спиновый гамильтониан

СПИНОВЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН - оператор энергии спиновой подсистемы атомов, ионов, молекул и твёрдых тел, выражающийся через операторы *спина* электронов и нуклонов, составляющих эти физ. объекты (см. *Гамильтониан*).Полный С. г. можно разбить на два слагаемых - квазиклассический и обменный С. г. (не имеющий классич. аналога). С. г. широко применяется в физике магн. явлении для описания разл. свойств магнетиков, в т. ч. типов *магнитных атомных структур*, магн. ветвей спектра элементарных возбуждений, термодинамич. величин в упорядоченных магн. системах (включая описание *магнитных фазовых переходов)*, разл. видов *магнитного резонанса* и т. п. (см. также *Парамагнетизм*).

Для решения широкого круга задач физики конден-сиров. состояния помимо магнетизма (напр., *сверхтекучести* и *сверхпроводимости*, сегнетоэлектричества, упорядочения сплавов и т. п.) часто используются эфф. квази- (или псевдо-)спиновые гамильтонианы (КСГ). Применение КСГ основано на формальной аналогии между спиновыми операторами и операторами, действующими в пространстве состояний (*волновых функций*)к--л. квантовой системы.

Квазиклассический спиновый гамильтониан обусловлен наличием у электронов или нуклонов собственного дипольного магн. момента $\boldsymbol{\mu}$ (см. *Магнетизм микрочастиц*),к-рый посредством магнитомеханич. отношения связан с их спином $\boldsymbol{s}$: $\boldsymbol{\mu} = -g\mu_0\boldsymbol{s}$ (g - *Ланде множитель*, μ_0-электронный $\mu_\text{Б}$ или ядерный $\mu_\text{ЯД}$ *магнетон*).«Квазиклассичность» этой части С. г. означает, что все перечисленные взаимодействия выражаются через магн. моменты частиц $\boldsymbol{\mu}$, к-рые могут иметь природу, отличную от спиновой (напр., *суперпарамагнетизм*),тогда как обменная часть С. г. имеет чисто квантовую природу и принципиально невозможна в системе частиц, не обладающих полуцелым спином. В квазиклассический С. г. входят: взаимодействие микрочастицы с внеш. магн. нолем (см. *Зеемана эффект); спин-орбитальное взаимодействие* электрона, находящегося в кулоновском поле ядра и др. электронов; *сверхтонкое взаимодействие* магн. моментов электронов и ядер; магн. *диполь-дипольное взаимодействие* в системе спинов электронов или ядер (иногда учитываются и взаимодействия более высокой мультипольности). В обычных условиях все эти релятивистские взаимодействия малы по сравнению с кулоновским *обменным взаимодействием*. Кроме того, малы члены, включающие взаимодействие с магн. моментами ядер, т. к. $\mu_\text{ЯД} \ll \mu_\text{Б}$. Учёт тех или иных членов С. г. важен, напр., в атомной и молекулярной спектроскопии и многих резонансных явлениях, где они приводят к расщеплению энергетич. уровней и уширению резонансных линий.

Эффективный одноузельный спиновый гамильтониан. В физике магн. явлений осн. роль играют ионы (атомы) элементов переходных групп и редкоземельных элементов с частично заполненными *d*- или *f*-оболочками - т. н. парамагн. ионы (ПМИ). Они обладают отличным от нуля полным спином $\boldsymbol{S} = \sum_{l=1}^{n} \boldsymbol{s}_l$

, где n - число неспаренных электронов в оболочке, s_l - оператор спина l-го электрона. Суммарное спиновое квантовое число ПМИ $S = n/2$. Энергия свободного ПМИ определяется в основном зеемановским и спин-орбитальным взаимодействиями, тогда как энергия того же атома (иона) в твёрдом теле выражается с помощью «одночастичного» (точнее, одноузельного) эффективного С. г. [М. Прайс (M. Pryce), 1950]

$$\mathcal{H} = \mu_Б g_{\alpha\beta} H^\alpha S^\beta + \mu_Б^2 \Lambda_{\alpha\beta} H^\alpha H^\beta + D_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta, \qquad (1)$$

$$\alpha, \beta = x, y, z,$$

в к-ром полностью исключены орбитальные степени свободы (их вклад во 2-м порядке теории возмущений определяют коэф. $\Lambda_{\lambda\beta}$), H^α и S^α - проекции векторов внеш. магн. поля и полного спина на оси координат. Это связано с действием кулоновского *внутрикристаллического поля*, создаваемого немагнитным окружением, благодаря к-рому спин-орбитальное взаимодействие ПМИ существенно ослабляется. Если осн. состояние ПМИ является, напр., орбитальным синглетом, то происходит полное *«замораживание» орбитальных моментов*.

Первое слагаемое в (1) соответствует зеемановской энергии, где $g_{\alpha\beta} = 2(\delta_{\alpha\beta} + \lambda\Lambda_{\alpha\beta})$, $\delta_{\alpha\beta}$ - *Кронекера символ*; второе - энергии, определяющей т. н. *ванфлековский парамагнетизм*, третье - энергии одноионной *магнитной анизотропии*, характеризуемой тензором $D_{\alpha\beta} = \lambda^2 \Lambda_{\alpha\beta}$ (λ - константа спин-орбитального взаимодействия). Число разл. независимых g-факторов и констант анизотропии одинаково и определяется типом локальной симметрии окружения. В случае кубич. симметрии имеется всего одна константа, $D_{\alpha\beta} = D\delta_{\alpha\beta}$, третье слагаемое в (1) вырождается в число $DS(S+1)$ и вклад в (1) начинается с членов 4-го порядка $D_{\alpha\beta\gamma\delta} S^\alpha S^\beta S^\gamma S^\delta$ ($\alpha, \beta, \gamma, \delta = x, y, z$). В случае аксиальной симметрии таких констант две: $D_{\alpha\beta} = D_\alpha \delta_{\alpha\beta}$ ($D_z = D_{\parallel}, D_y = D_x = D_\perp$). В случае более сложной симметрии вклад в (1) могут давать более высокие степени спиновых (дипольных) операторов, а также квадрупольные и др. тензорные операторы, что особенно важно для больших значений S и высокой симметрии внутрикристаллич. поля. Микроскопич. расчёт $g_{\alpha\beta}$ и $D_{\alpha\beta}$ сложен, и они обычно задаются в С. г. феноменологически.

Обменный спиновый гамильтониан атомов и молекул. Обменный С. г. имеет чисто квантовую природу и не обладает классич. аналогом. Он обусловлен *тождественности принципом* (квантовая неразличимость одинаковых микрочастиц) и *Паули принципом* .Полная волновая ф-ция системы фермионов (электронов или нуклонов), образующих электронную или ядерную подсистемы твёрдого тела, должна быть антисимметричной по отношению к перестановке координат и спинов любой пары частиц. Этим обусловлено появление в собств. значениях энергии системы дополнит. обменных вкладов. Однако, согласно П. Дираку (P. Dirac, 1926), можно избежать сложной процедуры антисимметризации и ограничиться простым произведением одночастичных волновых ф-ций, если добавить к исходному гамильтониану оператор обменного взаимодействия, построенный только на спиновых операторах входящих в систему фермионов. Структура обменного С. г. определяется тем, что для любой пары частиц p, q со спином 1/2 оператор перестановки (транспозиции) орбитальной (координатной) волновой ф-ции имеет вид: $P_{p,q} = \pm {}^1/_2 (1 + \boldsymbol{S}_p \boldsymbol{S}_q)$, где S_p и S_q - векторные спиновые операторы частиц p и q.

Простейшим примером обменного С. г. является гамильтониан системы двух взаимодействующих друг с другом и с ядрами электронов (напр., в атоме He или молекуле H_2):

$$\mathcal{H} = \mathcal{E}_0 - 2J\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{S}_2. \qquad (2)$$

Он описывает зависимость энергии этой системы от взаимной ориентации спинов S_1 и S_2 электронов и учитывает лишь кулоновское взаимодействие.

Обменный спиновый гамильтониан твёрдых тел. Обобщение простейшего С. г. (2) было дано В. Гейзенбергом (W. Heisenberg, 1928) и независимо Я. И. Френкелем (1928) для описания сильно магнитных свойств нек-рых твёрдых тел, содержащих ПМИ. При этом учитывалось только кулоновское взаимодействие в системе многих d- и (или) f-электронов и полностью пренебрегалось наличием s-

электронов проводимости. Соответствующий С. г. магн. диэлектрика имеет вид (см. *Гейзенберга модель*:)

$$\mathscr{H}=\mathscr{E}_0-\sum_{i,j}J_{ij}S_iS_j, \qquad (3)$$

где $\mathscr{E}_0$ - константа, S_i (S_j) - векторный оператор полного спина ПМИ в узле $i(j)$, J_{ij} - обменный интеграл, зависящий только от расстояния между узлами i и j ($J_{ii}=0$).

Несмотря на простоту, С. г. (3) качественно правильно описывает магн. упорядочение не только в магн. диэлектриках, но и в нек-рых др. веществах, где учёт обменного взаимодействия внутри подсистемы *d*- или f-электронов уже недостаточен.

Обобщённый спиновый гамильтониан. Дальнейшее обобщение С. г. (3) для магн. диэлектриков можно получить при учёте не только обменного, но и релятивистского межионного взаимодействия. Этот С. г. может быть получен с помощью *возмущений теории* для вырожденного уровня в операторной форме (Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, 1949). Обменный интеграл становится тензором $J_{ij}^{\alpha\beta}$, симметричная часть к-рого описывает эффекты обменной магн. анизотропии, а антисимметричная часть, представляемая вектором D_{ij}, описывает явление *слабого ферромагнетизма* в магнетиках определ. симметрии [И. Е. Дзялошинский, 1957; Т. Мория (T. Moriya), 1960]. Соответствующий добавочный член к С. г. (3) имеет вид $\sum_{ij}(\boldsymbol{D}_{ij}[\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_j])$. Число независимых компонент симметричной части тензора $J_{ij}^{\alpha\beta}$

определяется типом симметрии кристаллич. решётки. В кристаллах кубич. симметрии всего одна компонента

$J_{ij}^{\alpha\beta}=J_{ij}\delta_{\alpha\beta}$. В случае одноосной анизотропии $J_{ij}^{\alpha\beta}=J_{ij}^{\alpha}\delta_{\alpha\beta}$, причём

$J_{ij}^{z}=J_{ij}^{\parallel}$, $J_{ij}^{x}=J_{ij}^{y}=J_{ij}^{\perp}$ ($J_{ij}^{\parallel}$ - продольная, $J_{ij}^{\perp}$-поперечная компоненты). Соответствующий последнему случаю С. г. с учётом зеемановского взаимодействия имеет вид:

$$\mathscr{H}=-g\mu_{\text{Б}}\sum_i(\boldsymbol{H}\boldsymbol{S}_i)-\sum_{ij}\Big\{J_{ij}^{\parallel}S_i^zS_j^z+ +J_{ij}^{\perp}\left(S_i^xS_j^x+S_i^yS_j^y\right)\Big\}; \qquad (4)$$

здесь Н - постоянное и однородное внеш. магн. поле. С. г. (4) описывает ферро- или антиферромагнетик в зависимости от знака обменных констант $J_{ij}^{\parallel,\perp}$, к-рые рассматриваются как феноменологич. константы теории (их микроскопич. расчёт представляет самостоят. сложную задачу). Частные случаи С. г. (4) соответствуют известным моделям магн. веществ; напр., при $J_{ij}^{\parallel}=J_{ij}^{\perp}$ С. г. (4) сводится к С. г. изотропной модели Гейзенберга (3), при $J_{ij}^{\perp}=0$ к С. г. *Изинга модели*, при $J_{ij}^{\parallel}=0$ к С. г, т. н. поперечной, или *X Y* - модели. В большинстве случаев рассматривается приближение, когда величины J_{ij}^{α} отличны от нуля, лишь если узлы *i* и *j* являются ближайшими соседями и . Отношение $\xi=J^{\perp}/J^{\parallel}$ наз. константой $J_{ij}^{\alpha}=J^{\alpha}$ межионной магн. анизотропии. В более общем случае С. г. включает члены, описывающие одноионную анизотропию [см. третье слагаемое в (1)]. При $|\xi|<1$ С. г. (4) описывает (анти)ферромагнетик типа «лёгкая ось», при $|\xi|>1$ - типа «лёгкая плоскость».

В оолее высоких порядках теории возмущений к билинейному по спиновым операторам С. г. (4) могут добавляться т. н. негейзенберговские взаимодействия, напр. полилинейные формы вида

$\sum_{i,j,k\ldots} A^{\alpha\beta\gamma\ldots}_{ijk\ldots} \cdot S^{\alpha}_{i} S^{\beta}_{j} S^{\gamma}_{k} \ldots$ (здесь $A^{\alpha\beta\gamma\ldots}_{ijk\ldots}$ -численные коэф.),

называемые многоспиновыми взаимодействиями и существенные, напр., для описания спиновой системы *квантового кристалла* He^3. В случае спина $S \geqslant 1$ возможны также негейзенберговские слагаемые вида

$\sum_{ij} A^{(n)}_{ij} (S_i S_j)^n$, содержащие все независимые спиновые инварианты до порядка 25 включительно [Э. Шрёдингор (E. Schroedinger), 1940)]. Напр., при $S = 1$ это даёт биквадратный обмен.

Обобщение С. г. (4), учитывающее *спин-фононное взаимодействие* в магнетике, возможно на основе кривой Слэтера, описывающей изменение обменных констант при смещениях ПМИ из своих равновесных положений. Др. обобщение С. г. (4) возможно, если при разбиении магнетика на две или более магн. подрешётки обменные константы могут иметь разл. величины и знаки внутри и $J^{\alpha\beta}_{ij}$ между подрешётками (напр., в простом антиферромагнетике $J_{ij} < 0$ между подрешётками, тогда как $J_{ij} > 0$ внутри подрешёток).

Величины могут быть анизотропны не только в спиновом (по $J^{\alpha\beta}_{ij}$ индексам α, β), но и в координатном (по индексам i, j)пространстве (см. *Слоистые магнетики*). В примесных или неупорядоченных магнетиках обменные константы могут быть случайно распределёнными величинами (см. *Спиновое стекло*).При теоретич. расчётах иногда удобно использовать вместо исходных решёточных (дискретных) С. г. (3) и (4) их континуальный (непрерывный) аналог; для этого вводится зависящий от времени t оператор плотности магн. момента $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r},t) = -g\mu_{\text{Б}}\sum_i \boldsymbol{S}_i\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)$, $\delta(\boldsymbol{r})$ - *дельта-функция*, $S_i == S_i(t)$, $r_i = r_i(t)$, к-рый затем усредняется по физически бесконечно малому объёму [Ч. Херринг, Ч. Киттель (C. Herring, C. Kittel), 1951]. В результате возникает плотность макроскопич. магн. момента $M(r,t)$, через к-рую (вместе с её производными) выражаются обычно квазиклассич. феноменологич. С. г., получаемые в виде разложений по магн. инвариантам данной решётки.

Квазиспиновый гамильтониан. Использование КСГ прежде всего связано с относит. простотой и низкой размерностью $m = 2S + 1$ алгебры $SU(m)$спиновых операторов. Для С. г. (КСГ) хорошо разработаны теоретич. методы вычислений, в т. ч. квазиклассич. метод приближённого *вторичного квантования*, вариационные и функциональные методы, методы двухвременных и причинных *Грина функций*, разл. варианты диаграммной техники. Применение КСГ особенно удобно в тех случаях, когда система обладает небольшим числом $2S + 1$ (S - квантовое число квазиспина) разл. квантовых состояний, к-рые описываются собств. значениями оператора продольной компоненты оператора квазиспина S^z (от $-S$ до S)или оператора числа спиновых отклонений $n = S - S^z$ (от 0 до $2S$).. Операторы поперечных компонент квазиспина $S^{\pm} = S^x \pm iS^y$ играют роль операторов рождения и уничтожения квазиспиновых отклонений в S^z-представлении и переводят систему из одного состояния в другое. Для наиб. распространённого случая двухуровневой системы ($S = 1/2$) квазиспиновые операторы $S^{\pm}$ и S^z точно совпадают с паули-операторами, коммутирующими подобно бозе-операторам для разл. состояний ($i \neq j$) и антикоммутирующими подобно ферми-операторам для совпадающих состояний ($i = j$).

В методе КСГ пространство состояний системы является конечномерным, а энергетич. спектр - ограниченным (хотя и не обязательно дискретным). Определ. трудности связаны с кинематич. свойствами спиновых операторов (условием нормировки и т. п.), а также с необходимостью использования обобщённой квантовой статистики с макс. числом заполнения 25 (случай $S = 1/2$ соответствует *Ферми - Дирака статистике*, $S \to \infty$ - *Бозе - Эйнштейна статистике*). Физически возможность введения квазиспинового описания в реальных системах мн. ферми- или (реже) бозе-частиц обусловлена

особенностями структуры гамильтониана взаимодействия и пространства собств. ф-ций, позволяющими полностью исключить одночастичные ферми-или бозе-операторы и ввести с их помощью операторы квазиспина или паули-операторы. При вычислениях на основе КСГ также возможно использование соответствующих квазибозонных или квазифермионных представлений спиновых операторов.

Характерные примеры применения метода КСГ: 1) энергия ПМИ в немагн. окружении в случае, когда его основным орбитальным состоянием является не синглет, а вырожденный дублет, описывается вместо (1) эффективным КСГ вида

$$\mathscr{H}=2\mu_{\text{в}}H^{\alpha}S^{\alpha}+\mu_{\text{в}}H^{z}\sigma^{z}+\lambda S^{z}\sigma^{z}, \qquad (5)$$

где S^z - оператор z-компоненты обычного спина ПМИ, σ^z - оператор z-компоненты квазиспина ($\sigma = 1/2$), действующий в двумерном пространстве волновых ф-ций вырожденного орбитального дублета.

2) Зарядово-независимое (изотонически инвариантное) взаимодействие в системе нуклонов описывается КСГ вида (3) с заменой S_i на τ_i, где τ_i - оператор *изотопического спина* (В. Гейзенберг, 1932), действующий в пространстве волновых ф-ций протона и нейтрона. В J_{ij} входят как истинное обменное взаимодействие вида (3), обусловленное фермионной природой нуклонов, так и другие зависящие от спина (т. н. тензорные) взаимодействия (см. *Ядерные силы*).

3) Энергия (анти)сегнетоэлектрика с водородной связью (напр., KH_2PO_4 или $NaNO_2$), обнаруживающего *структурный фазовый переход*, описывается частным случаем КСГ вида (4) - моделью Изинга в поперечном «поле» [П. де Жен (P. de Gennes), 1963]. Роль внеш. поля играет интеграл туннелирования Ω протона между двумя симметричными минимумами («ямами») одночастичного потенциала. Операторы квазиспина для 5 = 1/2 определены в двумерном пространстве симметричных и антисимметричных по «ямам» волновых ф-ций, описывающих расщепление осн. состояния на дублет с энергиями соответственно $\mathscr{E}_+$ и $\mathscr{E}_-$ ($\mathscr{E}_- > \mathscr{E}_+$, причём $\Omega \approx \mathscr{E}_- - \mathscr{E}_+ > 0$).

4) Энергия сверхпроводника в простейшем варианте *Бардина - Купера - Шриффера модели* может быть представлена в виде частного случая КСГ (4) - поперечной, или ХУ-модели [П. Андерсон (P. Anderson), 1958]. Роль обменного интеграла играет матричный элемент взаимодействия притяжения между куперовскими парами (см. *Купера эффект*),а роль операторов квазиспина - операторы рождения, уничтожения и числа этих пар. Свойство «фермиевости» квазиспиновых операторов для S = 1/2 в одном импульсном состоянии отражает требование принципа Паули.

5) Энергия решёточного квантового неидеального бозе-газа (напр., состоящего из атомов He^4), проявляющего свойство сверхтекучести, также может быть выражена с помощью КСГ (4) для частного случая ферромагнетика типа «лёгкая плоскость» [Х. Мацубара, Х. Мацуда (H. Matsubara, H. Matsuda), 1956] для $S = 1/2$. Роль внеш. поля играют хим. потенциал и анизотропия, а обменного интеграла - энергия парного притяжения бозонов. Свойство «фермиевости» паули-операторов в одном узле решётки отражает наличие в нём сильного отталкивания (типа потенциала «твёрдых сфер»).

6) Конфигурац. энергия парных взаимодействий атомов - ближайших соседей в бинарном твёрдом растворе или сплаве может быть записана в виде продольной (изинговской) части КСГ (4) с $S = 1/2$ (Э. Изинг, 1925). Оператор квазиспина S^z описывает два состояния, соответствующих заполнению данного узла атомом одного или другого типа; роль обменного интеграла играет энергия упорядочения. На основе этой модели можно описать фазовый переход типа порядок - беспорядок ($J > 0$) с образованием сверхрешётки или распадение на две фазы разл. состава.

С помощью того же изинговского КСГ с $S = 1/2$, но с учётом полной потенциальной энергии парных взаимодействий атомов одного типа (дальнодействующее притяжение и короткодействующее отталкивание) [Т. Ли, Ч. Янг (T. Lee, C. Yang), 1952] можно описать фазовый переход типа конденсации для классич. неидеального решёточного газа, при этом оператор $n = 1/2 - S^z$, как правило, описывает два возможных состояния в узле: занятое ($n = 1$) и свободное ($n = 0$).

7) С помощью КСГ формулируются также задачи о взаимодействии *экситонов* в молекулярных кристаллах (А. М. Агранович, Б. Тошич, B. Tosich, 1976), магн. упорядочении в *f*-металлах с синглетным осн. состоянием во внутрикристаллич. поле [И. Уонг, Б. Купер (Y. Wang, B. Cooper), 1968], квадрупольном упорядочении в твёрдом ортоводороде [Дж. Рейч, Р. Эттерс (J. Raich, R. Etters), 1967], фазовом переходе в сверхизлучательный (лазерный) режим для взаимодействия эл--магн. излучения с термостатом из двухуровневых атомов [Р. Дикке (R. Dicke), 1954].

Лит.: Ландау Л. Д., Л и ф ш и ц Е. М., Квантовая механика, 4 изд., М., 1989, гл. 9-11, 16; Дирак П. А. М., Принципы квантовой механики, пер. с англ., 2 изд., М., 1979, гл. 9; Хилл Т., Статистическая механика, пер. с англ., М., 1960; Альтшулер С. А., Козырев Б. М., Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп, 2 изд., М., 1972; Та у л е с Д., Квантовая механика систем многих частиц, пер. с англ., М., 1963; Т я б л и к о в С. В., Методы квантовой теории магнетизма, 2 изд., М., 1975; Агранович В. М., Теория экситонов, М., 1968; Вонсовский С. В., Магнетизм, М., 1971; Уайт Р., Квантовая теория магнетизма, пер. с англ., 2 изд., М., 1985; Вакс В. Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков, М. 1973; Исихара А., Статистическая физика, пер. с англ. М., 1973, гл. 8; Барьяхтар В. Г., Криворучко В. Н. Яблонский Д. А., Функции Грина в теории магнетизма К., 1984; И з ю м о в Ю. А., С к р я б и и Ю. Н., Статистическая механика магвитоупорядочевных систем, М., 1987; Нагаев Э. Л., Магнетики со сложными обменными взаимодействиями, М., 1988. *Ю. Г. Рудой*.

<< Предметный указатель >>

© femto.com.ua
webmaster@femto.com.ua