^2}; \quad (12)$$

$$\epsilon_0 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_0^2}; \quad (13)$$

При этом: $\omega_L = \frac{e\mathcal{H}_0}{2mc}$, $\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 N}{m}$. Затухания нет - значит тензор эрмитов.

В чем разница между Ларморовской и gyro- частотой? Они отличаются в 2-а раза.

Рассмотренная модель соответствует гиروهлектрической среде - наличию комплексных недиагональных элементов тензора.

Какие собственные волны распространяются в такой среде?

Пусть волна распространяется по оси Z - что дальше? Волна распадается на собственные моды - циркулярно поляризованные. Это называется эффектом Фарадея.

Ситуация была оень простая. А что может дать квантовая механика? Можем получить сам вид того самого тензора восприимчивости. Оказывается, то изменятся только числа.

Наш же подход хорош простотой и сохранением симметрии. Выше была Рассмотренна ситуация, когда внешнее магнитное поле изменяет диэлектриеские свойства среды. Аналогично можно рассмотреть ситуацию, когда магнитные свойства среды изменяются под действием внешнего магнитного поля.

Наверное существуют частоты, когда надо учитывать и магнитное поле волны. Пусть среда - совокупность идентичных классических спинов во внешнем однородном постоянном магнитном поле. В отсутствии других магнитных полей. Спины прецессируют с бесконечно малым затуханием. Наложим однородное переменное магнитное поле. Тогда гамильтониан одного спина:

$$\hat{H} = g\mu_B(S_z\mathcal{H}_0 + S_z\mathcal{H}_{0z}e^{-i\omega t} + S_y\mathcal{H}_{0y}e^{-i\omega t} + S_x\mathcal{H}_{0x}e^{-i\omega t}); \quad (14)$$

$\mathcal{H}_{0\alpha}$ - амплитуды переменного магнитного поля. ω - его частота.

Для магнитного момента одного спина \vec{M} имеем:

$$\hat{H} = -m_z(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{0z}e^{-i\omega t}) - m_x\mathcal{H}_{0x}e^{-i\omega t} - m_y\mathcal{H}_{0y}e^{-i\omega t}; \quad (15)$$

Воспользуемся тем, что мы уже писали для классической цепочки спинов.

$$[m_\alpha; m_\beta] = \frac{g\mu_B}{\hbar}m_\gamma = \frac{g|e|}{2mc}m_\gamma = \zeta m_\gamma; \quad (16)$$

Тогда мы имеем уравнение движения. Из него мы собираемся получить уравнение связи. Нам это важно, тобы совать в уравнения для полей.

$$\dot{m}_x = -(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{0z}e^{-i\omega t})\zeta m_y + \mathcal{H}_{0y}e^{-i\omega t}\zeta m_z; \quad (17)$$

$$\dot{m}_y = -(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{0z}e^{-i\omega t})\zeta m_x + \mathcal{H}_{0x}e^{-i\omega t}\zeta m_z; \quad (18)$$

$$\dot{m}_z = \mathcal{H}_{0x}e^{-i\omega t}\zeta m_y - \mathcal{H}_{0y}e^{-i\omega t}\zeta m_x; \quad (19)$$

Будем считать, что $\mathcal{H}_{0z} \ll \mathcal{H}_0$. Кроме того будем считать $m_z \approx m_0$, а также $\Delta m_z \ll m_x, m_y \ll m_0$.

Тогда в линейном приближении будем иметь ($\omega_0 = \zeta \mathcal{H}_0$ - частота однородной прецессии):

$$\dot{m}_x = -\omega_0 m_y + \zeta \mathcal{H}_{0y} m_0 e^{-i\omega t}; \quad (20)$$

$$\dot{m}_y = \omega_0 m_x - \zeta \mathcal{H}_{0x} m_0 e^{-i\omega t}; \quad (21)$$

$$\Delta \dot{m}_z = 0; \quad (22)$$

Стационарное решение выглядит так:

$$m_x = \frac{\zeta m_0 \omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2} \mathcal{H}_{0x} e^{-i\omega t} - i \frac{\zeta m_0 \omega}{\omega_0^2 - \omega^2} \mathcal{H}_{0y} e^{-i\omega t}; \quad (23)$$

$$m_y = \frac{\zeta m_0 \omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2} \mathcal{H}_{0y} e^{-i\omega t} + i \frac{\zeta m_0 \omega}{\omega_0^2 - \omega^2} \mathcal{H}_{0x} e^{-i\omega t}; \quad (24)$$

Тогда для одного атома будем иметь:

$$\chi_{xx} = \chi_{yy} = \frac{\zeta m_0 \omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2}; \quad (25)$$

$$\chi_{xy} = -\chi_{yx} = -i \frac{\zeta m_0 \omega}{\omega_0^2 - \omega^2}; \quad (26)$$

В таком случае тензор магнитной проницаемости будет таким:

$$\hat{\mu} = \begin{bmatrix} 1 + \frac{4\pi N \zeta m_0 \omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2} & -i \frac{4\pi N \zeta m_0 \omega}{\omega_0^2 - \omega^2} & 0 \\ i \frac{4\pi N \zeta m_0 \omega}{\omega_0^2 - \omega^2} & 1 + \frac{4\pi N \zeta m_0 \omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}; \quad (27)$$

Эта модель соответствует гиромангнитной среде - наличие комплексной недиагональной компоненты в тензоре магнитной проницаемости.

Какие будут собственные волны? Что с ними будет происходить?

В реальности что из этого срабатывает - гирозлектрические эффекты или гиромангнитные?

На самом деле - и то и другое. А характерное поведение зависит в основном от частоты.

Теперь попробуем рассмотреть то же самое в простой квантовомеханической модели.

16 Магнитооптика в ферромагнитной среде.

Рассмотрим в качестве модели гипотетический магнитоактивный атом, который устроен следующим образом - у группы электронов этого атома отличен от нуля полный спин, но равен нулю полный орбитальный момент.

С этой группой электронов взаимодействует один оптический электрон, спин которого не будем учитывать.

Соответствующий одноэлектронный гамильтониан запишем как $\vec{s} \neq 0, L = 0$:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_s + A(\vec{l} \cdot \vec{s}); \quad (28)$$

Второй член здесь описывает взаимодействие с оптическим электроном.

Что такое оптический атом? Пусть есть внешняя оболочка со спонтанным спиновым моментом. И пусть на ней есть один активный электрон.

Спиновое состояние атома будем считать заданным - т.е.:

$$\hat{S} \Rightarrow \langle \hat{S} \rangle = \hat{S}; \quad (29)$$

Гамильтониан 28 описывает поведение оптического электрона в заданном поле, имеющем симметрию магнитного поля. Сам оператор соответствует релятивистскому спин-орбитальному взаимодействию.

В отсутствии спин-орбитального взаимодействия будем считать, что основному состоянию \hat{H}_S - соответствует функция ψ_1 с $l = 0$, а первое возбуждённое состояние 3-ёхкратно вырождено: $\psi_2(l = 1, m = -1)$, $\psi_3(l = 1, m = 0)$, $\psi_4(l = 1, m = 1)$.

Тогда второй спин снимает вырождение с собственных функций начального гамильтониана. Будет такой порядок уровней: $E_1 < E_2 < E_3 < E_4$ (индексы - номера функций). $E_4 - E_3 = E_3 - E_2 = AS$, а с основным состоянием расщепление $\hbar\omega_0$.

Пусть взаимодействие ферромагнитных атомов устанавливает определённый порядок. Мы имеем модель для рассмотрения оптических свойств ферромагнетика.

Рассмотрим взаимодействие оптического электрона с полем в дипольном приближении:

$$\hbar H_{\text{int}}(t) = -\vec{d}\vec{E}(t); \quad (30)$$

Если поле гармоническое. То:

$$\hbar H_{\text{int}} = -d_\alpha E_{0\alpha} e^{-i\omega t}; \quad (31)$$

С учётом этого полный гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{int}} + \hat{H}_0; \quad (32)$$

Матрица плотности в таком случае подчиняется уравнению:

$$-i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H}_{\text{int}}; \hat{\rho}]; \quad (33)$$

В чём смысл матрицы плотности:

$$\psi = \sum c_n \psi_n; \quad (34)$$

А дальше мы мереем оператор \hat{A} :

$$A_{ij} = \int \psi_i^* \hat{A} \psi_j dv; \quad (35)$$

Тогда среднее на заданной ψ :

$$\langle A \rangle = \sum_{ij} c_i^* c_j A_{ij}; \quad (36)$$

Но иногда не удастся описать таким образом. Например когда происходит взаимодействие с другой системой. Или например можно так учитывать взаимодействие подсистем.

Уравнение 33 соответствует представлению взаимодействия. В этом представлении операторы:

$$\hat{A}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}; \quad (37)$$

Это шредингеровское представление. Тогда получим выражение для матрицы плотности:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}^{(0)} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t [\hat{H}_{\text{int}}; \rho(t_1)] dt_1; \quad (38)$$

Здесь мы считаем то взаимодействие вечно. $\hat{\rho}^{(0)} = \hat{\rho}(-\infty)$. Тогда в первом приближении:

$$\hat{\rho}(t) \approx \hat{\rho}^{(0)} + \hat{\rho}^{(1)}(t); \quad (39)$$

Таким образом:

$$\hat{\rho}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t [\hat{H}_{\text{int}}; \rho^{(0)}] dt_1; \quad (40)$$

Поскольку речь идет про средние по ансамблю (измерений), то в первом приближении возникающий дипольный момент:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A}); \quad (41)$$

Пользуясь таким правилом можно получить:

$$\begin{aligned} \langle \hat{d}_\alpha(t) \rangle &= \sum_{\beta} \left(\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \text{Sp}([\hat{d}_\beta(t_1) E_\rho(t_1); \hat{\rho}^{(0)}]) dt_1 = \right. \\ &\quad \left. \sum_{\beta, m, n, k} \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \{ \{ (d_\beta(t_1))_{mn} (d_\alpha(t_1))_{nm} - (d_\beta(t_1))_{nk} (d_\alpha(t_1))_{kn} \} \rho_{nn}^{(0)} E_\beta(t_1) \} dt_1; \right. \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь m, n, k - индексы матричных элементов. α, β - просто координаты. Ненулевые компоненты матричного представления дипольного момента в Шредингеровском представлении:

$$(d_x)_{12} = (d_x)_{21} = (d_x)_{14} = (d_x)_{41} = d; \quad (43)$$

$$(d_y)_{12} = -id; (d_y)_{21} = id; (d_y)_{14} = id; (d_y)_{41} = -id; \quad (44)$$

$$(d_z) = d'; \quad (45)$$

Рассмотрим $\alpha = \beta = x$, тогда:

$$\langle d_x(t) \rangle = \sum_{n, m, k} \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \{ (d_x(t))_{nm} (d_x(t_1))_{mn} - (d_x(t_1))_{nk} (d_x(t))_{kn} \} \rho_{nn}^{(0)} E_{0x} e^{-i\omega t} dt_1; \quad (46)$$

Получим:

$$\begin{aligned} \langle d_x(t) \rangle &= \frac{i}{\hbar} d^2 E_{0x} \left((\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)}) \int_{-\infty}^0 (e^{i(\omega_{21} + \omega)\tau} - e^{i(-\omega_{21} + \omega)\tau}) d\tau + \right. \\ &\quad \left. (\rho_{11}^{(0)} - \rho_{44}^{(0)}) \int_{-\infty}^0 (e^{i(\omega_{41} + \omega)\tau} - e^{i(-\omega_{41} + \omega)\tau}) d\tau \right) e^{-i\omega t}; \end{aligned} \quad (47)$$

К сожалению эти интегралы расходятся, но можно сделать трюк с бесконечно малым затуханием.

Формально можно учесть медленное затухание, как:

$$E_{0x} e^{-i\omega t} e^{\epsilon t} \Rightarrow \omega \rightarrow \omega + i\epsilon; \quad (48)$$

В таком случае ответ будет равным:

$$\langle d_x(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} d^2 \left\{ (\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)}) \frac{2\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2} + (\rho_{11}^{(0)} - \rho_{44}^{(0)}) \frac{2\omega_{41}}{\omega_{41}^2 - \omega^2} \right\} E_{0x} e^{-i\omega t}; \quad (49)$$

При этом это работает, только, когда $\omega \neq \omega_{21}, \omega_{41}$. Что соответствует отсутствию поглощения.

Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

15 Магнитооптика

Как оптическое излучение взаимодействует со средой, имеющей спонтанную намагниченность. Мы рассмотрели такую среду - ферромагнетик.

Начнём с того, что представляет электромагнитное поле, точнее - с чем оно взаимодействует. Электрическое поле действует на заряды, а магнитное поле - в первую очередь на спиновые переменные.

Мы рассматривали "узкую" область - воздействие электрического поля. В первую очередь это влияет на движение электронов. Заряды "чувствуют" намагниченность и спин-орбитальное взаимодействие.

Может такое случиться, то их спин "чувствует" поле упорядоченной системы - мы это опускаем. Электроны, взаимодействующие с полем называются оптическими. Поле действует на все электроны, но эти - сильнее всего откликаются. Сами эти электроны взаимодействуют спином с магнитным полем упорядоченной системы.

Что бывает с электронами, с орбитальным движением, когда на них действует поле - мы рассматривали. Мы рассматриваем чисто квантовый случай с заданными наперёд дискретными уровнями. У нас есть система 4-ёх уровней, а их волновые функции считаем базовыми.

В классике - мы что делаем? Получаем уравнения на функцию распределения. А у нас получается то же самое, но для матрицы плотности. С её помощью можно вычислить все квантовомеханические средние.

В каких условиях мы не можем описать систему волновой функции? Например, когда есть классический силовой центр, и волновая функция в начале. Тогда мы можем всегда описать при помощи волновых функций. А если у нас есть квантовый источник, тогда происходит запутывание. Если мы следим за переменными только своей системы - тогда у нас не получится описать. Работает всё хорошо только для глобальной волновой функции.

Рассмотрим систему из 4-ёх уровней в термостате. Вероятности обнаружения частицы на уровнях: $P_i \propto \frac{1}{z} \exp(-\frac{E_i}{T})$. Вместо того, чтобы заморачиваться с этим, можно ввести матрицу плотности, которая удобнее - можно просто вычислять средние.

Мы посчитали матрицу плотности в первом порядке возмущений. Оператор возмущения - дипольный момент.

Рассмотрим предельный случай $T \rightarrow 0$. Тогда у нас останется по-сути гибсовского распределение. $\rho_{11}^{(0)} \rightarrow 1$, в таком случае электрический дипольный момент выходит равным:

$$\langle d_x(t) \rangle = \frac{2}{\hbar} d^2 \left\{ \frac{\omega_{21}}{\omega_{21}^2 - \omega^2} + \frac{\omega_{41}}{\omega_{41}^2 - \omega^2} \right\} E_{0x} e^{-i\omega t}, \quad (1)$$

Смотрим на картинку с переходами. Введём $\omega_0 = \frac{E_3 - E_1}{\hbar}$ - "собственная частота" атома, соответствующая переходу между основным состоянием и средним уровнем триплета. Аналогично: $\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$, $\omega_{41} = \frac{E_4 - E_1}{\hbar}$. Также введём аналог Лорморовской частоты: $\omega_L = \frac{A_s}{\hbar}$.

В этих обозначениях получим:

$$\langle d_x(t) \rangle = \frac{4}{\hbar} d^2 \frac{\omega_0((\omega_0^2 - \omega_L^2) - \omega^2)}{((\omega_0^2 - \omega_L^2) - \omega^2)((\omega_0^2 + \omega_L^2) - \omega^2)} E_{0x} e^{-i\omega t}; \quad (2)$$

Здесь можно увидеть аналог классического тензора поляризуемости:

$$\alpha_{xx} = \frac{4}{\hbar} d^2 \frac{\omega_0((\omega_0^2 - \omega_L^2) - \omega^2)}{((\omega_0^2 - \omega_L^2) - \omega^2)((\omega_0^2 + \omega_L^2) - \omega^2)}; \quad (3)$$

Но почему у нас отклик только по одной оси? $\alpha_{xx} = \alpha_{yy}$. Очевидно, то существуют и недиагональные компоненты. В том же приближении и в отсутствии поглощения можно получить:

$$\langle d_y(t) \rangle = -i \frac{8d^2}{\hbar} \frac{\omega_0 \omega_L \omega}{((\omega_0^2 - \omega_L^2) - \omega^2)((\omega_0^2 + \omega_L^2) - \omega^2)} E_{0x} e^{-i\omega t}; \quad (4)$$

$$\alpha_{xy} = -\alpha_{yx} = -i \frac{8d^2}{\hbar} \frac{\omega_0 \omega_L \omega}{((\omega_0^2 - \omega_L^2) - \omega^2)((\omega_0^2 + \omega_L^2) - \omega^2)}; \quad (5)$$

Это нечётная функция ларморовой частоты. Таким образом это модель giroэлектрической среды.

Вообще это достаточно традиционная процедура в электродинамике.

16 Обращение времени и теорема Крамерса

Случай классической механики. Система описывается состоянием из координат и импульсов \vec{p} , \vec{q} . Исходное состояние g - описывается теми же обобщёнными координатами, но противоположными импульсами. такое состояние называется сопряжённым по времени к отношению к исходному. Уравнения Гамильтона:

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}; \quad (6)$$

$$\dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}}; \quad (7)$$

Преобразование: $t \rightarrow -t$, $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$, $\vec{q} \rightarrow \vec{q}$ - не меняет вид уравнений 6 в случае, если:

$$H(\vec{p}, \vec{q}) = H(-\vec{p}, \vec{q}) \quad (8)$$

Это значит, что если $q(t)$, $p(t)$ - решения уравнений Гамильтона, то $q(-t)$, $-p(-t)$ - тоже решение уравнения Гамильтона.

Магнитное поле нарушает такой принцип. Чтобы восстановить обратимость во времени - нужно будет поле направлять в обратную сторону.

Если есть полностью изолированная система с магнитными частицами это всегда можно сделать.

Рассмотрим случай квантовой механики и бесспиновой частицы.

$$\hat{H}(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}; \quad (9)$$

Рассмотрим оператор \hat{T} - обращения во времени: замена $t \rightarrow -t$, комплексное сопряжение:

$$\hat{H}^*(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}})\psi^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial(-t)}; \quad (10)$$

Из этого видно, что если:

$$\hat{H}^*(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) = \hat{H}(\vec{r}, -\vec{p}) = \hat{H}(\vec{r}, \vec{p}); \quad (11)$$

И если $\psi(\vec{r}, t)$ - является решением, то и $\psi^*(\vec{r}, -t)$ - будет тоже решением уравнения 10. Рассмотрим теперь случай частицы со спином $\frac{1}{2}$. Тогда оператор Гамильтона будет выглядеть:

$$\hat{H}(\vec{r}, \vec{p}, \vec{\sigma}) \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{bmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial(t)} \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{bmatrix}; \quad (12)$$

Подействуем оператором \hat{T} , определённым для бесспиновой частицы.

$$\hat{H}(\vec{r}, -\vec{p}, \sigma_x, -\sigma_y, \sigma_z) \begin{bmatrix} \psi_1^*(\vec{r}, -t) \\ \psi_2^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial(-t)} \begin{bmatrix} \psi_1^*(\vec{r}, -t) \\ \psi_2^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix}; \quad (13)$$

Подействуем на 13 оператором $i\hat{\sigma}_y$:

$$(i\hat{\sigma}_y)\hat{H}(\vec{r}, -\vec{p}, \sigma_x, -\sigma_y, \sigma_z) \begin{bmatrix} \psi_1^*(\vec{r}, -t) \\ \psi_2^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial(-t)} (i\hat{\sigma}_y) \begin{bmatrix} \psi_1^*(\vec{r}, -t) \\ \psi_2^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix}; \quad (14)$$

А теперь будем действовать формально:

$$\hat{H}(\vec{r}, -\vec{p}, -\sigma_x, -\sigma_y, -\sigma_z)(i\hat{\sigma}_y) \begin{bmatrix} \psi_1^*(\vec{r}, -t) \\ \psi_2^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial(-t)} (i\hat{\sigma}_y) \begin{bmatrix} \psi_1^*(\vec{r}, -t) \\ \psi_2^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix}; \quad (15)$$

Это можно переписать более кратко:

$$\hat{H}(\vec{r}, -\vec{p}, -\vec{\sigma})(i\hat{\sigma}_y) \begin{bmatrix} \psi_1^*(\vec{r}, -t) \\ \psi_2^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial(-t)} (i\hat{\sigma}_y) \begin{bmatrix} \psi_1^*(\vec{r}, -t) \\ \psi_2^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix}; \quad (16)$$

Теперь по аналогии с классическим случаем потребуем:

$$\hat{H}(\vec{r}, -\vec{p}, -\vec{\sigma}) = \hat{H}(\vec{r}, \vec{p}, \vec{\sigma}); \quad (17)$$

В таком случае мы получим, что волновые функции $i\hat{\sigma}_y) \begin{bmatrix} \psi_1^*(\vec{r}, -t) \\ \psi_2^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix}$ - тоже являются решением системы.

Имеет смысл ввести оператор обращения времени для частицы с таким спином \hat{T}' :

$$\hat{T}' \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{bmatrix} = (i\hat{\sigma}_y)\hat{T} \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_2^*(\vec{r}, -t) \\ -\psi_1^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix}; \quad (18)$$

Ситуация 17 соответствует: $\hat{T}'\hat{H} = \hat{H}\hat{T}'$. А из ??, 18 следует, что:

$$\hat{T}' \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_2^*(\vec{r}, -t) \\ -\psi_1^*(\vec{r}, -t) \end{bmatrix}; \quad (19)$$

- есть решение уравнения Шредингера.

Воздействие оператора \hat{T}' - даёт другую функцию или исходную (с точностью до постоянного множителя)?

Пусть это так, тогда:

$$\hat{T}'\Phi = C\Phi; \quad (20)$$

Применим второй раз и получим:

$$\hat{T}'\hat{T}'\Phi = \hat{T}'C\Phi = C^*C\Phi = |C|^2\Phi; \quad (21)$$

Но, выполняя требования 19 получим:

$$\hat{T}'\hat{T}'\Phi = -\Phi; \quad (22)$$

Таким образом это не совместные уравнения, это значит, что если Φ - решение уравнения Шредингера, то $\hat{T}'\hat{T}'\Phi$ - тоже решение, но:

$$\hat{T}'\Phi \neq C\Phi; \quad (23)$$

Тогда одному энергетическому уровню принадлежат *как минимум* два состояния:

$$\hat{H}\Phi = E\Phi; \quad (24)$$

И тогда:

$$\hat{H}\hat{T}'\Phi = E\hat{T}'\Phi; \quad (25)$$

Значит есть как минимум двухкратное вырождение. Наличие этого вырождения составляет предмет *теоремы Крамерса*.

Можно сформулировать так: Если есть спиновая частица, движущаяся в таком гамильтониане, то вырождение это никак не изменить.

Но вот добавки, не обладающие таким свойством - испортят эту симметрию, но если мы включим в рассмотрение и источники поля, то всё снова станет прекрасно.

Рассмотрим случай системы частиц со спином $\frac{1}{2}$, если есть симметрия, рассмотренная в прошлом и оно действует для изолированной системы и для такой же системы во внешнем электрическом поле (внешнее магнитное поле отсутствует), то если система состоит из нечётного числа электронов - имеет место Крамерово вырождение.

В силу того что волновая функция - сумма произведений:

$$\hat{T}'\hat{T}'\psi^N = -\psi^N, \quad N = 2k + 1; \quad (26)$$

$$\hat{T}'\hat{T}'\psi^N = \psi^N, \quad N = 2k; \quad (27)$$

Φ^N - N электронная волновая функция частиц со спином $\frac{1}{2}$.