О вероятности и времени инверсии большого спина

Екатерина Карацуба и Паоло Моретти

Федеральный исследовательский центр "Информатика и управление" РАН, Россия;
Институт комплексных систем C.N.R., отдел Флоренции, Италия

30 сентября 2018 г.

Динамика спина изучается на основе непосредственного применения уравнения Шредингера. Полный спин S рассматривается в статическом магнитном поле, индуцирующем переходы между соседними состояниями. Это, очевидно, упрощенная ситуация, в некоторых случаях описывающая реальную физическую систему, как это показано в [1]–[3].

В [3] коэффициент $|b_n(t)|^2$, который определяется как вероятность найти систему в n -ом спиновом состоянии, был вычислен и оказался такой сложной тригонометрической суммой:

$$b_n(t) = -2\frac{(-1)^n}{N+1}\sum_{s=1}^{N} \sin\frac{s\pi}{N+1}\sin\frac{ns\pi}{N+1} e^{2i\frac{k}{\hbar}t\cos\frac{s\pi}{N+1}},$$

$1 \leq n \leq N.$

Примерное выражение для $b_n(t)$ посредством соответствующих функций Бесселя было получено только при условии, что $n \ll N$, $\alpha t \ll N$ (N есть общее число спиновых состояний, α – параметр), поскольку только в этом случае можно обоснованно заменить тригонометрическую сумму по всем спиновым состояниям соответствующим интегралом. Используя эвристические рассуждения, это соотношение предполагается справедливым также при $n = N$, что соответствует переходу от состояния спин-вверх к состоянию спин-вниз, и таким образом можно вычислить время инверсии. Оно определяется первым максимумом функции $|b_N(t)|^2$. Однако из-за значимости момента времени инверсии, связывающего теорию с экспериментальными данными, нужны были более точные и обоснованные вычисления на основе строгого подхода, предложенного в [3]. Они были проведены в [4].

Настоящий доклад посвящён результату, опубликованному в [4], где для амплитуды вероятности $b_N(t)$ была выведена новая формула через функции Бесселя с большими индексами, при $N \geq 2$ и для любого t, и его продолжению в работе этого (2018) года в [8].

Мы получим новые асимптотические разложения для функции $b_N(t)$, которые позволят вычислить $b_N(t)$ с растущей точностью (см. графики).

Получено асимптотически точное выражение для времени инверсии спина. Применение этой полезной формулы показано на примере кластера Fe8.

Гамильтониан нашей системы, который включает полный спин S, имеет вид: $H = H_0 + V$, где H_0 есть статический гамильтониан (т.е. магнитное поле) и V есть член, ответственный за переходы между спиновыми состояниями. Начиная с дискретного набора N $(N = 2S + 1)$ собственных состояний спина $|n\rangle$ при H_0 с энергиями E_n, можно записать волновую функцию как:

$$\psi(t) = \sum_{n=1}^{N} a_n(t)|n\rangle \exp(-iE_n t/\hbar).$$

Из уравнения Шрёдингера получаем коэффициенты $a_n(t)$:

$$i\hbar\dot{a}_n(t) = \sum_{l=1}^{N} a_l(t)V_{nl} \exp(i\omega_{nl}t), \quad \omega_{nl} = \frac{E_n - E_l}{\hbar}.$$

Уместны некоторые упрощения. Во-первых, можно предположить, что V связывает только соседние состояния, и не имеет диагональных элементов; более того, $|\omega_{n,n\pm1}| = \omega$, независимо от n, и $V^*_{n,n+1} = V_{n,n-1} = k$.
Начальными условиями, представляющими интерес, являются такие:

$$a_1(0) = 1,$$

$$a_n(0) = 0, \quad n = 2, 3, \cdots N,$$

что соответствует состоянию спин вверх (или вниз).
Подстановка

$$b_n(t) = a_n(t) \mathrm{e}^{-in\omega t}$$

приводит к системе уравнений, которая может быть решена преобразованием Лапласа. Если рассмотреть $n = N$, то есть именно амплитуду вероятности инверсии спина, можно получить следующий результат (см. [3]):

$$b_N(t) = -2\frac{(-1)^N}{N+1}\sum_{s=1}^{N}\sin\frac{s\pi}{N+1}\sin\frac{Ns\pi}{N+1}e^{2\pi i\beta\cos\frac{s\pi}{N+1}}, \qquad (1)$$

где

$$\beta = \frac{kt}{\pi\hbar} = \alpha\frac{t}{2\pi} \quad , \quad \alpha = \frac{2k}{\hbar}. \qquad (2)$$

Это уравнение получается в пределе $\omega \to 0$ и не зависит от ω. Может быть выполнен подробный расчет до первого порядка по ω (см. [3]), и оказывается, что коэффициент b_N снова задается формулами (1), (2) в пределах фазового множителя. Таким образом, если ω не слишком велико, значение b_N почти нечувствительно к его варьированию.

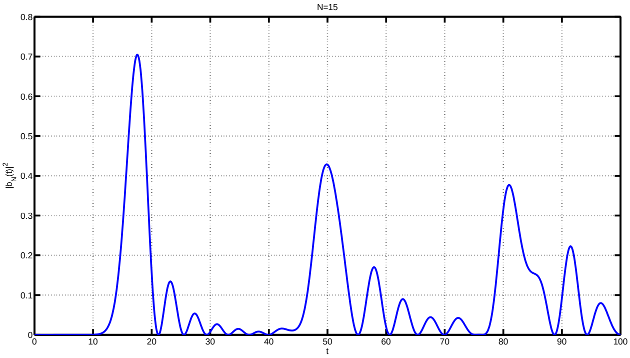

Рис.: Значение $|b_N(t)|^2$ $(N = 10,\ \alpha = 1)$, определяемое формулой (1).

Докажем следующую
Теорема. *При* $b_N(t)$, $N \geq 2$, *справедлива формула:*

$$b_N(t) = (-1)^N \frac{2}{\alpha t} \sum_{\nu=1}^{+\infty} i^{(N+1)(2\nu-1)} \left\{ [(N+1)(2\nu-1)-1] \right.$$

$$\left. J_{(N+1)(2\nu-1)-1}(\alpha t) + [(N+1)(2\nu-1)+1]\, J_{(N+1)(2\nu-1)+1}(\alpha t) \right\}, \qquad (3)$$

$N \geq 2.$

Доказательство теоремы основано на трёх леммах.

Лемма 1. *Для* $b_N(t)$ *справедливо соотношение:*

$$b_N(t) = \frac{(-1)^N}{2(N+1)} \left[S_1 - S_2 - (S_3 - S_4)\right], \tag{4}$$

где

$$S_1 = \sum_{j=1}^{N+1} \exp\left[2\pi i \left(\frac{2j-1}{N+1} + \beta \cos \frac{(2j-1)\pi}{N+1}\right)\right],$$

$$S_2 = \sum_{j=1}^{N+1} \exp\left[2\pi i \left(\frac{2j}{N+1} + \beta \cos \frac{2j\pi}{N+1}\right)\right],$$

$$S_3 = \sum_{j=1}^{N+1} \exp\left[2\pi i \beta \cos \frac{(2j-1)\pi}{N+1}\right], S_4 = \sum_{j=1}^{N+1} \exp\left(2\pi i \beta \cos \frac{2j\pi}{N+1}\right).$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пользуемся тем, что

$$(-1)^{s+1}\exp\left[2\pi i\left(\frac{s}{N+1}+\beta\cos\frac{s\pi}{N+1}\right)\right]$$

является функцией, периодической по s с периодом $2(N+1)$,

$$\sum_{s=1}^{2(N+1)}(-1)^{s+1}\exp\left[2\pi i\left(\frac{s}{N+1}+\beta\cos\frac{s\pi}{N+1}\right)\right]=$$

$$\sum_{s=1}^{2(N+1)}(-1)^{s+1}\exp\left[-2\pi i\left(\frac{s}{N+1}-\beta\cos\frac{s\pi}{N+1}\right)\right],$$

и следовательно

$$b_N(t) = \frac{(-1)^N}{2(N+1)} \sum_{s=1}^{2(N+1)} (-1)^{s+1} \left\{ \exp\left[2\pi i \left(\frac{s}{N+1} + \beta \cos \frac{s\pi}{N+1} \right) \right] \right.$$

$$\left. - \exp\left[2\pi i \beta \cos \frac{s\pi}{N+1} \right] \right\}. \qquad (5)$$

Затем (5) представляется в виде суммы двух сумм, одна по нечётным s :

$$s = 2j - 1; j = 1, 2, 3, \ldots, N+1;$$

другая по чётным s :

$$s = 2j; j = 1, 2, 3, \ldots, N+1;$$

и отсюда получаем утверждение леммы.

Рассмотрим функцию

$$f(x) = e^{2\pi i\beta \cos 2\pi x}, \tag{6}$$

которая является периодической с периодом 1. Разложим $f(x)$ в ряд Фурье

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c(k) e^{2\pi i k x}, \tag{7}$$

с коэффициентами

$$c(k) = \int_0^1 f(x) e^{-2\pi i k x} dx = 2 \int_0^{\frac{1}{2}} e^{2\pi i\beta \cos 2\pi x} \cos 2\pi k x dx. \tag{8}$$

Лемма 2. *При* $|k| > 0$, *справедлива оценка:*

$$|c(k)| \leq \frac{(2\pi\beta)^2 + 2\pi|\beta|}{k^2},$$

и, в частности, ряд Фурье для функции $f(x)$ *сходится абсолютно.*

Доказательство. Из (8) $c(k) = c(-k)$. Находим при $k \neq 0$:

$$c(k) = \int_0^1 f(x) \frac{de^{-2\pi ikx}}{-2\pi ik} = \frac{1}{(2\pi ik)^2} \int_0^1 f''(x) e^{-2\pi ikx} dx,$$

$$|c(k)| \le \frac{1}{(2\pi k)^2}\int_0^1 |f''(x)|dx \le \frac{1}{(2\pi k)^2}\max_{0\le x\le 1}|f''(x)|.$$

Поскольку из (7)

$$f''(x) = -16\pi^4\beta^2\sin^2 2\pi x e^{2\pi i\beta\cos 2\pi x} - 8\pi^3 i\beta\cos 2\pi x e^{2\pi i\beta\cos 2\pi x},$$

то

$$|f''(x)| \le (2\pi)^4\beta^2 + (2\pi)^3|\beta|.$$

Отсюда следует утверждение леммы.

Пусть M и m – целые, $M > 1$, $0 \le m \le M$; и суммы A и B определяются как :

$$A = \sum_{j=1}^{M} \exp\left[2\pi i \left(\frac{m}{M}\left(j - \frac{1}{2}\right) + \beta \cos 2\pi \frac{(j - \frac{1}{2})}{M}\right)\right],$$

$$B = \sum_{j=1}^{M} \exp\left[2\pi i \left(\frac{m}{M} j + \beta \cos 2\pi \frac{j}{M}\right)\right].$$

Лемма 3. *Для сумм A и B справедливы следующие соотношения:*

$$A = M \sum_{r=-\infty}^{+\infty} (-1)^r c(rM - m),$$

$$B = M \sum_{r=-\infty}^{+\infty} c(rM - m),$$

где $c(k)$ – коэффициенты Фурье функции $f(x) = e^{2\pi i\beta \cos 2\pi x}$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Представляя множитель $e^{2\pi i\beta\cos 2\pi x}$ каждого слагаемого сумм A и B в виде ряда Фурье, находим

$$A = \sum_{j=1}^{M} \exp\left[2\pi i \frac{m}{M}\left(j-\frac{1}{2}\right)\right] \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c(k) \exp\left(2\pi i \frac{j-\frac{1}{2}}{M} k\right)$$

$$= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c(k) \sum_{j=1}^{M} \exp\left[2\pi i \frac{m+k}{M}\left(j-\frac{1}{2}\right)\right], \qquad (9)$$

$$B = \sum_{j=1}^{M} \exp\left(2\pi i \frac{m}{M} j\right) \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c(k) \exp\left(2\pi i \frac{j}{M} k\right)$$

$$= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c(k) \sum_{j=1}^{M} \exp\left(2\pi i \frac{m+k}{M} j\right). \qquad (10)$$

Поскольку

$$\sum_{j=1}^{M} \exp\left[2\pi i \frac{m+k}{M}\left(j-\frac{1}{2}\right)\right] =$$

$$\begin{cases} (-1)^r M & \text{, если } m+k = rM,\ r \text{ целое}, -\infty < r < +\infty; \\ 0 & \text{, если } m+k \text{ не кратно } M; \end{cases}$$

$$\sum_{j=1}^{M} \exp\left(2\pi i \frac{m+k}{M} j\right) =$$

$$\begin{cases} M & \text{, если } m+k = rM,\ r \text{ целое}, -\infty < r < +\infty; \\ 0 & \text{, если } m+k \text{ не кратно } M; \end{cases}$$

то из (9) и (10) получаем соотвественно

$$A = M \sum_{r=-\infty}^{+\infty} (-1)^r c(rM - m); \tag{11}$$

$$B = M \sum_{r=-\infty}^{+\infty} c(rM - m). \tag{12}$$

Лемма доказана.
Следствие. Из **леммы 1** и **леммы 3** получаем

$$b_N(t) = (-1)^{N+1} \sum_{\nu=1}^{+\infty} \{c[(N+1)(2\nu-1)-2]$$

$$+c[(N+1)(2\nu-1)+2] - 2c[(N+1)(2\nu-1)]\} . \tag{13}$$

Доказательство теоремы. Члены этого ряда, функции $c(k)$, определяются интегралами (8) и могут преобразованы к удобному виду. Заменой переменных интегрирования $y = 2\pi x$, $\varphi = y - \frac{\pi}{2}$, из (8) получаем

$$c(k) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} e^{i\alpha t\cos y}\cos ky dy = \frac{i^k}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(k\varphi - \alpha t\sin\varphi)}d\varphi,$$

$\alpha = 2\pi\beta/t.$

Интеграл

$$J_k(\alpha t) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(k\varphi - \alpha t \sin\varphi)} d\varphi \qquad (14)$$

есть функция Бесселя k-ого порядка; пользуясь известными рекуррентными формулами (см.[6]), представим ряд (13) в виде

$$b_N(t) = (-1)^N \frac{2}{\alpha t} \sum_{\nu=1}^{+\infty} i^{(N+1)(2\nu-1)} \left\{ [(N+1)(2\nu-1)-1] \right.$$

$$\left. J_{(N+1)(2\nu-1)-1}(\alpha t) + [(N+1)(2\nu-1)+1]\, J_{(N+1)(2\nu-1)+1}(\alpha t) \right\}, \qquad (15)$$

$N \geq 2$. Теорема доказана.

Замечание. Так как $J_\nu(\alpha t)$ убывает экспоненциально с ростом ν, а суммирование в (15) идёт по ν, принадлежащим арифметической прогрессии с разностью $2(N+1)$, то уже первые слагаемые суммы (15) обеспечивают хорошее приближение к $b_N(t)$.
Пусть $k \geq 1, \;\; N \geq 2$

$$b_N^{(k)}(t) = (-1)^N \frac{2}{\alpha t} \sum_{\nu=1}^{k} i^{(N+1)(2\nu-1)} \left\{ [(N+1)(2\nu-1)-1] \right.$$

$$\left. J_{(N+1)(2\nu-1)-1}(\alpha t) + [(N+1)(2\nu-1)+1] \, J_{(N+1)(2\nu-1)+1}(\alpha t) \right\}. \tag{16}$$

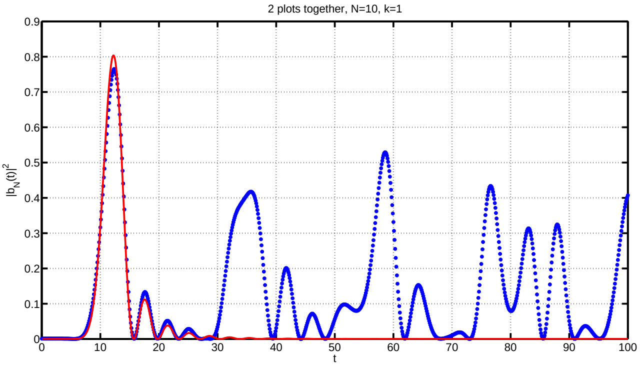

Рис.: Два графика вместе: значение $|b_N(t)|^2$ $(N = 10,\ \alpha = 1)$, определяемое (2) – линия из синих звёздочек; и определяемое приближением (15), (16) – непрерывная красная линия; с $k = 1$.

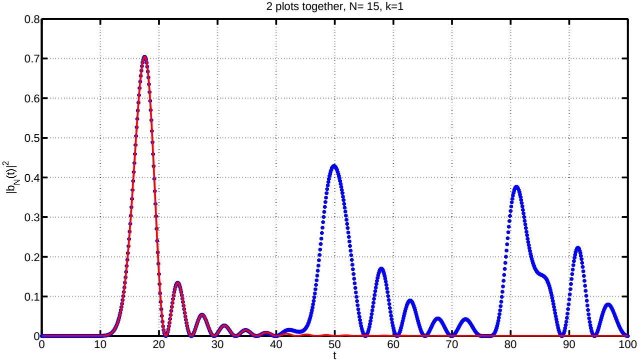

Рис.: Два графика вместе: значение $|b_N(t)|^2$ $(N = 15, \alpha = 1)$, определяемое (2) – линия из синих звёздочек; и определяемое приближением (16) – непрерывная красная линия; с $k = 1$.

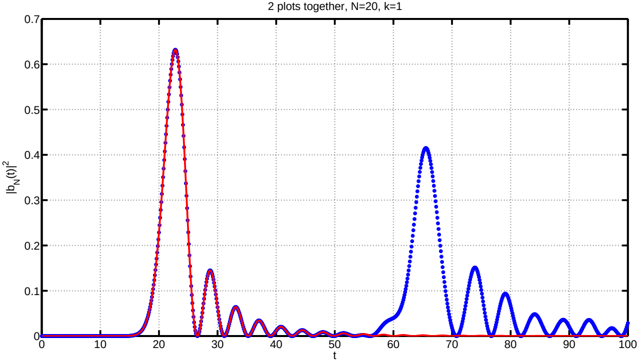

Рис.: Два графика вместе: значение $|b_N(t)|^2$ ($N = 20$, $\alpha = 1$), определяемое (2) – линия из синих звёздочек; и определяемое приближением (16) – непрерывная красная линия; с $k = 1$.

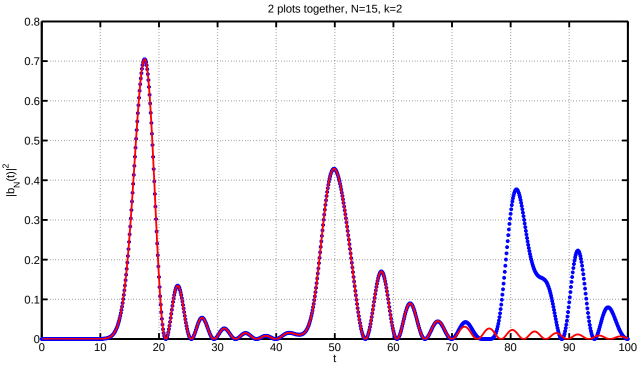

Рис.: Два графика вместе: значение $|b_N(t)|^2$ ($N = 15$, $\alpha = 1$), определяемое (2) – линия из синих звёздочек; и определяемое приближением (16) – непрерывная красная линия; с $k = 2$.

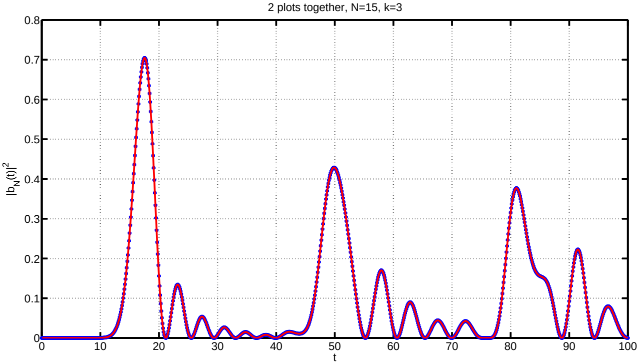

Рис.: Два графика вместе: значение $|b_N(t)|^2$ $(N = 15, \alpha = 1)$, определяемое (2) – линия из синих звёздочек; и определяемое приближением (16) – непрерывная красная линия; с $k = 3$.

Пользуясь методами из [5] для уточнения аппроксимаций функций Бесселя, можно получить следующее асимптотическое выражение для вероятности инверсии спина ($N \geq 2$, $N \to +\infty$):

$$b_N(t) = (-1)^N \frac{2i^{N+1}}{\alpha t} \left(N J_N(\alpha t) + (N+2) J_{N+2}(\alpha t)\right)$$

$$+\frac{5}{2}\theta_0 \left(\frac{1}{(N+1)^2} + \frac{\alpha t}{(N+1)^3} + \frac{(\alpha t)^2}{(N+1)^4}\right), \quad |\theta_0| \leq 1,$$

которое справедливо для любого t из интервала $0 < t \leq N/\alpha$. В частности,

$$b_N(N/\alpha) = (-1)^N i^{N+1} \left(\frac{2^{4/3}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}{3^{1/6}\pi N^{1/3}} - \frac{2^{5/3}3^{1/6}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}{\pi N^{2/3}}\right) + o\left(\frac{1}{N^{2/3}}\right).$$

Поскольку сумма (16) воспроизводит поведение функции $b_N(\alpha t)$ в интересующей нас области хорошо даже при $k = 1$, воспользуемся этой аппроксимацией, чтобы найти положение первого максимума квадрата модуля этой функции, который даёт время инверсии. Этот максимум соответствует первому нулю функции $d/d\tau \left(b_N^{(1)}(\alpha t) \right)$, и задаётся уравнением $(\tau = \alpha t)$

$$0 = \frac{d}{d\tau} \left(N \frac{J_N(\tau)}{\tau} + (N+2) \frac{J_{N+2}(\tau)}{\tau} \right)$$

$$= \frac{d}{d\tau} \left(\frac{2N(N+1)}{\tau} J_{N+1}(\tau) + 2J_{N+2}(\tau) \right)$$

и поскольку (см., например, [6])

$$\frac{d}{d\tau}J_{N+2}(\tau) = J_{N+1}(\tau) - \frac{N+2}{\tau}J_{N+2}(\tau),$$

$$J_{N+2}(\tau) = -\frac{d}{d\tau}J_{N+1}(\tau) + \frac{N+1}{\tau}J_{N+1}(\tau),$$

мы в итоге получаем

$$0 = \frac{d\,J_{N+1}(\tau)}{d\tau} - \frac{J_{N+1}(\tau)}{\tau}\left(\frac{2N(N+1)+(N+3)(N+1)-\tau^2}{N^2+2N+3}\right)$$

что легко проверяется. Разлагая $d/d\tau\,(J_{N+1})$ в окрестности первого нуля (см. [7]), непосредственный расчёт приводит к результату

$$\bar{\tau} = N + 1 + 0.8N^{1/3} - 1.16N^{-1/3} + O\left(N^{-2/3}\right).$$

- D. Gatteschi, R. Sessoli, and J. Villain, *Molecular Nanomagnets* (Oxford University Press, New York, 2006).
- L. Cianchi, M. Mancini, P. Moretti, and G. Spina, Rep. Prog. Phys. **49**, 1243 (1986).
- P. Moretti , M. Lantieri, and L. Cianchi , J. Math. Phys. **45**, 107 (2004).
- Karatsuba E.A., Moretti P. Inversion time of large spins. *J. of Math. Phys.*, **46:4**, 042101-1–042101-7 (2005).
- E.A. Karatsuba. On the computation of the Euler constant γ. J. of Numerical Algorithms **24:1-2**, 83 (2000).
- Дж.Н. Ватсон,Теория бесселевых функций.(М.:ИЛ, 1949).
- *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовиц, И. Стиган (Наука, 1979).
- Е.А. Карацуба, П. Моретти. Вероятность инверсии большого спина в форме асимптотического разложения в ряд функций Бесселя. На рецензии в журнале (2018).