

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
ПЕРМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Центр прикладной математики и физики

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ МАГНЕТИЗМА. ПРАКТИКУМ ПО РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ

Практикум

Для студентов, обучающихся по направлениям
подготовки бакалавров «Прикладные математика и физика» и «Физика»



Пермь 2026

УДК 537.61(075.8)

ББК 22.334.14я73

П573

Составитель:

*канд. физ.-мат. наук, доцент центра прикладной математики
и физики физико-математического института И. С. Поперечный*

П573 Квантовая теория магнетизма. Практикум по решению задач. / И. С. Поперечный ; Пермский государственный национальный исследовательский университет. – Пермь, 2026. – 44 с.

Практикум соответствует вводу к курсу квантовой теории магнетизма. Каждый раздел содержит краткое теоретическое введение, задачи с подробным решением и задачи для самостоятельной работы.

Предназначен для студентов, обучающихся по направлениям подготовки «Прикладная математика и физика» и «Физика».

*Печатается по решению методической комиссии
физико-математического института*

Пермского государственного национального исследовательского университета

© Поперечный И. С., составление, 2026

© ПГНИУ, 2026

Содержание

1. Операторы в квантовой механике	4
1.1. Линейные операторы	4
1.2. Элементы теории представлений	5
1.3. Задачи	6
1.4. Задачи для самостоятельного решения	10
2. Момент импульса	12
2.1. Коммутационные соотношения	12
2.2. Спин электрона	12
2.3. Задачи	12
2.4. Задачи для самостоятельного решения	16
3. Электронный газ в магнитном поле	18
3.1. Движение в магнитном поле	18
3.2. Ферми-газ	18
3.3. Задачи	19
3.4. Задачи для самостоятельного решения	26
4. Атомы в магнитном поле	28
4.1. Магнитный момент атома	28
4.2. Магнетизм газов	28
4.3. Задачи	29
4.4. Задачи для самостоятельного решения	34
5. Магнитное упорядочение: модель Гейзенберга–Дирака–Ван-Флека	35
5.1. Обменное взаимодействие	35
5.2. Гейзенберговский гамильтониан	35
5.3. Задачи	36
5.4. Задачи для самостоятельного решения	42
6. Список рекомендуемой литературы	43

1. Операторы в квантовой механике

1.1. Линейные операторы

В квантовой механике состояние физической системы задаётся волновой функцией ψ , которая представляет собой вектор из некоторого комплексного гильбертова пространства. Для обозначения скалярного произведения векторов этого пространства, как правило, используются символы (ψ_1, ψ_2) либо $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$:

$$(\psi_1, \psi_2) \equiv \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx; \quad (1.1)$$

интегрирование здесь выполняется по всему конфигурационному пространству системы, dx — его элементарный объём. Физические величины в квантовой механике представляются линейными операторами, которые действуют на волновые функции. Оператор, определённый в пространстве R , называется линейным, если выполняются условия

$$\hat{A}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\hat{A}\psi_1 + \beta\hat{A}\psi_2, \quad (1.2)$$

где ψ_1 и ψ_2 — две произвольные функции (векторы состояний) из R , а α и β — любые (комплексные) числа. Оператор $\hat{I}$, ставящий в соответствие каждой функции ψ саму функцию ψ , называется *единичным*. Оператор $\hat{A}^{-1}$ называется обратным к оператору $\hat{A}$, если выполняются равенства $\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{I}$.

а) *Сложение операторов*. Если даны линейные операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$, то оператор $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ определён формулой

$$\hat{C}\psi = (\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi. \quad (1.3)$$

б) *Умножение операторов*. Если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ — линейные операторы, то оператор $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ определяется условием

$$\hat{C}\psi = \hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi), \quad (1.4)$$

то есть сначала на функцию ψ действует оператор $\hat{B}$, а потом на результат — оператор $\hat{A}$. В общем случае $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Оператор $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ называется *коммутатором* операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Если $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, то говорят, что операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют.

Линейному оператору $\hat{A}$ можно сопоставить сопряжённый оператор $\hat{A}^+$ с помощью равенства

$$(\psi, \hat{A}\varphi) = (\hat{A}^+\psi, \varphi). \quad (1.5)$$

Если $\hat{A} = \hat{A}^+$, то оператор $\hat{A}$ называют *самосопряжённым*, или *эрмитовым*. Два важных свойства сопряжённых операторов: а) $\hat{A}^{++} = \hat{A}$; б) если $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$, то $\hat{C}^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$.

1.2. Элементы теории представлений

Если для оператора $\hat{A}$ и функции ψ с отличной от нуля нормой ($\langle\psi|\psi\rangle \neq 0$) выполняется равенство

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi, \quad (1.6)$$

где λ — число, то λ называется *собственным значением* (*собственным числом*) оператора $\hat{A}$, отвечающим *собственной функции* ψ . Спектр собственных значений оператора может быть как дискретным, так и непрерывным. Собственные значения самосопряжённых операторов вещественны, а их собственные функции, отвечающие различным собственным значениям, взаимно ортогональны.

В квантовой механике постулируется, что любая физическая величина изображается самосопряжённым оператором и принимать только те значения, которые являются для него собственными. Собственные функции операторов физических величин образуют полную систему. Для оператора $\hat{L}$ с дискретным спектром собственных значений ($\hat{L}\psi_n = \lambda_n\psi_n$, $\hat{L}^+ = \hat{L}$) это означает, что волновая функция произвольного состояния может быть разложена в ряд по его собственным функциям:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x), \quad c_n = \langle\psi_n|\psi\rangle = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx; \quad (1.7)$$

базисные функции ψ_n предполагаются ортонормированными:

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m, \\ 0, & n \neq m. \end{cases}$$

Равенства (1.7) устанавливают взаимно однозначное соответствие между функцией $\psi(x)$ и коэффициентами c_n . Говорят, что набор коэффициентов c_n опре-

деляет функцию $\psi(x)$ в дискретном $\hat{L}$ -представлении, подчёркивая тем самым, что базисные функции $\psi_n(x)$ являются собственными для оператора $\hat{L}$. Произвольный линейный оператор $\hat{A}$ в указанном представлении задаётся матрицей с элементами

$$A_{nm} = \int \psi_n^*(x) \hat{A} \psi_m(x) dx.$$

Если спектр собственных значений отвечающего физической величине самосопряжённого оператора $\hat{L}$ непрерывен, то имеет место разложение произвольной волновой функции в интеграл

$$\psi(x) = \int c(\lambda) \psi(x, \lambda) d\lambda, \quad c(\lambda) = \int \psi^*(x, \lambda) \psi(x) dx, \quad (1.8)$$

по собственным функциям $\psi(x, \lambda)$ оператора $\hat{L}$. Эти функции нормированы так, что выполняется равенство

$$\int \psi^*(x, \lambda) \psi(x, \lambda') dx = \delta(\lambda - \lambda'),$$

где $\delta(\lambda - \lambda')$ — дельта-функция Дирака. Говорят, что функция $c(\lambda)$ есть функция $\psi(x)$ в $\hat{L}$ -представлении. Действие произвольного оператора $\hat{A}$ на функцию $c(\lambda)$ может быть найдено согласно

$$(\hat{A}c)_\lambda = \int A(\lambda, \lambda') c(\lambda') d\lambda',$$

где нижний индекс справа обозначает аргумент результирующей функции, а

$$A(\lambda, \lambda') = \int \psi^*(x, \lambda) \hat{A} \psi(x, \lambda') dx.$$

Множество чисел $A(\lambda, \lambda')$ называют матрицей (ядром) оператора $\hat{A}$ в $\hat{L}$ -представлении.

1.3. Задачи

1. Найти результат действия оператора $\hat{L} = \left(x \frac{d}{dx}\right)^2$ на функцию $f(x) = \cos x$.

Решение. Оператор $\hat{L}$ представляет собой квадрат оператора $\hat{C} = x \frac{d}{dx}$, который, в свою очередь, является произведением операторов $\hat{A} = x$ и $\hat{B} = \frac{d}{dx}$. Поэтому

$$\hat{C}f = \hat{A}(\hat{B}f) = x \left(\frac{d \cos x}{dx} \right) = -x \sin x,$$

$$\hat{L}f = \hat{C}(\hat{C}f) = x \frac{d}{dx} (-x \sin x) = -x (\sin x + x \cos x) = -x \sin x - x^2 \cos x.$$

2. Действие оператора комплексного сопряжения $\hat{K}$ на функцию $\psi(x)$ ($-\infty < x < \infty$) задаётся равенством $\hat{K}\psi(x) = \psi^*(x)$. Является ли этот оператор линейным?

Решение. Пусть $f(x)$ и $g(x)$ — две произвольные функции, заданные на интервале $-\infty < x < \infty$, а α и β — два любых (комплексных) числа. По определению оператора $\hat{K}$,

$$\hat{K}[\alpha f(x) + \beta g(x)] = \alpha^* f^*(x) + \beta^* g^*(x) = \alpha^* \hat{K}f(x) + \beta^* \hat{K}g(x).$$

Поскольку в общем случае $\alpha^* \neq \alpha$ и $\beta^* \neq \beta$, то

$$\hat{K}[\alpha f(x) + \beta g(x)] \neq \alpha \hat{K}f(x) + \beta \hat{K}g(x).$$

Таким образом, равенство (1.1) не выполняется, значит, оператор комплексного сопряжения не является линейным.

3. Показать, что если $\hat{L}$ — произвольный линейный оператор, а $\hat{A}$ — самосопряженный оператор, то оператор $\hat{C} = \hat{L}\hat{A}\hat{L}^+$ является эрмитовым.

Решение. Найдём оператор $\hat{C}^+$, сопряжённый к оператору $\hat{C}$:

$$\hat{C}^+ = (\hat{L}\hat{A}\hat{L}^+)^+ = (\hat{A}\hat{L}^+)^+ \hat{L}^+ = \hat{L}^{++} \hat{A} \hat{L}^+ = \hat{L} \hat{A} \hat{L}^+.$$

Таким образом, $\hat{C}^+ = \hat{C}$.

4. Самосопряжённый оператор $\hat{A}$ подчиняется равенству $\hat{A}^2 = \alpha \hat{A}$, где α — действительное число. Найти собственные значения этого оператора.

Решение. Собственные значения λ и собственные функции ψ оператора $\hat{A}$ определяются равенством

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi,$$

из которого следует, что

$$\hat{A}^2\psi = \hat{A}(\lambda\psi) = \lambda\hat{A}\psi = \lambda^2\psi.$$

С другой стороны, по условию задачи

$$\hat{A}^2\psi = \alpha\hat{A}\psi = \alpha\lambda\psi.$$

Сравнивая два равенства, получаем

$$\alpha\lambda = \lambda^2, \quad \lambda(\alpha - \lambda) = 0.$$

Отсюда, $\lambda = 0$ либо $\lambda = \alpha$.

5. Найти нормированные собственные функции оператора импульса $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ частицы, совершающей одномерное движение, в координатном представлении ($\hbar = 1.05 \times 10^{-27}$ эрг · с — постоянная Планка).

Решение. По определению, искомые собственные значения и собственные функции подчиняются равенству

$$-i\hbar\frac{d\psi_p(x)}{dx} = p\psi_p(x),$$

интегрирование которого даёт

$$\psi_p(x) = A e^{ipx/\hbar}.$$

Нормировочная постоянная A находится из условия

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p'}^*(x) \psi_p(x) dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx = \delta(p - p').$$

Учитывая равенство

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')y} dy = 2\pi\delta(p - p'),$$

находим

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx = (y = x/\hbar) = A^2\hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')y} dy = 2\pi\hbar A^2 \delta(p - p').$$

Значит, волновые функции $\psi_p(x)$ нормированы на дельта-функцию при $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$. Окончательный результат имеет вид

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}.$$

6. Состояние частицы задаётся волновой функцией $\psi(x) = A \exp[ip_0 x/\hbar - \alpha x^2]$. Найти вид этой функции в импульсном представлении.

Решение. Найдём значение нормировочного коэффициента A . Используя известную формулу

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

для интеграла Пуассона, находим

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = A^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}.$$

Приравняв правую часть к единице, получаем $A = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}$.

Волновая функция частицы в импульсном представлении равна

$$c(p) = \langle \psi_p(x) | \psi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) \psi(x) dx,$$

где $\psi_p(x)$ — нормированная собственная функция оператора импульса.

Подстановка сюда выражения для $\psi(x)$ и $\psi_p(x)$ даёт

$$c(p) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p_0-p)x/\hbar - \alpha x^2} dx.$$

Для вычисления интеграла запишем показатель экспоненты в виде

$$\begin{aligned} i(p_0 - p)x/\hbar - \alpha x^2 &= -\alpha \left(x^2 - \frac{i(p_0 - p)x}{\hbar} \right) = \\ &= -\alpha \left(x - \frac{i(p_0 - p)x}{2\alpha\hbar} \right)^2 - \frac{(p_0 - p)^2}{4\alpha\hbar^2}. \end{aligned}$$

Тогда

$$c(p) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{(p_0-p)^2}{4\alpha\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha\left(x - \frac{i(p_0-p)x}{2\alpha\hbar}\right)^2} dx = \frac{1}{(2\alpha\pi\hbar^2)^{1/4}} e^{-\frac{(p_0-p)^2}{4\alpha\hbar^2}}.$$

7. Найти явный оператор координаты $\hat{x}$ в импульсном представлении.

Решение. В импульсном представлении матричные элементы оператора $\hat{x}$ равны

$$\begin{aligned} x(p, p') &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x) x \psi_{p'}(x) dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{i(p'-p)x/\hbar} dx = \\ &= \frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} y e^{i(p'-p)y} dy = i \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial}{\partial p} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)y} dy = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(p' - p). \end{aligned}$$

Соответственно, на произвольную функцию $\Phi(p)$ оператор $\hat{x}$ действует согласно

$$(\hat{x}\Phi)_p = \int_{-\infty}^{\infty} x(p, p') \Phi(p') dp' = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p') \delta(p - p') dp' = i\hbar \frac{\partial \Phi(p)}{\partial p}. \quad (1.9)$$

Отсюда следует, что $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$.

1.4. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти результат действия оператора $\frac{d^2}{dx^2}$ на функцию $f(x) = e^{3x}$.
2. Действие оператора сдвига $\hat{T}_a$ на функцию $\psi(x)$ ($-\infty < x < \infty$) задаётся равенством $\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x+a)$. Является ли этот оператор линейным?
3. Показать, что если $\hat{L}$ — произвольный линейный оператор, то оператор $i(\hat{L} - \hat{L}^+)$ является самосопряжённым.
4. Найти собственные значения эрмитового оператора $\hat{A}$, который удовлетворяет равенству $\hat{A}^3 = \alpha^2 \hat{A}$, где α — действительное число.

5. Найти собственные значения и нормированные собственные функции оператора $\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$, где φ — азимутальный угол.
6. Основное состояние гармонического осциллятора задаётся волновой функцией $\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$. Найти её вид в импульсном представлении.
7. Найти явный вид оператора сдвига $\hat{T}_a$ в импульсном представлении.

2. Момент импульса

2.1. Коммутационные соотношения

Независимо от природы механического момента (орбитальный, спиновый, полный), его компоненты подчиняются коммутационным соотношениям

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k, \quad [\hat{J}_i, \hat{J}^2] = 0; \quad (2.1)$$

здесь предполагается, что момент измеряется в единицах $\hbar$. Из указанных соотношений следует, что квадрат момента равен $J(J+1)$, где J — целое либо полуцелое число, а множество возможных значений проекции момента на ось Oz составлено из чисел $-J, -J+1, \dots, J$. При этом для орбитального момента импульса $\hbar \mathbf{l} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ величина проекции $\hat{l}_z$ на ось Oz может быть только целочисленной.

В теории механического момента часто применяются “повышающий” (значение проекции момента на ось Oz) $\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$ и “понижающий” $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$ операторы, отличные от нуля матричные элементы которых равны

$$\langle M | \hat{J}_+ | M-1 \rangle = \langle M-1 | \hat{J}_- | M \rangle = \sqrt{(J+M)(J-M+1)}. \quad (2.2)$$

2.2. Спин электрона

Некоторые частицы, в том числе электроны, обладают спином $\hat{\mathbf{s}}$ — собственным механическим моментом, который не связан с движением в пространстве. Спин электрона равен $s = 1/2$, его проекция на ось может принимать только два значения: либо $+1/2$, либо $-1/2$ (в единицах $\hbar$). Компоненты спина электрона принято выражать через матрицы Паули: $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$, которые в s_z -представлении записываются согласно

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

2.3. Задачи

1. Найти коммутатор $[\hat{J}_z, \hat{J}_+]$ оператора проекции момента на ось z и оператора $\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$.

Решение. Записывая искомый коммутатор в виде суммы двух коммутаторов:

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = [\hat{J}_z, \hat{J}_x] + i [\hat{J}_z, \hat{J}_y].$$

и учитывая соотношения $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hat{J}_y$, $[\hat{J}_z, \hat{J}_y] = -i\hat{J}_x$, получаем

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = i\hat{J}_y + \hat{J}_x = \hat{J}_+.$$

2. Показать, что в состоянии $|J, M\rangle$ с определёнными значениями момента J и его проекции M на ось z выполняются равенства $\langle J_x^2 \rangle = \langle J_y^2 \rangle$ и $\langle \hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle = 0$.

Решение. Найдём среднее значение квадрата оператора $\hat{J}_+$ в состоянии $|J, M\rangle$, применив правило перемножения матриц:

$$\langle J_+^2 \rangle = \langle M | \hat{J}_+^2 | M \rangle = \sum_K \langle M | \hat{J}_+ | K \rangle \langle K | \hat{J}_+ | M \rangle.$$

Все слагаемые в этой сумме равны нулю, поскольку множитель $\langle M | \hat{J}_+ | K \rangle$ отличен от нуля только при $K = M + 1$, а множитель $\langle K | \hat{J}_+ | M \rangle$ — только при $K = M - 1$. Значит, в состоянии $|J, M\rangle$ среднее значение $\langle \hat{J}_+^2 \rangle = 0$. С другой стороны,

$$\hat{J}_+^2 = (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)^2 = \hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2 + i(\hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x).$$

Среднее значение этого выражения в состоянии $|J, M\rangle$ равно

$$\langle \hat{J}_+^2 \rangle = \langle \hat{J}_x^2 - \hat{J}_y^2 \rangle + i \langle \hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle = 0.$$

Отделяя здесь действительную и мнимую части, получаем

$$\langle \hat{J}_x^2 \rangle = \langle \hat{J}_y^2 \rangle, \quad \langle \hat{J}_x \hat{J}_y + \hat{J}_y \hat{J}_x \rangle = 0.$$

3. Моменты J_1 и J_2 двух слабо взаимодействующих систем складываются в результирующий момент J . Показать, что в состояниях с заданным значением J скалярное произведение $\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2$ имеет определённое значение.

Решение. Операторы $\hat{J}_1$ и $\hat{J}_2$ коммутируют, поэтому квадрат оператора суммарного механического момента равен

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2.$$

Из этого выражения следует, что

$$\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{J}}_1^2 - \hat{\mathbf{J}}_2^2 \right).$$

Значит, в состоянии с заданными значениями J_1 , J_2 и J скалярное произведение $\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2$ имеет величину

$$\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 = \frac{1}{2} [J(J+1) - J_1(J_1+1) - J_2(J_2+1)].$$

4. Найти собственные значения и нормированные на единицу собственные функции x -компоненты оператора спина электрона.

Решение. Собственные значения s_x и собственные функции Ψ_{s_x} оператора $\hat{s}_x$ подчиняются уравнению

$$\hat{s}_x \Psi_{s_x} = s_x \Psi_{s_x}.$$

В s_z -представлении оператор $\hat{s}_x$ задаётся матрицей

$$\hat{s}_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix},$$

а функция Ψ_{s_x} изображается двухэлементным вектор-столбцом

$$\Psi_{s_x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

и указанное уравнение имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

или

$$\begin{cases} -s_x a + \frac{b}{2} = 0, \\ \frac{a}{2} - s_x b = 0. \end{cases}$$

Эта система однородных уравнений имеет нетривиальное решение, если определитель соответствующей матрицы равен нулю:

$$\begin{vmatrix} -s_x & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -s_x \end{vmatrix} = 0.$$

Решение этого уравнения даёт искомые собственные значения: $s_x = \pm \frac{1}{2}$. Как видно, при $s_x = \frac{1}{2}$ выполняется равенство $a = b$, а при $s_x = -\frac{1}{2}$ — равенство $a = -b$. Применяя условие нормировки $|a|^2 + |b|^2 = 1$, находим, что $a = b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ при $s_x = \frac{1}{2}$ и $a = -b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ при $s_x = -\frac{1}{2}$. Таким образом, искомые собственные функции имеют вид

$$\Psi_{s_x=+1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{s_x=-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

5. Найти средние значения $\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle$ и $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle$ для полного момента $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2$ системы, состоящей из двух слабо взаимодействующих подсистем 1 и 2, состояния которых $|j_1, M_1\rangle$ и $|j_2, M_2\rangle$ характеризуются заданными квантовыми числами момента и его z -проекции. Найти вероятности различных значений полного момента в случае, когда $M_1 = j_1$ и $M_2 = j_2 - 1$.

Решение. Диагональные матричные элементы повышающего $\hat{j}_+$ и понижающего $\hat{j}_-$ операторов в j_z -представлении равны нулю, поэтому в состояниях с заданным значением m проекции момента на ось Oz соответствующие средние равны нулю:

$$\langle j_+ \rangle = \langle j_- \rangle = 0.$$

Но

$$\hat{j}_x = \frac{\hat{j}_+ + \hat{j}_-}{2}, \quad \hat{j}_y = \frac{\hat{j}_+ - \hat{j}_-}{2i},$$

поэтому в указанных состояниях равны нулю и средние значения поперечных компонент момента: $\langle j_x \rangle = \langle j_y \rangle = 0$. Это означает, что

$$\langle J_x \rangle = \langle j_{1x} \rangle + \langle j_{2x} \rangle = 0, \quad \langle J_y \rangle = \langle j_{1y} \rangle + \langle j_{2y} \rangle = 0.$$

Однако среднее значение z -компоненты полного момента отлично от нуля:

$$\langle J_z \rangle = \langle j_{1z} \rangle + \langle j_{2z} \rangle = M_1 + M_2.$$

Если пренебречь взаимодействием подсистем, то для среднего квадрата полного механического момента системы можно записать выражение

$$\langle \mathbf{J}^2 \rangle = \langle \mathbf{j}_1^2 \rangle + \langle \mathbf{j}_2^2 \rangle + 2\langle \mathbf{j}_1 \cdot \mathbf{j}_2 \rangle = \langle \mathbf{j}_1^2 \rangle + \langle \mathbf{j}_2^2 \rangle + 2\langle \mathbf{j}_1 \rangle \cdot \langle \mathbf{j}_2 \rangle.$$

Учитывая, что

$$\langle \mathbf{j}_1^2 \rangle = j_1(j_1 + 1), \quad \langle \mathbf{j}_2^2 \rangle = j_2(j_2 + 1),$$

$$\langle \mathbf{j}_1 \rangle \cdot \langle \mathbf{j}_2 \rangle = \langle j_{1x} \rangle \langle j_{2x} \rangle + \langle j_{1y} \rangle \langle j_{2y} \rangle + \langle j_{1z} \rangle \langle j_{2z} \rangle = \langle j_{1z} \rangle \langle j_{2z} \rangle = m_1 m_2,$$

получаем

$$\langle \mathbf{J}^2 \rangle = j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1) + 2m_1 m_2.$$

Если $m_1 = j_1$, а $m_2 = j_2 - 1$, то полный момент J может принимать два значения: $J = j_1 + j_2$ и $J = j_1 + j_2 - 1$. Им соответствуют значения $(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1)$ и $(j_1 + j_2 - 1)(j_1 + j_2)$ квадрата момента. Обозначив вероятности этих значений через p_1 и p_2 и учтя, что $p_1 + p_2 = 1$, для среднего значения квадрата полного момента рассматриваемой системы можно записать выражение

$$\langle \mathbf{J}^2 \rangle = p_1(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) + (1 - p_1)(j_1 + j_2 - 1)(j_1 + j_2).$$

Сравнив его с полученным выше равенством, приходим к линейному алгебраическому уравнению

$$p_1(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) + (1 - p_1)(j_1 + j_2 - 1)(j_1 + j_2) = j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1) + 2m_1 m_2$$

для неизвестной вероятности p_1 . Решая его, находим

$$p_1 = \frac{j_2}{j_1 + j_2}, \quad p_2 = 1 - p_1 = \frac{j_1}{j_1 + j_2}.$$

2.4. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти коммутатор $[\hat{J}_z, \hat{J}_-]$ оператора проекции момента на ось z и “понижающего” оператора $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$.
2. Найти средние значения $\langle J_x^2 \rangle$ и $\langle J_y^2 \rangle$ в состоянии $|J, M\rangle$ с определёнными значениями момента J и его проекции M на ось z .
3. Найти собственные значения и собственные функции y и z -компонент оператора спина электрона.

4. Моменты J_1 и J_2 двух слабо взаимодействующих систем складываются в результирующий момент J . Показать, что в состояниях с заданным значением J скалярное произведение $\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}$ имеет определённое значение.
5. Найти вероятности возможных значений j полного момента $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$ электрона в состоянии $|l, m, s_z\rangle$ с заданными значениями орбитального квантового числа, магнитного квантового числа и проекции спина на ось z .

3. Электронный газ в магнитном поле

3.1. Движение в магнитном поле

Гамильтониан электрона в присутствии магнитного поля (гамильтониан Паули) имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m_e} \left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \mu_B \mathbf{H} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - e\varphi, \quad (3.1)$$

где $\mu_B = e\hbar/2m_e c$ — магнетон Бора, $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \text{grad}$ — обобщённый импульс, $\mathbf{A}$ и φ — векторный и скалярный потенциалы электромагнитного поля.

Решение стационарного уравнения Шрёдингера с гамильтонианом Паули приводит к следующему выражению для уровней энергии электрона:

$$\varepsilon_{\sigma, n, p_z} = \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m_e} + \sigma\mu_B H, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad \sigma = \pm 1. \quad (3.2)$$

Дискретные значения энергии, определяемые первым слагаемым, называют *уровнями Ландау*; они отвечают движению электрона в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Второе слагаемое даёт энергию его движения вдоль поля, а последнее — расщепление уровней, обусловленное наличием у электрона спина.

3.2. Ферми-газ

При расчёте термодинамических характеристик вырожденного электронного газа необходимо учитывать, что электроны являются фермионами, поэтому средние числа заполнения равны

$$n_k = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \mu)/\theta} + 1}, \quad (3.3)$$

где μ — химический потенциал, а θ — температура в энергетических единицах. Термодинамический потенциал Ω для газа электронов может быть найден согласно

$$\Omega = -\theta \sum_k \ln \left(1 + e^{-(\varepsilon_k - \mu)/\theta} \right). \quad (3.4)$$

3.3. Задачи

1. Найти энергетический спектр заряженной бесспиновой частицы, которая находится во взаимно перпендикулярных однородных магнитном и электрическом полях.

Решение. Обозначим массу частицы через m , а её электрический заряд через e . Будем считать, что напряжённость $\mathbf{H}$ магнитного поля направлена вдоль оси Oz , а напряжённость $\mathbf{E}$ электрического поля — вдоль оси Ox . Скалярный потенциал поля выберем равным $\Phi = -Ex$, а декартовы компоненты векторного потенциала равными $A_x = 0$, $A_y = Hx$, $A_z = 0$ (при таком выборе $\mathbf{E} = -\text{grad } \Phi$, $\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}$, как и должно быть). Гамильтониан системы запишется в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \left[\hat{P}_x^2 + \left(\hat{P}_y - \frac{eH}{c}x \right)^2 + \hat{P}_z^2 \right] - eEx.$$

Он коммутирует с операторами $\hat{P}_y$ и $\hat{P}_z$ и, следовательно, имеет с ними общую систему собственных функций. Это означает, что решение стационарного уравнения Шрёдингера

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = \mathcal{E}\Psi$$

следует искать в виде

$$\Psi(x, y, z) = \chi(x) e^{ip_y y/\hbar} e^{ip_z z/\hbar},$$

где $\chi(x)$ — подлежащая определению функция; величины p_y и p_z задают значения соответствующих компонент обобщённого импульса. Подстановка этого выражения в уравнение Шрёдингера приводит к равенству

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dx^2} + \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{eH}{c}x \right)^2 \chi(x) - eEx\chi(x) = \left(\mathcal{E} - \frac{p_z^2}{2m} \right) \chi(x)$$

(отличный от нуля множитель $\exp[i(p_y y + p_z z)/\hbar]$ присутствует в каждом слагаемом и его можно сократить). Выделим в его левой части можно полный квадрат:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \left(p_y - \frac{eH}{c}x \right)^2 \chi(x) - eEx &= \\ &= \frac{e^2 H^2}{2mc^2} \left(x - \frac{cp_y}{eH} - \frac{mc^2 E}{eH^2} \right)^2 - \left(\frac{cEp_y}{H} + \frac{mc^2 E^2}{2H^2} \right), \end{aligned}$$

и запишем уравнение для функции $\chi(x)$ в виде

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dx^2} + \frac{e^2 H^2}{2mc^2} \left(x - \frac{cp_y}{eH} - \frac{mc^2 E}{eH^2} \right)^2 \chi(x) = \\ = \left(\mathcal{E} - \frac{p_z^2}{2m} + \frac{cE p_y}{H} + \frac{mc^2 E^2}{2H^2} \right) \chi(x). \end{aligned}$$

Если обозначить

$$\omega_H = eH/mc, \quad \tilde{\mathcal{E}} = \mathcal{E} - \frac{p_z^2}{2m} + \frac{cE p_y}{H} + \frac{mc^2 E^2}{2H^2},$$

и сделать замену переменной

$$\tilde{x} = x - \frac{cp_y}{eH} - \frac{mc^2 E}{eH^2},$$

то полученное уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{d\tilde{x}^2} + \frac{m\omega_H^2 \tilde{x}^2}{2} \chi(\tilde{x}) = \tilde{\mathcal{E}} \chi(\tilde{x})$$

окажется в точности совпадающим со стационарным уравнением Шрёдингера для гармонического осциллятора с частотой ω_H . Уровни энергии последнего известны: $\tilde{\mathcal{E}}_n = \hbar\omega_H(n + 1/2)$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Значит, энергия рассматриваемой частицы в стационарных состояниях равна

$$\mathcal{E}_{np_y p_z} = \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m} - \frac{cE p_y}{H} - \frac{mc^2 E^2}{2H^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots;$$

величины p_y и p_z пробегает непрерывный ряд значений от $-\infty$ до ∞ .

2. Для незаряженной частицы со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ_0 ($\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_0 \hat{\boldsymbol{\sigma}}$), помещённой в однородное магнитное поле, определить стационарные состояния (волновые функции и соответствующие уровни энергии).

Решение. Обозначим массу частицы через m . Направим ось Oz вдоль направления приложенного поля и запишем гамильтониан частицы в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu_0 H \hat{\sigma}_z.$$

Он не содержит слагаемых, которые включают одновременно и пространственные, и спиновые переменные, поэтому его собственные функции факторизуются:

$$\Psi(\mathbf{r}, s_z) = \phi(\mathbf{r}) S(s_z).$$

Кроме того, гамильтониан коммутирует с операторами $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\sigma}_z$. Это означает, что функция $\phi(\mathbf{r})$ является собственной для оператора $\hat{\mathbf{p}}$, а функция $S(s_z)$ — для оператора $\hat{\sigma}_z$. Таким образом, нормированные на единицу собственные функции оператора $\hat{\mathcal{H}}$ имеют вид

$$\Psi_{p\sigma}(\mathbf{r}, s_z) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \delta(\sigma - s_z), \quad s_z = \pm \frac{1}{2}.$$

Отвечающие им собственные значения гамильтониана

$$\mathcal{E}_{p\sigma} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu_0 H \sigma$$

определяют уровни энергии частицы.

3. Показать, что гамильтониан Паули может быть записан в виде $\hat{\mathcal{H}} = (\hat{\boldsymbol{\sigma}} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}/c))^2 / 2m - e\varphi$.

Решение. С помощью правила суммирования по повторяющемуся индексу перепишем указанный в условии оператор согласно

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \left(\hat{P}_i + \frac{e}{c} A_i \right) \left(\hat{P}_j + \frac{e}{c} A_j \right) - e\varphi(\mathbf{r}).$$

Используем свойства матриц Паули

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k + \delta_{ij},$$

чтобы преобразовать гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ к виду

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \frac{1}{2m} (i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k + \delta_{ij}) \left(\hat{P}_i + \frac{e}{c} A_i \right) \left(\hat{P}_j + \frac{e}{c} A_j \right) - e\varphi(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\hat{P}_i + \frac{e}{c} A_i \right)^2 + \frac{1}{2m} i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k \left(\hat{P}_i + \frac{e}{c} A_i \right) \left(\hat{P}_j + \frac{e}{c} A_j \right) - e\varphi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Второе слагаемое в этой сумме можно упростить. Рассмотрим, как соответствующий оператор действует на произвольную функцию координат $f(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ijk} \left(\hat{P}_i + \frac{e}{c} A_i \right) \left(\hat{P}_j + \frac{e}{c} A_j \right) f(\mathbf{r}) &= \\ &= i\hbar \varepsilon_{kij} \left(-\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{e}{c} A_i \right) \left(-\frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{e}{c} A_j \right) f(\mathbf{r}) = \\ &= i\hbar \varepsilon_{kij} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{e}{c} \frac{\partial (A_j f)}{\partial x_i} - \frac{e}{c} A_i \frac{\partial f}{\partial x_j} + \left(\frac{e}{c} \right)^2 A_i A_j f \right). \end{aligned}$$

Но первый и последний члены здесь равны нулю:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{kij} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} &= \frac{1}{2} \left(\varepsilon_{kij} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} + \varepsilon_{kji} \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} \right) = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_{kij} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} + \varepsilon_{kji} \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left(\varepsilon_{kij} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} - \varepsilon_{kij} \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} \right) = 0,\end{aligned}$$

$$\varepsilon_{ijk} A_i A_j = (\mathbf{A} \times \mathbf{A})_k = 0,$$

а сумму второго и третьего можно записать как

$$\varepsilon_{kij} \left(\frac{\partial (A_j f)}{\partial x_i} + A_i \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) = \varepsilon_{kij} \left(\frac{\partial (A_j f)}{\partial x_i} - A_j \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial A_j}{\partial x_i} f.$$

Значит,

$$\varepsilon_{ijk} \left(\hat{P}_i + \frac{e}{c} A_i \right) \left(\hat{P}_j + \frac{e}{c} A_j \right) f(\mathbf{r}) = -i \frac{e\hbar}{c} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial A_j}{\partial x_i} f(\mathbf{r}),$$

или

$$\varepsilon_{ijk} \left(\hat{P}_i + \frac{e}{c} A_i \right) \left(\hat{P}_j + \frac{e}{c} A_j \right) = -i \frac{e\hbar}{c} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial A_j}{\partial x_i}.$$

Сумма (по индексам i и j) в правой части этого равенства определяет k -ю компоненту ротора векторного потенциала $\mathbf{A}$:

$$-i \frac{e\hbar}{c} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial A_j}{\partial x_i} = -i \frac{e\hbar}{c} (\text{rot } \mathbf{A})_k = -i \frac{e\hbar}{c} H_k.$$

Учитывая это, получаем окончательное выражение

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \left(\hat{P}_i + \frac{e}{c} A_i \right)^2 + \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\sigma}_k H_k - e\varphi = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \mu_B \mathbf{H} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} - e\varphi,$$

которое совпадает с гамильтонианом Паули.

4. Вычислить статическую намагничённость двумерного электронного газа, предполагая, что вектор напряжённости магнитного поля лежит в плоскости системы.

Решение. Получим прежде всего выражения для импульса и энергии Ферми в двумерном случае при нулевой температуре ($\theta = 0$). Площадь ячейки в импульсном пространстве, соответствующий одному состоянию электрона, равен $(2\pi\hbar/L_y) \times (2\pi\hbar/L_z) = 4\pi^2\hbar^2/V$, где L_y и L_z — линейные размеры системы, а $V = L_x L_y$. Поверхность Ферми в двумерном случае представляет собой окружность. Её радиус p_F является

импульсом Ферми, а отвечающая энергия $\mathcal{E}_F = p_F^2/2m_e$ — энергией Ферми. При $\theta = 0$ удвоенное отношение площади окружности Ферми к площади одной ячейки даёт полное число частиц:

$$N = 2 \frac{\pi p_F^2}{4\pi^2 \hbar^2} V = \frac{p_F^2 V}{2\pi \hbar^2},$$

откуда

$$p_F = \hbar \left(2\pi \frac{N}{V} \right)^{1/2}, \quad \mathcal{E}_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(2\pi \frac{N}{V} \right).$$

В отсутствие внешнего поля термодинамический потенциал Ω равен

$$\Omega = -2\theta \sum_{\mathbf{p}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu}{\theta} \right) \right), \quad \varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m_e}.$$

Появление двойки здесь, как и в формуле для числа частиц, связано с тем, что проекция спина на ось может принимать два значения ($s_z = \pm 1/2$).

Если напряжённость магнитного поля лежит в плоскости системы (для определённости — вдоль оси Oz), то диамагнитного эффекта Ландау не возникает, поскольку электроны не могут оказаться в плоскости, перпендикулярной магнитному полю (их движение ограничено плоскостью yOz). Энергия электрона в этом случае равняется

$$\varepsilon_{\mathbf{p},\sigma} = \frac{p^2}{2m_e} + \mu_B \sigma H, \quad \sigma = \pm 1,$$

а термодинамический потенциал —

$$\Omega = -\theta \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\sigma=\pm 1} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon_{\mathbf{p},\sigma} - \mu}{\theta} \right) \right).$$

Можно использовать другую форму записи этого выражения:

$$\Omega = \Omega_+ + \Omega_-,$$

если ввести величины

$$\Omega_+ = -\theta \sum_{\mathbf{p}} \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu_+}{\theta} \right) \right), \quad \mu_+ = \mu + \mu_B H,$$

$$\Omega_- = -\theta \sum_p \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon_p - \mu_-}{\theta} \right) \right), \quad \mu_- = \mu - \mu_B H.$$

В таком случае намагниченность системы так же представится в виде двух слагаемых:

$$M = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega}{\partial H} = M_+ + M_-, \quad M_+ = -\frac{\mu_B}{V} \frac{\partial \Omega_+}{\partial \mu_+}, \quad M_- = \frac{\mu_B}{V} \frac{\partial \Omega_-}{\partial \mu_-},$$

или

$$M = \frac{\mu_B}{V} (N_+ - N_-), \quad N_+ = -\frac{\partial \Omega_+}{\partial \mu_+}, \quad N_- = -\frac{\partial \Omega_-}{\partial \mu_-}.$$

Найдём числа N_+ и N_- . По определению,

$$N_+ = -\frac{\partial \Omega_+}{\partial \mu_+} = \sum_p \frac{e^{-(\varepsilon_p - \mu_+)/\theta}}{1 + e^{-(\varepsilon_p - \mu_+)/\theta}} = \sum_p \frac{1}{e^{(\varepsilon_p - \mu_+)/\theta} + 1}.$$

Переходя от здесь от суммирования к интегрированию по всему импульсному пространству (при таком переходе возникает дополнительный множитель $V/4\pi^2\hbar^2$), получим

$$N_+ = \frac{V}{4\pi^2\hbar^2} \int_0^{+\infty} \frac{2\pi p dp}{e^{(\varepsilon_p - \mu_+)/\theta} + 1} = \frac{2mV}{4\pi\hbar^2} \int_0^{+\infty} \frac{d\varepsilon_p}{e^{(\varepsilon_p - \mu_+)/\theta} + 1} = \frac{2mV\theta}{4\pi\hbar^2} \ln \left(1 + e^{\mu_+/\theta} \right).$$

При записи правой части было учтено, что

$$\int_0^{\infty} \frac{dx}{e^{-\alpha} e^x + 1} = \ln(1 + e^\alpha)$$

(для расчёта интеграла нужно сделать замену переменной $t = e^{-\alpha} e^x$, после чего он может быть сведён к табличному). Принимая во внимание выражения для $\mathcal{E}_F$ и μ_+ , формулу для N_+ можно представить в виде

$$N_+ = \frac{N}{2} \frac{\theta}{\mathcal{E}_F} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{\mu + \mu_B H}{\theta} \right) \right).$$

Совершенно аналогично,

$$N_- = \frac{N}{2} \frac{\theta}{\mathcal{E}_F} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{\mu - \mu_B H}{\theta} \right) \right).$$

Значит, искомая намагниченность электронного газа равна

$$M = c \mu_B \frac{\theta}{2\mathcal{E}_F} \ln \frac{1 + \alpha e^{\mu_B H/\theta}}{1 + \alpha e^{-\mu_B H/\theta}},$$

где $c = N/V$ — число частиц в единице объёма, а величина $\alpha = e^{\mu/\theta}$ определяется химическим потенциалом системы. Отметим, что последний может быть исключён из окончательного результата с помощью условия $N_+ + N_- = N$. Подстановка в него выражений для N_+ и N_- даёт

$$\frac{\theta}{2\mathcal{E}_F} \ln \left(1 + 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\mu_B H}{\theta} \right) e^{\mu/\theta} + e^{2\mu/\theta} \right) = 1,$$

или

$$1 + 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\mu_B H}{\theta} \right) e^{\mu/\theta} + e^{2\mu/\theta} = e^{2\mathcal{E}_F/\theta}.$$

Решая это квадратное (относительно величины $e^{\mu/\theta}$) уравнение, получаем окончательно

$$\alpha = e^{\mu/\theta} = -\operatorname{ch} \frac{\mu_B H}{\theta} + \sqrt{e^{2\mathcal{E}_F/\theta} + \operatorname{sh}^2 \frac{\mu_B H}{\theta}}.$$

5. Найти плотность состояний для электронного газа в магнитном поле, пренебрегая расщеплением уровней, связанным с наличием спина.

Решение. Плотность состояний может быть найдена по формуле

$$\rho(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$$

(сумма выполняется по состояниям, задаваемым набором квантовых чисел k). В указанном приближении уровни энергии электрона определяются выражением

$$\varepsilon_{n,p_z} = \frac{p_z^2}{2m_e} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

поэтому

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{\sigma, n, p_x, p_z} \delta \left(\varepsilon - \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{p_z^2}{2m_e} \right).$$

Спиновая переменная может принимать два значения ($s_z = \pm 1/2$), и суммирование по ней даёт множитель 2. При переходе от суммирования по значениям x -компоненты обобщённого импульса к интегрированию, необходимо учесть, что p_x определяет центр орбиты электрона в плоскости, перпендикулярной напряжённости магнитного поля (центр

осциллятора Ландау): $y_0 = cp_x/eH$. Указанный центр должен находиться внутри образца:

$$-\frac{L_x}{2} \leq y_0 \leq \frac{L_x}{2},$$

поэтому

$$-\frac{eHL_x}{2c} \leq p_x \leq \frac{eHL_x}{2c}.$$

Продольная компонента обобщённого импульса может изменяться в пределах от $-\infty$ до ∞ . Таким образом,

$$\rho(\varepsilon) = 2 \frac{L_x}{2\pi\hbar} \frac{L_z}{2\pi\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \int_{-eHL_x/2c}^{eHL_x/2c} dp_x \delta \left(\varepsilon - \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{p_z^2}{2m_e} \right).$$

Выполнив интегрирование по p_x и учтя чётность подынтегральной функции по аргументу p_z , получим

$$\rho(\varepsilon) = \frac{eHV}{c(\pi\hbar)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dp_z \delta \left(\varepsilon - \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{p_z^2}{2m_e} \right).$$

Сделаем замену переменной

$$t = \frac{p_z^2}{2m_e}, \quad dt = \frac{p_z dp_z}{m_e}, \quad dp_z = \frac{m_e dt}{p_z} = \frac{dt}{\sqrt{2m_e t}}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \rho(\varepsilon) &= \frac{eHV}{\sqrt{2m_e} c (\pi\hbar)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{\delta \left(\varepsilon - \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right) - t \right)}{\sqrt{t}} dt = \\ &= \frac{eHV}{\sqrt{2m_e} c (\pi\hbar)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon - \hbar\omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right)}}. \end{aligned}$$

3.4. Задачи для самостоятельного решения

1. Для заряженной бесспиновой частицы, помещённой во взаимно перпендикулярные магнитное и электрическое поля, определить стационарные состояния (волновые функции и соответствующие уровни энергии).

2. Для заряженной частицы со спином $s = 1/2$ и гиромагнитным отношением γ , помещённой в однородное магнитное поле, определить стационарные состояния.
3. Показать, что проекция спина электрона на направлении скорости является интегралом движения, если приложенное поле является однородным и стационарным.
4. Выполнить количественную оценку парамагнитной восприимчивости газа электронов, связанную с наличием у них спина.
5. Найти термодинамический потенциал Ω для электронного газа в магнитном поле, пренебрегая спиновым расщеплением энергетических уровней.

4. Атомы в магнитном поле

4.1. Магнитный момент атома

Состояние атома с заданными значениями квантовых чисел L , S и J часто обозначают следующим образом (спектральные обозначения):

$$^{\kappa}L_J, \quad (4.1)$$

где $\kappa = 2S + 1$ так называемая *мультиплетность*. При этом пишут не числовое значение L , а его буквенный аналог ($S, P, D, F, G, H, \dots$)

В отсутствие внешнего магнитного поля уровни энергии не зависят от проекции момента M_J на заданное направление. Магнитное поле снимает это вырождение, причём энергия расщепления равна

$$\Delta E = \mu_B g H M_J, \quad (4.2)$$

где

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \quad (J \neq 0) \quad (4.3)$$

называется фактором Ландэ. Величина

$$\mu_z = -g\mu_B M_J \quad (4.4)$$

определяет проекцию магнитного момента атома в состоянии с фиксированным M_J на направление приложенного поля.

4.2. Магнетизм газов

Статическая магнитная восприимчивость системы, состоящей из атомов с полностью заполненными электронными оболочками, равна

$$\chi_{\text{dia}} = -\frac{ne^2}{6m_e c^2} \sum_{i=1}^Z \langle r_i^2 \rangle_0, \quad (4.5)$$

где Z — число электронов в атоме, n — число атомов в единице объёма, а $\langle r_i^2 \rangle_0$ — средний (по основному состоянию атома) квадрат расстояния i -го электрона от ядра. Величину χ_{dia} часто называют *ларморовской диамагнитной восприимчивостью*. Приведённое выражение можно использовать для

описания магнитного отклика инертных газов и простых ионных кристаллов при не очень высоких температурах, когда тепловая энергия мала по сравнению в интервалом между основным и ближайшим к нему возбуждённым состоянием.

Если система состоит из слабо взаимодействующих атомов, собственный магнитный момент которых отличен от нуля, то её *парамагнитная восприимчивость* подчиняется закону Кюри:

$$\chi_{\text{para}} = \frac{C}{T}, \quad C = \frac{n (g\mu_B)^2 J(J+1)}{3k_B}, \quad (4.6)$$

где n — число атомов в единице объёма. Если энергия атома в магнитном поле много меньше тепловой энергии: $g\mu_B H \ll k_B T$, то намагниченность системы пропорциональна напряжённости приложенного поля: $M = \chi_{\text{para}} H$.

4.3. Задачи

1. Выписать спектральные обозначения состояния атома, в котором спиновое квантовое число $S = 3/2$, орбитальное квантовое число $L = 2$, а фактор Ландэ равен $g = 0$.

Решение. С помощью условия находим $L(L+1) = 6$, $S(S+1) = 15/4$. Подставив эти значения в формулу для g -фактора и приравняв результат к нулю, получим следующее уравнение для J :

$$1 + \frac{J(J+1) - 9/4}{2J(J+1)} = 0;$$

Его неотрицательным корнем является число $J = 1/2$. Вычисляя мультиплетность $\kappa = 2S + 1 = 4$ учитывая, что значению $L = 2$ отвечает буква D , определяем, что атом находится в состоянии ${}^4D_{1/2}$.

2. Атом в состоянии ${}^2P_{1/2}$ находится на оси кругового витка с током на расстоянии $l = 5.0$ см от его центра. Найти максимальную силу, действующую на атом, если сила тока в контуре $I = 10$ А, а его радиус $R = 5.0$ см.

Решение. Выберем начало декартовой системы координат в центре витка и направим Oz вдоль его. Тогда напряжённость магнитного поля в

точках, расположенных на оси Oz , найдётся как

$$H_z = \frac{I}{c} \frac{2\pi r^2}{(r^2 + z^2)^{3/2}},$$

где c — скорость света в вакууме. Средняя сила, действующая на атом в магнитном поле, равна

$$\overline{\mathbf{F}} = (\overline{\boldsymbol{\mu}} \cdot \nabla) \mathbf{H}.$$

На оси витка поперечные компоненты поля, а значит, и силы $\overline{\mathbf{F}}$ равны нулю. Однако её продольная компонента отлична от нуля:

$$\overline{F}_z = \overline{\mu}_z \frac{\partial H_z}{\partial z}.$$

Средняя проекция магнитного момента на ось Oz выражается через соответствующую проекцию механического момента

$$\overline{\mu}_z = g\mu_B \overline{J}_z,$$

так что

$$\overline{F}_z = g\mu_B \overline{J}_z \frac{\partial H_z}{\partial z}.$$

Модуль этой величины достигает наибольшего значения, когда атом находится в состоянии с заданной величиной J_z проекции механического момента на ось витка, причём $|J_z| = J$. Таким образом, с учётом выражения

$$\frac{\partial H}{\partial z} = -\frac{6\pi IR^2 z}{c(R^2 + z^2)^{5/2}},$$

находим, что при $z = l$ максимальное значение силы, действующей на атом, равно

$$F_{\max} = g\mu_B J \frac{6\pi IR^2 l}{c(R^2 + l^2)^{5/2}}.$$

В состоянии $^2P_{1/2}$ квантовые числа $J = 1/2$, $L = 1$, $S = 1/2$, и вычисление фактора Ландэ даёт $g = 2/3$. Подстановка численных данных в выражение для $F_{\max}$ даёт

$$F_{\max} = 4.1 \times 10^{-22} \text{ дин}$$

(в гауссовой системе единиц сила тока равна $10I/c$, где I — её значение в амперах).

3. В опыте Штерна и Герлаха узкий пучок атомов ванадия в состоянии $^4F_{3/2}$ пропускают через поперечное резко неоднородное поле магнитное поле протяжённостью $l = 5.0$ см. Результат эксперимента наблюдают на экране, который находится на расстоянии $L = 15$ см от магнита. Кинетическая энергия атомов в пучке $K = 22$ мэВ. Найти расстояние между крайними компонентами расщеплённого пучка на экране, если градиент напряжённости магнитного поля $\partial H/\partial z = 15$ кЭ/см.

Решение. Введём декартовую систему координат, направив ось Ox вдоль начальной скорости атомов, а ось Oz — вдоль магнитного поля. Средняя сила, действующая на атом в неоднородном поле магнита, равна

$$\overline{F}_z = \mu_z \frac{\partial H}{\partial z}.$$

Эта сила изменяет z -компоненту скорости атома, создавая ускорение

$$a_z = \frac{\overline{F}_z}{m} = \frac{\mu_z}{m} \frac{\partial H}{\partial z}.$$

При этом движение вдоль оси Ox всё время остаётся равномерным со скоростью $v_x = v_0 = \sqrt{2K/m}$.

После прохождения магнитного поля атомы смещаются вдоль оси Oz на величину $\Delta_1 = a_z t_1^2/2$, где $t_1 = l/v_0$ — время пролёта соответствующего участка. В области между магнитом и экраном движение вдоль оси Oz равномерно, поэтому вертикальное смещение составляет $\Delta_2 = v_z t_2$, где $t_2 = L/v_0$. Общее отклонение атомов, очевидно, равно $\Delta_z = \Delta_1 + \Delta_2$.

В состоянии с фиксированной проекцией J_z механического момента атома на ось Oz соответствующая проекция магнитного момента равна $\mu_z = g\mu_B J_z$. Наибольшее отклонение от начального направления движения будут испытывать атомы, для которых величина $|J_z|$ максимальна: $J_z = J$ либо $J_z = -J$. Атомы каждого из этих типов смещаются на одну и ту же величину, но в противоположных направлениях. Это означает, что расстояние между крайними компонентами расщеплённого пучка равно

$$\Delta_{\max} = 2(\Delta_1 + \Delta_2) \big|_{\mu_z = g\mu_B J}.$$

Собирая вместе все результаты, получаем

$$\Delta_{\max} = \frac{g\mu_B J l (l + 2L)}{2K} \frac{\partial H}{\partial z}.$$

Фактор Ландэ для рассматриваемых атомов равен $g = 2/5$. Подставляя числовые данные, находим

$$\Delta_{\max} = 2.1 \text{ мм.}$$

4. Атом находится в слабом магнитном поле напряжённости $H = 2 \text{ кЭ}$. Найти величину расщепления уровня энергии, отвечающего состоянию 1D .

Решение. Магнитное поле по условию является слабым (сложный эффект Зеемана), поэтому вызванный им сдвиг уровней энергии равен

$$\Delta E_{M_J} = g\mu_B M_J H,$$

где $M_J = -J, J+1, \dots, J$. Искомая величина расщепления равняется интервалу между верхним и нижним подуровнями:

$$\Delta E = \Delta E_{M_J=J} - \Delta E_{M_J=-J} = 2g\mu_B JH.$$

Квантовые числа для атомов в состоянии 1D равны $S = 0$, $L = J = 2$, а фактор Ландэ $g = 1$. Подставляя в формулу числовые значения, находим

$$\Delta E = 4.6 \times 10^{-5} \text{ эВ.}$$

5. Вычислить молярную диамагнитную восприимчивость газа атомов гелия, если в основном состоянии координатная часть их волновой функции имеет вид $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \alpha^3/\pi r_B^3 e^{-\alpha(r_1+r_2)/r_B}$, где $\alpha = 27/16$, а $r_B = 0.53 \times 10^{-8} \text{ см}$ — боровский радиус.

Решение. Искомая молярная восприимчивость равна

$$\chi_M = -\frac{N_A e^2}{6m_e c^2} (\langle r_1^2 \rangle_0 + \langle r_2^2 \rangle_0),$$

где N_A — число Авогадро. Волновая функция основного состояния симметрична по переменным r_1 и r_2 , поэтому $\overline{r_1^2} = \overline{r_2^2}$, так что

$$\chi_M = -\frac{N_A e^2 \langle r_1^2 \rangle_0}{3m_e c^2}.$$

Средний квадрат расстояния $\langle r_1^2 \rangle_0$ вычисляется согласно

$$\begin{aligned}\langle r_1^2 \rangle_0 &= \int r_1^2 |\Psi^2| dV_1 dV_2 = \left(\frac{\alpha^3}{\pi r_B^3} \right)^2 \int r_1^2 e^{-2\alpha(r_1+r_2)/r_B} dV_1 dV_2 = \\ &= \left(\frac{\alpha^3}{\pi r_B^3} \right)^2 \int r_1^2 e^{-2\alpha r_1/r_B} dV_1 \int e^{-2\alpha r_2/r_B} dV_2.\end{aligned}$$

Интегралы удобно вычислить в сферической системе координат:

$$\begin{aligned}\int e^{-2\alpha r_2/r_B} dV_2 &= \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi r_2^2 \sin \vartheta e^{-2\alpha r_2/r_B} = \\ &= 4\pi \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r/r_B} dr = 4\pi \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r/r_B} dr = \frac{\pi r_B^3}{\alpha^3}, \\ \int r_1^2 e^{-2\alpha r_1/r_B} dV_1 &= 4\pi \int_0^\infty r^4 e^{-2\alpha r/r_B} dr = \frac{3\pi r_B^5}{\alpha^5}\end{aligned}$$

(для нахождения интегралов по r можно несколько раз применить метод интегрирования по частям). Таким образом, средний квадрат удаления электрона от ядра составляет $\langle r_1^2 \rangle_0 = 3r_B^2/\alpha^2$. Соответственно, молярная восприимчивость

$$\chi_M = -\frac{N_A}{m_e} \left(\frac{er_B}{\alpha c} \right)^2.$$

Подставляя сюда числовые значения ($N_A = 6.02 \times 10^{23}$ моль⁻¹, $m_e = 9.1 \times 10^{-28}$ г, $e = 4.8 \times 10^{-10}$ ед., $c = 3 \times 10^{10}$ см/с), получаем

$$\chi_M = -1.66 \times 10^{-6} \text{ см}^3/\text{моль}.$$

6. Парамагнитный одноатомный газ из атомов, находящихся в состоянии $^2S_{1/2}$, помещён в однородное магнитное поле $H = 25$ кЭ. Найти намагниченность этой системы, если число атомов в единице объёма $n = 10^{20}$ см⁻³, а температура $T = 300$ К.

Решение. Для рассматриваемых атомов $L = 0$, $J = S = 1/2$ и, соответственно, фактор Ландэ

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

Отношение характерной магнитной энергии атомов $g\mu_B H$ к тепловой $k_B T$ составляет 0.011, что много меньше единицы. Поэтому намагниченность системы определяется законом Кюри:

$$M = \frac{n (g\mu_B)^2 J(J+1)}{3k_B} H = n\mu_B \left(\frac{\mu_B H}{k_B T} \right).$$

Подставляя численные значения, находим

$$M = 5.2 \times 10^{-3} \text{ Гс}.$$

4.4. Задачи для самостоятельного решения

1. Выписать спектральные обозначения состояния атома, в котором спин-новое квантовое число $S = 1/2$, квантовое число $J = 3/2$, а фактор Ландэ равен $g = 4/3$.
2. Атом в состоянии $^4D_{1/2}$ находится на расстоянии $r = 2.5$ см от длинного проводника с током $I = 10$ А. Найти силу, действующую на атом.
3. Узкий пучок атомов в состоянии 5F_1 пропускают по методу Штерна и Герлаха через сильно неоднородное магнитное поле. На сколько потоков разделится исходный пучок?
4. Атом находится в слабом магнитном поле напряжённости $H = 2.5$ кЭ. Найти величину расщепления уровня энергии, отвечающего состоянию 3F_4 .
5. Сделать оценку отношения диа- и парамагнитной восприимчивости атомарного газа при комнатной температуре и убедитесь, что $\chi_{\text{dia}} \ll \chi_{\text{para}}$.
6. Найти постоянную Кюри для одного моля газа атомов натрия, находящихся в основном состоянии.

5. Магнитное упорядочение: модель Гейзенберга–Дирака–Ван-Флека

5.1. Обменное взаимодействие

В квантовой механике энергия совокупности одинаковых частиц зависит от величины полного системы, даже если её гамильтониан не включает спин-овых переменных. Чтобы подчеркнуть это, говорят, что между частицами есть своеобразное *обменное взаимодействие*, которое и приводит к указанной зависимости.

В атоме с двумя валентными электронами (например, атоме гелия) обменное взаимодействие между ними приводит к тому, что все состояния распадаются на два класса: *парасостояния*, в которых полный спин $S = 0$, и *ортосостояния*, в которых полный спин $S = 1$. Парасостояниям отвечают *синглетные* уровни энергии атома, а ортосостояниям — *триплетные*. Если рассматривать взаимодействие электронов друг с другом как возмущение, то в первом приближении энергия пара- (E_s) и ортосостояний (E_t) может быть вычислена по формуле

$$E_s = E_\alpha + E_\beta + K + J, \quad E_t = E_\alpha + E_\beta + K - J, \quad (5.1)$$

где E_α и E_β — энергии электронов в соответствующем водородоподобном атоме, K — среднее значение энергии кулоновского взаимодействия, а J — обменная энергия (обменный интеграл).

5.2. Гейзенберговский гамильтониан

В подходе Гейзенберга–Дирака–Ван Флека реальный магнетик моделируется диэлектриком, кристаллическая решётка которого образована атомами одного сорта. Гамильтониан такой системы (гейзенберговский гамильтониан) записывается в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{\mathbf{S}}_f \cdot \hat{\mathbf{S}}_{f'} - g\mu_B H \sum_f \hat{S}_f^z, \quad (5.2)$$

где первое слагаемое отвечает попарному обменному взаимодействию электронов, принадлежащих разным атомам, а второе — взаимодействию атомов

с внешним полем; суммирование здесь выполняется по узлам решётки (f — номер узла). Обменный интеграл $J(f - f')$ зависит от расстояния между узлами f и f' ; в случае ферромагнетиков он положителен, в случае антиферромагнетиков — отрицателен.

При конечных температурах в материалах с сильными магнитными свойствами наблюдаются коллективные спиновые колебания — так называемые спиновые волны. Энергия кристалла в этом случае записывают в виде

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}, \quad n_{\mathbf{k}} = 0, 1, 2, \dots \quad (5.3)$$

где E_0 — энергия основного состояния, а

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = g\mu_B H + 2S \sum_f (1 - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_f}) J(r_f) \quad (5.4)$$

есть энергия спиновой волны (магнона) с волновым вектором $\mathbf{k}$ (суммирование, как правило, выполняется по ближайшим соседям).

5.3. Задачи

1. Найти обменную и кулоновскую энергию взаимодействия электронов в атоме гелия с электронной конфигурацией $1s^1 2s^1$, если измеренные значения энергии пара- и ортосостояния равны $E_s = -58.3712$ эВ и $E_t = -59.1600$ эВ соответственно.

Решение. В пренебрежении взаимодействием электронов друг с другом их энергии определяются выражением

$$E_n = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{54.4}{n^2} \text{ эВ} \quad (Z = 2)$$

при $n = 1$ и $n = 2$ в соответствии с указанной в условии электронной конфигурацией. Кулоновское взаимодействие электронов приводит к разделению уровней энергии атома гелия на синглетные и триплетные:

$$E_s = E_1 + E_2 + K + J, \quad E_t = E_1 + E_2 + K - J,$$

где K и J — искомые кулоновская и обменная энергии соответственно. Чтобы найти величину J , достаточно составить разность $E_s - E_t$:

$$J = \frac{1}{2} (E_s - E_t) = 0.395 \text{ эВ}.$$

Сложение E_s и E_t позволяет найти кулоновскую энергию:

$$K = \frac{1}{2} (E_s + E_t) - (E_1 + E_2).$$

Учитывая, что $E_1 = -54.4$ эВ, $E_2 = -13.6$ эВ, находим $K = 9.23$ эВ.

2. Найти собственные значения обменного оператора $\hat{V}_e = -\frac{1}{2}J(1+4\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2)$ для двух электронов (J — обменный интеграл).

Решение. Операторы $\hat{\mathbf{s}}_1$ и $\hat{\mathbf{s}}_2$ коммутируют, поэтому квадрат полного спина $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ равен

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2)^2 = \hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2.$$

Учитывая, что $s_1 = s_2 = 1/2$ и $\hat{\mathbf{s}}_1^2 = \hat{\mathbf{s}}_2^2 = 1/2 \times (1/2 + 1) = 3/4$, находим отсюда

$$\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{S}}^2 - \frac{3}{4}.$$

Из этого выражения следует, что состояния с заданным полным спином S являются собственными для оператора $\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$. Соответствующие собственные значения равны

$$\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 = \frac{1}{2}S(S+1) - \frac{3}{4},$$

поскольку в указанных состояниях $\hat{\mathbf{S}}^2 = S(S+1)$. Спиновое число S , определяющее квадрат полного спина, может принимать два значения: $S = 0$ либо $S = 1$ (от $|s_1 - s_2|$ до $|s_1 + s_2|$ через единицу). Таким образом,

$$\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 = \begin{cases} -\frac{3}{4}, & \text{при } S = 0, \\ \frac{1}{4}, & \text{при } S = 1. \end{cases}$$

Соответственно, значения обменного оператора $\hat{V}_e = -\frac{1}{2}J(1+4\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2)$ равны

$$\hat{V}_e = \begin{cases} +J, & \text{при } S = 0, \\ -J, & \text{при } S = 1. \end{cases}$$

3. Показать, что гамильтониан Гейзенберга для ферромагнетика может быть записан в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^z \hat{S}_{f'}^z - g\mu_B H \sum_f \hat{S}_f^z - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^- \hat{S}_{f'}^+,$$

где $\hat{S}^\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$.

Решение. Расписав скалярное произведение $\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_{f'}$ через декартовые компоненты спиновых операторов, запишем гейзенберговский гамильтониан в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \left(\hat{S}_f^x \hat{S}_{f'}^x + \hat{S}_f^y \hat{S}_{f'}^y + \hat{S}_f^z \hat{S}_{f'}^z \right) - g\mu_B H \sum_f \hat{S}_f^z.$$

Поперечные компоненты спинов могут быть выражены через повышающий $\hat{S}^+$ и понижающий $\hat{S}^-$ операторы согласно

$$\hat{S}_x = \frac{\hat{S}^+ + \hat{S}^-}{2}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hat{S}^+ - \hat{S}^-}{2i}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \hat{S}_f^x \hat{S}_{f'}^x + \hat{S}_f^y \hat{S}_{f'}^y &= \frac{1}{4} \left(\hat{S}_f^+ + \hat{S}_f^- \right) \left(\hat{S}_{f'}^+ + \hat{S}_{f'}^- \right) - \\ &- \frac{1}{4} \left(\hat{S}_f^+ - \hat{S}_f^- \right) \left(\hat{S}_{f'}^+ - \hat{S}_{f'}^- \right) = \frac{1}{2} \left(\hat{S}_f^+ \hat{S}_{f'}^- + \hat{S}_f^- \hat{S}_{f'}^+ \right). \end{aligned}$$

Подставив это выражение в гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$, получим

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^z \hat{S}_{f'}^z - g\mu_B H \sum_f \hat{S}_f^z - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \left(\hat{S}_f^x \hat{S}_{f'}^x + \hat{S}_f^y \hat{S}_{f'}^y \right) = \\ &= - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^z \hat{S}_{f'}^z - g\mu_B H \sum_f \hat{S}_f^z - \frac{1}{2} \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \left(\hat{S}_f^+ \hat{S}_{f'}^- + \hat{S}_f^- \hat{S}_{f'}^+ \right). \end{aligned}$$

Обменный интеграл для пары ионов зависит только от расстояния между ними: $J(f - f') = J(f' - f)$, а коммутатор $[\hat{S}_f^+, \hat{S}_{f'}^-] = 0$ при $f \neq f'$.

Поэтому

$$\sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^+ \hat{S}_{f'}^- = \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_{f'}^+ \hat{S}_f^- = \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^- \hat{S}_{f'}^+.$$

Значит, гейзенберговский гамильтониан можно записать в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^z \hat{S}_{f'}^z - g\mu_B H \sum_f \hat{S}_f^z - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^- \hat{S}_{f'}^+.$$

4. Найти, какое наибольшее значение может принимать оператор $\hat{\mathbf{S}}_f \cdot \hat{\mathbf{S}}_{f'}$, где $\hat{\mathbf{S}}_f$ и $\hat{\mathbf{S}}_{f'}$ — спиновые операторы магнитных ионов в узлах f и f' соответственно (спиновое число S для них предполагается одним и тем же).

Решение. По условию $\hat{\mathbf{S}}_f^2 = \hat{\mathbf{S}}_{f'}^2 = S(S + 1)$. Составим оператор $\hat{\tilde{\mathbf{S}}} = \hat{\mathbf{S}}_f + \hat{\mathbf{S}}_{f'}$ и с его помощью запишем оператор $\hat{\mathbf{S}}_f \cdot \hat{\mathbf{S}}_{f'}$ в виде

$$\hat{\mathbf{S}}_f \cdot \hat{\mathbf{S}}_{f'} = \frac{1}{2} \left[\hat{\tilde{\mathbf{S}}}^2 - \hat{\mathbf{S}}_f^2 - \hat{\mathbf{S}}_{f'}^2 \right] = \frac{1}{2} \tilde{S}(\tilde{S} + 1) - S(S + 1).$$

По правилу сложения механических моментов спиновое число $\tilde{S}$, определяющее значение квадрата $\hat{\tilde{\mathbf{S}}}^2$, может принимать значения в интервале от 0 ($|S - S|$) до $2S$ ($S + S$) через единицу. Скалярное произведение $\hat{\mathbf{S}}_f \cdot \hat{\mathbf{S}}_{f'}$ имеет наибольшее значение, когда $\tilde{S}$ максимально, то есть $\tilde{S} = 2S$. Таким образом,

$$\left(\hat{\mathbf{S}}_f \cdot \hat{\mathbf{S}}_{f'} \right)_{\max} = \frac{1}{2} (2S)(2S + 1) - S(S + 1) = S^2.$$

5. Убедиться, что состояние, в котором все спины ферромагнетика сонаправлены, является основным (имеет наименьшую энергию) для гейзенберговского гамильтониана.

Решение. Пусть число спинов в решётке равно N . Запишем гамильтониан Гейзенберга в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^z \hat{S}_{f'}^z - g\mu_B H \sum_f \hat{S}_f^z - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^- \hat{S}_{f'}^+.$$

Пусть спин в f -ом узле решётки находится в состоянии $|S\rangle_f$, в котором проекция S_z максимальна и равняется спиновому числу S : $\hat{S}_z |S\rangle_f = S |S\rangle_f$. Состояние $|0\rangle$, в котором все спины ферромагнетика сонаправлены, является произведением указанных состояний $|S\rangle_f$ отдельных спинов:

$$|0\rangle = \prod_f |S\rangle_f.$$

Убедимся, что состояние $|0\rangle$ является собственным для гамильтониана Гейзенберга. Для этого заметим, что оператор $\hat{S}_f^+$, действуя на состояние с заданной величиной проекции спина S_z , даёт состояние, в котором величина S_z увеличена на единицу. При заданном спиновом числе S не существует состояний, в котором $S_z = S + 1$, поэтому

$$\hat{S}_f^+ |S\rangle_f = 0.$$

Это означает последняя сумма в выражении для $\mathcal{H}$ не сказывается на результате действия гамильтониана на состояние $|0\rangle$, так что

$$\hat{\mathcal{H}} |0\rangle = - \left(\sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \hat{S}_f^z \hat{S}_{f'}^z + g\mu_B H \sum_f \hat{S}_f^z \right) |0\rangle.$$

Состояние $|0\rangle$ является собственным для операторов $\hat{S}_f^z$:

$$\hat{S}_f^z |0\rangle = S |0\rangle, \quad \hat{S}_f^z \hat{S}_{f'}^z |0\rangle = S^2 |0\rangle,$$

поэтому

$$\hat{\mathcal{H}} |0\rangle = E_0 |0\rangle,$$

где

$$E_0 = -S^2 \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') - N g\mu_B H S.$$

Таким образом, состояние $|0\rangle$ является собственным для гейзенберговского гамильтониана.

Убедимся, что энергия любого другого состояния $|0'\rangle$ рассматриваемого ферромагнетика превышает E_0 . По правилу вычисления средних значений физических величин в квантовой механике энергия E'_0 состояния $|0'\rangle$ вычисляется как

$$E'_0 = \langle 0' | \hat{\mathcal{H}} | 0' \rangle.$$

В состоянии с заданной величиной проекции спина на ось Oz средние значения $\langle \hat{S}_f^+ \rangle = \langle \hat{S}_f^- \rangle = 0$, поэтому

$$E'_0 = - \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') \langle \hat{S}_f^z \hat{S}_{f'}^z \rangle_{0'} - g\mu_B H \sum_f \langle \hat{S}_f^z \rangle_{0'}.$$

Как установлено в предыдущей задаче, $\langle \hat{S}_z^f \hat{S}_z^{f'} \rangle_{0'} \leq S^2$; кроме того, $\langle S_f^z \rangle \leq S$. Поэтому

$$E'_0 \geq -S^2 \sum_{\substack{f, f' \\ f \neq f'}} J(f - f') - Ng\mu_B HS,$$

то есть $E_{0'} \geq E_0$. Таким образом, состояние $|0\rangle$ действительно является основным.

6. Показать, что при малых значениях волнового числа ($ka \ll 1$, a — постоянная решётки) энергия спиновой волны в приближении ближайших соседей может записана в виде $\mathcal{E}_k = \text{const} + \hbar^2/2m_*$, где m_* — “эффективная масса” частицы (магнона).

Решение. Для простоты будем считать, что кристаллическая решётка имеет простую кубическую структуру. У каждого атома в такой решётке шесть ближайших соседей — по два вдоль каждой из осей Ox , Oy и Oz . Обменный интеграл J для каждой пары ближайших соседей имеет одно и то же значение. Выберем один из атомов, придав его номер $f = 0$. Выполняя суммирование по ближайшим к нему соседям, расположенным вдоль оси Ox , при $ka \ll 1$ получим

$$\begin{aligned} \sum_{f(x)} (1 - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_f}) J(r_f) &= J(1 - e^{-ik_x a} + 1 - e^{ik_x a}) = \\ &= 2J(1 - \cos k_x a) \approx J(k_x a)^2. \end{aligned}$$

Аналогично, для ближайших соседей, расположенных вдоль осей Oy и Oz , будем иметь

$$\sum_{f(y)} (1 - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_f}) J(r_f) \approx J(k_y a)^2, \quad \sum_{f(z)} (1 - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_f}) J(r_f) \approx J(k_z a)^2.$$

Тогда сумма по всем ближайшим к данному атому соседям при $ka \ll 1$ равна

$$\sum_f (1 - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_f}) J(r_f) \approx J(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) a^2 = Jk^2 a^2,$$

а энергия спиновой волны

$$\mathcal{E}_k = g\mu_B H + 2S \sum_f (1 - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_f}) J(r_f) = g\mu_B H + 2SJk^2 a^2.$$

Если ввести эффективную массу

$$m_* = \frac{\hbar^2}{4SJa^2},$$

то энергию возбуждённого состояния можно представить в виде

$$\mathcal{E}_k = \text{const} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_*},$$

то есть как энергию свободно движущейся частицы массы m_* .

5.4. Задачи для самостоятельного решения

1. Найти, какое наименьшее значение может принимать диагональный матричный элемент оператора $\hat{\mathbf{S}}_f \cdot \hat{\mathbf{S}}_{f'}$, где $\hat{\mathbf{S}}_f$ и $\hat{\mathbf{S}}_{f'}$ — спиновые операторы магнитных ионов в узлах f и f' соответственно.
2. Найти скалярное произведение $\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2$ спинов ($s_1 = s_2 = 1$) двух частиц в состояниях, в которых суммарный спин системы $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ имеет определённое значение.
3. Убедиться, что для антиферромагнетика состояние, в котором спины, принадлежащие одной и той же магнитной подрешётке, сонаправлены, но направления спинов в подрешётках противоположны, не является собственным для гамильтониана Гейзенберга и, следовательно, не может считаться основным.
4. Найти энергию основного состояния цепочки из четырёх спинов с антиферромагнитным упорядочением, связанных взаимодействием только между ближайшими соседями. Учесть, что отвечающий этой системе гейзенберговский гамильтониан

$$\hat{\mathcal{H}} = 2J \left(\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3 + \hat{\mathbf{S}}_3 \cdot \hat{\mathbf{S}}_4 + \hat{\mathbf{S}}_4 \cdot \hat{\mathbf{S}}_1 \right) \quad (J > 0)$$

можно записать в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = 2J \left[\left(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_3 + \hat{\mathbf{S}}_4 \right)^2 - \left(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_3 \right)^2 - \left(\hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_4 \right)^2 \right].$$

5. Оценить эффективную массу магнона в ферромагнетике, взяв постоянную решётки $a \sim 3 \times 10^{-8}$ см и обменный интеграл $J \sim 2 \times 10^{-14}$ эрг.

6. Список рекомендуемой литературы

1. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики: учебное пособие. – 7-е изд., стер. – Санкт-Петербург: Лань, 2022. – 672 с.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика : учебное пособие для вузов : в 10 т. Том 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория)/под ред. Л. П. Питаевского. – 6-е изд., испр. – М: ФИЗМАТЛИТ, 2016 – 800 с.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика : учебное пособие для вузов : в 10 т. Том 5. Статистическая физика. Часть 1/под ред. Л. П. Питаевского. – 6-е изд., стер. – М: ФИЗМАТЛИТ, 2018 – 620 с.
4. Квасников И. А. Термодинамика и статистическая физика. Т.2: Теория равновесных систем: Статистическая физика: Учебное пособие. Изд. 2-е, сущ. перераб. и доп. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 432 с.
5. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твёрдого тела: пер. с англ.: в 2 т.; под ред. М. И. Каганова. – Москва: Мир, 1979.
6. Галицкий В.М., Карнаков Б. М., Коган В. И. Задачи по квантовой механике: Учеб. пособие для студентов физ. специальностей вузов: в 2 частях. – 3-е изд., испр. и доп. – Москва: УРСС, 2001.
7. Серова Ф. Г., Янкина А. А. Сборник задач по теоретической физике: Квантовая механика, статистическая физика. Учеб. пособие для студентов пед. ин-тов по физ. спец. – М.: Просвещение, 1979. – 192 с., ил.

Учебное издание

Составитель: **Поперечный** Игорь Сергеевич

**Квантовая теория магнетизма.
Практикум по решению задач**

Практикум

Издается в авторской редакции
Компьютерная верстка *И. С. Поперечного*

Подписано в печать 13.08.2026. Формат 60×84/16
Усл. печ. л. 2,56. Тираж 50 экз. Заказ 96

Управление издательской деятельности
Пермского государственного
национального исследовательского университета
614068, г. Пермь, ул. Букирева, 15

Отпечатано в типографии ПГНИУ.
614068, г. Пермь, ул. Букирева, 15