

УДК 621.391.1 : 519.651 : 519.688

© 2019 г. Е.А. Карацуба¹, П. Моретти**ВЕРОЯТНОСТЬ ИНВЕРСИИ БОЛЬШОГО СПИНА В ВИДЕ АСИМПТОТИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ В РЯД ФУНКЦИЙ БЕССЕЛЯ**

Точное выражение для вероятности инверсии большого спина устанавливается в виде асимптотического разложения в ряды функций Бесселя с порядками, принадлежащими арифметической прогрессии. На основе нового асимптотического разложения выведена формула для времени инверсии спина.

DOI: 10.1134/S0134347519010030

§ 1. Введение

Магнитные материалы снова вызывают большой интерес, что обусловлено недавним синтезом молекул с большим магнитным моментом, так называемых магнитных молекулярных кластеров. Когда они расположены в кристаллической решетке, магнитные моменты взаимодействуют очень слабо, так как взаимное расстояние велико; однако может происходить магнитное упорядочение, поскольку высокая магнитная анизотропия таких кластеров допускает параллельную ориентацию осей анизотропии. Потенциальное применение магнитных кластеров в устройствах с высокой плотностью хранения было основным стимулом исследований в этой области [1]. Недостатком же такого применения является мобильность спинов – могут возникнуть неконтролируемые спиновые инверсии, разрушающие любой магнитный порядок. Поэтому необходимо понять микромеханизмы, на которых основаны такие взаимодействия, чтобы их эффекты могли быть устранены или уменьшены; таким образом, динамика спина играет очень важную роль в изучении молекулярных магнитных кластеров. В частном случае кластеров железа, если используется мёсбауэровская спектроскопия, время инверсии спина является одним из наиболее важных параметров в структуре экспериментальных данных [2].

В наглядном, интуитивном описании, когда общий электронный спин соседей из ближайшего окружения переворачивается, магнитное поле на ядрах железа также меняется. Тем самым, уровни ядерной энергии модифицируются, и проявляется присутствие мёсбауэровского релаксационного спектра со структурой, зависящей от частоты инверсии [3], а следовательно, можно получить информацию о структуре спиновых состояний и спиновой динамике.

Динамика спина изучается на основе непосредственного применения уравнения Шрёдингера. Рассматривается полный спин S под действием статического магнитного поля. Кроме того, существует недиагональная часть взаимодействия, которая вызывает переходы между соседними спиновыми состояниями. Это, очевидно, упрощенная ситуация, в некоторых случаях описывающая реальную физическую систему, как показано в [4].

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований – Российских железных дорог (номер проекта 17-20-02222) и Российского фонда фундаментальных исследований (номер проекта 19-07-00750).

В [4] коэффициент $|b_n(t)|^2$, который определяется как вероятность найти систему в n -м спиновом состоянии, был вычислен и оказался некоторой сложной тригонометрической суммой. Примерное выражение для $b_n(t)$ через соответствующие функции Бесселя было получено только при условии, что $n \ll N$, $\alpha t \ll N$ (N – общее число спиновых состояний, α – размерный параметр недиагонального взаимодействия, который далее будет определен явно), поскольку только в этом случае можно обоснованно заменить тригонометрическую сумму по всем спиновым состояниям соответствующим интегралом. Используя эвристические рассуждения, можно предположить, что это соотношение справедливо 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 важности установления момента времени инверсии, связывающего теорию с экспериментальными данными, нужны были более точные и обоснованные вычисления на основе строгого подхода, предложенного в [4]. Они были проведены в [5].

Настоящая статья продолжает работу [5], 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 .

Мы получим новые асимптотические разложения для функции $b_N(t)$, которые позволят вычислить $b_N(t)$ с растущей точностью (см. рис. 2, 4, 5 в §3).

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

§ 2. Постановка задачи

Гамильтониан нашей системы, который включает полный спин S , имеет вид $H = H_0 + V$, где H_0 – статический гамильтониан (т.е. магнитное поле), а V – член, отвечающий 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 в виде

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

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

$$i\hbar \dot{a}_n(t) = \sum_{\ell=1}^N a_\ell(t) V_{n\ell} \exp(i\omega_{n\ell} t), \quad \omega_{n\ell} = \frac{E_n - E_\ell}{\hbar}.$$

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

Начальными условиями, представляющими интерес, являются следующие:

$$\begin{aligned} a_1(0) &= 1, \\ a_n(0) &= 0, \quad n = 2, 3, \dots, N, \end{aligned}$$

что соответствует состоянию “спин вверх” (или “спин вниз”). Подстановка

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

приводит к системе уравнений, которая может быть решена преобразованием Лапласа. Если рассмотреть $n = N$, т.е. именно амплитуду вероятности инверсии спина,

можно получить следующий результат (см. [4]):

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

где

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

Это уравнение получается в пределе $\omega \rightarrow 0$ и не зависит от ω . Может быть выполнен подробный расчет до первого порядка по ω (см. [4]), 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 не чувствительно к его варьированию.

§ 3. Асимптотическое разложение b_N

Цель настоящей статьи – изучить функцию $b_N(t)$ при $N \geq 2$.

В [5] доказана следующая

Теорема. Для $b_N(t)$ справедлива формула

$$b_N(t) = (-1)^N \frac{2}{\alpha t} \sum_{\nu=1}^{+\infty} i^{(N+1)(2\nu-1)} \left\{ [(N+1)(2\nu-1) - 1] J_{(N+1)(2\nu-1)-1}(\alpha t) + \right. \\ \left. + [(N+1)(2\nu-1) + 1] J_{(N+1)(2\nu-1)+1}(\alpha t) \right\}, \quad N \geq 2. \quad (3)$$

Доказательство теоремы основано на трех леммах.

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

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

где

$$S_1 = \sum_{j=1}^{N+1} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2j-1}{N+1} + \beta \cos \frac{(2j-1)\pi}{N+1} \right) \right], \\ S_2 = \sum_{j=1}^{N+1} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2j}{N+1} + \beta \cos \frac{2j\pi}{N+1} \right) \right], \\ S_3 = \sum_{j=1}^{N+1} \exp \left[2\pi i \beta \cos \frac{(2j-1)\pi}{N+1} \right], \quad S_4 = \sum_{j=1}^{N+1} \exp \left(2\pi i \beta \cos \frac{2j\pi}{N+1} \right).$$

Доказательство. Для доказательства леммы (подробнее см. в [5]) воспользуемся 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 $2(N+1)$:

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

и следовательно,

$$\begin{aligned} b_N(t) &= \frac{(-1)^N}{2(N+1)} \sum_{s=1}^{2(N+1)} (-1)^{s+1} \left\{ \exp \left[2\pi i \left(\frac{s}{N+1} + \beta \cos \frac{s\pi}{N+1} \right) \right] - \right. \\ & \left. - \exp \left[2\pi i \beta \cos \frac{s\pi}{N+1} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Затем сумма в (4) представляется в виде суммы двух сумм, одна по нечетным $s = 2j-1$, $j = 1, 2, 3, \dots, N+1$, другая по четным $s = 2j$, $j = 1, 2, 3, \dots, N+1$, и отсюда получаем утверждение леммы. ▲

Один из множителей в (1)

$$f(x) = e^{2\pi i \beta \cos 2\pi x} \quad (5)$$

является периодической функцией с периодом 1. Представим $f(x)$ в виде ряда Фурье

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c(k) e^{2\pi i k x} \quad (6)$$

с коэффициентами

$$c(k) = \int_0^1 f(x) e^{-2\pi i k x} dx = 2 \int_0^{\frac{1}{2}} e^{2\pi i \beta \cos 2\pi x} \cos 2\pi k x dx. \quad (7)$$

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

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

и в частности, ряд Фурье (6) для функции $f(x)$ сходится абсолютно.

Доказательство. Поскольку из (7) следует $c(k) = c(-k)$, при $k \neq 0$ находим

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

т.е.

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

Оценивая на основе (5) вторую производную функции $f(x)$ как $|f''(x)| \leq (2\pi)^4 \beta^2 + (2\pi)^3 |\beta|$, получаем отсюда утверждение леммы. ▲

Лемма 3. Предположим, что M и m – целые числа, $M > 1$, $0 \leq m \leq M$, а суммы A и B определяются равенствами

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

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

Тогда справедливы соотношения

$$A = M \sum_{r=-\infty}^{+\infty} (-1)^r c(rM - m), \quad (8)$$

$$B = M \sum_{r=-\infty}^{+\infty} c(rM - m), \quad (9)$$

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

Доказательство. Представляя множитель $e^{2\pi i \beta \cos 2\pi x}$ каждого слагаемого сумм A и B в виде ряда Фурье, находим

$$\begin{aligned} A &= \sum_{j=1}^M \exp \left[2\pi i \frac{m}{M} \left(j - \frac{1}{2} \right) \right] \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c(k) \exp \left(2\pi i \frac{j - \frac{1}{2}}{M} k \right) = \\ &= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c(k) \sum_{j=1}^M \exp \left[2\pi i \frac{m+k}{M} \left(j - \frac{1}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} B &= \sum_{j=1}^M \exp \left(2\pi i \frac{m}{M} j \right) \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c(k) \exp \left(2\pi i \frac{j}{M} k \right) = \\ &= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c(k) \sum_{j=1}^M \exp \left(2\pi i \frac{m+k}{M} j \right). \end{aligned} \quad (11)$$

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 (10) и (11) получаем, соответственно, формулы (8) и (9). \blacktriangle

Следствие. Из лемм 1 и 3 получаем

$$\begin{aligned} b_N(t) &= (-1)^{N+1} \sum_{\nu=1}^{+\infty} \left\{ c[(N+1)(2\nu-1)-2] + c[(N+1)(2\nu-1)+2] - \right. \\ &\quad \left. - 2c[(N+1)(2\nu-1)] \right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

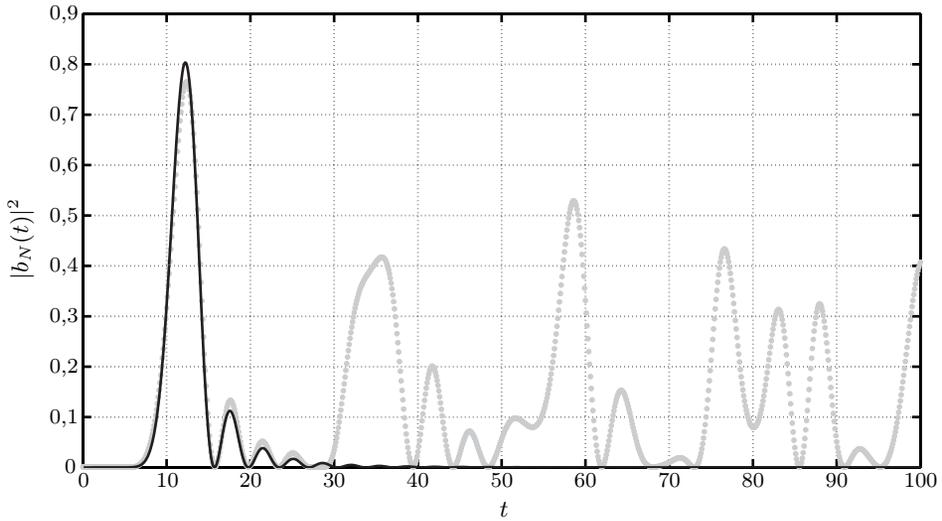


Рис. 1. Два графика вместе: значение $|b_N(t)|^2$ ($N = 10$, $\alpha = 1$), определяемое (1), – линия из серых звездочек, а определяемое приближением (14) – непрерывная линия; $k = 1$

Доказательство теоремы. Сделав в (7) (подробнее см. в [5]) замену переменной интегрирования $y = 2\pi x$, $\varphi = y - \frac{\pi}{2}$, 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

$$J_k(\alpha t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(k\varphi - \alpha t \sin \varphi)} \, d\varphi \quad (13)$$

представляет собой функцию Бесселя k -го порядка; пользуясь известными рекуррентными формулами [6], представим ряд (12) в виде (3). ▲

Замечание. Поскольку функция $J_\nu(\alpha t)$ убывает экспоненциально при возрастании ν , а суммирование в (3) идет по ν , принадлежащим арифметической прогрессии с разностью $2(N+1)$, то уже первые слагаемые суммы (3) обеспечивают хорошее приближение к $b_N(t)$.

Пусть $k \geq 1$, и

$$b_N^{(k)}(t) = (-1)^N \frac{2}{\alpha t} \sum_{\nu=1}^k i^{(N+1)(2\nu-1)} \left\{ [(N+1)(2\nu-1) - 1] J_{(N+1)(2\nu-1)-1}(\alpha t) + [(N+1)(2\nu-1) + 1] J_{(N+1)(2\nu-1)+1}(\alpha t) \right\}, \quad N \geq 2. \quad (14)$$

Заметим сразу, что даже останавливаясь на $k = 1$, получаем весьма удовлетворительный до первого максимума результат, и выражение, используемое в [4], с одной функцией Бесселя значительно улучшено. Это продемонстрировано на рис. 1–3 для типичных значений $N = 10, 15, 20$ соответственно.

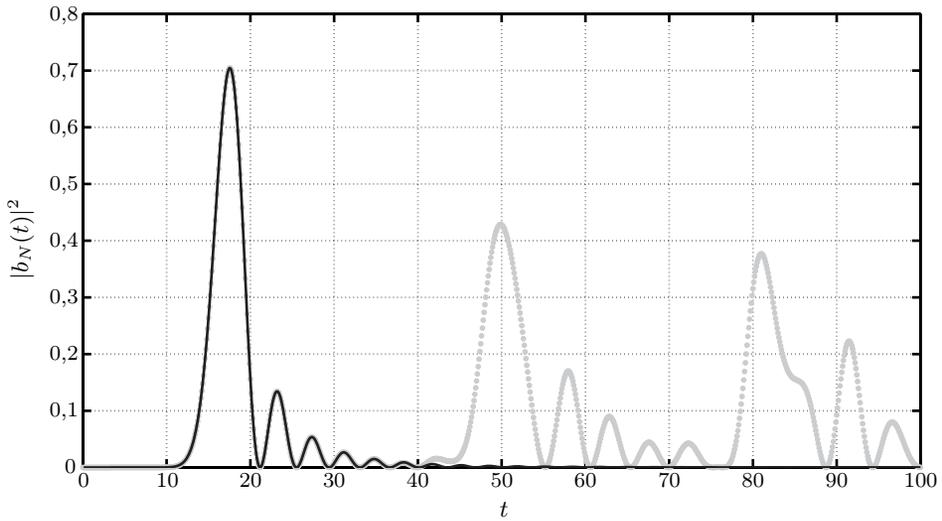


Рис. 2. Два графика вместе: значение $|b_N(t)|^2$ ($N = 15$, $\alpha = 1$), определяемое (1), – линия из серых звездочек, а определяемое приближением (14) – непрерывная линия; $k = 1$

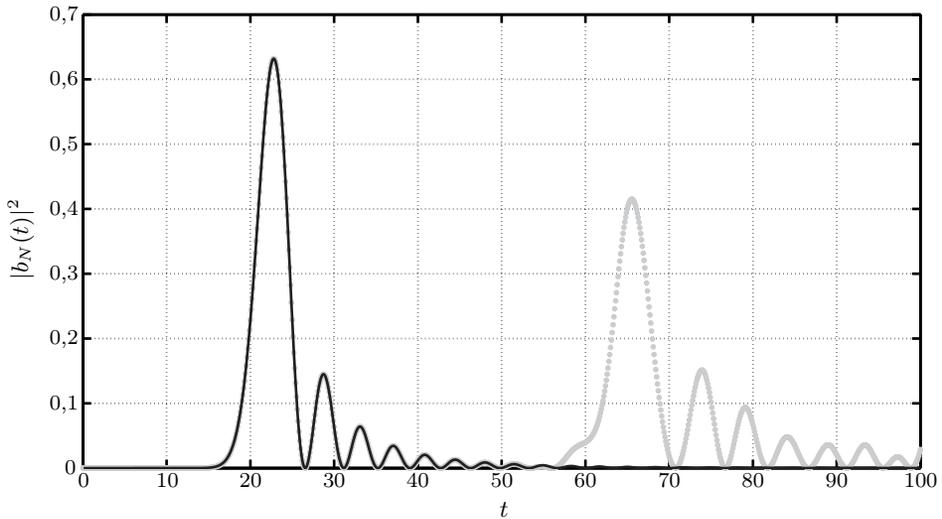


Рис. 3. Два графика вместе: значение $|b_N(t)|^2$ ($N = 20$, $\alpha = 1$), определяемое (1), – линия из серых звездочек, а определяемое приближением (14) – непрерывная линия; $k = 1$

Новое асимптотическое выражение (3) дает возможность легко вычислить амплитуду вероятности с использованием встроенных в компьютерные пакеты программ (Matlab) функций Бесселя (см. рис. 1–5). Однако чтобы увидеть, как ведет себя функция $b_N(t)$ на разных временных интервалах, $N \geq 2$, $N \rightarrow +\infty$, нам нужно построить аппроксимации этой функции для разных t , используя соответствующие приближения функций Бесселя.

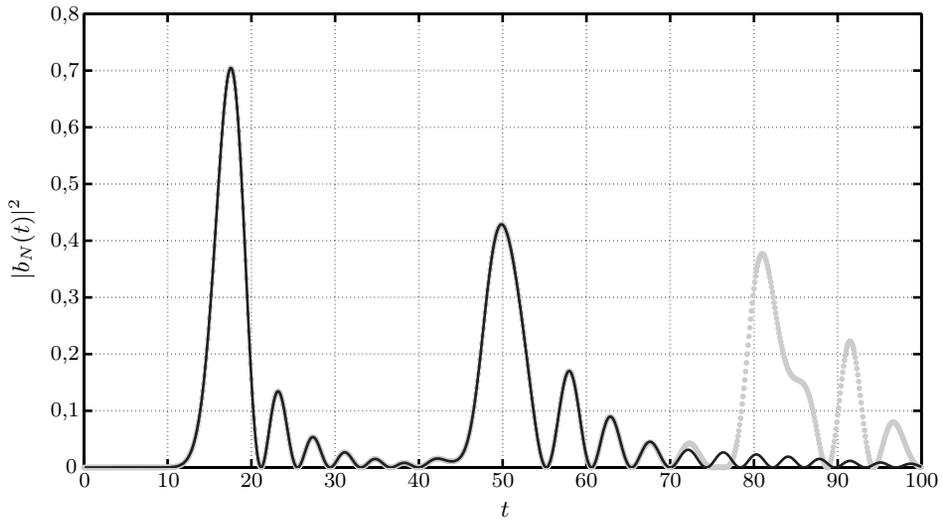


Рис. 4. Два графика вместе: значение $|b_N(t)|^2$ ($N = 15$, $\alpha = 1$), определяемое (1), – линия из серых звездочек, а определяемое приближением (14) – непрерывная линия; $k = 2$

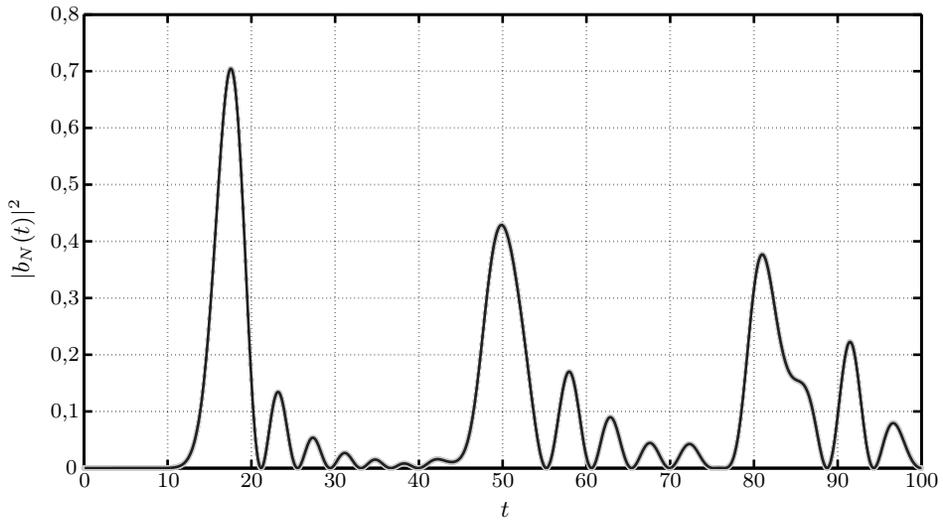


Рис. 5. Два графика вместе: значение $|b_N(t)|^2$ ($N = 15$, $\alpha = 1$), определяемое (1), – линия из серых звездочек, а определяемое приближением (14) – непрерывная линия; $k = 3$

§ 4. Аппроксимация функции амплитуды вероятности для фиксированного времени

Пусть $at = x$. Без потери общности далее для простоты предполагаем, что

$$\left(\frac{x}{2}\right)^2 < 1. \tag{15}$$

Сначала оценим остаточные суммы ($N \geq 2$):

$$\begin{aligned} S_1^{(k)}(x) &= \sum_{\nu=k+1}^{+\infty} i^{(N+1)(2\nu-1)} [(N+1)(2\nu-1) - 1] J_{(N+1)(2\nu-1)-1}(x) = \\ &= \sum_{\nu=k}^{+\infty} i^{(N+1)(2\nu+1)} ((2\nu+1)N + 2\nu) J_{(2\nu+1)N+2\nu}(x), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} S_2^{(k)}(x) &= \sum_{\nu=k+1}^{+\infty} i^{(N+1)(2\nu-1)} [(N+1)(2\nu-1) + 1] J_{(N+1)(2\nu-1)+1}(\alpha x) = \\ &= \sum_{\nu=k}^{+\infty} i^{(N+1)(2\nu+1)} ((2\nu+1)N + 2\nu + 2) J_{(2\nu+1)N+2\nu+2}(x). \end{aligned} \quad (17)$$

Учитывая (см. [6]), что $J_n(x) = \theta_0 \left(\frac{x}{2}\right)^n \frac{1}{n!}$, $|\theta_0| \leq 1$, из (16) имеем

$$\begin{aligned} S_1^{(k)}(x) &= i^{(N+1)(2k+1)} ((2k+1)N + 2k) J_{(2k+1)N+2k}(x) \times \\ &\times \left(1 + \tilde{\theta}_1 \left(\frac{x}{2}\right)^{2N+2} \frac{((2k+1)N + 2k - 1)!}{((2k+3)N + 2k + 1)!} + \tilde{\theta}_2 \left(\frac{x}{2}\right)^{4N+4} \times \right. \\ &\times \left. \frac{((2k+1)N + 2k - 1)!}{((2k+5)N + 2k + 3)!} + \dots \right) = i^{(N+1)(2k+1)} ((2k+1)N + 2k) \times \\ &\times J_{(2k+1)N+2k}(x) \left(1 + \theta_1 \left(\frac{x}{2}\right)^{2N+2} \sum_{r=1}^{+\infty} \frac{((2k+1)N + 2k - 1)!}{((2k+2r+1)N + 2k + 2r - 1)!} \right) = \\ &= i^{(N+1)(2k+1)} ((2k+1)N + 2k) J_{(2k+1)N+2k}(x) \left(1 + \left(\frac{x}{2}\right)^{2N+2} \times \right. \\ &\times \left. \frac{\theta_2}{((2k+1)N + 2k)^{2N+1}} \right) = i^{(N+1)(2k+1)} ((2k+1)N + 2k) J_{(2k+1)N+2k}(x) + \\ &+ \frac{\theta_3}{((2k+1)N + 2k)^{2N}}, \quad |\tilde{\theta}_1| \leq 1, \quad |\tilde{\theta}_2| \leq 1, \quad |\theta_1| \leq 1, \quad |\theta_2| \leq 1, \quad |\theta_3| \leq 1. \end{aligned} \quad (18)$$

Аналогично

$$\begin{aligned} S_2^{(k)}(x) &= i^{(N+1)(2k+1)} ((2k+1)N + 2k + 2) J_{(2k+1)N+2k+2}(x) + \\ &+ \frac{\theta_4}{((2k+1)N + 2k + 2)^{2N}}, \quad |\theta_4| \leq 1. \end{aligned} \quad (19)$$

С другой стороны, можно вывести аппроксимационную формулу для функции Бесселя $J_n(x)$ большого целого порядка n , $n \rightarrow +\infty$, для фиксированных значений аргумента x . Имеем (см. [6])

$$\begin{aligned} J_n(x) &= \left(\frac{x}{2}\right)^n \frac{1}{n!} \left(1 - \left(\frac{x}{2}\right)^2 \frac{1}{1!(n+1)} + \left(\frac{x}{2}\right)^4 \frac{1}{2!(n+1)(n+2)} - \dots \right) = \\ &= \left(\frac{x}{2}\right)^n \frac{1}{n!} \left(1 - \left(\frac{x}{2}\right)^2 \frac{1}{1!(n+1)} + \left(\frac{x}{2}\right)^4 \frac{\theta_5}{2!(n+1)(n+2)} \right), \quad |\theta_5| \leq 1. \end{aligned} \quad (20)$$

Прологарифмируем (20):

$$\ln J_n(x) = n \ln \frac{x}{2} - \ln n - \ln \Gamma(n) - \left(\frac{x}{2}\right)^2 \frac{1}{n+1} + \left(\frac{x}{2}\right)^4 \frac{\theta_6}{(n+1)^2}, \quad |\theta_6| \leq 1,5. \quad (21)$$

Воспользуемся следующим известным выражением для функции $\ln \Gamma(x)$ (см. [7, 8]):

$$\ln \Gamma(x) = \left(x - \frac{1}{2}\right) \ln x - x + \ln \sqrt{2\pi} + I(x),$$

где

$$I(x) = \frac{1}{12x} - \frac{1}{2\pi^2} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{I_0(x, j)}{j^2}, \quad I_0(x, j) = \int_0^{\infty} \frac{\cos 2\pi ju \, du}{(u+x)^2},$$

откуда

$$I(x) = \frac{1}{12x} - \frac{1}{360x^3} + R(x), \quad 0 < R(x) < \frac{1}{1260x^5},$$

и

$$\begin{aligned} \ln \Gamma(n) &= \left(n - \frac{1}{2}\right) \ln n - n + \ln \sqrt{2\pi} + \frac{1}{12n} - \frac{1}{360n^3} + R(n), \\ 0 < R(n) &< \frac{1}{1260n^5}. \end{aligned} \quad (22)$$

Из (21), (22) находим

$$\begin{aligned} \ln J_n(x) &= -\left(n + \frac{1}{2}\right) \ln n + \left(1 + \ln \frac{x}{2}\right) n - \ln \sqrt{2\pi} - \frac{1}{12n} - \\ &- \left(\frac{x}{2}\right)^2 \frac{1}{n+1} + \frac{\theta_7}{n^2}, \quad |\theta_7| \leq 1,5. \end{aligned}$$

Отсюда получаем асимптотическое выражение ($n \rightarrow +\infty$)

$$J_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} n^{-(n+\frac{1}{2})} \left(\frac{ex}{2}\right)^n e^{-\frac{1}{n}\left(\frac{1}{12} + \left(\frac{x}{2}\right)^2 - \frac{\theta_7}{n}\right)}, \quad |\theta_7| \leq 1,5.$$

Таким образом, имеем следующее приближение бесселевой функции $J_n(x)$ большого целого порядка $n \rightarrow +\infty$ и фиксированного аргумента $x \leq 2$:

$$J_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} \left(\frac{ex}{2n}\right)^n \left(1 - \frac{1}{n} \left(\frac{1}{12} + \left(\frac{x}{2}\right)^2\right) + \frac{\theta_8}{n^2}\right), \quad |\theta_8| \leq 2. \quad (23)$$

Для функции $b_N(t)$ при $t < 2/\alpha$ из (23), (15)–(19) и (14) находим

$$\begin{aligned} b_N(t) &= \frac{2i^{N+1}}{\alpha t} \left(N J_N(\alpha t) + (N+2) J_{N+2}(\alpha t) + S_1^{(0)}(\alpha t) + S_2^{(0)}(\alpha t)\right) = \\ &= i^{N+1} \sqrt{\frac{2N}{\pi}} \left(\frac{e}{2N}\right)^N (\alpha t)^{N-1} \left(1 - \frac{\theta_0}{N^2}\right), \quad |\theta_0| \leq 2, \quad N \geq 2. \end{aligned} \quad (24)$$

§ 5. Приближение функции амплитуды вероятности для растущего времени

Перепишем интеграл (13) в виде

$$J_k(\alpha t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{iF_k(\varphi)} d\varphi, \quad F_k(\varphi) = k\varphi - \alpha t \sin \varphi. \quad (25)$$

Отсюда

$$F'_k(\varphi) = k - \alpha t \cos \varphi. \quad (26)$$

Пусть $k > \alpha t$. Тогда $F'_k(\varphi) > 0$. Из (25), (26) находим

$$\begin{aligned} J_k(\alpha t) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{de^{i(k\varphi - \alpha t \sin \varphi)}}{i(k - \alpha t \cos \varphi)} = -\frac{\alpha t}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\sin \varphi de^{i(k\varphi - \alpha t \sin \varphi)}}{(k - \alpha t \cos \varphi)^3} = \\ &= \frac{\alpha t}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(k\varphi - \alpha t \sin \varphi)} \left(\frac{\cos \varphi}{(k - \alpha t \cos \varphi)^3} - \frac{3\alpha t \sin^2 \varphi}{(k - \alpha t \cos \varphi)^4} \right) d\varphi. \end{aligned}$$

Так как модуль интеграла не превосходит интеграла от модуля подынтегрального выражения, то из последнего выражения имеем

$$|J_k(\alpha t)| \leq \alpha t \left(\frac{1}{(k - \alpha t)^3} + \frac{3\alpha t}{(k - \alpha t)^4} \right),$$

и для произведения $kJ_k(\alpha t)$ справедливо неравенство

$$|kJ_k(\alpha t)| \leq \frac{\alpha t}{(k - \alpha t)^2} + \frac{4(\alpha t)^2}{(k - \alpha t)^3} + \frac{3(\alpha t)^3}{(k - \alpha t)^4}. \quad (27)$$

Выделяя первое слагаемое суммы (3), представим ее в виде

$$b_N(t) = (-1)^N \frac{2i^{N+1}}{\alpha t} (NJ_N(\alpha t) + (N+2)J_{N+2}(\alpha t) + S), \quad (28)$$

где

$$\begin{aligned} S &= \sum_{\nu=2}^{+\infty} i^{2(N+1)(\nu-1)} \left(((N+1)(2\nu-1)-1) J_{(N+1)(2\nu-1)-1}(\alpha t) + \right. \\ &\left. + ((N+1)(2\nu-1)+1) J_{(N+1)(2\nu-1)+1}(\alpha t) \right), \quad N \geq 2. \end{aligned} \quad (29)$$

Если $0 < \alpha t \leq N$, то из (29) и (27) получаем

$$\begin{aligned} |S| &\leq \sum_{\nu=2}^{+\infty} \left(\frac{2\alpha t}{(2(N+1))^2(\nu-1)^2} + \frac{8(\alpha t)^2}{(2(N+1))^3(\nu-1)^3} + \right. \\ &\left. + \frac{6(\alpha t)^3}{(2(N+1))^4(\nu-1)^4} \right) \leq \frac{\alpha t}{2(N+1)^2} \zeta(2) + \frac{(\alpha t)^2}{(N+1)^3} \zeta(3) + \frac{3(\alpha t)^3}{8(N+1)^4} \zeta(4), \end{aligned} \quad (30)$$

где $\zeta(\mu)$ – дзета-функция Римана (см., например, [9]), для значений которой справедливы неравенства $\frac{\pi^2}{6} = \zeta(2) > \zeta(3) > \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$. Отсюда и из (30) имеем

$$S = \frac{5}{4} \theta_0 \left(\frac{\alpha t}{(N+1)^2} + \frac{(\alpha t)^2}{(N+1)^3} + \frac{(\alpha t)^3}{(N+1)^4} \right), \quad |\theta_0| \leq 1. \quad (31)$$

Из (28)–(31) получаем следующее асимптотическое выражение ($N \geq 2$, $N \rightarrow +\infty$):

$$b_N(t) = (-1)^N \frac{2i^{N+1}}{\alpha t} (NJ_N(\alpha t) + (N+2)J_{N+2}(\alpha t)) + \frac{5}{2}\theta_0 \left(\frac{1}{(N+1)^2} + \frac{\alpha t}{(N+1)^3} + \frac{(\alpha t)^2}{(N+1)^4} \right), \quad |\theta_0| \leq 1. \quad (32)$$

Соотношение (32) справедливо для любого t из интервала $0 < t \leq N/\alpha$. Если $t < N/\alpha$ строго, то для оценки первых двух слагаемых суммы (32) также можно использовать оценку (27). Следовательно, для $0 < t < N/\alpha$ имеем

$$b_N(t) = 4\theta_1 \left(\frac{1}{(N-\alpha t)^2} + \frac{4\alpha t}{(N-\alpha t)^3} + \frac{3(\alpha t)^2}{(N-\alpha t)^4} \right) + \frac{5}{2}\theta_0 \left(\frac{1}{(N+1)^2} + \frac{\alpha t}{(N+1)^3} + \frac{(\alpha t)^2}{(N+1)^4} \right), \quad |\theta_0| \leq 1, \quad |\theta_1| \leq 1.$$

При $t = N/\alpha$ из уравнения (25) следует, что $F'_N(0) = 0$. В этом случае, воспользовавшись известными (см. [6, 9]) рекуррентными соотношениями для функций Бесселя

$$J_{N+2}(N) = \frac{2(N+1)}{N} J_{N+1}(N) - J_N(N), \quad (33)$$

$$J_{N+1}(N) = J_N(N) - J'_N(N), \quad (34)$$

из (32) находим

$$b_N(N/\alpha) = (-1)^N i^{N+1} 4 \left(\left(1 + \frac{2}{N} + \frac{2}{N^2}\right) J_N(N) - \left(1 + \frac{1}{N}\right) \left(1 + \frac{2}{N}\right) \times \right. \\ \left. \times J'_N(N) \right) + \frac{5}{2}\tilde{\theta}_0 \left(\frac{3}{(N+1)^2} - \frac{3}{(N+1)^3} + \frac{1}{(N+1)^4} \right) = (-1)^N i^{N+1} \times \\ \times 4 \left(J_N(N) - J'_N(N) + \frac{2}{N} J_N(N) + \frac{2}{N^2} J_N(N) - \frac{3}{N} J'_N(N) - \frac{2}{N^2} J'_N(N) \right) + \\ + \frac{15}{2} \frac{\tilde{\theta}_1}{N^2}, \quad |\tilde{\theta}_0| \leq 1, \quad |\tilde{\theta}_1| \leq 1. \quad (35)$$

Чтобы получить асимптотику для $b_N(N/\alpha)$, нужно подставить в (35) асимптотические выражения для $J_N(N)$ и $J'_N(N)$ (см., например, [6]). Имеем (используя o -символику Ландау)

$$b_N(N/\alpha) = (-1)^N i^{N+1} \left(\frac{2^{4/3}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}{3^{1/6}\pi N^{1/3}} - \frac{2^{5/3}3^{1/6}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}{\pi N^{2/3}} \right) + o\left(\frac{1}{N^{2/3}}\right). \quad (36)$$

Здесь $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ – гамма-функция Эйлера (см., например, [8, 9]), и кроме того,

$$\frac{2^{4/3}\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}{3^{1/6}\pi} < 1,8; \quad \frac{2^{5/3}3^{1/6}\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}{\pi} < 1,6.$$

Пусть теперь $\alpha t > N$. Рассмотрим снова ряд (3) бesselевых функций (13), которые можно записать для удобства в виде

$$J_k(\alpha t) = \frac{1}{\pi} Re \int_0^\pi e^{i(k\varphi - \alpha t \sin \varphi)} d\varphi = \frac{1}{\pi} Re \int_0^\pi e^{iF_k(\varphi)} d\varphi, \quad (37)$$

$$k = (N+1)(2\nu-1) \mp 1, \quad \nu = 1, 2, 3, \dots$$

При $\alpha t > N$ уравнение

$$F'_k(\varphi) = 0: \quad k - \alpha t \cos \varphi = 0 \quad (38)$$

имеет решения. Если назвать интеграл $J_k(\alpha t)$, в который входит функция $F_k(\varphi)$, имеющая свойство (38), “специальным”, то в (3) эти “специальные” интегралы появляются в следующем порядке:

- при $N \leq \alpha t < N + 2$ “специальным” интегралом будет $J_N(\alpha t)$;
- при $N + 2 \leq \alpha t < 3(N + 1) - 1$ “специальными” интегралами будут $J_N(\alpha t)$, $J_{N+2}(\alpha t)$;
- при $3(N + 1) - 1 \leq \alpha t < 3(N + 1) + 1$ “специальными” интегралами будут $J_N(\alpha t)$, $J_{N+2}(\alpha t)$, $J_{3(N+1)-1}(\alpha t)$;
- \vdots
- при $(2\nu - 1)(N + 1) - 1 \leq \alpha t < (2\nu - 1)(N + 1) + 1$ “специальными” интегралами будут $J_N(\alpha t)$, $J_{N+2}(\alpha t)$, \dots , $J_{(2\nu-1)(N+1)-1}(\alpha t)$.

Каждый из “специальных” интегралов оценивается тем же способом, что $J_N(N)$. “Близкий” интеграл, индекс которого отличается на 2 и который не является “специальным” интегралом, но “близок” к нему (как, скажем, $J_{N+2}(N)$ к $J_N(N)$) лучше оценивать аналогично “специальному” вместе с ним (как, например, мы делали, когда оценивали $J_{N+2}(N)$ через производную $J_N(N)$ – см. (33), (34)). Оценка остатка ряда (3), не содержащего “специальных” интегралов, проводится так же, как и раньше, для суммы S из (29). Пусть

$$\nu_1 = \left\lfloor \frac{\alpha t + N + 2}{2(N + 1)} \right\rfloor,$$

где $[\mu]$ – целая часть числа μ , тогда из (37), (38) ряд, который не содержит “специальных” интегралов (плюс, возможно, “близкого” к одному из “специальных” интегралов), содержит члены $k(\nu)J_{k(\nu)}(\alpha t)$ с $\nu = \nu_1 + 1 + \nu'$, $\nu' = 1, 2, 3, \dots$, для которых справедливы следующие условия:

$$F'_k(\varphi) \geq k - \alpha t \cos \varphi > 0, \quad k = (2\nu - 1)(N + 1) \mp 1. \quad (39)$$

Отсюда $F'_k(\varphi) > (N + 1)(2\nu' + 1)$, $\nu' = 1, 2, 3, \dots$, и сумма (29) оценивается следующим образом:

$$\begin{aligned} |S| &\leq \sum_{\nu=\nu_1+2}^{+\infty} |k(\nu)J_{k(\nu)}(\alpha t)| \leq \sum_{\nu'=1}^{+\infty} \left(\frac{\alpha t}{((N + 1)(2\nu' + 1))^2} + \right. \\ &+ \left. \frac{4(\alpha t)^2}{((N + 1)(2\nu' + 1))^3} + \frac{3(\alpha t)^3}{((N + 1)(2\nu' + 1))^4} \right) < \frac{\alpha t \zeta(2)}{(2(N + 1))^2} + \frac{4(\alpha t)^2 \zeta(3)}{(2(N + 1))^3} + \\ &+ \frac{3(\alpha t)^3 \zeta(4)}{(2(N + 1))^4} = \frac{3}{5} \check{\theta} \left(\frac{\alpha t}{(N + 1)^2} + \frac{(\alpha t)^2}{(N + 1)^3} + \frac{(\alpha t)^3}{(N + 1)^4} \right), \quad |\check{\theta}| \leq 1. \end{aligned} \quad (40)$$

Первые слагаемые – функции Бесселя можно оценить на основе асимптотических разложений функций Бесселя большого аргумента через суммы тригонометрических функций (см., например, [6, 9]).

§ 6. Вычисление времени инверсии

Поскольку сумма (14) в интересующей нас области воспроизводит поведение функции $b_N(\alpha t)$ хорошо даже при $k = 1$, воспользуемся этой аппроксимацией,

чтобы найти положение первого максимума квадрата модуля этой функции, который дает время инверсии. Этот максимум соответствует первому нулю функции $d/d\tau(b_N^{(1)}(\alpha t))$ и задается 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])

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

в итоге получаем

$$0 = \frac{dJ_{N+1}(\tau)}{d\tau} - \frac{J_{N+1}(\tau)}{\tau} \left(\frac{2N(N+1) + (N+3)(N+1) - \tau^2}{N^2 + 2N + 3} \right), \quad (41)$$

что легко проверяется. Разлагая $d/d\tau(J_{N+1})$ в окрестности первого нуля (см. [9]), непосредственными вычислениями приходим к результату

$$\bar{\tau} = N + 1 + 0,8N^{1/3} - 1,16N^{-1/3} + O(N^{-2/3}). \quad (42)$$

§ 7. Заключение

Разница между выражением (42) и значением, найденным в [4] для типичного значения $N \sim 10-20$, примечательна. Что касается кластера Fe_8 [10], то значение экспериментального параметра (k/D), где D является константой анизотропии, оказывается равной 0,22, что меньше значения 0,25, указанного в [4], и следовательно, ближе к найденному экспериментальному значению 0,16, подтверждая тем самым, что точное определение времени инверсии имеет фундаментальное значение для корреляции структуры мёсбауэровских спектров с параметрами спинового гамильтониана.

Мы хотели бы подчеркнуть, что в этой системе инверсия происходит с помощью прыжков между вырожденными низшими дублетами, и поэтому использование формул (1) и (42) вполне оправдано. Точная асимптотическая формула (42) была бы бесполезной при наличии неопределенной ошибки из-за большого значения ω .

Еще лучший результат расчета можно получить, заметив, что во многих случаях спиновые состояния вырождаются по энергии только в первом приближении. Как указано в [4], полное исследование с учетом разностей энергий приводит к преобразованию Лапласа многочленов Ломмеля, и работа идет в этом направлении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Gatteschi D., Sessoli R., Villain J.* Molecular Nanomagnets. Oxford: Oxford Univ. Press, 2006.
2. *Blume M., Tjon J.A.* Mössbauer Spectra in a Fluctuating Environment // Phys. Rev. 1968. V. 165. № 2. P. 446–456.
3. *Cianchi L., Mancini M., Moretti P., Spina G.* Mossbauer Spectra in Paramagnetic Relaxing Systems // Rep. Prog. Phys. 1986. V. 49. № 11. P. 1243–1291.
4. *Moretti P., Lantieri M., Cianchi L.* Quantum Study of the Spin Inversion // J. Math. Phys. 2004. V. 45. № 1. P. 107–113.
5. *Karatsuba E.A., Moretti P.* Inversion Time of Large Spins // J. Math. Phys. 2005. V. 46. № 4. P. 042101 (7 pp.).

6. *Ватсон Дж.Н.* Теория бесселевых функций. М.: Изд-во иностр. лит., 1949.
7. *Karatsuba E.A.* On the Computation of the Euler Constant γ // Numer. Algorithms. 2000. V. 24. № 1–2. P. 83–97.
8. *Karatsuba E.A.* On the Asymptotic Representation of the Euler Gamma Function by Ramanujan // J. Comput. Appl. Math. 2001. V. 135. № 2. P. 225–240.
9. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979.
10. *Cianchi L., Del Giallo F., Spina G., Reiff W., Caneschi A.* Spin Dynamics Study of Magnetic Molecular Clusters by Means of Mössbauer Spectroscopy // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. № 6. P. 064415.

Карацуба Екатерина Анатольевна
 Вычислительный центр им. А.А. Дородницына
 Федерального исследовательского центра
 “Информатика и управление” РАН
 karatsuba@mi.ras.ru, ekaratsuba@gmail.com
Моретти Паоло
 Национальный исследовательский совет Италии,
 Институт сложных систем, отдел Флоренции,
 Сесто-Фьорентино, Флоренция, Италия
 pmoretти56@gmail.com

Поступила в редакцию
 26.10.2018
 После доработки
 04.01.2019
 Принята к публикации
 09.01.2019