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]

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

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

в к-ром полностью исключены орбитальные степени свободы (их вклад во 2-м порядке теории возмущений определяют коэф. $\Lambda_{\lambda\beta}$), $H^\alpha$ и $S^\alpha$ — 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 $D_{\alpha\beta} = \lambda^2\Lambda_{\alpha\beta}$ ($\lambda$ — 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: $P_{p,q} = \pm ^1/_2(1 + S_pS_q)$, 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 $H_2$):

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

Он описывает зависимость энергии этой системы от взаимной ориентации спинов $\boldsymbol{S}_1$ и $\boldsymbol{S}_2$ 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*):

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

где $\mathscr{E}_0$ — константа, $\boldsymbol{S}_i$ ($\boldsymbol{S}_j$) — 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 $\boldsymbol{D}_{ij}$, 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:

$$\mathscr{H}=-g\mu_Б\sum_i(\boldsymbol{HS}_i)-\sum_{ij}\Big\{J_{ij}^\parallel S_i^z S_j^z+ +J_{ij}^\perp\left(S_i^x S_j^x+S_i^y S_j^y\right)\Big\}; \qquad (4)$$

здесь $\boldsymbol{H}$ — 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 *XY*-модели. В боль-