вения такой спонтанной намагниченности для простых систем в § 7 в связи с обсуждением локализованных моментов.) Как было показано в работах Вако и Ямаситы [3] и Конноли [4], именно так обстоит дело в случае никеля и железа. Ферромагнетизм зонных электронов обсуждался раннее на более феноменологическом уровне Стонером [5]. Воспользовавшись самосогласованным решением, можно сразу же найти полное число нескомпенсированных спинов и, умножив его на магнитный момент, соответствующий одному спину, получить равновесную намагниченность материала. Оказывается, что полученный таким образом результат находится в разумном согласии с экспериментом.

Хотя описанный здесь метод рассмотрения обменного взаимодействия приближенный, он тем не менее представляет собой попытку получить ферромагнетизм, исходя из первых принципов. Сделанные при этом приближения состоят, во-первых, в том, что состояния системы, как мы предположили, описываются единственным слэтеровским детерминантом, и, во-вторых, в использовании обменного взаимодействия, найденного для свободных электронов. Мы увидим, что для феноменологического гейзенберговского обменного взаимодействия необходимости в этих приближениях не возникает.

Мы предполагали также, что электроны могут распространяться по кристаллу, т. е. описываться блоховскими функциями. Как мы уже указывали ранее, возникает вопрос: не происходит ли здесь чего-то, подобного моттовскому переходу, и не становится ли поэтому более подходящим описание, основывающееся на представлениях о локализованных состояниях?

§ 3. ОПЕРАТОРЫ СПИНА

В дальнейшем при обсуждении магнетизма окажется удобным выразить гамильтониан и другие операторы через операторы спина. Так как этот формализм нами до сих пор не использовался, мы, прежде чем двигаться дальше, дадим краткую сводку основных его положений. Сейчас мы просто введем обозначения. Когда мы будем использовать их позже, то все те результаты, которые будут получены с помощью метода вторичного квантования, мы выразим эквивалентным образом через операторы спина. Эквивалентность можно проверить путем выполнения определенных в этом параграфе операций. Начнем с состояний одного электрона, а затем обобщим результаты на атомы с полным спином, бо́льшим $^1/_2$.

Спиновое *состояние* электрона можно представить с помощью нормированного вектора $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$. Спину вверх отвечает вектор $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, а спину вниз — вектор $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Таким образом, состояние i-го электрона задается, например, как $\psi_k(\mathbf{r}_i)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_i$. *Операторы* спина, фигурирующие в гамильтониане или других динамических переменных, можно выразить через спиновые матрицы Паули. Три компоненты оператора спина $\mathbf{S}$ суть

$$S_i^x=\frac{1}{2}\sigma_x=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}_i;\quad S_i^y=\frac{1}{2}\sigma_y=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}_i;$$
$$S_i^z=\frac{1}{2}\sigma_z=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}_i. \tag{5.5}$$

Индекс i показывает, что матрица действует на i-е спиновое состояние. Можно непосредственно получить результат действия каждой из компонент спина на данное спиновое состояние. Например,

$$S_i^x\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_i=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_i.$$

В выражениях, содержащих операторы спинов, три их компоненты рассматриваются как компоненты векторов [1]. Так, например, можно вычислить скалярное произведение спинов двух состояний:

$$\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j=S_i^xS_j^x+S_i^yS_j^y+S_i^zS_j^z. \tag{5.6}$$

Компоненты $\mathbf{S}$ для различных электронов действуют, конечно, на разные координаты и поэтому коммутируют друг с другом. Коммутационные соотношения для компонент спина одного электрона можно получить из (5.5), и они имеют вид

$$S_i^xS_i^y-S_i^yS_i^x=iS_i^z, \tag{5.7}$$
$$S_i^yS_i^z-S_i^zS_i^y=iS_i^x, \tag{5.8}$$
$$S_i^zS_i^x-S_i^xS_i^z=iS_i^y. \tag{5.9}$$

В большинстве случаев оказывается более удобным использовать операторы S_i^+ и S_i^-, определяемые как

$$S_i^+=S_i^x+iS_i^y\left[=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}_i \quad \text{для электронов}\right], \tag{5.10}$$
$$S_i^-=S_i^x-iS_i^y\left[=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}_i \quad \text{для электронов}\right]. \tag{5.11}$$

---

[1]) Точнее, псевдовекторов.— *Прим. ред*

Отсюда сразу видно, что

$$S_i^+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_i=0,\qquad S_i^+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_i=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_i,\tag{5.12}$$

$$S_i^-\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_i=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_i,\qquad S_i^-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_i=0,\tag{5.13}$$

$$S_i^z\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_i=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_i,\qquad S_i^z\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_i=-\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_i.\tag{5.14}$$

Таким образом, по аналогии с операторами рождения и уничтожения фононов оператор S_i^+ увеличивает z-компоненту спина на 1, а S_i^- уменьшает ее на 1. Оператор S_i^z задает эту компоненту. Легко проверить, что скалярное произведение выражается через эти операторы следующим образом:

$$\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j=\frac{1}{2}\left(S_i^+S_j^-+S_i^-S_j^+\right)+S_i^zS_j^z.\tag{5.15}$$

Из соотношений (5.7) — (5.9) вытекают правила коммутации:

$$S_i^+S_i^- - S_i^-S_i^+ = 2S_i^z,\tag{5.16}$$

$$S_i^-S_i^z - S_i^zS_i^- = S_i^-,\tag{5.17}$$

$$S_i^zS_i^+ - S_i^+S_i^z = S_i^+.\tag{5.18}$$

Все эти результаты получены для электрона со спином $^1/_2$. Соотношения (5.5), (5.12) — (5.14) и те, что стоят в квадратных скобках (5.10), справедливы только для этого случая. Выражения же для скалярного произведения и коммутационные соотношения такие же, как для общего оператора углового момента, и поэтому соотношения (5.6) — (5.9) и (5.15) — (5.18) применимы в случае ионов или атомов с произвольным полным спином [6]. Используя соотношения (5.6) — (5.9), можно убедиться в том, что S_i^z коммутирует с $\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_i$, поэтому состояния могут быть собственными состояниями обоих этих операторов одновременно. Можно также сразу показать, что, действуя на собственное состояние оператора S_i^z, оператор S_i^+ увеличивает собственное значение на 1, а оператор S_i^- уменьшает его на 1, оставляя собственное значение оператора $\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_i$ неизменным.

Из соотношения (5.6) или (5.15) ясно, что величина $\langle S_i^z\rangle^2$ ограничена заданным полным спином, поэтому последовательное действие оператора S_i^+ на заданное состояние приведет к такому состоянию, действие оператора S_i^+ на которое дает нуль. Обозначив максимальное собственное значение оператора S_i^z через S из соотношений (5.15) и (5.16), получим, что $\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_i$ равно

$$S+S^2=S(S+1).$$

Полагая S равным полному спину атома, находим, что, как хорошо известно, собственное значение $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i$ есть $S(S+1)$, а оператор S_i^z может иметь собственные значения, отстоящие друг от друга на целое число в интервале от $-S$ до S. Число S может быть либо целым, либо полуцелым.

Можно видеть, что, подобно фононным операторам рождения и уничтожения, S_i^+ и S_i^- не сохраняют нормировку. Для заданного полного спина S собственные состояния можно классифицировать по собственным значениям оператора S^z, обозначенным как S_z. Тогда если $|S_z\rangle$ нормировано, то нормировочный интеграл для состояния $S^+|S_z\rangle$ есть

$$\langle S_z | S^-S^+ | S_z\rangle = \langle S_z | S^+S^- | S_z\rangle - \langle S_z | 2S^z | S_z\rangle.$$

Рассмотрим теперь состояние с $S_z = -S$. Тогда

$$\langle S_z | S^+S^- | S_z\rangle = 0,$$

так что

$$\langle S_z | S^-S^+ | S_z\rangle = 2S,$$

и состояние $S^+|S_z\rangle$ не нормировано, исключая только случай частиц со спином $^1/_2$, т. е. таких, как электрон.

После этого краткого введения в свойства спиновых операторов мы можем заняться феноменологическим рассмотрением обменного взаимодействия.

§ 4. ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЙ ОБМЕННЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН

Начнем с описания зависящего от спинов взаимодействия между электронами, которое можно связать с введенным ранее обменным взаимодействием. Полученные при этом результаты и формализм, однако, оказываются непосредственно применимыми и для ионов, и для атомов. Мы постулируем, что зависящему от спина взаимодействию в гамильтониане соответствует слагаемое

$$\mathscr{H}_{\text{ex}} = -\sum_{i>j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \tag{5.19}$$

Такой гамильтониан называется *гейзенберговским обменным гамильтонианом* и суммирование в нем проводится по всем *парам* электронов. Коэффициенты J_{ij} называются обменными интегралами, и позднее мы выразим их через матричные элементы приближения Хартри — Фока.

Если два рассматриваемых состояния представляют собой состояния свободного атома, величина J имеет тенденцию быть положительной. Спины стремятся стать параллельными, как этого требует правило Хунда. Если взаимодействуют два состояния различных атомов, то величина J имеет тенденцию быть отрицательной. Это