

# 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  $\psi$  - 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  $\psi_l$  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  $2 \times 2$ .

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  $2 \times 1$ .

Пусть базисные функции таковы, что матрица  $\hat{\sigma}_z$  - диагональна, а её собственные значения  $\pm 1$ . 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  $\pm 1$ . 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  $2 \times 2$  действуют в фазовом пространстве 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  $\Phi$ . А в системе координат  $x', y', z'$  это же состояние описывается спинором:  $\Phi'$ . Для простоты рассмотрим случай, где переход от одной системы к другой осуществляется поворотом вокруг оси  $z$  на угол  $\gamma$ .

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  $\alpha, \beta, \gamma$  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  $4 \times 4$ . 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  $z$ :

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

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  $\pm 1$  (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  $\geq 2$  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 противоположны. 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  $\psi_n, \psi_m$ , 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  $\psi_n, \psi_m$  - 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:

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

Можно раскрыть это как:

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

Если мы выберем калибровку:

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

То сможем ещё упростить уравнение Паули:

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

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

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

Отсюда видно, что орбитальному моменту электрона соответствует магнитный момент:

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

**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  $\gamma$  - 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  $\alpha, \beta, \gamma$  - 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 OX направлена вдоль цепочки, а в равновесном состоянии все спины направлены по оси OZ. 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:

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

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

Далше 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 ( $\alpha$  - 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  $\omega_k$ ,  $\hat{n}_k$  - 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  $\infty$ . 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,  $\alpha, \gamma$  - 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  $\frac{\text{erg}}{\text{cm}^3}$ .  $\alpha$  - направляющие косинусов вектора намагниченности по направлению к кристаллографическим осям. Причем комбинация  $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$  - такие, что  $\epsilon_A$  - 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  $\epsilon_A$  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  $\theta$ . 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:

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

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

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

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  $\sigma$ ):

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

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

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:

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

Здесь второй множитель - собственное поле частицы.

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

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

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

$$R < R_{\text{cr}} \approx \frac{9}{4} \sqrt{\frac{A|K|}{M_0^4}} \sim \frac{\lambda_2^2}{\lambda_1}; \quad (3)$$

Это был иллюстрационный раздел.

## 15 Ферромагнетик во внешнем квазистатическом поле.

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

$$- \int \vec{H}_0 \vec{M} dv; \quad (4)$$

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  $\vec{H}_0$ . 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.

$$E = -\frac{1}{2}M_z\mathcal{H}_{M,z} - \frac{1}{2}M_x\mathcal{H}_{M,x} - M_z\mathcal{H}_{0,z} - M_x\mathcal{H}_{0,x}; \quad (5)$$

С точностью до несущественного постоянного члена можно записать:

$$E = -\frac{\beta M_0^2}{2}(\cos \theta)^2 - M_0\mathcal{H}_{0,z} \cos \theta - M_0\mathcal{H}_{0,x} \sin \theta; \quad (6)$$

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

$$E = -\frac{\beta M_0^2}{2}(\cos \theta)^2 - M_0\mathcal{H}_{0,z} \cos \theta; \quad (7)$$

Тогда попробуем найти минимум по  $\theta$ :

$$\left. \frac{dE}{d\theta} \right|_{\theta=\theta_p} = 0; \quad (8)$$

Решение:

$$\sin \theta_p (\beta M_0^2 \cos \theta_p + M_0\mathcal{H}_{0,z}) = 0; \quad (9)$$

В общем случае есть 3-и решения:

$$\theta_1 = 0, \quad \theta_2 = \pi, \quad \cos \theta_3 = -\frac{\mathcal{H}_{0,z}}{\beta M_0}; \quad (10)$$

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

$$\frac{d^2 E}{d\theta^2} = -\beta M_0^2 \sin^2 \theta_p + \beta M_0 \mathcal{H}_{0,z} \cos \theta_p > 0; \quad (11)$$

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:

$$E(\theta = 0) = -\frac{\beta M_0^2}{2} - M_0\mathcal{H}_{0,z}; \quad (12)$$

$$E(\theta = \pi) = -\frac{\beta M_0^2}{2} + M_0\mathcal{H}_{0,z}; \quad (13)$$

$$E(\theta = -\frac{\mathcal{H}_{0,z}}{\beta M_0}) = \frac{\mathcal{H}_{0,z}^2}{2\beta}; \quad (14)$$

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.