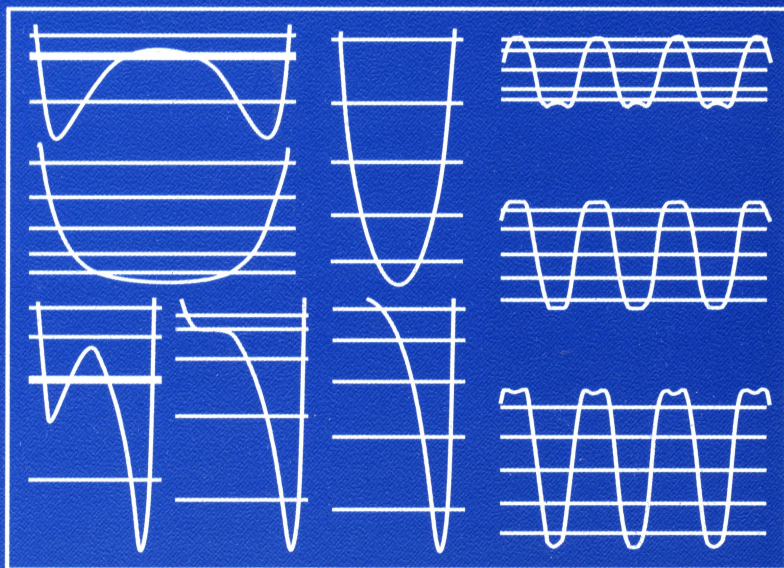


Министерство образования и науки Украины
ХАРЬКОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени В. Н. Каразина

*К 200-летию
Харьковского университета*

Ю. В. Василевская, В. В. Ульянов

Н О В Ы Е КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ СПИНОВЫХ СИСТЕМ



Харьков — 2005

К 60-летию кафедры теоретической физики

Ю.В.Василевская, В.В.Ульянов

**Н О В Ы Е
КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ
МОДЕЛИ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ
СПИНОВЫХ СИСТЕМ**

Харьков 2005

УДК 530.145
ББК 22.314
В 19

Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Новые квазиточнорешаемые модели в квантовой теории спиновых систем. - Х.: ХНУ им. В.Н.Каразина, 2005. - 124 с.

ISBN 966-623-212-X

Издается по решению кафедры теоретической физики
(протокол № 4 от 15 апреля 2004 года).

Рецензенты:

доктор физ.-мат. наук, профессор А.М.Ермолаев,
кандидат физ.-мат. наук, доцент Ю.П.Степановский

В монографии получены новые точные решения уравнения Шредингера, имеющие простые явные аналитические выражения для потенциальных полей, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний. Обсуждена общая роль точно- и квазиточнорешаемых потенциальных моделей спинowego и солитонного происхождения в квантовой теории. Подчеркнуто, что специфика новых моделей состоит прежде всего в разнообразии профилей потенциалов, а их отличительная особенность – физический смысл уже при своем появлении, поскольку они явились не плодом математических преобразований, а результатом исследования конкретных физических систем.

Для научных работников, преподавателей вузов, аспирантов и студентов старших курсов физических специальностей, а также для всех, кто интересуется квантовой теорией.

ISBN 966-623-212-X

© Харьковский национальный
университет им. В.Н.Каразина, 2005
© Ю.В.Василевская, В.В.Ульянов, 2005

ПРЕДИСЛОВИЕ

Начнем с простейших фактов и с перечисления обсуждаемых явлений.

А.Б.Мигдал

В квантовой теории проблема точных решений уравнения Шредингера для стационарных состояний частицы в потенциальном поле постоянно привлекает внимание специалистов. Точно решаемые задачи служат основой иллюстраций теории стационарных состояний в квантовой механике [1-3]. Кроме того, они являются фундаментом для постановки новых задач, важны как база приближенных методов.

Вообще, множество таких решений образует важный фонд квантовой механики, используемый как при изучении сложных явлений и при проверке новых теорий, так и имеющий самостоятельное значение.

Совершенно естественно, что обращение к вопросам точных решений вызывает постоянный интерес. Можно выделить три периода интенсивного появления новых точно решаемых моделей.

В середине и конце 1920-х годов появились первые точно решаемые модели с простыми выражениями для потенциалов, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний – гармонический осциллятор, кулоновское поле, потенциалы Морса, Эккарта, Пешля-Теллера, бесконечная прямоугольная яма, дельта-яма [1-7]. Затем наступило время различных обобщений, усложнений, композиций из разных моделей и т. п. [8-16]. Процесс поисков новых точно решаемых моделей продолжался, но его плоды оказывались либо слишком сложными, громоздкими, либо очень абстрактными.

Первый прорыв в область новых простых точно решаемых моделей обязан развитию теории солитонов [17-23]. Связь одномерного стационарного уравнения Шредингера с нелинейным эволюционным уравнением Кортевега-де Фриза в теории солитонов приводит к появлению разнообразных классов особых локализованных моделей потенциальных полей, у которых имеются простые явные

аналитические формулы для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний в квантовой механике. Существенно, что в отличие от других моделей с точными решениями в квантовой механике, для которых задается потенциал и решается уравнение Шредингера (задача о собственных значениях), в результате чего получаются уровни энергии, в моделях солитонного происхождения сразу же задаются уровни энергии и для каждого набора уровней существуют достаточно простые потенциалы с точными решениями. Другими словами, мы имеем дело с обратной задачей – задаются уровни энергии (произвольно расположенные!) и для них строятся потенциалы. Еще одной важной особенностью потенциалов солитонной природы является то, что для каждого набора уровней энергии находится не один фиксированный профиль потенциала, а *бесконечное многопараметрическое семейство* потенциальных моделей.

Другое направление связано с обнаружением новых классов точных решений на основе недавно разработанных методов в квантовой теории спиновых систем [24-28]. Так, при решении задачи о собственных значениях гамильтониана подобных спиновых систем оказывается [34], что энергетический спектр совпадает с некоторыми уровнями энергии частицы, движущейся в потенциальном поле определенного вида.

В данном случае мы имеем дело с методом эффективного поля, приводящего к переходу от дискретного пространства к координатному. Для ассоциированной координатной системы это дает методы нахождения новых точных решений уравнения Шредингера [26-28] с простыми явными аналитическими выражениями для потенциальных моделей, энергетических уровней и волновых функций стационарных состояний. При этом интерес представляют такие случаи, когда спин не очень велик, так что характеристические уравнения в спиновом пространстве имеют простые явные решения.

Число точных решений в рассматриваемых моделях оказывается конечным. Это свойство получило название "квазиточнорешаемости", а соответствующие принципиально новые объекты в квантовой механике получили название "квазиточнорешаемых" моделей [29-35].

При этом стационарные состояния с точными решениями относятся к нижней части энергетического спектра, начиная с основного уровня энергии. Такой подход при описании спиновых систем оказывается полезным при изучении физических свойств анизотропных парамагнетиков во внешнем магнитном поле (энергетического спектра, намагниченности, восприимчивости, спинового туннелирования) [24, 25, 28].

Появление новых квантовых задач с точными решениями, источником которых явились системы спиновой природы, существенно обогатило множество моделей потенциалов с простыми явными аналитическими формулами для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний в квантовой механике. Специфика новых моделей состоит прежде всего в *разнообразии профилей* потенциалов, а их отличительная особенность – физический смысл уже при своем появлении, поскольку они явились не плодом математических преобразований, а результатом исследования конкретных физических систем, в частности спиновых.

Очень важно иметь такой комплекс точных решений для методических иллюстраций, а также как базу проверки приближенных методов. Появляется наглядный способ демонстрации структуры спектра в случае потенциалов с экстремумами высокого порядка, попадания уровней в критический диапазон энергий вблизи максимумов потенциала, а также квантовых эффектов типа туннельного расщепления, формирования зонного спектра и т. п.

Нахождению новых точных решений уравнения Шредингера спинового происхождения, изучению физических свойств некоторых спиновых систем типа анизотропных парамагнетиков, а также исследованию точных решений солитоноподобных потенциалов и посвящена данная работа.

Насколько нам известно, в книгах по квантовой теории излагаемые вопросы не затрагивались.

Монография состоит из введения, трех разделов, разбитых на 11 подразделов, заключения, списка литературы и приложений.

Первый раздел "Проблема точных решений уравнения Шредингера", носящий *вводный характер*, посвящен обзору наиболее известных и простых точно решаемых моделей потенциалов с целью

их сопоставления в дальнейшем с рассмотренными в монографии моделями нового типа. Обсуждаются различные методы нахождения точных решений стационарного уравнения Шредингера. Особое внимание уделено двум направлениям в этой области. Во-первых, нахождению точно решаемых моделей с помощью метода эффективного потенциала [24, 25], разработанного в квантовой теории спиновых систем; во-вторых, появлению новых точных решений одномерного стационарного уравнения Шредингера на основе тесной связи последнего с уравнением Кортевега-де Фриза, установленной благодаря методу обратной задачи рассеяния в теории солитонов [17-23]. Обсуждаются общие аспекты теоретического и практического значения точных решений.

Во втором разделе "Квазиточнорешаемые модели спиновой природы", который является центральным, рассмотрены вопросы, связанные с новыми методами в квантовой теории спиновых систем. Изложен метод эффективных потенциалов для спиновых систем, приведены конкретные примеры эффективных потенциалов – симметричных и несимметричных, нелокализованных и периодических. Проведены вычисления качественно новых простых явных формул для энергетических уровней и волновых функций стационарных состояний для эффективных потенциалов, соответствующих спиновым системам типа анизотропных парамагнетиков в магнитном поле для различных значений спинового параметра, констант анизотропии и направлений магнитного поля. Предложен метод расчета уровней энергии четверного осциллятора с помощью найденных точных решений для эффективных потенциалов с минимумом 4-го порядка. Проведено детальное исследование физических свойств анизотропных парамагнетиков в зависимости от температуры и магнитного поля с применением найденных точных решений для спиновых систем и с широким использованием компьютерных методов. В последнем подразделе анализируются полученные результаты для новых точных решений в сопоставлении с ранее известными.

Третий раздел "Точно решаемые модели солитонной природы" посвящен решениям уравнения Шредингера с пространственно локализованными потенциальными полями солитонного

происхождения. Здесь рассматриваются общие особенности этих моделей, получены явные формулы для соответствующих волновых функций стационарных состояний. При исследовании многоуровневых потенциальных полей установлена роль фазовых добавок, определяющих несимметричное поведение потенциальных моделей, а также выявлены характерные формы этих потенциалов. Таким образом, множество потенциалов с простыми точными решениями в квантовой механике существенно обогащается локализованными многопараметрическими моделями разнообразного вида, во многих отношениях аналогичными квазиточнорешаемым моделям спиновой природы. Отмечено, что между двумя совершенно различными системами – спиновой и солитонной, – поставляющими в квантовую теорию модели потенциальных полей с точными решениями уравнения Шредингера, имеется целый ряд соответствий.

В заключительной части кратко обсуждаются: состояние проблемы, методы решения, сравнение полученных результатов с известными, а также их теоретическое и практическое значение. В приложениях содержатся вспомогательные математические дополнения. Библиография содержит работы различных авторов, в основном до 1998 года, когда были завершены главные разделы данной книги, издание которой пришлось отложить из-за финансовых трудностей. Добавлены лишь ссылки на некоторые последующие наши работы, развивающие направления, которым посвящена книга.

В основу монографии положены работы авторов. Она предназначена прежде всего для научных работников, преподавателей вузов, аспирантов и студентов старших курсов физических специальностей, а также для всех, кто интересуется квантовой теорией.

Замечания и предложения будут приняты с благодарностью.

Выражаем признательность рецензентам А.М.Ермолаеву и Ю.П.Степановскому за внимательное отношение и поддержку издания книги, О.Б.Заславскому, совместно с которым авторы работали в течение ряда лет, а также В.М.Цукернику – энтузиасту спиновых систем. Особая благодарность Н.В.Ульянову за помощь при подготовке рукописи к печати.

1. ПРОБЛЕМА ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Мы рассмотрим случай, допускающий точное решение и приводящий к простым выражениям.

И. М. Лифшиц

В квантовой теории проблема точных решений уравнения Шредингера для стационарных состояний частицы в потенциальном поле постоянно привлекает внимание специалистов. Можно отметить два направления поисков в этой области: решение конкретных физических задач с помощью уравнения Шредингера и чисто математический подход в теории дифференциальных уравнений.

В первом случае точные решения сразу же имеют определенный физический смысл, а во втором – создается фундамент для возможных будущих приложений.

Следует добавить также, что точные решения уравнения Шредингера, – да еще и с простыми явными выражениями для потенциалов, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний, – вообще образуют "золотой" фонд квантовой теории.

1.1. Стандартные точно решаемые модели потенциалов

Среди множества точных решений стационарного уравнения Шредингера прежде всего выделим те, которые имеют простые явные аналитические выражения для потенциалов, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний.

Модели потенциальных полей с такими решениями немногочисленны: гармонический осциллятор, прямоугольная бесконечная яма, потенциалы Экарта, Морса, Пешля-Теллера, кулоново поле и дельта-потенциал.

Этим стандартным моделям присущи неизменность формы и наличие не более одного независимого параметра (кроме размерных масштабных множителей).

Говоря о литературе по вопросу точных решений уравнения Шредингера, необходимо прежде всего обратиться, конечно же, к учебникам и задачникам по квантовой теории [1-7], поскольку в каждом из них непременно упоминаются ставшие классическими примеры потенциалов, допускающих точное решение.

Ниже приведены эти стандартные хорошо известные модели с краткой характеристикой их особенностей, что позволит в дальнейшем провести их сравнение с рассматриваемыми в монографии моделями и полученными соответствующими новыми точными решениями.

Модель гармонического осциллятора соответствует одномерному движению квантовой частицы в пространственно нелокализованном потенциальном поле $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$, где m – масса частицы, ω – классическая частота колебаний.

Собственные значения энергии линейно зависят от квантового числа n (эквидистантность): $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, $n = 0, 1, \dots$ ($\hbar$ – постоянная Планка). Данный потенциал – однопрофильный и нуль-параметрический, а энергетический спектр – жестко фиксирован.

Эта модель имеет очень важное значение, поскольку используется во многих приложениях квантовой теории (от механических малых колебаний до электромагнитного поля).

Кулоновский потенциал притяжения записывается в форме $U(r) = -\alpha / r$. Энергетический спектр определяется следующим выражением: $E_n = -m\alpha^2 / 2\hbar^2 n^2$, $n = 1, 2, \dots$. Помимо дискретного существует также непрерывный спектр бесконечной кратности.

Этот потенциал, как видно, также является однопрофильным и нуль-параметрическим (с неизменным энергетическим спектром связанных состояний). Имея непосредственный физический смысл, он находит широкое применение в различных областях физики (от атомов до твердых тел).

Прямоугольная потенциальная яма бесконечной глубины и ширины a также является однопрофильной и имеет фиксированный энергетический спектр $E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 2ma^2$, где $n = 1, 2, \dots$. Такая модель находит многочисленные применения при учете различных размерных и граничных эффектов.

Локализованный потенциал Экарта $U(x) = -U_0 / \text{ch}^2(x/a)$ с

энергетическим коэффициентом U_0 и характерной длиной a обладает как непрерывным (двукратно вырожденным), так и

дискретным энергетическим спектром $E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}(N-n)^2$,

$n = 0, 1, \dots, N = \sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2 + 1/4} - 1/2$. Единственным параметром N определяется число связанных стационарных состояний (всегда есть хотя бы одно такое состояние). Эта модель тесно связана с теорией солитонов, а также используется для описания локализованных физических объектов.

Потенциал Морса $U(x) = U_0[\exp(-2x/a) - 2\exp(-x/a)]$ тоже обладает как невырожденным непрерывным,

так и дискретным спектром энергии $E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}(N-n)^2$,

$n = 0, 1, \dots, N = \sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} - 1/2$, где N – единственный (кроме масштабного множителя) параметр, от которого зависит "вместимость" этого однопрофильного потенциала, то есть число связанных стационарных состояний (они могут отсутствовать вовсе). Модель широко используется в теории молекул.

Приведем еще один однопараметрический потенциал достаточно простой формы – модель Пешля-Теллера, которая занимает промежуточное положение между осциллятором и бесконечной ямой:

$U(x) = U_0 \operatorname{ctg}^2(\pi x/a)$. Энергетический спектр – дискретный, уровни энергии $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(n^2 + 2n\lambda - \lambda)$, где $n = 1, 2, \dots$, зависят от

единственного (помимо размерного множителя) параметра

$$\lambda = \sqrt{2mU_0a^2/\pi^2\hbar^2 + 1/4} - 1/2.$$

Наконец, дельта-яма с предельно локализованным в координатном пространстве потенциалом $U(x) = -u\delta(x)$, где коэффициент $u > 0$, а δ – дельта-функция Дирака, содержит единственный уровень энергии $E_0 = -mu^2/2\hbar^2$ и часто используется для моделирования различных примесных и плоскостойких систем.

Волновые функции стационарных состояний для указанных выше моделей потенциалов также имеют достаточно простой вид (в диапазоне от тригонометрических до гипергеометрических функций), однако для краткости они здесь не приводятся, поскольку главные особенности потенциалов обычно заключены в структуре их энергетического спектра.

Имеется также ряд случаев, когда точное решение сводится к неявному виду: уровни энергии определяются из некоторого алгебраического или трансцендентного уравнения (прямоугольная яма конечной глубины, линейный потенциал, модель Кронига-Пенни и "гребенка" Дирака, синусоидальный потенциал, цилиндрическая и сферическая потенциальные ямы бесконечной глубины и т. п.).

Необходимо отметить также различные комбинации и модификации стандартных моделей, обобщения на многомерные случаи и т. п.

1.2. Методы поисков новых точно решаемых моделей

Обращение к вопросам точных решений вызывает постоянный интерес. При этом поиски точных решений ведутся различными путями. Это и случайные математические находки, и специальные методы, приводящие к обнаружению целых классов точно решаемых моделей.

Среди современных методов и путей поисков новых точных решений следует упомянуть следующие: математические трансформации дифференциальных уравнений (подстановки, замены переменных, сведение к редким специальным функциям), различные варианты факторизации и преобразования Дарбу, суперсимметричная квантовая механика, теоретико-групповые подходы, решение обратных задач (нахождение потенциалов по заданным уровням энергии), обобщения существующих точных решений (комбинации точно решаемых моделей), обобщения точно- и квазиточно решаемых задач (неквадратичные законы дисперсии, более общие дифференциальные уравнения, неэрмитовы гамильтонианы, нелокальные операторы потенциальной энергии, неявный вид потенциала и т. п.) [10, 12-16, 61].

Многие из этих методов тесно связаны между собой, так что разделение их оказывается весьма условным, однако все же остановимся кратко на некоторых из них.

Метод факторизации [10,13]. При выполнении некоторых условий оператор Шредингера "раскладывается" на линейные дифференциальные операторы, которые можно применить для получения собственных значений и собственных функций. Процесс получения этих линейных дифференциальных операторов из дифференциального уравнения называется разложением на множители (факторизацией). Наиболее часто приводимый в связи с этим методом пример — гармонический осциллятор.

Метод, основанный на так называемом преобразовании Дарбу [62, 63], позволяет конструировать новые потенциалы с увеличением (или уменьшением) числа уровней энергии и соответствующих волновых функций на основе имеющихся потенциалов с известными решениями уравнения Шредингера.

Существенное пополнение точно решаемых моделей обязано обнаружению *многопараметрических* классов потенциалов в связи с развитием теории спиновых систем, а также теории солитонов.

Обратимся вначале к спиновым эффективным потенциалам. Метод нахождения точных решений, разработанный при исследовании спиновых систем, основан на рассмотрении гамильтонианов, построенных из генераторов некоторой группы Ли (в частности, спиновых операторов), и использовании представления обобщенных (в частности, спиновых) когерентных состояний [65, 66]. В соответствующем координатном пространстве такой гамильтониан становится дифференциальным оператором, в частности оператором Шредингера с некоторой эффективной потенциальной энергией. При этом собственные значения энергии спиновой системы связаны с нижним участком энергетического спектра соответствующего эффективного потенциала. Такой метод потенциального поля, с одной стороны, может быть эффективен при изучении физических свойств спиновых систем, например, поведения магнитной восприимчивости в существенно квантовой области, спинового туннелирования и т. п. С другой стороны, соответствие между спиновыми и координатными системами приводит к открытию новых классов точных решений уравнения Шредингера.

Проблема отыскания и исследования свойств новых точных решений может быть также реализована на основе связи квантовой механики и солитонной теории [17-23]. Речь идет о взаимосвязи одного из типичных нелинейных эволюционных уравнений —

уравнения Кортевега-де Фриза – с одномерным стационарным уравнением Шредингера, когда солитонные решения Кортевега-де Фриза играют роль потенциалов в уравнении Шредингера.

Благодаря методу обратной задачи теории рассеяния [17-18] решение нелинейного уравнения Кортевега-де Фриза сводится к решению линейного дифференциального уравнения 2-го порядка (уравнения Шредингера) и линейного интегрального уравнения (уравнения Гельфанда-Левитана-Марченко).

Важно, что устанавливаемая тесная связь уравнения Кортевега-де Фриза с одномерным стационарным уравнением Шредингера позволяет указать новые типы точных решений последнего.

Исследователей солитонов интересовал лишь метод решения задачи Коши для уравнения КдФ, а уравнение Шредингера при этом играло чисто вспомогательную роль. В отличие от других случаев с точными решениями, когда задается потенциал и решается уравнение Шредингера (задача о собственных значениях), вследствие чего получаются уровни энергии и соответствующие волновые функции, *в моделях солитонного происхождения произвольно выбираются уровни энергии и для них строятся достаточно простые потенциалы с точными решениями.*

Еще одна важная особенность потенциалов солитонной природы состоит в том, что *для каждого набора уровней энергии находится не один фиксированный профиль потенциала, а бесконечное многопараметрическое семейство потенциальных моделей.*

1.3. Значение точно решаемых моделей потенциалов

В чем же конкретно заключается важность точных решений? Во-первых, это основа стационарных состояний. В квантовой механике точные решения не зависящего от времени уравнения Шредингера составляют основу целого раздела – теории стационарных состояний. Демонстрация общих свойств этих состояний происходит на конкретных примерах с точными решениями, которые лежат и в основе иллюстративных задач.

Далее нужно отметить, что точные решения являются фундаментом новых задач. Один из основных теорфизических приемов – сведение задачи к хорошо известной, точно решаемой. Например, решение Ландау для заряда в постоянном однородном магнитном поле сводится после разделения переменных к гармоническому

осциллятору. То же касается теории малых колебаний сложных механических систем со многими степенями свободы.

Кроме того, точные решения важны как база приближенных методов. В основе применения теории возмущений лежит представление о некотором исходном точном решении, к которому в первом приближении сводится решение данной задачи и на основе которого строятся последующие приближения. Аналогичная идея заложена и в различных вариационных методах.

С помощью точных результатов проверяются эффективность и точность различных аппроксимаций. Точно решаемые модели служат также основанием качественных результатов.

Простые модели часто используются исследователями при изучении сложных явлений, когда точные закономерности неизвестны или когда можно изучить основные свойства, не зависящие от конкретного вида потенциала, отвлекаясь от усложнений, вносимых его деталями.

Проверка новых теорий также обычно осуществляется на основе известных частных случаев точно решаемых задач.

Необходимо отметить еще одну важную роль точных решений – точно решаемые задачи служат тестовыми примерами при применении численных методов, которые отрабатываются и проверяются на хорошо известных простых аналитических выражениях точных решений.

Добавим, что о конкретной роли рассмотренных в монографии потенциальных моделей и соответствующих точных решений будет дополнительно сказано в заключительных замечаниях к следующим разделам.

Можно надеяться, что тема точных решений будет вызывать живой интерес исследователей и в последующие времена.

2. КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ СПИНОВОЙ ПРИРОДЫ

Я ничего не желаю столь горячо, как того, чтобы эти исследования понравились тем, кто принимает близко к сердцу успехи науки.

Карл Гаусс

Спин представляет собой квантовомеханический объект дискретной природы, поэтому уравнения, возникающие при нахождении собственных значений спиновых гамильтонианов, имеют матричную форму. Это существенно затрудняет анализ свойств энергетического спектра спиновых систем при больших значениях спина.

Оказывается, что для некоторого класса спиновых систем можно ввести такое потенциальное описание, при котором уровни энергии спиновой системы совпадают с частью энергетического спектра соответствующего уравнения Шредингера с некоторой потенциальной энергией достаточно простого вида.

Следовательно, для анализа свойств данной спиновой системы, особенно при больших значениях спина $S \gg 1$, можно воспользоваться хорошо известными методами исследования решений уравнения Шредингера – например, теорией возмущений, квазиклассическим приближением, вариационным методом [24, 25].

Особенно важно, что для не очень больших значений спина возможно нахождение собственных значений спинового гамильтониана непосредственно в дискретном спиновом представлении как корней характеристического уравнения, так что получаются простые явные аналитические формулы для энергетического спектра и векторов состояний спиновой системы, а тем самым для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний соответствующей эффективной потенциальной модели.

Таким образом, спин-координатное соответствие приводит к открытию новых точных решений уравнения Шредингера [24, 26, 27].

2.1. Метод эффективных потенциалов для спиновых систем

Остановимся подробнее на указанном методе нахождения точных решений. Подход заключается в том, что рассматриваются гамильтонианы, построенные из генераторов некоторой группы Ли (в частности, спиновых операторов), и при решении задачи об их собственных значениях и собственных векторах используется представление обобщенных (в частности, спиновых) когерентных состояний [65, 66].

В получающемся координатном представлении такой гамильтониан становится дифференциальным оператором, в частности оператором Шредингера с некоторой эффективной потенциальной энергией.

Найденные потенциалы для простых спиновых систем либо имеют форму нелокализованных ям, либо оказываются периодическими. Во всех случаях имеются как симметричные, так и несимметричные разнообразные многопараметрические потенциальные модели.

Рассмотрим простейший случай системы, соответствующей модели парамагнетика с анизотропией типа "легкая ось" (легкоосного) во внешнем магнитном поле, перпендикулярном оси анизотропии, и описываемой следующим гамильтонианом:

$$H = -S_z^2 - BS_x, \quad (2.1)$$

где B – магнитное поле с точностью до постоянного множителя, S_j – оператор j -й проекции спина. В монографии чаще всего будет использоваться терминология из области магнитных явлений [67-70], хотя результаты касаются спиновых систем любой природы, у которых величина эффективного спина (псевдоспина, квазиспина), которую будем называть просто спином, может быть как малой ($S \sim 1$), так и сравнительно большой ($S \sim 10$).

Используемые в данном гамильтониане переменные обезразмерены следующим образом: в качестве безразмерной энергии вводится отношение энергии к абсолютной величине константы анизотропии, что приводит и к соответствующей безразмерной характеристике магнитного поля B .

Изменение знака при первом слагаемом в (2.1) на "+" приводит к гамильтониану, описывающему парамагнетик с анизотропией типа "легкая плоскость", или легкоплоскостной парамагнетик.

Выбор осей координат определяется физически выделенными направлениями: ось z направлена вдоль оси анизотропии, а ось x вдоль магнитного поля, так что в этой и следующих моделях потенциалов предполагается, что $B > 0$, хотя формально в гамильтониане и в формулах для уровней энергии подобные величины могут иметь и отрицательный знак.

При исследовании энергетического спектра такой системы в работе [25] пришли к стандартному одномерному уравнению Шредингера для стационарных состояний

$$\psi'' + \left[E - \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2(x) + B\left(S + \frac{1}{2}\right) \operatorname{ch}(x) \right] \psi = 0, \quad (2.2)$$

где x – некоторая безразмерная координата, а решение $\psi(x)$, убывающее на бесконечности, является волновой функцией.

Итак, проблема собственных значений и собственных векторов спинового гамильтониана (2.1) приводит к координатной картине псевдочастицы, движущейся в эффективном потенциальном поле

$$U(x) = \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2(x) - B\left(S + \frac{1}{2}\right) \operatorname{ch}(x). \quad (2.3)$$

Еще раз отметим, что впервые эта модель была использована при исследовании физических свойств магнитных систем в работе [25], где было показано, что собственные значения гамильтониана спиновой системы (2.1) совпадают с начальными $2S+1$ энергетическими уровнями частицы, движущейся в потенциальном поле (2.3).

Полезно сравнить найденный точно решаемый потенциал со стандартными квантовомеханическими моделями, описанными в предыдущем разделе. Потенциал (2.3) является симметричным, с довольно простыми выражениями для волновых функций и энергетических уровней, для которых соответствующие выражения получены в следующем подразделе. Здесь же ограничимся качественным рассмотрением особенностей спиновых потенциальных моделей.

В отличие от хорошо известных процитированных квантовомеханических моделей потенциал (2.3) имеет зависимость от параметров – их два, но они могут меняться: значения магнитного поля B – непрерывным образом, а спиновый параметр S "пробегают" дискретный ряд целых и полуцелых значений.

Следует отметить, что под S мы понимаем некоторый условный спиновый параметр, который в зависимости от конкретной физической системы может иметь смысл спина, эффективного спина, квазиспина, псевдоспина, а также момента самого общего вида.

Если же отвлечься от конкретного физического смысла системы, благодаря которой появился потенциал (2.3), то, рассматривая формально S как непрерывным образом меняющуюся величину, получим модель с "внеспиновыми" значениями этого параметра.

При изменении указанных выше параметров форма потенциала существенно изменяется.

Модель (2.3) при $B < B_0 = 2S + 1$ целесообразно записать следующим образом:

$$U(x) = -\frac{B_0^2 + B^2}{4} + \frac{B^2}{4} \left[\text{ch}(x) - \frac{B_0}{B} \right]^2. \quad (2.4)$$

Отсюда ясно, что при малых B потенциал (2.4) имеет вид двух достаточно удаленных ям, которые при увеличении B сближаются (рис. 2.1 а). При $B = B_0$ эта модель принимает форму ямы с минимумом четвертого порядка (рис. 2.1 б):

$$U(x) = -\frac{B_0^2}{2} + B_0^2 \text{sh}^4\left(\frac{x}{2}\right). \quad (2.5)$$

При $B > B_0$ имеем яму с одним простым минимумом (рис. 2.1 в).

Обнаружение такой двухъямной потенциальной модели, как и потенциала с четверным минимумом, представляет специальный интерес. Так, задача о двухъямном потенциале возникает в квантовой теории молекул [16, 62, 63, 71, 72], а в теории магнитных систем двухъямная модель дает наглядную трактовку явлению так называемого спинового туннелирования [24, 28].

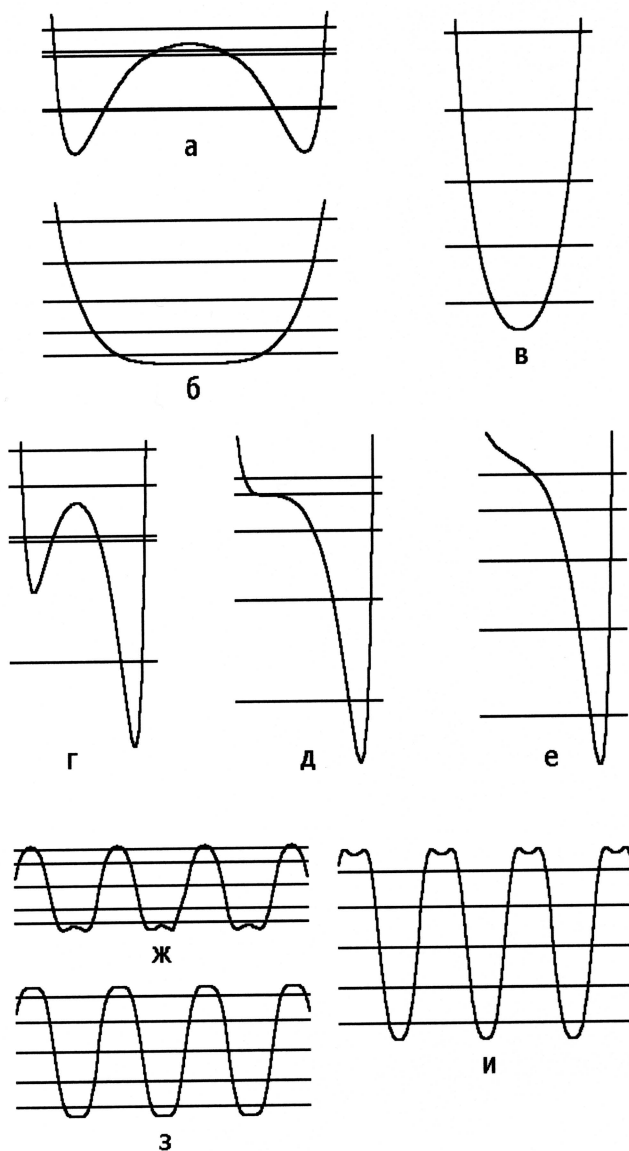


Рис. 2.1. Характерные формы эффективных потенциалов для анизотропных парамагнетиков в магнитном поле.

Модель с минимумом четвертого порядка также чрезвычайно любопытна: как известно, степенной потенциал $U(x) = Qx^4$ не имеет точных решений, тогда как рассматриваемая более сложная 4-гиперболическая модель (2.5) таковыми обладает (несколько подробнее этот вопрос будет рассмотрен в следующем подразделе).

Для спиновой системы с гамильтонианом (2.1) можно также ввести описание на основе некоторой периодической модели эффективного потенциала, однако проиллюстрируем такую возможность позднее, для более общей спиновой системы, отвечающей двухосному парамагнетизму.

Приведем теперь пример несимметричного точно решаемого спинового потенциала. К такой модели можно прийти, если рассматривать гамильтониан, описывающий легкоосный парамагнетик в наклонном по отношению к оси анизотропии магнитном поле $H = -S_z^2 - B_x S_x - B_z S_z$. Подробное исследование этой модели можно найти в [26]. Эффективный потенциал в этом случае имеет следующий вид:

$$U(x) = \frac{B_x^2}{4} \left[\operatorname{sh}(x) - \frac{B_z}{B_x} \right]^2 - B_x \left(S + \frac{1}{2} \right) \operatorname{ch}(x). \quad (2.6)$$

Точные решения для этого потенциала найдены в следующем подразделе монографии. Здесь же укажем, что такой потенциал содержит три параметра: дискретный спиновый S и непрерывно изменяющиеся компоненты магнитного поля B_x и B_z .

Потенциал может быть как несимметричным двухъямным (рис. 2.1 г), так и ямой с одним минимумом (рис. 2.1 е), обладая также промежуточными формами с характерным "уступом" (рис. 2.1 д), а также превращаясь в упомянутую выше симметричную модель, в зависимости от соотношения между компонентами магнитного поля B_x и B_z [26].

Наконец, рассмотрим пример периодического потенциала, к которому можно прийти при исследовании спиновой системы с гамильтонианом следующего вида:

$$H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 - BS_x, \quad (2.7)$$

где $\alpha \geq 0$, $\beta \geq 0$ – константы анизотропии.

Гамильтониан (2.7) описывает, например, двухосный парамагнетик в магнитном поле B , перпендикулярном осям анизотропии. Исследование такого потенциала было проведено в [27]. В этом случае можно также прийти к стандартному уравнению Шредингера, описывающему движение квазичастицы с квадратичным законом дисперсии и обратной эффективной массой $m^{-1} = 2(\alpha + \beta)$ в периодическом потенциальном поле

$$U(x) = \frac{W_1 \operatorname{sn}^2(x) - W_2 \operatorname{cn}(x)}{\alpha + \beta \operatorname{cn}^2(x)}, \quad (2.8)$$

где $W_1 = B^2 / 4 - \alpha\beta S(S+1)$, $W_2 = (\alpha + \beta)B(S+1/2)$, построенном из эллиптических функций Якоби с модулем $k = \sqrt{\beta / (\alpha + \beta)}$ [75].

Поскольку спиновая система (2.7) при небольших S допускает точное решение в виде простых явных формул для уровней энергии и векторов стационарных состояний, то и уравнение Шредингера имеет соответствующие точные решения: собственные значения спин-гамильтониана (2.7) совпадают на этот раз с $2S+1$ крайними уровнями энергии низших энергетических зон (чередующимися дном и потолком зоны) в потенциальном поле (2.8) [27].

С ростом магнитного поля B минимумы ям в ячейках периодического потенциала претерпевают изменения от двойных до одиночных через четверные, а форма максимумов барьеров изменяется в обратном порядке. Оказывается, что при $\alpha = \beta$ существует некоторое критическое значение магнитного поля $B_0 = 2\alpha\sqrt{S(S+1)}$, при котором ячейка потенциала имеет одновременно как четверной минимум, так и четверной максимум (рис. 2.1 з).

О других эффективных потенциалах спиновой природы и о конкретных примерах спиновых систем в различных областях физики см. в обзоре [24].

Следует еще раз подчеркнуть, что эффективные потенциалы позволяют понять характер изменения энергетического спектра в зависимости от параметров спиновой системы, тогда как абстрактный

вид спин-гамильтонианов и их матриц обычно не позволяет этого сделать.

Рассмотренные примеры спиновых систем иллюстрируют одну замечательную особенность эффективных потенциалов – наличие точных решений только для части стационарных состояний. При этом, кроме имеющих точные решения, есть бесконечное множество расположенных над ними (по шкале энергий) стационарных состояний, для которых такое свойство, вообще говоря, отсутствует. К тому же это свойство проявляется в указанных моделях потенциалов не при всех возможных значениях входящих в них параметров, а лишь при некоторых значениях, связанных с целыми числами (мультиплетность $2S+1$). Остальным же значениям параметров соответствуют "внеспиновые" потенциалы с "внеспиновыми" стационарными состояниями (уровнями энергии, волновыми функциями, энергетическими зонами).

Это новое свойство квантовомеханических систем получило название "квазиточнорешаемости". Природа подобных моделей потенциалов обычно связана с теоретико-групповыми свойствами систем. В частности, в спиновых системах основой является упомянутое спин-координатное соответствие.

Далее переходим к главной задаче этого раздела – нахождению точных решений в явном виде для различных значений спинового параметра и характеристик магнитного поля в случае эффективных потенциалов спинового происхождения.

2.2. Уровни энергии для спиновых точных решений

Как уже отмечалось в предыдущем подразделе, $2S+1$ низших уровней энергии частицы, движущейся в эффективном потенциальном поле

$$U(x) = \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2(x) - B\left(S + \frac{1}{2}\right) \operatorname{ch}(x) \quad (2.9)$$

соответствующем легкоосному парамагнетику в поперечном магнитном поле, т. е. спиновой системе с гамильтонианом $H = -S_z^2 - BS_x$, совпадают с энергетическим спектром этого гамильтониана.

Таким образом, задача сводится к нахождению собственных значений спинового гамильтониана, т. е. решению уравнения

$\hat{H}\psi = E\psi$. В представлении, где диагональна проекция спина S_z , это уравнение для рассматриваемого гамильтониана, записывается в виде

$$(E + \sigma^2)c_\sigma + \frac{B}{2}[\sqrt{(S+\sigma)(S-\sigma+1)}c_{\sigma-1} + \sqrt{(S-\sigma)(S+\sigma+1)}c_{\sigma+1}] = 0 ,$$

где $c_{S+1} = 0$, $c_{-S-1} = 0$. Величины c_σ определяют собственный вектор в указанном представлении, а квантовое число $\sigma = -S, -S+1, \dots, S-1, S$ отвечает z -проекции спина.

Подстановка $c_\sigma = c'_\sigma \sqrt{(S-\sigma)!(S+\sigma)!}$ позволяет избавиться от радикалов в этих уравнениях:

$$(E + \sigma^2)c'_\sigma + \frac{B}{2}[(S-\sigma+1)c'_{\sigma-1} + (S+\sigma+1)c'_{\sigma+1}] = 0 . \quad (2.10)$$

Система линейных однородных уравнений (2.10) имеет ненулевое решение, если определитель системы равен нулю, что и является средством для нахождения уровней энергии E . Чтобы записать явно такое характеристическое уравнение, удобно воспользоваться методом цепных дробей [73, 74]. Этот метод заключается в том, что условием разрешимости системы уравнений в виде трехчленного соотношения

$$-\alpha_k g_{k+1} + \beta_k g_k - \gamma_k g_{k-1} = 0 , \quad (2.11)$$

$(k = 0, 1, \dots, k_{\max})$ является обращение в ноль конечной цепной дроби:

$$b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \dots \frac{a_n}{b_n}}} = \frac{P_n}{Q_n} = 0 , \quad (2.12)$$

где $a_k = -\alpha_{k-1}\gamma_k$, $b_k = \beta_k$, а полиномы P_k строятся с помощью рекуррентных соотношений

$$P_k = b_k P_{k-1} + a_k P_{k-2}, \quad P_0 = b_0, \quad P_{-1} = 1, \quad k = 1, 2, \dots, k_{\max} . \quad (2.13)$$

Система уравнений (2.10) имеет именно такой трехчленный вид, если сделать замену переменных $k = S + \sigma$, $c'_\sigma = c'_{k-S} = g_k$.

Тогда в общем случае получаем множители в трехчленных уравнениях (2.11):

$$\alpha_k = -\frac{1}{2}B(k+1), \quad \beta_k = E + (k-S)^2, \quad \gamma_k = -\frac{1}{2}B(2S+1-k), \quad (2.14)$$

а в рекуррентных соотношениях для полиномов (2.13) коэффициенты равны

$$a_k = -\frac{B^2}{4}k(2S+1-k), \quad b_k = E + (k-S)^2. \quad (2.15)$$

При этом $k = 0, 1, \dots, 2S$, так что полином $P_{2S}(E)$ будет степени $2S+1$ по E , т. е. всего будет $2S+1$ корней характеристического уравнения, как и должно быть для данной спиновой системы. Поэтому найти в явном виде корни таких уравнений, вообще говоря, удастся только для небольших значений спина $S = 0, 1/2, 1, 3/2$.

Можно, однако, воспользоваться свойствами симметрии рассматриваемого гамильтониана, чтобы существенно понизить степень характеристических уравнений, отделив четные решения от нечетных. Рассмотрим эту процедуру несколько подробнее. Вначале будем считать, что S является целым числом.

Тогда в случае четных состояний с $c'_{-\sigma} = c'_\sigma$ систему уравнений (2.10) можно оборвать при $\sigma = 0$, когда

$$Ec'_0 + \frac{1}{2}B[(S+1)c'_{-1} + (S+1)c'_1] = 0, \quad (2.16)$$

что в силу $c'_1 = c'_{-1}$ дает граничное соотношение

$$Ec'_0 + B(S+1)c'_{-1} = 0, \quad (2.17)$$

т. е. последний коэффициент в рекуррентных соотношениях будет вдвое больше, если оборвать k на максимальном значении $k_{\max} = S$, так что $a_S = -\frac{1}{2}B^2S(S+1)$.

В случае же нечетных состояний с $c'_{-\sigma} = -c'_\sigma$ система уравнений (2.10) обрывается при $\sigma = -1$, так как $c'_0 = 0$, так что $k_{\max} = S-1$.

Аналогичным образом для полуцелых значений S имеем в случае четных состояний с $c'_{-\sigma} = c'_\sigma$ при $\sigma = -\frac{1}{2}$

$$(E + \frac{1}{4})c'_{-1/2} + \frac{B}{2} \left[(S + \frac{3}{2})c'_{-3/2} + (S + \frac{1}{2})c'_{1/2} \right] = 0 ,$$

или

$$[E + \frac{1}{4} + \frac{1}{2}B(S + \frac{1}{2})]c'_{-1/2} + \frac{1}{2}B(S + \frac{3}{2})c'_{-3/2} = 0 , \quad (2.18)$$

т. е. при $k_{mas} = S - 1/2$ граничное значение коэффициента $b_{S-1/2}$ будет отличаться от других его значений:

$$b_{S-1/2} = E + \frac{1}{4} + \frac{1}{2}B(S + \frac{1}{2}) . \quad (2.19)$$

Точно так же в случае нечетных состояний этот коэффициент будет равен

$$b_{S-1/2} = E + \frac{1}{4} - \frac{1}{2}B(S + \frac{1}{2}) . \quad (2.20)$$

Итак, полиномы для соответствующих уровней энергии будут строиться по правилу:

$$P_k = b_k P_{k-1} + a_k P_{k-2}, \quad P_0 = b_0, \quad P_{-1} = 1 , \quad (2.21)$$

где в случае целых S

– для четных состояний $k = 0, 1, \dots, S$,

$$a_k = -\frac{1}{4}B^2k(2S+1-k), \quad k < S, \quad a_k = -\frac{1}{2}B^2S(S+1), \quad k = S,$$

$$b_k = E + (k-S)^2; \quad (2.22)$$

– для нечетных состояний $k = 0, 1, \dots, S-1$,

$$a_k = -\frac{1}{4}B^2k(2S+1-k), \quad b_k = E + (k-S)^2; \quad (2.23)$$

а в случае полуцелых S

– для четных состояний $k = 0, 1, \dots, S-1/2$,

$$a_k = -\frac{1}{4}B^2k(2S+1-k), \quad (2.24)$$

$$b_k = E + (k - S)^2, \quad k < S - 1/2, \quad b_k = E + \frac{1}{4} + \frac{1}{2}B(S + \frac{1}{2}), \quad k = S - 1/2,$$

– для нечетных состояний $k = 0, 1, \dots, S - 1/2$,

$$a_k = -\frac{1}{4}B^2k(2S + 1 - k), \quad (2.25)$$

$$b_k = E + (k - S)^2, \quad k < S - 1/2, \quad b_k = E + \frac{1}{4} - \frac{1}{2}B(S + \frac{1}{2}), \quad k = S - 1/2.$$

Заметим, что удобно использовать цепные дроби (2.12) также и непосредственно для построения разложений уровней энергии при малых значениях B , что видно из структуры коэффициентов a_k и b_k .

На основе полученных правил построения характеристических уравнений перейдем к основной задаче нахождения уровней энергии для конкретных значений спина S .

В тривиальном для спинного гамильтониана случае $S = 0$ имеется единственное собственное значение $E_0 = 0$, однако для частицы в потенциальном поле (2.9) это есть важный основной уровень энергии, который при всех типичных для данного значения параметра S деформациях потенциала от двойной ямы при $B < 1$ до одинарной при $B > 1$ (через промежуточную форму ямы с четверным минимумом при $B = 1$) остается постоянным при изменении параметра B .

В случае $S = 1/2$ пара уровней энергии также непосредственно видна из структуры гамильтониана:

$$E_{0,1} = -\frac{1}{4} \mp \frac{1}{2}B. \quad (2.26)$$

Здесь и в дальнейшем первые индексы в обозначениях для уровней энергии отвечают верхним знакам в формулах.

В случае $S = 1$ для четных состояний полином

$$P_1(E) = E(E + 1) - B^2$$

дает уровни энергии

$$E_{0,2} = -\frac{1}{2} \mp \sqrt{\frac{1}{4} + B^2}, \quad (2.27)$$

а для нечетного состояния $P_0(E) = b_0 = E + 1$, так что

$$E_1 = -1. \quad (2.28)$$

Этот результат также заслуживает особого внимания, поскольку для частицы в потенциальном поле (2.9) это есть энергия первого возбужденного состояния, которая аналогично рассмотренному выше случаю $S = 0$ при всех деформациях потенциала от двойной ямы при $B < 3$ до одинарной при $B > 3$ (через промежуточную форму ямы с четверным минимумом при $B = 3$) остается постоянной при изменении параметра B .

В случае $S = 3/2$ для четных состояний полином

$$P_1(E) = (E + \frac{1}{4} + B)(E + \frac{9}{4}) - \frac{3}{4}B^2 \quad (2.29)$$

приводит к уравнению

$$E^2 + (\frac{5}{2} + B)E + \frac{9}{16} + \frac{9}{4}B - \frac{3}{4}B^2 = 0,$$

так что

$$E_{0,2} = -\frac{5}{4} - \frac{1}{2}B \mp \sqrt{1 - B + B^2}, \quad (2.30)$$

а для нечетных состояний полином

$$P_1(E) = (E + \frac{1}{4} - B)(E + \frac{9}{4}) - \frac{3}{4}B^2$$

отличается от предыдущего только знаком при B , так что

$$E_{1,3} = -\frac{5}{4} + \frac{1}{2}B \mp \sqrt{1 + B + B^2}. \quad (2.31)$$

Заметим, что в предыдущих случаях небольших значений спина $S = 0, 1/2, 1, 3/2$ точные выражения для уровней энергии имели исключительно простой вид и содержали лишь степени параметра B и радикалы.

Продолжая построения характеристических полиномов в случаях "средних" значений спина $S = 2, 5/2, 3, 7/2, 4$, мы переходим к качественно новым структурам точных формул для уровней энергии, в

которых будут фигурировать наряду с радикалами и полиномами также тригонометрические и обратные тригонометрические функции.

При этом ради краткости изложения в дальнейшем мы опускаем промежуточные выкладки с вычислениями полиномов с помощью рекуррентных соотношений, приводя только окончательные выражения для характеристических уравнений.

В случае $S=2$ для четных состояний получаем кубическое уравнение

$$E^3 + 5E^2 + 4(1 - B^2)E - 12B^2 = 0, \quad (2.32)$$

корни которого, определяющие уровни энергии, в соответствии с "тригонометрическим" методом решения таких уравнений (см. прил. 1) удобно записать в следующем виде:

$$E_4 = -\frac{5}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{13+12B^2} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{72B^2 - 35}{(13+12B^2)^{3/2}} \right],$$

$$E_2 = -\frac{5}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{13+12B^2} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{72B^2 - 35}{(13+12B^2)^{3/2}} - \frac{2}{3}\pi \right], \quad (2.33)$$

$$E_0 = -\frac{5}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{13+12B^2} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{72B^2 - 35}{(13+12B^2)^{3/2}} + \frac{2}{3}\pi \right].$$

Для нечетных состояний характеристическое уравнение оказывается квадратным:

$$E^2 + 5E + 4 - B^2 = 0, \quad (2.34)$$

так что нечетные уровни энергии равны

$$E_{1,3} = -\frac{5}{2} \mp \frac{1}{2}\sqrt{9+4B^2}. \quad (2.35)$$

В случае $S=5/2$ для четных состояний получаемое кубическое уравнение

$$E^3 + \frac{35+6B}{4}E^2 + \frac{259+204B-52B^2}{16}E + \frac{5(45+270B-164B^2-24B^3)}{64} = 0$$

дает три уровня энергии, которые здесь и в аналогичных случаях в дальнейшем будем объединять в одной краткой записи:

$$E_m = -\frac{35+6B}{12} + \frac{4}{3}\sqrt{7-3B+3B^2} \cos\left[\frac{1}{3}\arccos\frac{36B^2-9B-40}{4(7-3B+3B^2)^{3/2}} + \varphi_m\right],$$

$$\varphi_m = \frac{\pi}{12}(3m^2 - 14m + 8), \quad m = 0, 2, 4, \quad (2.36)$$

а для нечетных состояний аналогичное уравнение отличается только знаком при B , так что соответствующие уровни энергии равны

$$E_m = -\frac{35-6B}{12} + \frac{4}{3}\sqrt{7+3B+3B^2} \cos\left[\frac{1}{3}\arccos\frac{36B^2+9B-40}{4(7+3B+3B^2)^{3/2}} + \varphi_m\right],$$

$$\varphi_m = \frac{\pi}{12}(3m^2 - 20m + 25), \quad m = 1, 3, 5. \quad (2.37)$$

В случае $S=3$ для четных состояний впервые возникает характеристическое уравнение четвертой степени:

$$E^4 + 14E^3 + (49-10B^2)E^2 + (36-102B^2)E - 216B^2 + 9B^4 = 0, \quad (2.38)$$

корни которого, определяющие четыре уровня энергии, можно представить в явном виде с помощью компактных формул по методу Феррари (см. прил. 2) с объединением попарно:

$$E_{4,6} = -\frac{7}{2} + \sqrt{y} \mp \sqrt{\frac{49}{4} + 5B^2 - y - (9-8B^2)/\sqrt{y}},$$

$$E_{0,2} = -\frac{7}{2} - \sqrt{y} \mp \sqrt{\frac{49}{4} + 5B^2 - y + (9-8B^2)/\sqrt{y}}, \quad (2.39)$$

где согласно этому методу введено решение вспомогательного кубического уравнения ("кубической резольвенты")

$$y = \frac{1}{12}(49 + 20B^2) + \frac{1}{6}\sqrt{889 + 712B^2 + 208B^4} \times \\ \times \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{24013 - 24132B^2 + 21072B^4 + 2240B^6}{(889 + 712B^2 + 208B^4)^{3/2}} \right]. \quad (2.40)$$

Для нечетных уровней приходим к кубическому уравнению:

$$E^3 + 14E^2 + (49 - 4B^2)E + 36 - 24B^2 = 0. \quad (2.41)$$

Его корни также можем выписать в явном виде:

$$E_m = -\frac{14}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{49 + 12B^2} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{72B^2 - 143}{(49 + 12B^2)^{3/2}} + \varphi_m \right], \\ \varphi_m = \frac{\pi}{12}(3m^2 - 20m + 25), \quad m = 1, 3, 5. \quad (2.42)$$

Рассмотрим далее случай $S = 7/2$. Для нечетных уровней получаем уравнение четвертой степени:

$$E^4 + (21 - 2B)E^3 + \frac{1}{8}(987 - 332B - 68B^2)E^2 + \\ + \frac{1}{16}(3229 - 3782B - 1780B^2 + 152B^3)E + \\ + \frac{21}{256}(525 - 4200B - 3624B^2 + 992B^3 + 80B^4) = 0, \quad (2.43)$$

корни которого согласно методу Феррари можно записать в виде

$$E_{5,7} = -\frac{1}{4}(21 - 2B) + \sqrt{y} \mp \sqrt{21 + 5B + 5B^2 - y - (16 - 2B - 8B^2)/\sqrt{y}}, \quad (2.44)$$

$$E_{1,3} = -\frac{1}{4}(21-2B) - \sqrt{y} \mp \sqrt{21+5B+5B^2 - y + (16-2B-8B^2)/\sqrt{y}},$$

где представлено решение кубической резольвенты

$$y = \frac{1}{3}(21+5B+5B^2) + \frac{2}{3}\sqrt{189+108B+103B^2+26B^3+13B^4} \times$$

$$\times \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{4374+2592B+1053B^2+1744B^3+1236B^4+210B^5+70B^6}{2(189+108B+103B^2+26B^3+13B^4)^{3/2}} \right] \quad (2.45)$$

Для четных состояний получаем аналогичное уравнение:

$$E^4 + (21+2B)E^3 + \frac{1}{8}(987+332B-68B^2)E^2 +$$

$$+ \frac{1}{16}(3229+3782B-1780B^2-152B^3)E + \quad (2.46)$$

$$+ \frac{21}{256}(525+4200B-3624B^2-992B^3+80B^4) = 0.$$

Его корни дают уровни энергии

$$E_{4,6} = -\frac{1}{4}(21+2B) + \sqrt{y} \mp \sqrt{21-5B+5B^2 - y - (16+2B-8B^2)/\sqrt{y}}, \quad (2.47)$$

$$E_{0,2} = -\frac{1}{4}(21+2B) - \sqrt{y} \mp \sqrt{21-5B+5B^2 - y + (16+2B-8B^2)/\sqrt{y}}$$

с соответствующей вспомогательной величиной

$$y = \frac{1}{3}(21-5B+5B^2) + \frac{2}{3}\sqrt{189-108B+103B^2-26B^3+13B^4} \times$$

$$\times \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{4374-2592B+1053B^2-1744B^3+1236B^4-210B^5+70B^6}{2(189-108B+103B^2-26B^3+13B^4)^{3/2}} \right] \quad (2.48)$$

Наконец, в случае спина $S=4$ для четных состояний впервые получаем характеристическое уравнение 5-й степени

$$E^5 + 30E^4 + (273 - 20B^2)E^3 + (820 - 472B^2)E^2 + 16(36 - 197B^2 + 4B^4)E - 640B^2(9 - B^2) = 0. \quad (2.49)$$

При произвольных значениях параметра B корни такого уравнения нельзя записать в явном виде, однако в частном случае $B=3$ нулевой корень отщепляется, а степень уравнения понижается до четвертой, что приводит к решению методом Феррари для уровней энергии:

$$E_{4,8} = -\frac{15}{2} + \sqrt{y} \mp \sqrt{\frac{489}{4} - y + 362/\sqrt{y}},$$

$$E_6 = 0, \quad (2.50)$$

$$E_{0,2} = -\frac{15}{2} - \sqrt{y} \mp \sqrt{\frac{489}{4} - y - 362/\sqrt{y}},$$

где используется решение вспомогательного кубического уравнения

$$y = \frac{163}{4} + \frac{1}{2}\sqrt{5097} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{14355\sqrt{3}}{1699^{3/2}}\right). \quad (2.51)$$

Для нечетных уровней получается уравнение четвертой степени:

$$E^4 + 30E^3 + (273 - 10B^2)E^2 + (820 - 182B^2)E + 576 - 712B^2 + 9B^4 = 0.$$

Его корни согласно методу Феррари имеют следующий вид:

$$E_{5,7} = -\frac{15}{2} + \sqrt{y} \mp \sqrt{\frac{129}{4} + 5B^2 - y - (25 - 8B^2)/\sqrt{y}},$$

$$E_{1,3} = -\frac{15}{2} - \sqrt{y} \mp \sqrt{\frac{129}{4} + 5B^2 - y + (25 - 8B^2)/\sqrt{y}}, \quad (2.52)$$

где фигурирует решение кубической резольвенты

$$y = \frac{1}{12}(129 + 20B^2) + \frac{1}{6}\sqrt{7641 + 2376B^2 + 208B^4} \times \\ \times \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{540189 + 103356B^2 + 47952B^4 + 2240B^6}{(7641 + 2376B^2 + 208B^4)^{3/2}} \right]. \quad (2.53)$$

Дальнейшее увеличение спинного параметра S приводит к характеристическим уравнениям еще более высокой степени, так что явных выражений для уровней энергии при произвольных B уже не будет (за исключением случая $S = 5$ при некоторых значениях B).

Однако само наличие таких алгебраических уравнений означает, что при всех как угодно больших значениях спина S имеются точные решения уравнения Шредингера для частицы, движущейся в потенциальном поле (2.9), выражаемые неявно, что само по себе является важным следствием метода эффективных потенциалов для спиновых систем.

В заключение кратко остановимся на значении полученных результатов для уровней энергии.

Во-первых, существенно пополнилось множество точных решений уравнения Шредингера с простыми явными выражениями для уровней энергии в случае рассмотренного потенциала. Как потенциал, так и уровни энергии существенно изменяются в зависимости от непрерывного параметра B и дискретного параметра S .

При этом каждая группа уровней энергии с определенной четностью в отдельности описывает энергетический спектр в полуограниченном движении для того же потенциального поля, но с дополнительными граничными условиями: при условии непроницаемости, т. е. при $\psi(0) = 0$, это будут нечетные уровни энергии, а при условии $\psi'(0) = 0$ это будут четные уровни.

Кроме того, при критическом значении параметра $B = 2S + 1$ потенциал имеет форму ямы с уплощенным дном – минимумом 4-го порядка. Тем самым получаем точные решения для подобного вида ангармонического осциллятора $U(x) \sim sh^4(x)$, тогда как более простой чисто степенной четверной осциллятор $U(x) \sim x^4$ точных решений не имеет (более детально этот вопрос будет рассмотрен ниже).

Особенность нумерации уровней энергии состоит в том, что нет аналитической зависимости от номера уровня, поскольку для каждого

значения спинового параметра S имеется своя закономерность. И даже для данного S четные состояния отличаются от нечетных, хотя каждую из этих групп уровней в отдельности можно записать единым аналитическим выражением.

Во-вторых, точные результаты для уровней энергии будут непосредственно входить в получаемые далее точные же выражения для волновых функций стационарных состояний.

В-третьих, точные формулы для уровней энергии описывают при каждом данном S весь энергетический спектр спиновой системы, позволяя непосредственно получать конкретные физические характеристики (например, намагниченность и восприимчивость анизотропного парамагнетика в магнитном поле) как в чисто квантовых стационарных состояниях, так и в термодинамике.

Кроме того, очень важно иметь точные выражения в качестве тестовых примеров для контроля расчетов при других значениях параметров, когда используются различные приближенные аналитические и численные методы.

Заметим также, что для спиновой системы с гамильтонианом $H = +S_z^2 - BS_x$, соответствующей легкоплоскостному парамагнетику, уровни энергии в совокупности будут отличаться только знаком от полученных нами для легкоосного случая, так что не станем приводить этих результатов, но будем иметь этот факт в виду для дальнейших приложений при изучении физических свойств подобных парамагнетиков.

Добавим также, что хотя для данного потенциала вычисляется лишь часть энергетического спектра ($2S+1$ нижних уровней), однако именно она является наиболее важной, поскольку содержит основной уровень энергии, определяющий физические свойства соответствующих систем при сверхнизких температурах, и близкие к нему уровни возбужденных состояний, важные при низких температурах.

Отметим также, что большая часть изложенных замечаний относится в равной мере и к тем результатам, которые будут получены далее для других ситуаций со спиновыми гамильтонианами.

Далее прервем вычисления уровней энергии, введя небольшое дополнение о приложении полученных результатов к расчетам энергетического спектра четверного осциллятора.

Как уже отмечалось в предыдущем подразделе, для значений параметра $B > B_0 = 2S + 1$ эффективный потенциал (2.9) имеет форму одиночной ямы, тогда как для $B < B_0$ он превращается в яму с двумя минимумами.

Важно, что для $B = B_0$ эта модель принимает форму ямы с минимумом четвертого порядка (рис. 2.1 б).

Рассмотрим подробнее важный особый случай точных решений при этом критическом значении параметра $B = B_0 = 2S + 1$, когда потенциал равен

$$U(x) = -\frac{1}{2}B_0^2 + B_0^2 \operatorname{sh}^4\left(\frac{x}{2}\right). \quad (2.54)$$

Для дальнейшего удобно ввести новую координату $\xi = x/2$ и отсчитывать энергию от минимума потенциала (2.54). Тогда в новых переменных соответствующее уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + [\varepsilon - U_1(\xi)]\psi = 0,$$

где

$$\varepsilon = 4E + 2B_0^2, \quad U_1(\xi) = Q \operatorname{sh}^4(\xi), \quad Q = 4B_0^2. \quad (2.55)$$

Таким образом, точные решения для потенциального поля с минимумом четвертого порядка (четверным) (2.55) существуют при значениях $Q = 4(2S + 1)^2$, где $S = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$. При этом, как уже было установлено, для не очень больших значений параметра S получаются простые явные формулы для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний. Опуская расчетные детали, приведем результаты расчетов на основе формул, полученных в данном подразделе, а также в следующем, где рассматриваются волновые функции. Первые индексы энергий, как всегда, отвечают верхним знакам в формулах.

Если $S = 0$, то для основного состояния

$$\varepsilon_0 = 2, \quad \psi_0(\xi) = A_0 \exp\left[-\frac{1}{2} \operatorname{ch}(2\xi)\right]. \quad (2.56)$$

Если $S = 1/2$, то к основному состоянию присоединяется первое возбужденное:

$$\varepsilon_1 = 11, \quad \psi_1(\xi) = A_1 \exp[-\operatorname{ch}(2\xi)] \operatorname{sh}(\xi), \quad (2.57)$$

$$\varepsilon_0 = 3, \quad \psi_0(\xi) = A_0 \exp[-\operatorname{ch}(2\xi)] \operatorname{ch}(\xi).$$

Если $S = 1$, то в формулах появляются радикалы:

$$\varepsilon_1 = 14, \quad \psi_1(\xi) = A_1 \exp\left[-\frac{3}{2} \operatorname{ch}(2\xi)\right] \operatorname{sh}(2\xi), \quad (2.58)$$

$$\varepsilon_{0,2} = 16 \mp 2\sqrt{37}, \quad \psi_{0,2}(\xi) = A_{0,2} \exp\left[-\frac{3}{2} \operatorname{ch}(2\xi)\right] \left[\operatorname{ch}(2\xi) \pm \frac{\sqrt{37 \mp 1}}{6}\right].$$

Если $S = 3/2$, то для четырех состояний с низколежащими уровнями энергии

$$\varepsilon_{1,3} = 35 \mp 4\sqrt{21}, \quad \psi_{1,3}(\xi) = A_{1,3} \exp[-2\operatorname{ch}(2\xi)] \left[\operatorname{sh}(3\xi) \pm \frac{\sqrt{21 \mp 3}}{2} \operatorname{sh}(\xi)\right], \quad (2.59)$$

$$\varepsilon_{0,2} = 19 \mp 4\sqrt{13}, \quad \psi_{0,2}(\xi) = A_{0,2} \exp[-2\operatorname{ch}(2\xi)] \left[\operatorname{ch}(3\xi) \pm \frac{\sqrt{13 \pm 1}}{2} \operatorname{ch}(\xi)\right].$$

Если $S = 2$, то ограничимся только уровнями энергии, как и в дальнейших примерах. Они содержат не только радикалы, но и тригонометрические функции:

$$\varepsilon_{1,3} = 40 \mp 2\sqrt{109}, \quad \varepsilon_m = \frac{130}{3} + \frac{8}{3}\sqrt{313} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos \frac{1765}{313^{3/2}} + \varphi_m\right),$$

$$\varphi_m = \frac{\pi}{12}(3m^2 - 14m + 8), \quad m = 0, 2, 4. \quad (2.60)$$

Если $S = 5/2$, то уровни энергии равны:

$$\varepsilon_{m+1} = \frac{217}{3} + \frac{16}{3}\sqrt{133} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos \frac{655}{2(133)^{3/2}} + \varphi_m\right),$$

$$\varepsilon_m = \frac{145}{3} + \frac{16}{3}\sqrt{97} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos \frac{601}{2(97)^{3/2}} + \varphi_m\right),$$

$$\varphi_m = \frac{\pi}{12}(3m^2 - 14m + 8), \quad m = 0, 2, 4. \quad (2.61)$$

Если $S = 3$, то уровни энергии равны:

$$\begin{aligned} \varepsilon_m &= \frac{280}{3} + \frac{56}{3} \sqrt{13} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{3385}{343(13)^{3/2}} + \varphi_m \right), \\ \varphi_m &= \frac{\pi}{12}(3m^2 - 20m + 25), \quad m = 1, 3, 5; \\ \varepsilon_{4,6} &= 84 + 4\sqrt{y} \mp 4\sqrt{\frac{1029}{4} - y + 383/\sqrt{y}}, \\ \varepsilon_{0,2} &= 84 - 4\sqrt{y} \mp 4\sqrt{\frac{1029}{4} - y - 383/\sqrt{y}}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

где

$$y = \frac{343}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{59465} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{11591451}{(59465)^{3/2}} \right].$$

Если $S = 7/2$, то уровни энергии равны:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{5,7} &= 123 + 4\sqrt{y} \mp 4\sqrt{381 - y + 512/\sqrt{y}}, \\ \varepsilon_{1,3} &= 123 - 4\sqrt{y} \mp 4\sqrt{381 - y - 512/\sqrt{y}}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} y &= 127 + 2\sqrt{8245} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{579249}{(8245)^{3/2}} \right]; \\ \varepsilon_{4,6} &= 91 + 4\sqrt{y_1} \mp 4\sqrt{301 - y_1 + 480/\sqrt{y_1}}, \end{aligned} \quad (2.63)$$

$$\varepsilon_{0,2} = 91 - 4\sqrt{y_1} \mp 4\sqrt{301 - y_1 - 480/\sqrt{y_1}},$$

где

$$y_1 = \frac{301}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{45853} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{7844779}{(45853)^{3/2}} \right].$$

Как известно, степенной потенциал $U(\xi) = Q\xi^4$ (четверной осциллятор) не допускает точных решений, являясь важным элементом многих существенно ангармонических систем [76, 77].

Таким образом, возникает несколько парадоксальная ситуация, когда более простая модель 4-степенного четверного потенциала не имеет точных решений, а более сложная (и близкая к ней как качественно, так и количественно) 4-гиперболическая модель (2.55) таковыми обладает.

Сопоставление уровней энергии этих двух моделей показывает, что они сближаются с увеличением параметра S в (2.55), а относительная ошибка оказывается порядка $S^{-2/3}$ [36].

Такая связь между энергетическими спектрами двух потенциальных моделей может быть использована, в частности, для получения уровней энергии 4-гиперболического потенциала при больших значениях S , когда нет простых явных точных формул, а также для этой же модели при неспиновых значениях Q , т. е. когда $2S+1$ не есть целые числа.

Однако наиболее важно, что тем самым мы получаем еще один способ нахождения уровней энергии четверного осциллятора с помощью модели (2.55). Так, если для $S=1$ относительная ошибка при расчете основного уровня энергии с помощью (2.58) составляет 10%, а для $S=7/2$ с (2.63) она равна 5%, то уже для $S=50$ получается лишь 1% (вычисление с учетом поправочного члена сразу уменьшает ошибку на один-два порядка, а использование модели (2.8) обеспечивает еще большую точность).

В более общем случае то же касается смешанного квадратично-четверного осциллятора и модели (2.9).

Подробнее эти вопросы и некоторые осцилляционные явления изложены в наших работах [88, 90, 92-95].

Теперь вновь переходим к расчету уровней энергии, на этот раз для спиновых точных решений уравнения Шредингера, соответствующих легкоосному парамагнетизму в произвольно направленном по отношению к оси анизотропии (наклонном) магнитном поле, т. е. спиновой системе с гамильтонианом $H = -S_z^2 - B_x S_x - B_z S_z$. Эффективный потенциал в этом случае имеет следующий вид:

$$U(x) = \frac{1}{4} B_x^2 \left[\operatorname{sh}(x) - \frac{B_z}{B_x} \right]^2 - B_x \left(S + \frac{1}{2} \right) \operatorname{ch}(x). \quad (2.64)$$

Поскольку собственные векторы спин-гамильтониана уже не обладают свойством симметрии, позволяющим понизить степень характеристического уравнения, возвращаемся к полной системе уравнений в спиновом представлении:

$$(E + \sigma^2 + \sigma B_z) c'_\sigma + \frac{1}{2} B_x [(S - \sigma + 1) c'_{\sigma-1} + (S + \sigma + 1) c'_{\sigma+1}] = 0. \quad (2.65)$$

От случая перпендикулярного магнитного поля уравнения отличаются лишь заменой E на $E + \sigma B_z$ и B на B_x , так что правила построения характеристического полинома будут выглядеть так:

$$P_k(E) = b_k P_{k-1}(E) + a_k P_{k-2}(E), \quad P_0(E) = b_0, \quad P_{-1} = 1, \quad (2.66)$$

$$a_k = -\frac{1}{4} B_x^2 k(2S + 1 - k), \quad b_k = E + (k - S)^2 + (k - S) B_z, \quad k = 1, 2, \dots, 2S.$$

Вновь на основе полученных правил построения характеристических уравнений перейдем к конкретным примерам нахождения уровней энергии для различных значений спина S .

Опять, как и для легкоосной спиновой системы, в тривиальном для спинового гамильтониана случае $S = 0$ имеется единственное собственное значение $E_0 = 0$, однако для частицы в потенциальном поле (2.64) это есть важный основной уровень энергии, который при всех деформациях потенциала за счет изменения параметров B_x и B_z остается постоянным.

В случае $S = 1/2$ строим полином:

$$P_1(E) = \left(E + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} B_z \right) \left(E + \frac{1}{4} - \frac{1}{2} B_z \right) - \frac{1}{4} B_x^2 = \left(E + \frac{1}{4} \right)^2 - \frac{1}{4} (B_x^2 + B_z^2),$$

так что уровни энергии равны

$$E_{0,1} = -\frac{1}{4} \mp \frac{1}{2} B, \quad B = \sqrt{B_x^2 + B_z^2}, \quad (2.67)$$

что, впрочем, вытекает сразу же из вида гамильтониана.

В случае $S=1$ цепочка полиномов приводит к характеристическому уравнению третьей степени:

$$\begin{aligned} P_0(E) &= E+1-B_z, \quad P_1(E) = E(E+1-B_z) - \frac{1}{2} B_x^2, \\ P_2(E) &= (E+1+B_z)[E(E+1-B_z) - \frac{1}{2} B_x^2] - \frac{1}{2} B_x^2(E+1-B_z) = \\ &= E^3 + 2E^2 + (1-B_x^2-B_z^2)E - B_x^2 = 0. \end{aligned}$$

Отсюда получаем явные выражения для уровней энергии на основе формул тригонометрического решения данного кубического уравнения:

$$\begin{aligned} E_m &= -\frac{2}{3} + \frac{2}{3} \sqrt{1+3B^2} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{1 + \frac{9}{2} B_x^2 - 9B_z^2}{(1+3B^2)^{3/2}} + \varphi_m \right], \\ \varphi_m &= \frac{\pi}{3} (3m^2 - 7m + 2), \quad m = 0, 1, 2. \end{aligned} \quad (2.68)$$

В случае $S=3/2$ построение характеристического полинома

$$P_0(E) = E + \frac{9}{4} - \frac{3}{2} B_z, \quad P_1(E) = (E + \frac{1}{4} - \frac{1}{2} B_z)(E + \frac{9}{4} - \frac{3}{2} B_z) - \frac{3}{4} B_x^2,$$

$$P_2(E) = (E + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} B_z)P_1(E) - B_x^2 P_0(E)$$

приводит к уравнению четвертой степени

$$\begin{aligned} E^4 + 5E^3 + (\frac{59}{8} - \frac{5}{2} B^2)E^2 + (\frac{45}{16} - \frac{9}{4} B_z^2 - \frac{33}{4} B_x^2)E + \\ + \frac{81}{256} + \frac{9}{16} B^4 - \frac{45}{32} B_z^2 - \frac{189}{32} B_x^2 = 0, \end{aligned} \quad (2.69)$$

откуда с помощью метода Феррари получаем следующие формулы для уровней энергии:

$$E_{2,3} = -\frac{5}{4} + \sqrt{y} \mp \sqrt{1 + \frac{5}{4}B^2 - y + \left(\frac{1}{2}B_x^2 - B_z^2\right)/\sqrt{y}}, \quad (2.70)$$

$$E_{0,1} = -\frac{5}{4} - \sqrt{y} \mp \sqrt{1 + \frac{5}{4}B^2 - y - \left(\frac{1}{2}B_x^2 - B_z^2\right)/\sqrt{y}}.$$

Здесь решение вспомогательного кубического уравнения

$$y = \frac{1}{3}\left(1 + \frac{5}{4}B^2\right) + \frac{2}{3}\sqrt{W} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{W^{3/2}}\right), \quad (2.71)$$

компактно записано с помощью выражений

$$W = 1 + B_x^2 - \frac{5}{4}B_z^2 + \frac{13}{16}B^4 \quad (2.72)$$

и

$$V = 1 + \frac{3}{2}B_x^2 + \frac{51}{32}B_x^4 + \frac{35}{64}B^6 - \frac{15}{8}B_z^2 - \frac{195}{32}B_x^2B_z^2 - \frac{3}{32}B_z^4. \quad (2.73)$$

Для $S > 3/2$ явные формулы для уровней энергии получаются лишь для частного значения параметра $B_z = 0$ благодаря разделению состояний на группы с эффективным понижением степени характеристических уравнений.

Заметим, что для спиновой системы с гамильтонианом $H = +S_z^2 - B_x S_x - B_z S_z$, соответствующей легкоплоскостному парамагнетику в наклонном магнитном поле, уровни энергии в совокупности будут отличаться только знаком от полученных нами для легкоосного случая, так что не станем приводить этих результатов, но будем иметь этот факт в виду для дальнейших приложений при изучении физических свойств подобных парамагнетиков.

Добавим также, что полученные результаты для уровней энергии содержат два непрерывных независимых параметра (B_x , B_z) и один дискретный S .

Снова прерываем вычисления уровней энергии, чтобы на основе уже полученных результатов продемонстрировать один важный прием для изучения физических характеристик магнитных спиновых систем.

В некоторых случаях целесообразно получать точные формулы для физических характеристик типа намагниченности и магнитной восприимчивости непосредственно на основе уравнения для уровней энергии.

Рассмотрим это на примере случая $S=1$ для легкоосного парамагнетика в наклонном магнитном поле, когда такое уравнение имеет вид

$$E^3 + 2E^2 + (1 - B_x^2 - B_z^2)E - B_x^2 = 0. \quad (2.74)$$

Отсюда для проекции намагниченности $M_x = -\partial E / \partial B_x$ в стационарном состоянии с помощью прямого дифференцирования выводим точную формулу, выраженную через соответствующий уровень энергии:

$$M_x = -2 \frac{B_x(1 + E)}{3E^2 + 4E + 1 - B_x^2 - B_z^2}, \quad (2.75)$$

а составляющая тензора магнитной восприимчивости $\chi_{xx} = -2\partial^2 E / \partial B_x^2$ в свою очередь оказывается представленной через намагниченность и энергию, если вычислить вторую производную также непосредственно из уравнения (2.74):

$$\chi_{xx} = 4 \frac{(3E + 2)M_x^2 + 2B_x M_x - E - 1}{3E^2 + 4E + 1 - B_x^2 - B_z^2}. \quad (2.76)$$

Аналогичный расчет для другой проекции намагниченности приводит к соответствующей формуле

$$M_z = -2 \frac{B_z E}{3E^2 + 4E + 1 - B_x^2 - B_z^2} \quad (2.77)$$

и далее к выражениям для двух остальных компонент восприимчивости:

$$\chi_{zz} = 4 \frac{(3E+2)M_z^2 + 2B_z M_z - E}{3E^2 + 4E + 1 - B_x^2 - B_z^2}, \quad (2.78)$$

$$\chi_{xz} = 4 \frac{(3E+2)M_x M_z + B_z M_x + B_x M_z}{3E^2 + 4E + 1 - B_x^2 - B_z^2}. \quad (2.79)$$

Преимущество выражений (2.75)–(2.79) состоит в компактной записи, поскольку непосредственное дифференцирование точных формул для уровней энергии приводит к очень громоздким результатам.

Кроме того, даже при отсутствии точных формул для уровней энергии подобная запись позволяет избежать численного дифференцирования при численных расчетах: достаточно вычислить только корни уравнения типа (2.74) для энергии.

Далее переходим к расчету уровней энергии для спиновых точных решений, соответствующих двухосному парамагнетику в магнитном поле, перпендикулярном осям анизотропии, т. е. спиновой системе с гамильтонианом $H = \alpha S_x^2 - \beta S_y^2 - BS_z$.

Этому случаю соответствует периодический эффективный потенциал

$$U(x) = \frac{[\frac{1}{4}B^2 - \alpha\beta(S+1)]\operatorname{sn}^2(x) - (\alpha + \beta)B(S + \frac{1}{2})}{\alpha + \beta \operatorname{cn}^2(x)}, \quad (2.80)$$

построенный из эллиптических функций Якоби с модулем $\sqrt{\beta/(\alpha + \beta)}$.

Собственные значения спин-гамильтониана совпадают на этот раз с $2S+1$ крайними уровнями энергии низших энергетических зон (чередующимися дном и потолком зоны) в потенциальном поле (2.80).

В S_z -представлении система уравнений для компонент c_σ собственного вектора такого гамильтониана с учетом формул для матричных элементов проекций S_x и S_y имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4}(\alpha + \beta) \sqrt{(S - \sigma)(S + \sigma + 1)(S - \sigma - 1)(S + \sigma + 2)} c_{\sigma+2} + \\
& \left[E + B\sigma + \frac{1}{2}(\beta - \alpha)(S^2 + S - \sigma^2) \right] c_{\sigma} + \\
& \frac{1}{4}(\alpha + \beta) \sqrt{(S + \sigma)(S - \sigma + 1)(S + \sigma - 1)(S - \sigma + 2)} c_{\sigma-2} = 0, \\
& \sigma = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S.
\end{aligned} \tag{2.81}$$

Естественным образом она разбивается на две подсистемы, так как разностные соотношения связывают составляющие вектора состояния через одну. Так, для целых S компоненты c_{σ} с четными номерами отделяются от таковых с нечетными.

Таким способом заменой переменных $c_{\sigma} = g_k$, где $\sigma = -S + 2k$ для одной подсистемы и $\sigma = -S + 1 + 2k$ для другой подсистемы, приходим в обоих случаях к трехчленному рекуррентному соотношению

$$-\alpha_k g_{k+1} + \beta_k g_k - \gamma_k g_{k-1} = 0, \tag{2.82}$$

в котором для первой подсистемы

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \sqrt{(S - k)(2k + 1)(2S - 2k - 1)(k + 1)}, \\
\beta_k &= E - (S - 2k)B - \frac{1}{2}(\alpha - \beta)[S^2 + S - (S - 2k)^2], \\
\gamma_k &= \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \sqrt{k(2S - 2k + 1)(2k - 1)(S - k + 1)},
\end{aligned} \tag{2.83}$$

а для второй подсистемы

$$\begin{aligned}
\alpha_k &= \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \sqrt{(2S - 2k - 1)(2k + 3)(2S - 2k - 1)(k + 1)}, \\
\beta_k &= E - (S - 2k - 1)B - \frac{1}{2}(\alpha - \beta)[S^2 + S - (S - 2k - 1)^2],
\end{aligned} \tag{2.84}$$

$$\gamma_k = \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \sqrt{k(2S - 2k + 1)(2k + 1)(S - k)},$$

так что правила построения характеристического полинома будут выглядеть так:

$$P_k(E) = b_k P_{k-1}(E) + a_k P_{k-2}(E), \quad P_0(E) = b_0, \quad P_{-1} = 1, \quad (2.85)$$

где для первой подсистемы

$$a_k = -\frac{1}{4}(\alpha + \beta)^2 k(2k - 1)(2S - 2k + 1)(S - k + 1),$$

$$b_k = E - (S - 2k)B - \frac{1}{2}(\alpha - \beta)[S^2 + S - (S - 2k)^2], \quad (2.86)$$

$k = 0, 1, \dots, S$ в случае целых S и $k = 0, 1, \dots, S - 1/2$ в случае полуцелых S , а для второй подсистемы

$$a_k = -\frac{1}{4}(\alpha + \beta)^2 k(2k + 1)(2S - 2k + 1)(S - k),$$

$$b_k = E - (S - 2k - 1)B - \frac{1}{2}(\alpha - \beta)[S^2 + S - (S - 2k - 1)^2], \quad (2.87)$$

$k = 0, 1, \dots, S - 1$ в случае целых S и $k = 0, 1, \dots, S - 1/2$ в случае полуцелых S .

Вновь на основе полученных правил построения характеристических уравнений перейдем к конкретным примерам нахождения уровней энергии для различных значений спина S .

При этом будем для простоты называть указанные подсистемы состояний и уровней энергии относящимися соответственно к "первой группе" и "второй группе".

Заметим, что полученные правила построения характеристических полиномов на основе рекуррентных соотношений удобны как для "ручных" вычислений, так и для компьютерных аналитических расчетов.

В тривиальном для спиновой системы случае $S = 0$ единственный уровень энергии $E_0 = 0$ остается постоянным при любых деформациях потенциала за счет независимых параметров α / β и B , являясь дном основной зоны.

В случае $S = 1/2$ из вида гамильтониана сразу же получаем уровни энергии (окаймление первой щели):

$$E_{0,1} = \frac{1}{4}(\alpha - \beta) \mp \frac{1}{2}B. \quad (2.88)$$

В случае $S = 1$ для состояний первой группы строим полиномы:

$$P_0(E) = E - \frac{1}{2}(\alpha - \beta), \quad P_1(E) = E^2 - (\alpha - \beta)E - \alpha\beta - B^2,$$

так что уровни энергии этой группы состояний (дно основной зоны и дно второй зоны) равны

$$E_{0,2} = \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \mp \sqrt{B^2 + \frac{1}{4}(\alpha + \beta)^2}. \quad (2.89)$$

Для состояния второй группы полином $P_0(E) = E - (\alpha - \beta)$ дает уровень энергии первого возбужденного состояния (потолок первой зоны)

$$E_1 = \alpha - \beta. \quad (2.90)$$

Этот результат также представляет особый интерес, поскольку имеем постоянный уровень энергии при любых деформациях потенциала за счет параметра B .

Далее не будем более указывать, какое именно положение занимают в зонах периодического эффективного потенциала найденные уровни энергии (их нумерация отвечает собственным значениям спин-гамильтониана).

В случае $S = 3/2$ для состояний первой группы строим полиномы:

$$P_0(E) = E - \frac{3}{4}(\alpha - \beta + 2B),$$

$$P_1(E) = E^2 - \left[\frac{5}{2}(\alpha - \beta) + B \right]E + \frac{1}{16}(9\alpha^2 - 66\alpha\beta + 9\beta^2) + \frac{9}{4}(\alpha - \beta)B - \frac{3}{4}B^2,$$

так что уровни энергии этой группы состояний равны

$$E_{1,3} = \frac{5}{4}(\alpha - \beta) + \frac{1}{2}B \mp \sqrt{\left[B - \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \right]^2 + \frac{3}{4}(\alpha + \beta)^2}. \quad (2.91)$$

Для состояния второй группы полиномы

$$P_0(E) = E - \frac{7}{4}(\alpha - \beta) - \frac{1}{2}B ,$$

$$P_1(E) = E^2 - [\frac{5}{2}(\alpha - \beta) - B]E + \frac{1}{16}(9\alpha^2 - 66\alpha\beta + 9\beta^2) - \frac{9}{4}(\alpha - \beta)B - \frac{3}{4}B^2 ,$$

так что уровни энергии этой группы состояний равны

$$E_{0,2} = \frac{5}{4}(\alpha - \beta) - \frac{1}{2}B \mp \sqrt{\left[B + \frac{1}{2}(\alpha - \beta)\right]^2 + \frac{3}{4}(\alpha + \beta)^2} . \quad (2.92)$$

Результаты для уровней энергии в случае небольших значений спина, приведенные выше, были получены ранее в работе [27], однако они важны для полноты изложения и сравнения с найденными далее.

Начиная со значения $S=2$ в точных решениях спинового происхождения уровни энергии будут выражаться формулами, содержащими кроме полиномов и радикалов тригонометрические функции.

В случае $S=2$ для состояний первой группы полиномы имеют вид

$$P_0(E) = E - (\alpha - \beta) - 2B ,$$

$$P_1(E) = E^2 - 2[2(\alpha - \beta) + B]E + \frac{3}{2}(\alpha^2 - 6\alpha\beta + \beta^2) + 6(\alpha - \beta)B^2 ,$$

$$P_2(E) = E^3 - 5(\alpha - \beta)E^2 + 4(\alpha^2 - 5\alpha\beta + \beta^2 - B^2)E + 12(\alpha - \beta)(\alpha\beta + B^2) .$$

Отсюда для уровней энергии получаем формулы тригонометрического решения данного кубического уравнения:

$$E_m = \frac{5}{2}(\alpha - \beta) + \frac{2}{3}\sqrt{13\alpha^2 + 10\alpha\beta + 13\beta^2 + 12B^2} \times \\ \times \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{(\alpha - \beta)(35\alpha^2 + 38\alpha\beta + 35\beta^2 - 72B^2)}{(13\alpha^2 + 10\alpha\beta + 13\beta^2 + 12B^2)^{3/2}} + \varphi_m\right) , \\ \varphi_m = \frac{\pi}{12}(3m^2 - 14m + 8), \quad m = 0, 2, 4 . \quad (2.93)$$

Для состояния второй группы полиномы

$$P_0(E) = E - \frac{5}{2}(\alpha - \beta) - B ,$$

$$P_1(E) = E^2 - 5(\alpha - \beta)E + 4\alpha^2 - 17\alpha\beta + 4\beta^2 - B^2 ,$$

приводят ко второй группе уровней

$$E_{1,3} = \frac{5}{2}(\alpha - \beta) \mp \sqrt{B^2 + \frac{9}{4}(\alpha + \beta)^2} . \quad (2.94)$$

В случае $S = 5/2$, опуская процедуру построения характеристического полинома, приходим к следующему кубическому уравнению для первой группы состояний:

$$\begin{aligned} E^3 - \frac{1}{4}[35(\alpha - \beta) + 6B]E^2 + \frac{1}{16}(259\alpha^2 - 966\alpha\beta + 259\beta^2 - 204\alpha B - 204\beta B - 52B^2)E + \\ + \frac{5}{64}(-45\alpha^3 + 839\alpha^2\beta - 839\alpha\beta^2 + 45\beta^3 - 270\alpha^2B + 924\alpha\beta B - 270\beta^2B + \\ + 164\alpha B^2 - 164\beta B^2 + 24B^3) = 0 , \end{aligned} \quad (2.95)$$

решения которого дают уровни энергии:

$$\begin{aligned} E_m = \frac{1}{12}(35\alpha - 35\beta + 6B) + \frac{4}{3}\sqrt{7\alpha^2 + 7\alpha\beta + 7\beta^2 - 3(\alpha - \beta)B + 3B^2} \times \\ \times \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{4(7\alpha^2 + 7\alpha\beta + 7\beta^2 - 3(\alpha - \beta)B + 3B^2)^{3/2}} + \varphi_m\right) , \\ \varphi_m = \frac{\pi}{12}(3m^2 - 20m + 25), \quad m = 1, 3, 5 , \end{aligned} \quad (2.96)$$

где

$$\begin{aligned} V = 40\alpha^3 + 9\alpha^2B - 36\alpha B^2 + 60\alpha^2\beta - 126\alpha\beta B + 36B^2\beta - \\ - 60\alpha\beta^2 + 9B\beta^2 - 40\beta^3 . \end{aligned} \quad (2.97)$$

Для второй группы состояний характеристическое уравнение

$$\begin{aligned}
E^3 - \frac{1}{4}[35(\alpha - \beta) - 6B]E^2 + \frac{1}{16}(259\alpha^2 - 966\alpha\beta + 259\beta^2 - 204\alpha B + 204\beta B - 52B^2)E + \\
+ \frac{5}{64}(-45\alpha^3 + 839\alpha^2\beta - 839\alpha\beta^2 + 45\beta^3 + 270\alpha^2B - 924\alpha\beta B + 270\beta^2B + \\
+ 164\alpha B^2 - 164\beta B^2 - 24B^3) = 0
\end{aligned} \quad (2.98)$$

имеет аналогичные решения

$$\begin{aligned}
E_m = \frac{1}{12}(35\alpha - 35\beta - 6B) + \frac{4}{3}\sqrt{7\alpha^2 + 7\alpha\beta + 7\beta^2 + 3(\alpha - \beta)B + 3B^2} \times \\
\times \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{4(7\alpha^2 + 7\alpha\beta + 7\beta^2 + 3(\alpha - \beta) + 3B^2)^{3/2}} + \varphi_m\right) \\
\varphi_m = \frac{\pi}{12}(3m^2 - 14m + 8), \quad m = 0, 2, 4, \quad (2.99)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
V = 40\alpha^3 + 9\alpha^2B - 36\alpha B^2 + 60\alpha^2\beta - 126\alpha\beta B + 36B^2\beta - \\
- 60\alpha\beta^2 + 9B\beta^2 - 40\beta^3. \quad (2.100)
\end{aligned}$$

В случае $S=3$ приходим к уравнению четвертой степени для первой группы состояний:

$$\begin{aligned}
E^4 - 14(\alpha - \beta)E^3 + (49\alpha^2 - 10B^2 - 164\alpha\beta + 49\beta^2)E^2 - \\
- 6(\alpha - \beta)(6\alpha^2 - 17B^2 - 65\alpha\beta + 6\beta^2)E - \\
- 9(24\alpha^2B^2 - B^4 + 24\alpha^3\beta - 74\alpha B^2\beta - 73\alpha^2\beta^2 + 24B^2\beta^2 + 24\alpha\beta^3) = 0,
\end{aligned} \quad (2.101)$$

так что уровни энергии этой группы состояний равны записываем в соответствии с методом Феррари:

$$E_{4,6} = \frac{7}{2}(\alpha - \beta) + \sqrt{y} \mp \sqrt{\frac{1}{4}(49\alpha^2 + 34\alpha\beta + 49\beta^2 + 20B^2) - y + (\alpha - \beta)[9(\alpha + \beta)^2 - 8B^2] / \sqrt{y}}, \quad (2.102)$$

$$E_{0,2} = \frac{7}{2}(\alpha - \beta) - \sqrt{y} \mp \sqrt{\frac{1}{4}(49\alpha^2 + 34\alpha\beta + 49\beta^2 + 20B^2) - y - (\alpha - \beta)[9(\alpha + \beta)^2 - 8B^2] / \sqrt{y}},$$

где решение вспомогательного кубического уравнения

$$y = \frac{1}{12}(49\alpha^2 + 20B^2 + 34\alpha\beta + 49\beta^2) + \frac{1}{6}\sqrt{W} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{W^{3/2}}\right) \quad (2.103)$$

компактно записано с помощью параметров

$$W = 889\alpha^4 + 712\alpha^2B^2 + 208B^4 + 740\alpha^3\beta + 2704\alpha B^2\beta + 3798\alpha^2\beta^2 + \\ + 712B^2\beta^2 + 740\alpha\beta^3 + 889\beta^4 \quad (2.104)$$

и

$$V = 24013\alpha^6 - 24132\alpha^4B^2 + 21072\alpha^2B^4 + 2240B^6 + 12270\alpha^5\beta + 157296\alpha^3B^2\beta + \\ + 43680\alpha B^4\beta + 103299\alpha^4\beta^2 + 239976\alpha^2B^2\beta^2 + 21072B^4\beta^2 - 32060\alpha^3\beta^3 + \\ + 157296\alpha B^2\beta^3 + 103299\alpha^2\beta^4 - 24132B^2\beta^4 + 12270\alpha\beta^5 + 24013\beta^6. \quad (2.105)$$

Для состояний второй группы характеристическое уравнение оказывается кубическим:

$$E^3 - 14(\alpha - \beta)E^2 + (49\alpha^2 - 158\alpha\beta + 49\beta^2 - 4B^2)E - \\ - 12(\alpha - \beta)(3\alpha^2 - 26\alpha\beta + 3\beta^2 - 2B^2) = 0, \quad (2.106)$$

так что уровни энергии равны

$$E_m = \frac{14}{3}(\alpha - \beta) + \frac{2}{3}\sqrt{49\alpha^2 + 12B^2 + 82\alpha\beta + 49\beta^2} \times \\ \times \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{(\alpha - \beta)(143\alpha^2 - 72B^2 + 254\alpha\beta + 143\beta^2)}{(49\alpha^2 + 12B^2 + 82\alpha\beta + 49\beta^2)^{3/2} + \varphi_m}\right), \\ \varphi_m = \frac{\pi}{12}(3m^2 - 20m + 25), \quad m = 1, 3, 5. \quad (2.107)$$

В случае $S = 7/2$ приходим к характеристическим уравнениям четвертой степени для обеих групп состояний. Для первой группы такое уравнение имеет вид

$$\begin{aligned}
& E^4 - (21\alpha + 2B - 21\beta) E^3 + \frac{1}{8}(987\alpha^2 + 332B - 68B^2 - \\
& -2982\alpha\beta - 332\beta B + 987\beta^2) E^2 + 16(-3229\alpha^3 - 3782\alpha^2 B + 1780\alpha B^2 + \\
& + 152B^3 + 26247\alpha^2\beta + 11116\alpha\beta B - 1780\beta B^2 - 26247\alpha\beta^2 - 3782\beta^2 B + 3229\beta^3) E + \\
& + \frac{21}{256}(525\alpha^4 + 4200\alpha^3 B - 3624\alpha^2 B^2 - 992\alpha B^3 + 80B^4 - \\
& -18324\alpha^3\beta - 30392\alpha^2\beta B + 10448\alpha\beta B^2 + 992\beta B^3 + 47118\alpha^2\beta^2 + \\
& + 30392\alpha\beta^2 B - 3624\beta^2 B^2 - 18324\alpha\beta^3 - 4200\beta^3 B + 525\beta^4), \\
\end{aligned} \tag{2.108}$$

так что уровни энергии равны

$$\begin{aligned}
E_{5,7} &= \frac{1}{4}(21\alpha + 2B - 21\beta) + \sqrt{y} \mp \sqrt{21\alpha^2 + 21\alpha\beta + 21\beta^2 - 5\alpha B + 5B^2 + 5\beta B - y - R/\sqrt{y}}, \\
E_{1,3} &= \frac{1}{4}(21\alpha + 2B - 21\beta) - \sqrt{y} \mp \sqrt{21\alpha^2 + 21\alpha\beta + 21\beta^2 - 5\alpha B + 5B^2 + 5\beta B - y + R/\sqrt{y}}, \\
\end{aligned} \tag{2.109}$$

где для компактной записи введена величина

$$R = 2(-8\alpha^3 - \alpha^2 B + 4\alpha B^2 - 12\alpha^2\beta + 14\alpha\beta B - 4\beta B^2 + 12\alpha\beta^2 - \beta^2 B + 8\beta^3), \tag{2.110}$$

а решение вспомогательного кубического уравнения

$$y = \frac{1}{3}(21\alpha^2 - 5\alpha B + 5B^2 + 21\alpha\beta + 5\beta B + 21\beta^2) + \frac{2}{3}\sqrt{W} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{2W^{3/2}}\right) \tag{2.111}$$

содержит параметры

$$\begin{aligned}
W &= 189\alpha^4 - 108\alpha^3 B + 103\alpha^2 B^2 - 26\alpha B^3 + 13B^4 + 378\alpha^3\beta - 162\alpha^2\beta B + \\
& + 208\alpha\beta B^2 + 26\beta B^3 + 567\alpha^2\beta^2 + 162\alpha\beta^2 B + 103\beta^2 B^2 + 378\alpha\beta^3 + 108\beta^3 B + 189\beta^4 \\
\end{aligned} \tag{2.112}$$

и

$$\begin{aligned}
V = & 4374\alpha^6 - 2592\alpha^5 B + 1053\alpha^4 B^2 - 1744\alpha^3 B^3 + 1236\alpha^2 B^4 - \\
& - 210\alpha B^5 + 70B^6 + 13122\alpha^5 \beta - 18630\alpha^4 \beta B + 12798\alpha^3 \beta^2 B - \\
& - 1140\alpha^2 \beta B^3 + 1470\alpha \beta B^4 + 210\beta B^5 + 14580\alpha^4 \beta^2 - \\
& - 12312\alpha^3 \beta^2 B + 20412\alpha^2 \beta^2 B^2 + 1140\alpha \beta^2 B^3 + 1236\beta^2 B^4 + \\
& + 7290\alpha^3 \beta^3 + 12312\alpha^2 \beta^3 B + 12798\alpha \beta^3 B^2 + 1744\beta^3 B^3 + \\
& + 14580\alpha^2 \beta^4 + 18630\alpha \beta^4 B + 1053\beta^4 B^2 + 13122\alpha \beta^5 + 2592\beta^5 B + 4374\beta^6.
\end{aligned}
\tag{2.113}$$

Для второй группы характеристическое уравнение имеет вид

$$\begin{aligned}
E^4 - (21\alpha - 2B - 21\beta) E^3 + \frac{1}{8}(987\alpha^2 - 332B - 68B^2 - \\
- 2982\alpha\beta + 332\beta B + 987\beta^2) E^2 + 16(-3229\alpha^3 + 3782\alpha^2 B + 1780\alpha B^2 - \\
- 152B^3 + 26247\alpha^2 \beta + 11116\alpha \beta B - 1780\beta B^2 - 26247\alpha \beta^2 + 3782\beta^2 B + 3229\beta^3) E + \\
+ \frac{21}{256}(525\alpha^4 - 4200\alpha^3 B - 3624\alpha^2 B^2 + 992\alpha B^3 + 80B^4 - \\
- 18324\alpha^3 \beta + 30392\alpha^2 \beta B + 10448\alpha \beta B^2 + 992\beta B^3 + 47118\alpha^2 \beta^2 - \\
- 30392\alpha \beta^2 B - 3624\beta^2 B^2 - 18324\alpha \beta^3 + 4200\beta^3 B + 525\beta^4),
\end{aligned}
\tag{2.114}$$

так что уровни энергии равны

$$\begin{aligned}
E_{4,6} = \frac{1}{4}(21\alpha - 2B - 21\beta) + \sqrt{y} \mp \sqrt{21\alpha^2 + 21\alpha\beta + 21\beta^2 + 5\alpha B + 5B^2 - 5\beta B - y - R/\sqrt{y}}, \\
E_{0,2} = \frac{1}{4}(21\alpha - 2B - 21\beta) - \sqrt{y} \mp \sqrt{21\alpha^2 + 21\alpha\beta + 21\beta^2 + 5\alpha B + 5B^2 - 5\beta B - y + R/\sqrt{y}},
\end{aligned}
\tag{2.115}$$

где для компактной записи введена величина

$$R = 2(-8\alpha^3 + \alpha^2 B + 4\alpha B^2 - 12\alpha^2 \beta - 14\alpha \beta B - 4\beta B^2 + 12\alpha \beta^2 - \beta^2 B + 8\beta^3),
\tag{2.116}$$

а решение вспомогательного кубического уравнения

$$y = \frac{1}{3}(21\alpha^2 + 5\alpha B + 5B^2 + 21\alpha\beta - 5\beta B + 21\beta^2) + \frac{2}{3}\sqrt{W} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{2W^{3/2}}\right) \quad (2.117)$$

содержит параметры

$$W = 189\alpha^4 + 108\alpha^3 B + 103\alpha^2 B^2 + 26\alpha B^3 + 13 B^4 + \\ + 378\alpha^3 \beta + 162\alpha^2 \beta B - 208\alpha\beta B^2 - 26\beta B^3 + 567\alpha^2 \beta^2 - 162\alpha\beta^2 B + \\ + 103\beta^2 B^2 + 378\alpha\beta^3 - 108\beta^3 B + 189\beta^4 \quad (2.118)$$

и

$$V = 4374\alpha^6 + 2592\alpha^5 B + 1053\alpha^4 B^2 + 1744\alpha^3 B^3 + 1236\alpha^2 B^4 + \\ + 210\alpha B^5 + 70 B^6 + 13122\alpha^5 \beta + 18630\alpha^4 \beta B + 12798\alpha^3 \beta B^2 + \\ + 1140\alpha^2 \beta B^3 + 1470\alpha\beta B^4 - 210\beta B^5 + 14580\alpha^4 \beta^2 + \\ + 12312\alpha^3 \beta^2 B + 20412\alpha^2 \beta^2 B^2 - 1140\alpha\beta^2 B^3 + 1236\beta^2 B^4 + \\ + 7290\alpha^3 \beta^3 - 12312\alpha^2 \beta^3 B + 12798\alpha\beta^3 B^2 - 1744\beta^3 B^3 + \\ + 14580\alpha^2 \beta^4 - 18630\alpha\beta^4 B + 1053\beta^4 B^2 + 13122\alpha\beta^5 - \\ - 2592\beta^5 B + 4374\beta^6. \quad (2.119)$$

В случае $S=4$ для первой группы состояний характеристическое уравнение при произвольных константах анизотропии α и β оказывается 5-й степени:

$$E^5 + (273\alpha^2 - 20B^2 - 782\alpha\beta + 273\beta^2)E^3 - 30(\alpha - \beta)E^4 - \\ - 4(\alpha - \beta)(205\alpha^2 - 118B^2 - 1230\alpha\beta + 205\beta^2)E^2 + \\ + 16(36\alpha^4 - 197\alpha^2 B^2 + 4B^4 - 773\alpha^3 \beta + 546\alpha\beta B^2 + 1838\alpha^2 \beta^2 - \\ - 197\beta^2 B^2 - 773\alpha\beta^3 + 36\beta^4)E - 640(\alpha - \beta)(-9\alpha^2 B^2 + B^4 - \\ - 9\alpha^3 \beta + 47\alpha\beta B^2 + 46\alpha^2 \beta^2 - 9\beta^2 B^2 - 9\alpha\beta^3). \quad (2.120)$$

Это означает, что его корни нельзя записать в явном виде. Однако из структуры уравнения видно, что при $\alpha = \beta$ свободный член и вклады с четными степенями E исчезают. Следовательно, один из корней равен нулю, а остальные определяются биквадратным уравнением (чтобы не загромождать формулы, константы анизотропии удобно положить равными единице, что не снижает общности):

$$E^4 - (236 + 20B^2)E^2 + 64(91 + 38B^2 + B^4) = 0, \quad (2.121)$$

так что уровни энергии первой группы состояний равны

$$\begin{aligned} E_8 &= \sqrt{118 + 10B^2 + 6\sqrt{225 - 2B^2 + B^4}}, \\ E_6 &= \sqrt{118 + 10B^2 - 6\sqrt{225 - 2B^2 + B^4}}, \\ E_4 &= 0, \\ E_2 &= -\sqrt{118 + 10B^2 - 6\sqrt{225 - 2B^2 + B^4}}, \\ E_0 &= -\sqrt{118 + 10B^2 + 6\sqrt{225 - 2B^2 + B^4}}, \end{aligned} \quad (2.122)$$

Для состояний второй группы характеристическое уравнение оказывается 4-й степени:

$$\begin{aligned} E^4 - 30(\alpha - \beta)E^3 + (273\alpha^2 - 10B^2 - 772\alpha\beta + 273\beta^2)E^2 - \\ - 2(\alpha - \beta)(410\alpha^2 - 91B^2 - 2315\alpha\beta + 410\beta^2)E + \\ + 576\alpha^4 - 712\alpha^2B^2 + 9B^4 - 9928\alpha^3\beta + 1946\alpha\beta B^2 + \\ + 22673\alpha^2\beta^2 - 712\beta^2B^2 - 9928\alpha\beta^3 + 576\beta^4. \end{aligned} \quad (2.123)$$

так что уровни энергии на основании метода Феррари равны

$$\begin{aligned} E_{5,7} &= \frac{15}{2}(\alpha - \beta) + \sqrt{y} \mp \sqrt{\frac{1}{4}(129\alpha^2 + 194\alpha\beta + 129\beta^2 + 20B^2) - y - R / \sqrt{y}}, \\ E_{1,3} &= \frac{15}{2}(\alpha - \beta) - \sqrt{y} \mp \sqrt{\frac{1}{4}(129\alpha^2 + 194\alpha\beta + 129\beta^2 + 20B^2) - y + R / \sqrt{y}}, \end{aligned} \quad (2.124)$$

где для компактной записи введена величина

$$R = -(\alpha - \beta)(25\alpha^2 - 8B^2 + 50\alpha\beta + 25\beta^2), \quad (2.125)$$

а решение вспомогательного кубического уравнения

$$y = \frac{1}{12}(129\alpha^2 + 20B^2 + 194\alpha\beta + 129\beta^2) + \frac{1}{6}\sqrt{W} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{W^{3/2}}\right) \quad (2.126)$$

также кратко записано с использованием параметров

$$W = 7641\alpha^4 + 2376\alpha^2B^2 + 208B^4 + 23652\alpha^3\beta + 6032\alpha\beta B^2 + \\ + 36118\alpha^2\beta^2 + 2376\beta^2B^2 + 23652\alpha\beta^3 + 7641\beta^4 \quad (2.127)$$

и

$$V = 540189\alpha^6 + 103356\alpha^4B^2 + 47952\alpha^2B^4 + 2240B^6 + \\ + 2227662\alpha^5\beta + 1066608\alpha^3\beta B^2 + 97440\alpha\beta B^4 + 4712499\alpha^4\beta^2 + \\ + 1803624\alpha^2\beta^2B^2 + 47952\beta^2B^4 + 5787908\alpha^3\beta^3 + 1066608\alpha\beta^3B^2 + \\ + 4712499\alpha^2\beta^4 + 103356\beta^4B^2 + 2227662\alpha\beta^5 + 540189\beta^6. \quad (2.128)$$

В случае $S > 4$ характеристические полиномы имеют высокую степень, так что в общем случае для их корней нельзя записать явных выражений. Поэтому в дальнейшем будем рассматривать примеры с равными константами анизотропии $\alpha = \beta$ (считая их равными единице), для которых можно понизить степень уравнений, как уже было при $S = 4$ для части состояний.

Так, в случае $S = 5$ характеристический полином для состояний первой группы, имея 6-ю степень, приводит к бикубическому уравнению:

$$E^6 - (651 + 35B^2)E^4 + (65619 + 13782B^2 + 259B^4)E^2 - \\ - 225(2025 + 2131B^2 + 107B^4 + B^6) = 0. \quad (2.129)$$

Отсюда, используя формулы тригонометрического решения соответствующего вспомогательного кубического уравнения

$$y_m = \frac{1}{3}(651 + 35B^2) + \frac{16}{3}\sqrt{3546 + 66B^2 + 7B^4} \times$$

$$\times \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{175419 + 513B^2 - 414B^4 + 10B^6}{(3546 + 66B^2 + 7B^4)^{3/2}} + \varphi_m \right],$$

$$\varphi_m = \frac{\pi}{3}(3m^2 - 13m + 12), \quad m = 1, 2, 3, \quad (2.130)$$

получаем уровни энергии первой группы состояний:

$$E_{10} = \sqrt{y_3}, \quad E_8 = \sqrt{y_2}, \quad E_6 = \sqrt{y_1},$$

$$E_4 = -\sqrt{y_1}, \quad E_2 = -\sqrt{y_2}, \quad E_0 = -\sqrt{y_3}. \quad (2.131)$$

Для состояний второй группы характеристическое уравнение

$$E^5 - (636 + 20B^2)E^3 + 64(891 + 78B^2 + B^4)E = 0 \quad (2.132)$$

сводится к биквадратному отщеплением нулевого корня, так что вторая группа уровней энергии равна

$$E_{7,9} = \sqrt{318 + 10B^2 \mp 6\sqrt{1225 + 38B^2 + B^4}},$$

$$E_5 = 0,$$

$$E_{1,3} = -\sqrt{318 + 10B^2 \pm 6\sqrt{1225 + 38B^2 + B^4}}. \quad (2.133)$$

В случае $S = 6$ характеристическое уравнение для состояний первой группы, имея 7-ю степень, также сводится к бикубическому отщеплением нулевого корня:

$$E^7 - 56(27 + B^2)E^5 + 16(28161 + 3510B^2 + 49B^4)E^3 -$$

$$- 2304(8085 + 3721B^2 + 137B^4 + B^6)E = 0. \quad (2.134)$$

Отсюда, используя формулы тригонометрического решения соответствующего вспомогательного кубического уравнения

$$y_m = \frac{56}{3}(27 + B^2) + \frac{8}{3}\sqrt{58401 + 54B^2 + 49B^4} \times$$

$$\times \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{10037601 + 64881B^2 - 15633B^4 + 143B^6}{(58401 + 54B^2 + 49B^4)^{3/2}} + \varphi_m \right],$$

$$\varphi_m = \frac{\pi}{3}(3m^2 - 13m + 12), \quad m = 1, 2, 3,$$

получаем уровни энергии первой группы состояний:

$$\begin{aligned} E_{12} &= \sqrt{y_3}, & E_{10} &= \sqrt{y_2}, & E_8 &= \sqrt{y_1}, \\ E_6 &= 0, & E_4 &= -\sqrt{y_1}, & E_2 &= -\sqrt{y_2}, & E_0 &= -\sqrt{y_3}. \end{aligned} \quad (2.135)$$

Для состояний второй группы характеристическое уравнение $E^6 - 7(213 + 5B^2)E^4 + (421155 + 26214B^2 + 259B^4)E^2 -$

$$-225(53361 + 7459B^2 + 179B^4 + B^6) = 0 \quad (2.136)$$

сводится к бикубическому, так что, записывая для соответствующего кубического уравнения корни в тригонометрической форме

$$\begin{aligned} y_m &= \frac{7}{3}(213 + 5B^2) + \frac{16}{3}\sqrt{14994 + 402B^2 + 7B^4} \times \\ &\times \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{1271403 + 27081B^2 + 306B^4 + 10B^6}{(14994 + 402B^2 + 7B^4)^{3/2}} + \varphi_m \right] \\ \varphi_m &= \frac{\pi}{3}(3m^2 - 13m + 12), \quad m = 1, 2, 3, \end{aligned}$$

получаем уровни энергии второй группы состояний:

$$\begin{aligned} E_{11} &= \sqrt{y_3}, & E_9 &= \sqrt{y_2}, & E_7 &= \sqrt{y_1}, \\ E_5 &= -\sqrt{y_1}, & E_3 &= -\sqrt{y_2}, & E_1 &= -\sqrt{y_3}. \end{aligned} \quad (2.137)$$

В случае $S = 7$ характеристическое уравнение для состояний первой группы, имея 8-ю степень, сводится к бичетверному:

$$E^8 - 84(37 + B^2)E^6 + 6(372785 + 30682B^2 + 329B^4)E^4 -$$

$$\begin{aligned}
& -4(82173049 + 20039727B^2 + 554835B^4 + 3229B^6)E^2 + \\
& + 11025(342225 + 362164B^2 + 20214B^4 + 276B^6 + B^8) = 0,
\end{aligned}
\tag{2.138}$$

так что в соответствии с методом Феррари получаем уровни энергии первой группы:

$$\begin{aligned}
E_{12,14} &= \sqrt{21(37 + B^2) + \sqrt{y} \mp \sqrt{48(14434 + 122B_2 + 7B^4) - y + R/\sqrt{y}}}, \\
E_{8,10} &= \sqrt{21(37 + B^2) - \sqrt{y} \mp \sqrt{48(14434 + 122B_2 + 7B^4) - y - R/\sqrt{y}}}, \\
E_6 &= -E_8, \quad E_4 = -E_{10}, \quad E_2 = -E_{12}, \quad E_0 = -E_{14},
\end{aligned}
\tag{2.139}$$

где

$$R = 512(295715 + 2157B^2 - 174B^4 + 2B^2), \tag{2.140}$$

а решение соответствующего вспомогательного кубического уравнения

$$y = 16 \left[14434 + 122B^2 + 7B^4 + 2\sqrt{3W} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{9\sqrt{3}V}{W^{3/2}} \right) \right] \tag{2.141}$$

компактно записано с помощью выражений

$$W = 17934588 + 372568B^2 + 40704B^4 + 756B^6 + 7B^8 \tag{2.142}$$

и

$$\begin{aligned}
V &= 4455454752 + 75616408B^2 + 1449996B^4 + \\
& + 601936B^6 + 15382B^8 + 162B^{10} + B^{12}.
\end{aligned}
\tag{2.143}$$

Для состояний второй группы характеристическое уравнение

$$\begin{aligned}
& E^7 - 56(55 + B^2)E^5 + 16(134617 + 6254B^2 + 49B^4)E^3 - \\
& - 2304(120393 + 11785B^2 + 221B^4 + B^6)E = 0
\end{aligned}
\tag{2.144}$$

отщеплением нулевого корня сводится к бикубическому, так что, записывая корни соответствующего кубического уравнения в тригонометрической форме

$$y_m = \frac{8}{3} \left[7(55 + B^2) + \sqrt{W} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{V}{W^{3/2}} \right) + \varphi_m \right],$$

$$\varphi_m = \frac{\pi}{3} (3m^2 - 13m + 12), \quad m = 1, 2, 3, \quad (2.145)$$

где

$$W = 189049 + 2798B^2 + 49B^4 \quad (2.146)$$

и

$$V = 48596093 + 478329B^2 - 3621B^4 + 143B^6, \quad (2.147)$$

получаем уровни энергии второй группы состояний:

$$E_{13} = \sqrt{y_3}, \quad E_{11} = \sqrt{y_2}, \quad E_9 = \sqrt{y_1},$$

$$E_7 = 0, \quad E_5 = -\sqrt{y_1}, \quad E_3 = -\sqrt{y_2}, \quad E_1 = -\sqrt{y_3}. \quad (2.148)$$

В случае $S = 8$ для первой группы состояний приходим к уравнению 9-й степени

$$E^9 - 24(243 + 5B^2)E^7 + 48(183987 + 10746B^2 + 91B^4)E^5 -$$

$$- 256(13563045 + 2027493B^2 + 43353B^4 + 205B^6)E^3 +$$

$$+ 147456(1447875 + 705780B^2 + 29986B^4 + 332B^6 + B^8)E = 0, \quad (2.149)$$

которое после отщепления нулевого корня оказывается бичетверным, так что уровни энергии этой группы состояний в соответствии с методом Феррари равны

$$E_{14,16} = \sqrt{6(243 + 5B^2) + \sqrt{y} \mp \sqrt{12(163467 + 378B^2 + 43B^4) - y + R/y}}, \quad (2.150)$$

$$E_{10,12} = \sqrt{6(243 + 5B^2) - \sqrt{y} \mp \sqrt{12(163467 + 378B^2 + 43B^4) - y - R/y}},$$

$$E_8 = 0, \quad E_6 = -E_{10}, \quad E_4 = -E_{12}, \quad E_2 = -E_{14}, \quad E_0 = -E_{16},$$

где

$$R = 1600(392931 + 2439B^2 - 171B^4 + B^6), \quad (2.151)$$

а решение вспомогательного кубического уравнения

$$y = 4 \left[163467 + 378B^2 + 43B^4 + 2\sqrt{3W} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{9\sqrt{3}V}{W^{3/2}} \right) \right] \quad (2.152)$$

компактно записано с помощью величин

$$W = 2865541563 + 4106484B^2 + 2204482B^4 + 26036B^6 + 283B^8 \quad (2.153)$$

и

$$V = 8590519354023 + 28735076646B^2 - 2687038535B^4 + 190829460B^6 + 4778185B^8 + 34086B^{10} + 247B^{12}. \quad (2.154)$$

Характеристическое уравнение для состояний второй группы, имея 8-ю степень, является бичетверным:

$$\begin{aligned} E^8 - 84(69 + B^2)E^6 + 6(1438065 + 51738B^2 + 329B^4)E^4 - \\ - 4(797787225 + 57612015B^2 + 864819B^4 + 3229B^6)E^2 + \\ + 11025(12006225 + 1731636B^2 + 47734B^4 + 404B^6 + B^8) = 0, \end{aligned} \quad (2.155)$$

так что в соответствии с методом Феррари получаем уровни энергии второй группы:

$$\begin{aligned} E_{13,15} &= \sqrt{21(69 + B^2) + \sqrt{y} \mp \sqrt{48(41346 + 570B^2 + 7B^4) - y + R/\sqrt{y}}}, \\ E_{9,11} &= \sqrt{21(69 + B^2) - \sqrt{y} \mp \sqrt{48(41346 + 570B^2 + 7B^4) - y - R/\sqrt{y}}}, \\ E_7 &= -E_9, \quad E_5 = -E_{11}, \quad E_3 = -E_{13}, \quad E_1 = -E_{15}, \end{aligned} \quad (2.156)$$

где

$$R = 512(1232739 + 13005B^2 + 18B^4 + 2B^6), \quad (2.157)$$

а решение соответствующего вспомогательного кубического уравнения

$$y = 16 \left[41346 + 570B^2 + 7B^4 + 2\sqrt{3W} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{9\sqrt{3}V}{W^{3/2}} \right) \right]$$

компактно записано с помощью выражений

$$W = 185816700 + 7006680B^2 + 167488B^4 + 1652B^6 + 7B^8 \quad (2.159)$$

и

$$V = 140609124000 + 7100674200B^2 + 229581580B^4 + 5103312B^6 + 59062B^8 + 354B^{10} + B^{12}. \quad (2.160)$$

В случае $S=9$ для первой группы состояний приходим к уравнению 10-й степени

$$\begin{aligned} E^{10} - 33(309 + 5B^2)E^8 + 66(445509 + 19434B^2 + 133B^4)E^6 - \\ - 2(12939463989 + 1306696527B^2 + 22114719B^4 + 86405B^6)E^4 + \\ + 9(579241908189 + 154664245044B^2 + 5092522414B^4 + \\ + 46335284B^6 + 117469B^8)E^2 - 893025(98903025 + \\ + 105007621B^2 + 6204010B^4 + 99978B^6 + 565B^8 + B^{10}), \end{aligned} \quad (2.161)$$

которое уже нельзя свести к форме, имеющей корни, записываемые в явном виде.

Для второй группы состояний приходим к уравнению 9-й степени

$$\begin{aligned} E^9 - 24(423 + 5B^2)E^7 + 48(603243 + 17298B^2 + 91B^4)E^5 - \\ - 256(96327873 + 5340069B^2 + 65493B^4 + 205B^6)E^3 + \\ + 147456(29196531 + 3041316B^2 + 67426B^4 + 476B^6 + B^8)E = 0, \end{aligned} \quad (2.162)$$

которое после отщепления нулевого корня оказывается бичетверным, так что уровни энергии этой группы состояний в соответствии с методом Феррари равны

$$E_{15,17} = \sqrt{6(423 + 5B^2) + \sqrt{y}} \mp \sqrt{12(403875 + 3474B^2 + 43B^4) - y} + R/\sqrt{y},$$

$$E_{11,13} = \sqrt{6(423 + 5B^2) - \sqrt{y}} \mp \sqrt{12(403875 + 3474B^2 + 43B^4) - y} - R/\sqrt{y},$$

$$E_9 = 0, \quad E_7 = -E_{11}, \quad E_5 = -E_{13}, \quad E_3 = -E_{15}, \quad E_1 = -E_{17},$$
(2.163)

где

$$R = 1600(1323135 + 8271B^2 - 63B^4 + B^6), \quad (2.164)$$

а решение вспомогательного кубического уравнения

$$y = 4 \left[403875 + 3474B^2 + 43B^4 + 2\sqrt{3W} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{9\sqrt{3}V}{W^{3/2}} \right) \right]$$
(2.165)

компактно записано с помощью величин

$$W = 20117176875 + 427205700B^2 + 8521042B^4 + 66788B^6 + 283B^8$$
(2.166)

и

$$V = 152791411359375 + 4325378208750B^2 + 95479513225B^4 + 1769372004B^6 + 17422609B^8 + 87438B^{10} + 247B^{12}. \quad (2.167)$$

В заключение добавим еще несколько случаев с точными решениями при $\alpha = \beta = 1$ для полуцелых значений спина $S = 9/2, 11/2, 13/2, 15/2, 17/2$, для которых в явном виде удастся получить точные формулы для уровней энергии лишь при $B = 0$. Все уровни энергии двукратно вырождены, так что характеристические уравнения для обеих групп совпадают.

В случае $S = 9/2$ характеристическое уравнение имеет вид

$$E^5 - 396E^3 + 19008E = 0, \quad (2.168)$$

так что уровни энергии равны

$$E_9 = E_8 = \sqrt{198 + 6\sqrt{561}}, \quad E_7 = E_6 = \sqrt{198 - 6\sqrt{561}},$$

$$E_5 = E_4 = 0, \quad (2.169)$$

$$E_3 = E_2 = -\sqrt{198 - 6\sqrt{561}}, \quad E_1 = E_0 = -\sqrt{198 + 6\sqrt{561}}.$$

В случае $S=11/2$ имеем бикубическое характеристическое уравнение

$$E^6 - 1001E^4 + 172315E^2 - 2338875 = 0, \quad (2.170)$$

для которого решения кубического уравнения записываем в тригонометрической форме:

$$y_m = \frac{1001}{3} + \frac{16}{3}\sqrt{7579} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{45878}{689\sqrt{7579}} + \varphi_m\right),$$

$$\varphi_m = \frac{\pi}{3}(3m^2 - 13m + 12), \quad m=1,2,3,$$

а уровни энергии равны

$$E_{11} = E_{10} = \sqrt{y_3}, \quad E_9 = E_8 = \sqrt{y_2}, \quad E_7 = E_6 = \sqrt{y_1}, \\ E_5 = E_4 = -\sqrt{y_1}, \quad E_3 = E_2 = -\sqrt{y_2}, \quad E_1 = E_0 = -\sqrt{y_3}. \quad (2.171)$$

В случае $S=13/2$ имеем характеристическое уравнение

$$E^7 - 2184E^5 + 1012752E^3 - 74794752E = 0, \quad (2.172)$$

которое отщеплением нулевого корня сводится к бикубическому, так что решения соответствующего кубического уравнения записываем в тригонометрической

$$y_m = 728 + 40\sqrt{481} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{6823}{481^{3/2}} + \varphi_m\right),$$

$$\varphi_m = \frac{\pi}{3}(3m^2 - 13m + 12), \quad m=1,2,3,$$

а уровни энергии равны

$$E_{13} = E_{12} = \sqrt{y_3}, \quad E_{11} = E_{10} = \sqrt{y_2}, \quad E_9 = E_8 = \sqrt{y_1}, \\ E_7 = E_6 = 0, \quad (2.173)$$

$$E_5 = E_4 = -\sqrt{y_1}, \quad E_3 = E_2 = -\sqrt{y_2}, \quad E_1 = E_0 = -\sqrt{y_3}.$$

В случае $S=15/2$ имеем бичетверное характеристическое уравнение

$$E^8 - 4284E^6 + 4488102E^4 - 1062230652E^2 + 22347950625 = 0, \quad (2.174)$$

для которого решения вспомогательного кубического уравнения записываем в тригонометрической форме:

$$y = 144 \left[2771 + 30\sqrt{10061} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{24275201}{271647\sqrt{10061}} \right) \right], \quad (2.175)$$

а уровни энергии равны

$$\begin{aligned} E_{15} &= E_{14} = \sqrt{1071 + \sqrt{y} + \sqrt{1197072 - y + 319140864/\sqrt{y}}}, \\ E_{13} &= E_{12} = \sqrt{1071 + \sqrt{y} - \sqrt{1197072 - y + 319140864/\sqrt{y}}}, \\ E_{11} &= E_{10} = \sqrt{1071 - \sqrt{y} + \sqrt{1197072 - y - 319140864/\sqrt{y}}}, \\ E_9 &= E_8 = \sqrt{1071 - \sqrt{y} - \sqrt{1197072 - y - 319140864/\sqrt{y}}}, \\ E_7 &= E_6 = -E_9, \quad E_5 = E_4 = -E_{11}, \\ E_3 &= E_2 = -E_{13}, \quad E_1 = E_0 = -E_{15}. \end{aligned} \quad (2.176)$$

Наконец, в случае $S=17/2$ характеристическое уравнение

$$E^9 - 7752E^7 + 16263696E^5 - 9531032320E^3 + 995361177600E = 0$$

после отщепления нулевого корня сводится к бичетверному, так что на основе метода Феррари используем решение вспомогательного кубического уравнения, которое записываем в тригонометрической форме:

$$y = 1045228 + 168\sqrt{53932089} \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{103853187\sqrt{57}}{946177^{3/2}} \right). \quad (2.178)$$

При этом уровни энергии равны

$$\begin{aligned}
E_{17} &= E_{16} = \sqrt{1938 + \sqrt{y} + \sqrt{3135684 - y + 1180888000 / \sqrt{y}}} , \\
E_{15} &= E_{14} = \sqrt{1938 + \sqrt{y} - \sqrt{3135684 - y + 1180888000 / \sqrt{y}}} , \\
E_{13} &= E_{12} = \sqrt{1938 - \sqrt{y} + \sqrt{3135684 - y - 1180888000 / \sqrt{y}}} , \\
E_{11} &= E_{10} = \sqrt{1938 - \sqrt{y} - \sqrt{3135684 - y - 1180888000 / \sqrt{y}}} , \\
E_9 &= E_8 = 0 , \\
E_7 &= E_6 = -E_{11} , \quad E_5 = E_4 = -E_{13} , \\
E_3 &= E_2 = -E_{15} , \quad E_1 = E_0 = -E_{17} .
\end{aligned} \tag{2.179}$$

В заключение переходим к расчету уровней энергии для спиновых точных решений, соответствующих двухосному парамагнетизму в произвольно направленном магнитном поле, т. е. спиновой системе с гамильтонианом

$$H = \alpha S_x^2 - \beta S_y^2 - B_x S_x - B_y S_y - B_z S_z . \tag{2.180}$$

В данном случае использованный ранее метод построения характеристического уравнения непригоден, поскольку в любом спиновом представлении система уравнений для собственного вектора будет иметь пятичленный вид. Однако для малых значений спина S , при которых только и возможно получение явных формул для уровней энергии, нетрудно вычислить соответствующий определитель системы непосредственно.

Вновь, переходя к конкретным примерам нахождения уровней энергии, в тривиальном случае $S = 0$ имеем единственный уровень энергии $E_0 = 0$.

В случае $S = 1/2$ из вида гамильтониана также сразу получаем уровни энергии:

$$E_{0,1} = \frac{1}{4}(\alpha - \beta) \mp \frac{1}{2}B , \tag{2.181}$$

$$B = \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}.$$

В случае $S=1$ непосредственным вычислением определителя приходим к характеристическому уравнению

$$E^3 - 2(\alpha - \beta)E^2 + (\alpha^2 - 3\alpha\beta + \beta^2 - B^2)E + \alpha^2\beta - \alpha\beta^2 + \alpha(B_y^2 + B_z^2) - \beta(B_x^2 + B_z^2) = 0. \quad (2.182)$$

Отсюда для уровней энергии получаем формулы тригонометрического решения данного кубического уравнения:

$$E_m = \frac{2}{3}(\alpha - \beta) + \frac{2}{3}\sqrt{\alpha^2 + \alpha\beta + \beta^2 + 3B^2} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{V}{(\alpha^2 + \alpha\beta + \beta^2 + 3B^2)^{3/2}} + \varphi_m \right],$$

$$\varphi_m = \frac{\pi}{3}(3m^2 - 7m + 2), \quad m = 0, 1, 2, \quad (2.183)$$

где введен вспомогательный параметр

$$V = -\frac{1}{2}[(\alpha - \beta)(2\alpha^2 + 5\alpha\beta + 2\beta^2 + 27B_z^2 - 18B^2) + 27(\alpha B_y^2 - \beta B_x^2)]. \quad (2.184)$$

В случае $S = 3/2$ приходим к уравнению четвертой степени:

$$\begin{aligned} E^4 - 5(\alpha - \beta)E^3 + \frac{1}{8}(59\alpha^2 - 166\alpha\beta + 59\beta^2 - 20B^2)E^2 + \\ + \frac{3}{16}[-15\alpha^3 + 125\alpha^2\beta - 125\alpha\beta^2 + 15\beta^3 + 4\alpha(11B^2 - 8B_x^2) - 4\beta(11B^2 - 8B_y^2)]E + \\ + \frac{9}{256}[9\alpha^4 - 132\alpha^3\beta + 50\alpha^2\beta^2 - 132\alpha\beta^3 + 9\beta^4 - 8\alpha^2(21B^2 - 16B_x^2) + \\ + 16\alpha\beta(29B^2 - 24B_x^2 - 24B_y^2) - 8\beta^2(21B^2 - 16B_y^2) + 16B^4], \end{aligned} \quad (2.185)$$

так что в соответствии с методом Феррари корни такого уравнения, определяющие уровни энергии, можно записать в следующем виде:

$$E_{2,3} = \frac{5}{4}(\alpha - \beta) + \sqrt{y} \mp \sqrt{F - y + R / \sqrt{y}},$$

$$E_{0,1} = \frac{5}{4}(\alpha - \beta) - \sqrt{y} \mp \sqrt{F - y - R / \sqrt{y}},$$
(2.186)

где

$$F = \alpha^2 + \alpha\beta + \beta^2 + \frac{5}{4}B^2$$
(2.187)

$$R = \alpha(B_x^2 - \frac{1}{2}B_y^2 - \frac{1}{2}B_z^2) - \beta(B_y^2 - \frac{1}{2}B_x^2 - \frac{1}{2}B_z^2)$$
(2.188)

а решение вспомогательного кубического уравнения

$$y = \frac{1}{3}(\alpha^2 + \alpha\beta + \beta^2 + \frac{5}{4}B^2) + \frac{2}{3}\sqrt{W} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{W^{3/2}}\right)$$
(2.189)

может быть записано с помощью величин W и V на основании формул из прил. 2. Явные выражения для них мы здесь не приводим в силу их громоздкости.

Однако уже при $S=2$ характеристическое уравнение имеет 5-ю степень, так что его корни в общем случае нельзя записать в виде явных формул, хотя для частных значений параметров это становится возможным благодаря разделению состояний на группы с эффективным понижением степени уравнений (см. предыдущие расчеты).

Добавим также, что полученные в этом подразделе результаты для уровней энергии содержат большое число независимых параметров (как непрерывных α / β , B_x / β , B_y / β , B_z / β , так и дискретный S).

Завершая данный подраздел, посвященный вычислениям уровней энергии для потенциальных моделей спинного происхождения, отметим, что все полученные результаты имеют фундаментальный характер и приведены полностью, хотя некоторые выражения при

полной записи могут показаться несколько громоздкими, а отдельные страницы монографии – перенасыщенными формулами.

По отношению к спиновым системам роль найденных точных решений состоит прежде всего в том, что они позволяют непосредственно получать физические характеристики (намагниченность, восприимчивость), а также служат для контроля результатов, получаемых с помощью различных приближенных методов, включая численные (особенно при больших значениях спина S), что и будет использовано в подразделе 2.4.

Особое значение результатов для уровней энергии заключается в том, что все термодинамические характеристики определяются именно энергетическим спектром [78].

Особенность некоторых уровней энергии спинового происхождения в том, что они оказываются постоянными, не зависящими от параметров. Так, при $S = 0$ во всех рассмотренных случаях анизотропных парамагнетиков имеется не изменяющийся уровень энергии основного состояния $E_0 = 0$ (при наличии других изменяющихся параметров – магнитного поля и констант анизотропии – и существенных деформациях эффективных потенциалов).

Важность основного уровня энергии состоит в том, что это энергия наиболее стабильного состояния, в частности при сверхнизких температурах свойства системы определяются именно этим уровнем энергии.

Другим подобным примером может служить первый возбужденный уровень энергии $E_1 = \alpha - \beta$ в случае $S = 1$ для двухосного парамагнетика в перпендикулярном осям анизотропии магнитном поле.

Как будет видно в третьем разделе монографии, подобными свойствами фиксированности энергетического спектра при изменяемости самих потенциалов обладают модели с точными решениями солитонного происхождения.

Далее на основе полученных результатов для уровней энергии переходим к вычислению волновых функций стационарных состояний для точных решений в случае эффективных потенциальных полей спинового происхождения.

2.3. Волновые функции для спиновых точных решений

Вначале рассмотрим волновые функции стационарных состояний для спиновых точных решений уравнения Шредингера, соответствующих легкоосному парамагнетику, т. е. спиновой системе в поперечном магнитном поле с гамильтонианом $H = -S_z^2 - BS_x$.

В соответствии с обозначениями из обзора [24] волновые функции в координатном представлении можно записать в виде

$$\psi(x) = A \exp\left[-\frac{B}{2} \text{ch}(x)\right] \Phi(x), \quad (2.190)$$

$$\Phi(x) = \sum_{\sigma=-S}^S c'_{\sigma} \exp(\sigma x), \quad (2.191)$$

где коэффициенты c'_{σ} определяются системой уравнений

$$(E + \sigma^2)c'_{\sigma} + \frac{B}{2}[(S - \sigma + 1)c'_{\sigma-1} + (S + \sigma + 1)c'_{\sigma+1}] = 0, \\ c'_{S+1} = 0, \quad c'_{-S-1} = 0. \quad (2.192)$$

Если уровни энергии E считать известными, то волновые функции строятся непосредственно на основе рекуррентных соотношений (2.192) для любых значений спина S . При этом учет симметрии волновых функций в координатном представлении упрощает вычисления, поскольку для четных волновых функций $c'_{-\sigma} = c'_{\sigma}$, а для нечетных $c'_{-\sigma} = -c'_{\sigma}$, т. е. $\Phi(x)$ содержит либо гиперболические косинусы $\text{ch}(Sx)$, $\text{ch}[(S-1)x]$, ... (и константу в случае целых S) для четных волновых функций, либо гиперболические синусы $\text{sh}(Sx)$, $\text{sh}[(S-1)x]$, ... для нечетных.

В частности, при $\sigma = S$ из (2.192) сразу же вытекает, что коэффициент c'_{S-1} связан с c'_S универсальным соотношением

$$c'_{S-1} = -2 \frac{E + S^2}{B} c'_S, \quad (2.193)$$

а при $\sigma = S - 1$ получаем с учетом (2.193), что

$$c'_{S-2} = 2 \left[\frac{(E + S^2)[E + (S - 1)^2]}{B^2} - \frac{S}{2} \right] c'_S. \quad (2.194)$$

Аналогично при $\sigma = S - 2$ после некоторых преобразований имеем:

$$c'_{S-3} = \frac{2}{3B} \left[(3S - 1)E + S(3S^2 - 5S + 4) - \right. \\ \left. - 2 \frac{(E + S^2)[E + (S - 1)^2][E + (S - 2)^2]}{B^2} \right] c'_S. \quad (2.195)$$

Таким же способом получаем все коэффициенты при любых S .

Учитывая, что c'_σ определены с точностью до множителя, включаемого в нормировочный коэффициент A , приходим к общей структуре волновых функций стационарных состояний:

$$\psi_{1,3,\dots}(x) = A_{1,3,\dots} \exp \left[-\frac{B}{2} \text{ch}(x) \right] \left[\text{sh}(Sx) - 2 \frac{E_{1,3,\dots} + S^2}{B} \text{sh}[(S - 1)x] + \dots \right], \quad (2.196)$$

$$\psi_{0,2,\dots}(x) = A_{0,2,\dots} \exp \left[-\frac{B}{2} \text{ch}(x) \right] \left[\text{ch}(Sx) - 2 \frac{E_{0,2,\dots} + S^2}{B} \text{ch}[(S - 1)x] + \dots \right]. \quad (2.197)$$

При выписывании коэффициентов при гиперболических функциях следует учесть лишь отношение c'_σ / c'_S , но для свободного члена, который будет при целых S в четных волновых функциях, нужно в выражении для c'_0 положить $c'_S = \frac{1}{2}$.

Переходя к конкретным примерам, ограничимся значениями спина $S = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, 7/2$ и 4, для которых имеются явные выражения для уровней энергии.

В случае $S = 0$ имеется один спиновый уровень энергии $E_0 = 0$, а соответствующая волновая функция основного состояния равна

$$\psi_0(x) = A_0 \exp\left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x)\right]. \quad (2.198)$$

Это выражение в соответствии с (2.190) фигурирует в качестве множителя во всех других формулах для волновых функций. Ему отвечает колоколообразный график, подобный "гауссиану" гармонического осциллятора.

Заметим, что нормировочные коэффициенты A выражаются через модифицированные функции Бесселя (функции Макдональда): так, $A_0 = K_0(1)^{-1/2}$. В дальнейших расчетах, однако, мы не будем приводить этих выражений, чтобы не загромождать главные результаты.

В случае $S = 1/2$ получаем следующие волновые функции:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 \exp\left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x)\right] \operatorname{sh}\left(\frac{x}{2}\right), \\ \psi_0(x) &= A_0 \exp\left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x)\right] \operatorname{ch}\left(\frac{x}{2}\right). \end{aligned} \quad (2.199)$$

Выпишем далее выражения для волновых функций в случае $S = 1$:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 \exp\left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x)\right] \operatorname{sh}(x), \\ \psi_{0,2}(x) &= A_{0,2} \exp\left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x)\right] \left[\operatorname{ch}(x) - \frac{E_{0,2} + 1}{B} \right]. \end{aligned} \quad (2.200)$$

Аналогичные выражения для $S = 3/2$ имеют вид

$$\psi_{1,3}(x) = A \exp\left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x)\right] \left[\operatorname{sh}\left(\frac{3}{2}x\right) - 2 \frac{E + 9/4}{B} \operatorname{sh}\left(\frac{1}{2}x\right) \right],$$

$$\psi_{0,2}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left[\operatorname{ch}\left(\frac{3}{2}x\right) - 2 \frac{E+9/4}{B} \operatorname{ch}\left(\frac{1}{2}x\right) \right]. \quad (2.201)$$

Здесь и далее индексы у нормировочных констант A и уровней энергии E не выписываем, чтобы не загромождать формулы.

Приведенные выше результаты для небольших значений спина были получены в работе [26].

В случае $S = 2$ волновые функции нечетных состояний равны

$$\psi_{1,3}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left[\operatorname{sh}(2x) - 2 \frac{E+4}{B} \operatorname{sh}(x) \right], \quad (2.202)$$

а волновые функции четных состояний равны

$$\psi_{0,2,4}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left[\operatorname{ch}(2x) - 2 \frac{E+4}{B} \operatorname{ch}(x) + \frac{(E+4)(E+1)}{B^2} - 1 \right]. \quad (2.203)$$

В случае $S = 5/2$ вычисления приводят к таким формулам для волновых функций нечетных состояний:

$$\psi_{1,3,5}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left\{ \operatorname{sh}\left(\frac{5}{2}x\right) - 2 \frac{E+25/4}{B} \operatorname{sh}\left(\frac{3}{2}x\right) + 2 \left[\frac{(E+25/4)(E+9/4)}{B^2} - \frac{5}{4} \right] \operatorname{sh}\left(\frac{1}{2}x\right) \right\}, \quad (2.204)$$

а для волновых функций четных состояний получаем:

$$\psi_{0,2,4}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left\{ \operatorname{ch}\left(\frac{5}{2}x\right) - 2 \frac{E+25/4}{B} \operatorname{ch}\left(\frac{3}{2}x\right) + 2 \left[\frac{(E+25/4)(E+9/4)}{B^2} - \frac{5}{4} \right] \operatorname{ch}\left(\frac{1}{2}x\right) \right\}. \quad (2.205)$$

В случае $S = 3$ расчет дает для волновых функций нечетных состояний выражения

$$\psi_{1,3,5}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left\{ \operatorname{sh}(3x) - 2 \frac{E+9}{B} \operatorname{sh}(2x) + 2 \left[\frac{(E+9)(E+4)}{B^2} - \frac{3}{2} \right] \operatorname{sh}(x) \right\}, \quad (2.206)$$

тогда как для четных состояний имеем

$$\psi_{0,2,4,6}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left\{ \operatorname{ch}(3x) - 2 \frac{E+9}{B} \operatorname{ch}(2x) + 2 \left[\frac{(E+9)(E+4)}{B^2} - \frac{3}{2} \right] \operatorname{ch}(x) - \right. \\ \left. - \frac{2}{3B} \left[\frac{(E+9)(E+4)(E+1)}{B^2} - 4E - 24 \right] \right\}. \quad (2.207)$$

В случае $S = 7/2$ для волновых функций нечетных состояний получаем следующие формулы, содержащие гиперболические синусы:

$$\psi_{1,3,5,7}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left\{ \operatorname{sh}\left(\frac{7}{2}x\right) - 2 \frac{E+49/4}{B} \operatorname{sh}\left(\frac{5}{2}x\right) + 2 \left[\frac{(E+49/4)(E+25/4)}{B^2} - \frac{7}{4} \right] \operatorname{sh}\left(\frac{3}{2}x\right) - \right. \\ \left. - \frac{4}{3B} \left[\frac{(E+49/4)(E+25/4)(E+9/4)}{B^2} - \frac{19}{4}E - \frac{651}{16} \right] \operatorname{sh}\left(\frac{1}{2}x\right) \right\}, \quad (2.208)$$

а волновые функции четных состояний имеют аналогичную структуру с гиперболическими косинусами:

$$\psi_{0,2,4,6}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left\{ \operatorname{ch}\left(\frac{7}{2}x\right) - 2 \frac{E+49/4}{B} \operatorname{ch}\left(\frac{5}{2}x\right) + 2 \left[\frac{(E+49/4)(E+25/4)}{B^2} - \frac{7}{4} \right] \operatorname{ch}\left(\frac{3}{2}x\right) - \right. \\ \left. - \frac{4}{3B} \left[\frac{(E+49/4)(E+25/4)(E+9/4)}{B^2} - \frac{19}{4}E - \frac{651}{16} \right] \operatorname{ch}\left(\frac{1}{2}x\right) \right\}. \quad (2.209)$$

Наконец, в случае $S = 4$ волновые функции нечетных состояний равны

$$\psi_{1,3,5,7}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left\{ \operatorname{sh}(4x) - 2 \frac{E+16}{B} \operatorname{sh}(3x) + 2 \left[\frac{(E+16)(E+9)}{B^2} - 2 \right] \operatorname{sh}(2x) - \right. \\ \left. - \frac{4}{3B} \left[\frac{(E+16)(E+9)(E+4)}{B^2} - \frac{11}{4}E - 64 \right] \operatorname{sh}(x) \right\}, \quad (2.210)$$

а волновые функции четных состояний имеют вид

$$\psi_{1,3,5,7}(x) = A \exp \left[-\frac{B}{2} \operatorname{ch}(x) \right] \left\{ \operatorname{ch}(4x) - 2 \frac{E+16}{B} \operatorname{ch}(3x) + 2 \left[\frac{(E+16)(E+9)}{B^2} - 2 \right] \operatorname{ch}(2x) - \right. \\ \left. - \frac{4}{3B} \left[\frac{(E+16)(E+9)(E+4)}{B^2} - \frac{11}{4} E - 64 \right] \operatorname{ch}(x) + \right. \quad (2.211) \\ \left. + \frac{1}{3B^4} \left[E^4 + 30E^3 + (273 - 10B^2)E^2 + (820 - 182B^2)E + 576 - 712B^2 + 9B^4 \right] \right\}.$$

На этом завершим расчеты волновых функций стационарных состояний для рассматриваемых точных решений уравнения Шредингера, соответствующих спиновой системе типа легкоосного парамагнетика в поперечном магнитном поле.

Вместе с приведенными в предыдущем подразделе соответствующими результатами для уровней энергии они дают полное решение поставленной задачи.

Далее получим волновые функции стационарных состояний, соответствующих легкоосному парамагнетику в наклонном магнитном поле, т. е. спиновой системе с гамильтонианом

$$H = -S_z^2 - B_x S_x - B_z S_z.$$

Выкладки аналогичны случаю поперечного магнитного поля, за исключением соображений симметрии, поскольку эффективный потенциал

$$U(x) = \frac{B_x^2}{4} \left[\operatorname{sh}(x) - \frac{B_z}{B_x} \right]^2 - B_x \left(S + \frac{1}{2} \right) \operatorname{ch}(x) \quad (2.212)$$

уже не является четной функцией x . Так, волновая функция

$$\psi(x) = A \exp \left[-\frac{B_x}{2} \operatorname{ch}(x) + \frac{B_z}{2} x \right] \Phi(x),$$

$$\Phi(x) = \sum_{\sigma=-S}^S c'_\sigma \exp(\sigma x), \quad (2.213)$$

где рекуррентные соотношения для c'_σ

$$(E + \sigma^2 + \sigma B_z) c'_\sigma + \frac{B_x}{2} [(S - \sigma + 1) c'_{\sigma-1} + (S + \sigma + 1) c'_{\sigma+1}] = 0 ,$$

$$c'_{S+1} = 0, \quad c'_{-S-1} = 0 \quad (2.214)$$

теперь должны использоваться в полной мере.

Для вычисления c'_σ достаточно заметить, что в формулах предыдущего случая нужно заменить E на $E + \sigma B_z$, а B на B_x . Таким образом,

$$c'_{S-1} = -2 \frac{E + S^2 + S B_z}{B_x} c'_S , \quad (2.215)$$

$$c'_{S-2} = 2 \left[\frac{(E + S^2 + S B_z) [E + (S-1)^2 + (S-1) B_z]}{B^2} - \frac{S}{2} \right] c'_S \quad (2.216)$$

и т. д., а волновые функции стационарных состояний строятся из соответствующих экспонент по общему для всех состояний правилу

$$\psi_{0,1,2,\dots}(x) = A \exp \left[-\frac{B_x}{2} \text{ch}(x) + \frac{B_z}{2} x \right] \left[\exp(Sx) - 2 \frac{E + S^2 + S B_z}{B_x} \exp[(S-1)x] + \dots \right]. \quad (2.217)$$

Переходя к конкретным примерам, также ограничимся только значениями спина $S = 0, 1/2, 1$ и $3/2$, для которых можно найти явные выражения для уровней энергии.

В случае $S = 0$ для $E = 0$ волновая функция основного состояния равна

$$\psi_0(x) = A \exp \left[-\frac{B_x}{2} \text{ch}(x) + \frac{B_z}{2} x \right]. \quad (2.218)$$

В случае $S = 1/2$ получаем следующие волновые функции:

$$\psi_{0,1}(x) = A \exp \left[-\frac{B_x}{2} \text{ch}(x) + \frac{B_z}{2} x \right] \left\{ \exp\left(\frac{x}{2}\right) - \frac{B_z \mp \sqrt{B_x^2 + B_z^2}}{B_x} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) \right\}$$

(2.219)

с уровнями энергии

$$E_{0,1} = -\frac{1}{4} \mp \frac{1}{2} \sqrt{B_x^2 + B_z^2} . \quad (2.220)$$

Выпишем выражения для спина $S=1$:

$$\begin{aligned} \psi_{0,1,2}(x) = A \exp \left[-\frac{B_x}{2} \operatorname{ch}(x) + \frac{B_z}{2} x \right] \times \\ \times \left\{ \exp(x) - \left[1 - \frac{2}{B_x^2} (E+1+B_z) \right] \exp(-x) - \frac{2}{B_x} (E+1+B_z) \right\} , \end{aligned} \quad (2.221)$$

$$E_m = -\frac{2}{3} + \frac{2}{3} \sqrt{1+3B^2} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{1+9/2B_x^2-9B_z^2}{(1+3B^2)^{3/2}} + \frac{\pi}{3} (3m^2-7m+2) \right] , \quad (2.222)$$

где $m=0, 1, 2$.В случае $S=3/2$

$$\begin{aligned} \psi_{0,1,2,3}(x) = A \exp \left[-\frac{B_x}{2} \operatorname{ch}(x) + \frac{B_z}{2} x \right] \left\{ \exp\left(\frac{3}{2}x\right) - 2 \frac{E+9/4+3/2B_z}{B_x} \exp\left(\frac{1}{2}x\right) + \right. \\ \left. + 2 \left[\frac{(E+9/4+3/2B_z)(E+1/4+1/2B_z)}{B_x^2} - \frac{3}{4} \right] \exp\left(-\frac{1}{2}x\right) + \right. \\ \left. + \frac{3}{4B_x} \left[E + \frac{9}{4} + \frac{3}{2}B_z - \left(E + \frac{1}{4} - \frac{1}{3}B_z\right) \left(\frac{(E+9/4+3/2B_z)(E+1/4+1/2B_z)}{B_x^2} - \frac{3}{4} \right) \right] \exp\left(-\frac{3}{2}x\right) \right\} , \end{aligned} \quad (2.223)$$

а уровни энергии:

$$E_{2,3} = -\frac{5}{4} + \sqrt{y} \mp \sqrt{1 + \frac{5}{4}B^2 - y + \left(\frac{1}{2}B_x^2 - B_z^2\right)/\sqrt{y}}$$

$$E_{0,1} = -\frac{5}{4} - \sqrt{y} \mp \sqrt{1 + \frac{5}{4}B^2 - y - (\frac{1}{2}B_x^2 - B_z^2)/\sqrt{y}}, \quad (2.224)$$

где

$$y = \frac{1+5/4B^2}{3} + \frac{2}{3} \sqrt{1+B_x^2 - \frac{5}{4}B_z^2 + \frac{13}{16}B^4} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \frac{V}{(1+B_x^2 - 5/4B_z^2 + 13/16B^4)^{3/2}} \right], \quad (2.225)$$

$$V = 1 + \frac{3}{2}B_x^2 + \frac{51}{32}B_x^4 - \frac{15}{8}B_z^2 - \frac{195}{32}B_x^2B_z^2 - \frac{3}{32}B_z^4 + \frac{35}{64}B^6 \quad (2.226)$$

$$(B^2 = B_x^2 + B_z^2).$$

Заметим, что, если знание уровней энергии достаточно для описания термодинамических свойств, то для задач кинетики необходимо знание также и волновых функций, не говоря уже о чисто квантовых задачах о движении частицы в стационарных и нестационарных состояниях.

Полученные формулы проверялись как путем сравнения с частными случаями для отдельных значений параметров, так и численными расчетами, а также аналитическими (символьными) преобразованиями с помощью современных компьютерных математических программ.

В отличие от большинства стандартных моделей потенциалов, рассмотренные спинные эффективные потенциалы имеют волновые функции стационарных состояний очень простого вида, выражаясь через экспоненты или гиперболические функции.

Кроме найденных уровней энергии и волновых функций с точными выражениями в виде достаточно простых формул (относящихся к части энергетического спектра) имеется также бесконечное множество "надспиновых" состояний, для которых точные выражения отсутствуют (квазиточнорешаемость).

Однако по отношению к квазичастице с эффективным потенциалом наиболее важно в квантовой статистике знание именно нижней части энергетического спектра, для которого как раз и имеются точные решения.

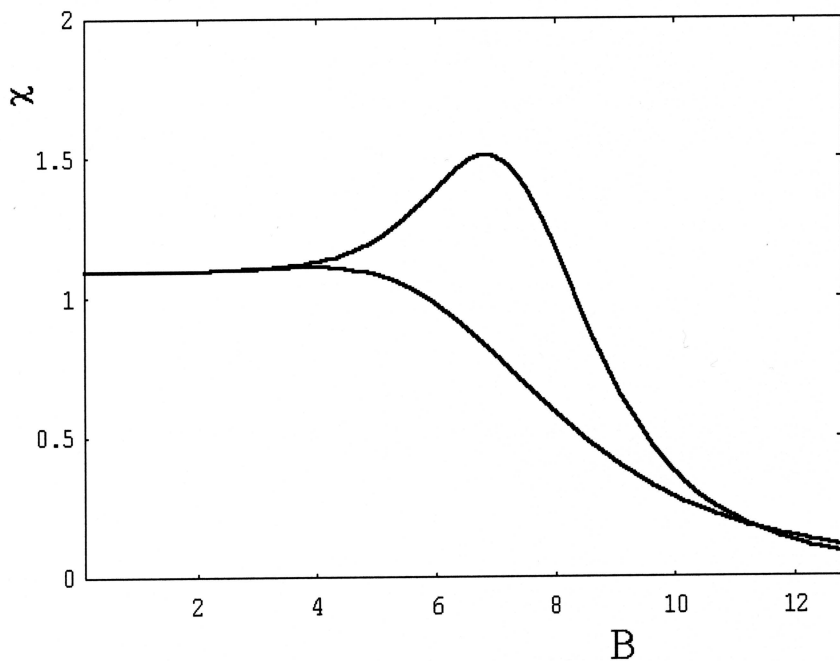


Рис. 2.2. Типичная зависимость восприимчивости легкоосного парамагнетика от магнитного поля в основном состоянии (верхняя кривая) и первом возбужденном (нижняя кривая). Случай $S = 6$.

Рассматриваемые потенциальные модели обладают помимо точных решений указанного спинового типа также и другими решениями "внеспинового" типа при значениях параметра S , не являющихся целыми или полуцелыми числами.

Особое значение результатов для уровней энергии заключается в том, что все термодинамические характеристики определяются именно энергетическим спектром, и только в вопросах кинетики требуется знание наряду с уровнями энергии и волновых функций стационарных состояний.

Важность основного уровня энергии состоит в том, что это энергия наиболее стабильного состояния, в частности при сверхнизких температурах свойства системы определяются именно этим уровнем энергии, а близкие к нему уровни возбужденных состояний определяют физические свойства системы при низких температурах.

Это обстоятельство и будет использовано в следующем подразделе при изучении низкотемпературных физических свойств анизотропных парамагнетиков, помещенных во внешнее магнитное поле.

2.4. Свойства парамагнетиков в магнитном поле

Как уже отмечалось в начале этого раздела монографии, спин-координатное соответствие и метод эффективных потенциалов не только привели к нахождению точных решений уравнения Шредингера, но также оказались весьма полезными при исследовании физических свойств парамагнетиков, описываемых спинowymi гамильтонианами [24].

Так, в работе [25] было подробно исследовано поведение магнитной восприимчивости одноосного парамагнетика в основном состоянии, т. е. при температуре $T = 0$.

Результат состоял в том, что магнитная восприимчивость $\chi_0 = -2\partial^2 E_0 / \partial B^2$ основного состояния в зависимости от магнитного поля для спина $S \geq 2$ имеет характерный ход: с ростом величины магнитного поля B постепенное увеличение сменяется резким возрастанием, с образованием четко локализованного, ярко выраженного возвышения в виде "горба", после чего наступает быстрый спад к малым значениям в области "критического" магнитного поля $B_0 = 2S + 1$ (на рис. 2.2 для сравнения показана также восприимчивость первого возбужденного состояния).

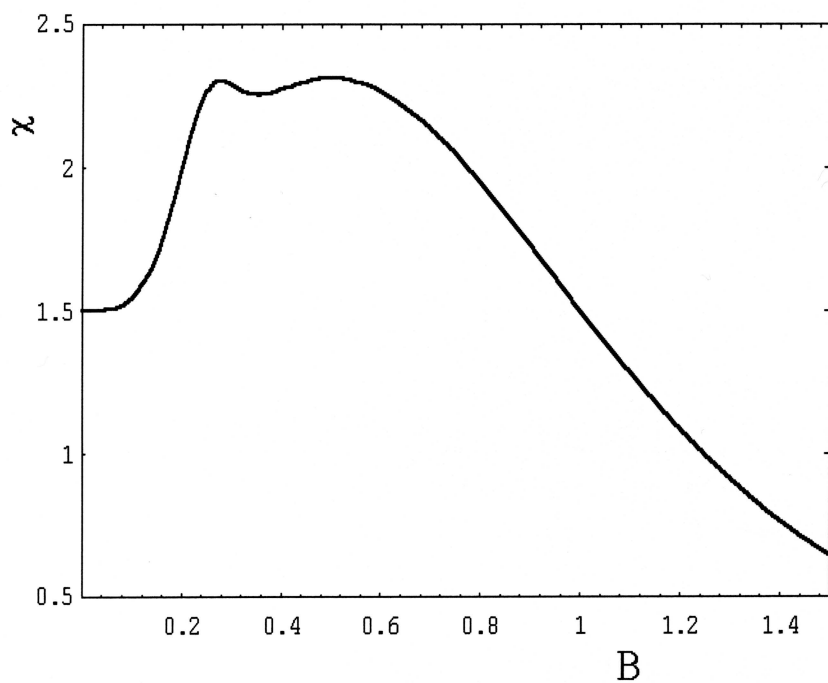


Рис. 2.3. Двугорбый профиль магнитной восприимчивости ($S = 3/2$, $T = 0.0028$).

Там же было дано наглядное объяснение такого явления на основе метода эффективного потенциала.

Как уже было отмечено, энергетический спектр одноосного парамагнетика имеет характерную структуру, соответствующую деформациям эффективного потенциала: от двукратного вырождения при $B=0$ с попарно близкими уровнями при $B \ll B_0$ (туннельное расщепление в двойной потенциальной яме – рис. 2.1 а) к типичному для четверного осциллятора $U \sim x^4$ расположению энергий при $B = B_0$ (рис. 2.1 б) и далее при $B \gg B_0$ к эквидистантной структуре спектра гармонического осциллятора $U \sim x^2$ (рис. 2.1 в).

При этом самая существенная перестройка энергетического спектра приходится как раз на область "предкритических" полей $B \leq B_0$, где и расположена особенность восприимчивости в виде "горба".

Нами детально изучено влияние температуры на поведение восприимчивости в зависимости от магнитного поля при различных значениях спина S . Опуская расчетные детали, приведем основные результаты проведенных исследований.

Оказалось, что вместо ожидаемого размытия упомянутой выше особенности появляется любопытная трансформация "горба", грубо говоря, сводящаяся к тому, что он вначале "заостряется" и увеличивается и лишь потом постепенно начинает размываться, исчезая при некоторой критической температуре $T_c \sim S$.

Важно, кроме того, что при не очень больших значениях спина ($S < 3$) на начальной стадии образуется двугорбый профиль (рис. 2.3), а при больших значениях спина ($S \geq 3$) получается уплощенная вершина горба (рудимент раздвоения).

Положение максимума изменяется немонотонно: вначале он смещается в область больших значений магнитного поля B , а затем совершает "обратный ход" до $B=0$ при T_c .

Некоторые типичные стадии этих метаморфоз восприимчивости представлены на рис. 2.4 наряду с эталонной восприимчивостью основного состояния, обозначенной пунктиром.

Отмеченные закономерности определяются структурой энергетического спектра одноосного парамагнетика в той области магнитных полей, где расположен горб: близкое расположение основного уровня энергии и первого возбужденного при значительном удалении следующих возбужденных уровней. Так, для $S=3$ при $B_{\max} = 2.34$ щель $E_1 - E_0 = 0.16$, тогда как $E_2 - E_1 = 3.34$.

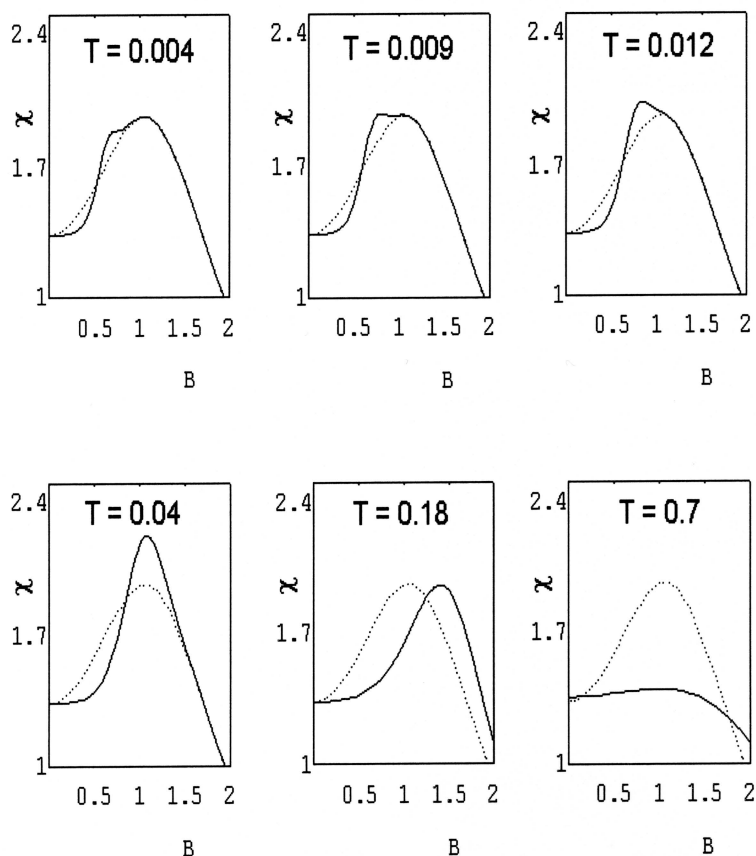


Рис. 2.4. Некоторые стадии низкотемпературных преобразований восприимчивости легкоосного парамагнетика ($S = 2$).

Таким образом, в области температур $0 < T < T_c$ рассматриваемая спиновая система ведет себя как двухуровневая.

Магнитную восприимчивость χ в двухуровневой аппроксимации можно записать, выделив температурную поправку $\Delta\chi$: $\chi = \chi_0 + \Delta\chi$.

Учитывая, что уровни энергии зависят от магнитного поля, можно получить следующую формулу для восприимчивости, содержащую основной вклад в виде восприимчивости основного состояния χ_0 и двух конкурирующих температурных поправочных членов:

$$\chi = \chi_0 + \frac{(\Delta')^2}{2T \operatorname{ch}^2(\Delta/T)} - \frac{2\Delta''}{1 + \exp(\Delta/T)}, \quad (2.227)$$

где $\Delta \equiv E_1 - E_0$, а штрихи обозначают производные по B .

При $T \rightarrow 0$, как и должно быть, $\chi \rightarrow \chi_0$. При любом конечном T в области малых B , где $\Delta \ll T$, имеем $\chi = (\chi_1 + \chi_0)/2$ (χ_1 – восприимчивость первого возбужденного состояния), т. е. основной вклад дает второй отрицательный поправочный член, а с возрастанием B возможно преобладание первого положительного поправочного члена, так что $\chi > \chi_0$.

Двухуровневая аппроксимация (2.227) в полной мере описывает поведение восприимчивости в наиболее интересной области низких температур $0 < T < T_c$.

Далее можно воспользоваться степенным по магнитному полю B приближением для щели Δ между основным уровнем энергии и первым возбужденным, которое было получено в работе [24]:

$$\Delta \approx cB^{2S}, \quad c = \frac{S^2}{2^{2S-3}(2S)!},$$

что дает следующую формулу для температурной поправки на основе (2.227):

$$\Delta\chi = T^{\frac{S-1}{S}} f_S\left(\frac{cB^{2S}}{T}\right) \quad (2.228)$$

с универсальной функцией

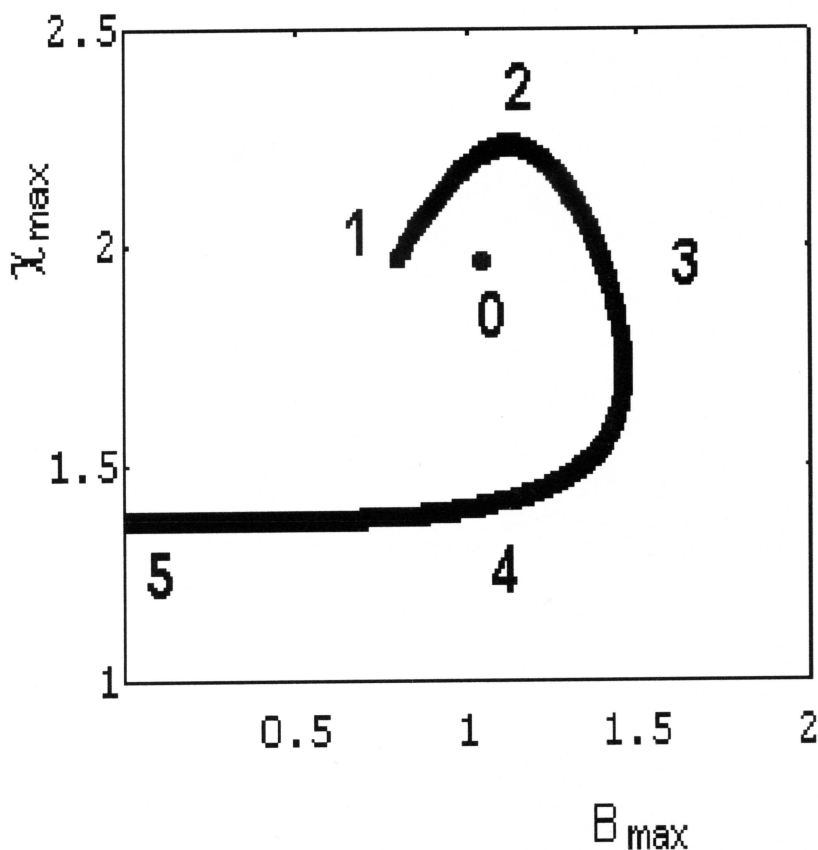


Рис. 2.5. Типичный виток спирали, изображающий положение и величину наибольшего максимума восприимчивости в области низких температур $0 < T < T_c$ в случае $S = 2$.

$$f_S(x) = 2S(2S-1)c^{1/S} \frac{x^{(S-1)/S}}{\text{ch}(x/2)} \left[\frac{Sx}{(2S-1)\text{ch}(x/2)} - \exp(-x/2) \right]. \quad (2.229)$$

Сравнение этого приближения для температурной поправки (2.228) к восприимчивости с результатами, основанными на точных формулах для E_0 и E_1 (а также χ_0) в случае $S = 3/2, 2, 5/2, 3, 7/2$, показывает, что этим приближением достигается весьма хорошая точность в наиболее интересной области температур, где наблюдаются описанные выше трансформации профиля магнитной восприимчивости (причем для всех магнитных полей B).

Если по осям координат откладывать положение $B_{\max}$ и величину наибольшего максимума магнитной восприимчивости $\chi_{\max}$, то при изменении температуры $0 \leq T \leq T_c$ получается кривая в виде витка спирали с отдельной точкой внутри, наглядно иллюстрирующая отмеченные выше "аномалии" поведения максимума восприимчивости – стадии его температурного "дрейфа" (рис. 2.5).

В результате на шкале температур можно выделить следующие характерные области и опорные точки по отношению к превращениям профиля магнитной восприимчивости: $T_0 = 0$ – обычный одnogорбый профиль (эталонный);

$T_0 < T < T_1$ – небольшие деформации левого склона горба с появлением второго (левого) максимума;

T_1 – двугорбый профиль с одинаковыми значениями максимумов;

$T_1 < T < T_2$ – нарастание левого горба, превосходящего эталонный, с "заострением" и перемещением его вправо;

T_2 – максимальная высота горба с положением примерно на месте эталонного;

$T_4 < T < T_5$ – дальнейшее смещение максимума вправо с постепенным его уменьшением;

T_3 – высота уменьшается до эталонной с максимальным смещением вправо;

$T_3 < T < T_4$ – перемена направления смещения (влево) и размытие;

T_4 – очень размытый максимум на месте эталонного;

$T_4 < T < T_5$ – слабо различимый максимум продолжает смещаться влево;

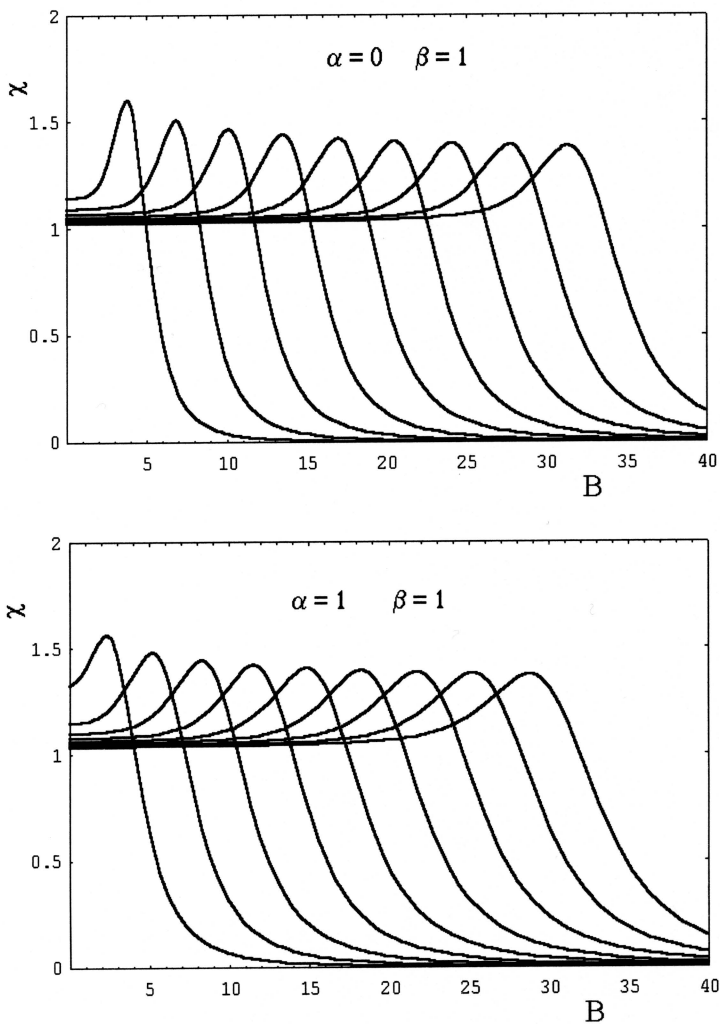


Рис. 2.6. Графики зависимости восприимчивости разных анизотропных парамагнетиков от магнитного поля для всех четных S от 4 до 20 при $T = 0$.

$T_5 \equiv T_c$ – критическая температура, при которой совсем слабо выраженный максимум достигает точки $B=0$ (кривая восприимчивости плавно спадает без особенностей);

$T > T_c$ – уменьшение χ при всех B за счет подключения остальных возбужденных уровней энергии (выход за рамки двухуровневой аппроксимации).

На рис. 2.5 цифрами у спирали показаны основные температурные опорные точки.

С ростом S спиралевидная кривая смещается в область больших значений B , но все качественные особенности метаморфоз сохраняются, кроме образования двугорбого профиля.

Все расчеты велись (помимо указанных двухуровневой аппроксимации и степенного приближения) на основе точных явных формул для уровней энергии в случае $S < 4$, а в случае $S \geq 4$ – на основе точных алгебраических уравнений для собственных значений спинового гамильтониана. Кроме того, аналитические и численные методы взаимно контролировались и подкреплялись графическими построениями.

Другой цикл исследований посвящен изучению поведения магнитной восприимчивости двухосных парамагнетиков. Обнаружено, что все отмеченные выше особенности восприимчивости сохраняются и в этих спиновых системах. Так, на рис. 2.6 б приведена серия типичных профилей восприимчивости для разных значений спина S в случае равных констант анизотропии $\alpha = \beta$ при $T = 0$. Видно, что ситуация аналогична наблюдаемой для легкоосного случая (рис. 2.6 а).

Таким образом, обнаруженные ранее особенности магнитной восприимчивости анизотропных парамагнетиков оказываются весьма устойчивыми по отношению к влиянию различных факторов, обогащаясь любопытными дополнительными деталями, как при возрастании температуры T и спина S , так и при различных соотношениях между константами анизотропии α / β .

В случае произвольно направленного магнитного поля необходим учет тензорного характера магнитной восприимчивости, т. е. детальное изучение каждой ее компоненты. Так, в одноосном случае в силу свойств симметрии имеется фактически три величины: χ_{xx} , χ_{xy} и χ_{yy} , которые следует рассматривать в зависимости от составляющих магнитного поля B_x и B_z . Эти исследования, результаты которых изложены в [38], продолжили ранние работы

других авторов по изучению свойств парамагнетиков в магнитном поле [79,80].

Для произвольных значений S в легкоосном и легкоплоскостном случаях изучены термодинамические характеристики системы в различных приближениях (малые и большие магнитные поля, низкие и сверхнизкие температуры и т. п.) [38].

При этом оказалось, что в легкоплоскостном случае при низких температурах поперечная намагниченность и продольная восприимчивость как функции магнитного поля обладают особенностями в виде серии резких всплесков, тогда как в легкоосном случае продольные компоненты этих величин обладают одиночным всплеском [38].

2.5. Обсуждение результатов

Используемое в монографии спин-координатное соответствие "расширяет" спиновую систему, "оснащая" ее такими объектами, как непрерывное координатное пространство, псевдочастица (спинзон), эффективные потенциалы, дифференциальные уравнения. Оно затрагивает не только собственно спиновые системы, но отвечает также операторам момента самой общей природы. Название "спин", в этом смысле является дважды условным: это и эффективный (квази-, псевдо-) спин, и представитель операторов момента самого общего вида (в состояниях с определенным значением квадрата момента).

Для изучения физических свойств рассмотренных спиновых систем чрезвычайно полезным и наглядным оказался метод эффективного потенциала (как для интерпретации физических явлений, так и для количественных расчетов).

Рассмотренные модели эффективных потенциалов резко отличаются от известных стандартных моделей потенциальных полей: каждая модель имеет несколько независимых параметров, существенно влияющих на форму потенциала и на структуру энергетического спектра, результатом чего является многопрофильность потенциалов и перестройка энергетического спектра.

Полученные явные выражения для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний в зависимости от параметров системы имеют вид простых формул, выраженных через элементарные функции (полиномы, радикалы, тригонометрические и

обратные тригонометрические функции, экспоненциальные и гиперболические функции), и существенно дополняют результаты предшествующих работ.

Предложен метод расчета уровней энергии четверного осциллятора на основе точных решений для эффективных потенциалов с минимумом 4-го порядка.

Найденные точные решения применяются при исследовании свойств анизотропных парамагнетиков при низких температурах.

На основе этих решений получаются достоверные результаты для физических характеристик и проверяются данные приближенных расчетов для других случаев, а также тестируются применяемые методы компьютерных исследований (аналитические, численные и графические).

Предсказано особое поведение намагниченности и магнитной восприимчивости одноосных парамагнетиков в зависимости от магнитного поля, спинового параметра и температуры.

Рассмотренные в этом разделе точно решаемые модели потенциалов спиновой природы имеют много общего с теми моделями потенциальных полей с точными решениями, которые имеют солитонное происхождение и будут служить предметом изучения в следующем разделе монографии.

3. ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ СОЛИТОННОЙ ПРИРОДЫ

Несмотря на различие физических ситуаций, эти задачи имеют много общего.

В.Е.Захаров

Взаимосвязь одномерного стационарного уравнения Шредингера и нелинейного эволюционного уравнения Кортевега-де Фриза обнаружилась впервые при нахождении решений последнего методом обратной задачи рассеяния [17-19].

При этом солитонные решения уравнения Кортевега-де Фриза, будучи взяты в качестве потенциальной энергии в одномерном стационарном уравнении Шредингера, имеют не зависящий от временного параметра этого эволюционного уравнения энергетический спектр при существенных изменениях формы такого потенциала.

Таким образом, с одной стороны, с помощью уравнения Шредингера, играющего в теории солитонов вспомогательную роль, есть возможность получить решения уравнения Кортевега-де Фриза.

С другой стороны, появляется целый класс потенциальных полей, для которых имеются простые явные формулы для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний в квантовой механике.

3.1. Общие особенности локализованных полей

Рассмотрим общие свойства потенциалов солитонной природы, опуская для краткости детали выкладок и преобразований.

Сведения о солитонообразных полях, которые можно получить из теории солитонов, далеко не исчерпывают их особенностей. При более детальном исследовании у них можно обнаружить много интересных свойств. В частности, отсутствует информация о явном виде волновых функций связанных стационарных состояний, поскольку в так называемые данные рассеяния входят лишь их асимптотики.

Естественно, что основное внимание при разработке метода обратной задачи рассеяния в теории солитонов было приковано к решению задачи Коши, а ассоциированное уравнение Шредингера при этом играло вспомогательную роль, так что многие чисто квантовомеханические особенности и сам факт появления новых точно решаемых моделей не были специально отмечены.

Если задать N произвольно выбранных параметров

$0 < \kappa_{N-1} < \kappa_{N-2} < \dots < \kappa_0$, то можно построить семейство пространственно локализованных потенциалов с помощью компактных формул

$$u(x) = -2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln[\det(F_{mn})];$$

$$F_{mn} = \delta_{mn} + 2 \frac{\sqrt{\kappa_m \kappa_n}}{\kappa_m + \kappa_n} \exp(\varphi_m + \varphi_n); \quad (3.1)$$

$$\varphi_n = \gamma_n + \Delta_n; \quad \gamma_n = \kappa_n x - 4\kappa_n^3 t + \delta_n; \quad m, n = 0, 1, \dots, N-1,$$

где δ_{mn} – символ Кронекера. Нумерация отвечает принятой в квантовой механике для связанных стационарных состояний, а безразмерные величины типичны для теории солитонов.

Следует специально отметить, что величина t в потенциалах (3.1), которая имеет физический смысл времени для солитонов, тут является постоянным вспомогательным параметром, который будем называть "квазивременем". По отношению к этому параметру модели (3.1) удовлетворяют нелинейному эволюционному уравнению Кортевега-де Фриза вида $u_t - 6uu_x + u_{xxx} = 0$.

Если "фазовые" величины Δ_n сделать зависящими от энергетических параметров κ_n в соответствии с формулами

$$\Delta_n = \frac{1}{2} \sum_{m=0, m \neq n}^{N-1} \ln \left| \frac{\kappa_n + \kappa_m}{\kappa_n - \kappa_m} \right|, \quad N > 1; \quad \Delta_n = 0, \quad N = 1, \quad (3.2)$$

то особые фазовые добавки δ_n будут определять особенности симметрии моделей (3.1) и могут выбираться произвольно.

Для потенциальных энергий (3.1) стационарное уравнение Шредингера в координатном представлении

$$\frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + [E - u(x)] \psi_n = 0 \quad (3.3)$$

имеет связанные стационарные состояния с уровнями энергии $E_n = -\kappa_n^2$ и соответствующими нормированными волновыми функциями ψ_n , которые непосредственно можно получить из неоднородной системы N линейных уравнений

$$\sum_{m=0}^{N-1} F_{nm} \psi_m = \sqrt{2\kappa_n} \exp(\varphi_n). \quad (3.4)$$

Вещественные потенциалы (3.1) обращаются в нуль при $|x| \rightarrow \infty$ и имеют отрицательный знак $u(x) < 0 \quad \forall x$, а их деформации при изменении квазивремени t происходят с сохранением площади, так что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u(x) dx = -4 \sum_{n=0}^{N-1} \kappa_n.$$

При $t \rightarrow \pm\infty$ потенциал $u(x)$ состоит из N отдельных неодинаковых ям Эккарта, которые при $t = 0$ объединяются в составную яму, имеющую разнообразные как симметричные (если все $\delta_n = 0$), так и несимметричные формы.

Детерминант, входящий в выражение (3.1), целесообразно представить в несколько более развернутой форме

$$\det(F_{mn}) = 2 \exp(G) d_n,$$

где
$$d_N = \text{ch}(G) + \sum_{n=0}^{N-1} \exp(2\Delta_n) \text{ch}(G - 2\gamma_n) + \dots;$$

$$G = \sum_{n=0}^{N-1} \gamma_n; \quad N > 1; \quad d_1 = \text{ch} \gamma_0. \quad (3.5)$$

В общем случае выражение для d_n содержит 2^{N-1} членов в виде гиперболических косинусов с аргументами, линейно зависящими от координаты x , коэффициенты при которых зависят от энергетических

параметров κ_n . При этом формула для потенциала (3.1) приобретает вид

$$u(x) = -2[d_N''' d_N - (d_N')^2] / d_N^2, \quad (3.6)$$

удобный как для изучения общих свойств, например свойств симметрии, так и для построения при каждом конкретном значении N (здесь штрихи обозначают производные по x , так что все потенциальные модели строятся на основе элементарных функций – гиперболических косинусов и синусов). В частности, если все $\delta_n = 0$, то потенциалы (3.1) обладают следующим свойством симметрии:

$$u(-x) \Big|_{-t} = u(x) \Big|_t, \quad (3.7)$$

которое при $t = 0$ означает четность потенциалов.

Из выражений (3.5) и (3.6) вытекает, что в общем случае количество независимых параметров, которые определяют форму N -уровневых потенциалов (3.6), равно $2(N-1)$. Если же уровни энергии заданы, то остаются $N-1$ параметров, определяющих форму профилей потенциальных моделей

Среди этих моделей есть класс таких, что при $t = 0$ и всех $\delta_n = 0$ имеют форму ямы Экарта

$$u(x) = -N(N+1)\kappa^2 / \operatorname{ch}^2 \kappa x$$

с уровнями энергии $E_n = -(N-n)^2 \kappa^2$.

Существенно, что в отличие от других моделей с точными решениями в квантовой механике, для которых задается потенциал и решается уравнение Шредингера (задача о собственных значениях), в результате чего получаются уровни энергии, в моделях солитонного происхождения сразу же задаются уровни энергии и для каждого набора уровней существуют потенциалы с точными решениями. Другими словами, мы имеем дело с обратной задачей – даны уровни энергии (произвольно расположенные!) и для них сразу же строятся потенциалы. При этом для каждого набора уровней энергии находится не один фиксированный профиль потенциала, а бесконечное многопараметрическое семейство потенциальных моделей.

3.2. Исследование многоуровневых потенциальных моделей

В теории солитонов прежде всего используется связь уровней энергии и потенциалов, а вопрос о волновых функциях связанных состояний оказывается вторичным. Это – наследие метода обратной задачи рассеяния, где сами волновые функции связанных состояний не фигурируют полностью, а представлены лишь своими асимптотическими параметрами (входят в так называемые данные рассеяния). Однако и для волновых функций также можно получить явные точные выражения из неоднородной системы N линейных уравнений (3.4), где формирующая матрица F_{nm} определена соотношением (3.1).

Решения этой системы автоматически удовлетворяют обычному для связанных стационарных состояний условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2 dx = 1 \text{ (волновые функции вещественны)}. \text{ Это прямо вытекает}$$

из структуры (3.1) формирующей матрицы F и связи квадратов волновых функций с диагональными элементами обратной матрицы F^{-1} , которая устанавливается путем несложных вычислений и имеет вид

$$\psi_n^2 = -\frac{\partial}{\partial x} F_{nn}^{-1}. \quad (3.8)$$

Поведение волновых функций стационарных состояний ψ_n при $|x| \rightarrow \infty$ также определяется формирующей матрицей F_{nm} . В частности, при $x \rightarrow -\infty$ из уравнений (3.4) видно, что

$$\psi_n \approx \sqrt{2\kappa_n} \exp(\varphi_n).$$

С учетом формулы (3.2) для величин Δ_n отсюда получаем в соответствии с общими свойствами волновых функций связанных стационарных состояний для пространственно локализованных потенциалов:

$$\psi_n(x) \approx c_n \exp(\kappa_n x), \quad (3.9)$$

где постоянные коэффициенты равны

$$c_n = \sqrt{2\kappa_n \prod_{m=0, m \neq n}^{N-1} \left| \frac{\kappa_n + \kappa_m}{\kappa_n - \kappa_m} \right|} \exp(-4\kappa_n^3 t + \delta_n).$$

Аналогичные соотношения имеют место и при $x \rightarrow +\infty$.

Приведем также полезную формулу, связывающую потенциал $u(x)$ с волновыми функциями ψ_n :

$$u(x) = -2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{n=0}^{N-1} \sqrt{2\kappa} \exp(\varphi_n) \psi_n \right), \quad (3.10)$$

которая, в частности, непосредственно дает поведение потенциала при $x \rightarrow -\infty$ в силу (3.9): $u(x) \approx a \exp(2\kappa_{N-1}x)$,

где

$$a = -8\kappa_{N-1}^2 \prod_{m=0}^{N-2} \left| \frac{\kappa_{N-1} + \kappa_m}{\kappa_{N-1} - \kappa_m} \right| \exp(-8\kappa_{N-1}^3 t + 2\delta_{N-1})$$

и учтено, что в сумме (3.10) основной вклад вносит член с $n = N-1$. Подобным образом описывается и пространственная локализация $u(x)$ при $x \rightarrow +\infty$.

Если все фазовые добавки $\delta_n \equiv 0$, то при $t = 0$ потенциал, как уже отмечалось, становится четной функцией координат $u(-x) = u(x)$, а волновые функции связанных стационарных состояний, согласно общим свойствам одномерного движения [1], также наделяются соответствующим свойством симметрии $\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x)$, $n = 0, 1, \dots, N-1$.

В области непрерывного спектра энергии $E > 0$ в уравнении (3.3) солитоноподобные модели (3.1) обладают свойством сверхпрозрачности: согласно стационарной теории рассеяния квантовые частицы проходят сквозь потенциалы (3.1) безотражательно [81]. Однако эти потенциалы не являются "невидимками", поскольку в нестационарной теории будут наблюдаться локальные особенности движения волновых пакетов и интегральный эффект изменения времени прохождения области потенциала по сравнению со свободным движением [22].

В случае $N = 1$ форма модели (3.1) фиксирована – это одноуровневая яма Экарта с $E_0 = -\kappa_0^2$ для которой всегда можно выбрать начало отсчета координаты x таким образом, чтобы

$u(x) = -2\kappa_0^2 / \text{ch}^2 \kappa_0 x$. Тогда соответствующая волновая функция основного состояния согласно уравнению (3.4) равна

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\kappa_0}{2}} \frac{1}{\operatorname{ch} \kappa_0 x}. \quad (3.11)$$

В случае $N = 2$ модели (3.1) уже имеют достаточно разнообразные формы (с одним или двумя минимумами, включая минимум 4-го порядка), которые определяются двумя параметрами: квазивременем t и отношением энергетических величин κ_0 / κ_1 (фазовые добавки δ_0 и δ_1 можно сделать равными нулю выбором начала отсчета x и t). Формулу (3.6) для потенциальной энергии можно преобразовать к виду

$$u(x) = -8 \exp(2\Delta) (\kappa_1^2 \operatorname{sh}^2 \gamma_0 + \kappa_0^2 \operatorname{ch}^2 \gamma_1) / d_2^2, \quad (3.12)$$

где в соответствии с (3.5)

$$d_2 = \operatorname{ch}(\gamma_1 + \gamma_0) + \exp(2\Delta) \operatorname{ch}(\gamma_1 - \gamma_0), \quad (3.13)$$

а согласно (3.2)

$$\Delta \equiv \Delta_0 = \Delta_1 = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\kappa_0 + \kappa_1}{\kappa_0 - \kappa_1} \right). \quad (3.14)$$

Соответственно, решая систему (3.4), приходим к формулам для волновых функций основного и первого возбужденного состояний

$$\psi_0(x) = \sqrt{2\kappa_0} \exp(\Delta) \frac{\operatorname{ch} \gamma_1}{d_2}, \quad \psi_1(x) = -\sqrt{2\kappa_1} \exp(\Delta) \frac{\operatorname{sh} \gamma_0}{d_2}. \quad (3.15)$$

Уровни энергии равны $E_0 = -\kappa_0^2$ и $E_1 = -\kappa_1^2$. Координата x входит в выражения для потенциала (3.12), (3.13) и волновых функций (3.15) через линейную зависимость от x величин γ_n в (3.1).

Если одно- и двухуровневые формы потенциалов (3.1) знакомы по соответствующим солитонным профилям, то этого нельзя сказать уже про трехуровневые модели, когда имеется четыре независимых параметра: отношения энергетических величин, например κ_1 / κ_2 и κ_0 / κ_2 , квазивремя t и одна из фазовых добавок, например δ_2 (две другие влияют только на начало отсчета x и t , так что их можно считать равными нулю).

При этом потенциал в компактном виде можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
u(x) = & -16[\exp(2\Delta_2)(\kappa_0 + \kappa_1)^2 \operatorname{sh}^2 \gamma_2 + \exp(2\Delta_1)(\kappa_0 + \kappa_2)^2 \operatorname{ch}^2 \gamma_1 + \\
& + \exp(2\Delta_0)(\kappa_1 + \kappa_2)^2 \operatorname{sh}^2 \gamma_0 + \exp(2\Delta_2)\kappa_2^2 \frac{\kappa_0^2 + \kappa_1^2}{(\kappa_0 - \kappa_1)^2} \operatorname{ch}^2(\gamma_1 + \gamma_0) + \\
& + \exp(2\Delta_1)\kappa_1^2 \frac{\kappa_0^2 + \kappa_2^2}{(\kappa_0 - \kappa_2)^2} \operatorname{sh}^2(\gamma_0 + \gamma_2) + \\
& + \exp(2\Delta_0)\kappa_0^2 \frac{\kappa_1^2 + \kappa_2^2}{(\kappa_1 - \kappa_2)^2} \operatorname{ch}^2(\gamma_1 + \gamma_2)] / d_3^2,
\end{aligned} \quad (3.16)$$

где в соответствии с (3.5)

$$\begin{aligned}
d_3 = & \operatorname{ch}(\gamma_2 + \gamma_1 + \gamma_0) + \exp(2\Delta_2)\operatorname{ch}(\gamma_1 + \gamma_0 - \gamma_2) + \\
& + \exp(2\Delta_1)\operatorname{ch}(\gamma_2 + \gamma_0 - \gamma_1) + \exp(2\Delta_0)\operatorname{ch}(\gamma_2 + \gamma_1 - \gamma_0).
\end{aligned} \quad (3.17)$$

Если при этом $t = 0$ и $\delta_2 = 0$, то имеем симметричные формы потенциалов (3.1), то есть четные функции $u(-x) = u(x)$, которые при $x = 0$ равны $u(0) = -2(\kappa_0^2 - \kappa_1^2 + \kappa_2^2)$.

Исследование показывает, что при условии $\kappa_0^4 - 4(\kappa_1^2 - \kappa_2^2)\kappa_0^2 + (\kappa_1^2 - \kappa_2^2)(3\kappa_1^2 - \kappa_2^2) = 0$ возникают экстремумы 4-го порядка. На плоскости $(\kappa_1^2 / \kappa_2^2, \kappa_0^2 / \kappa_2^2)$ это отвечает ветви гиперболы, часть которой принадлежит четверным минимумам (рис. 3.1 д), а другая часть – четверным максимумам (рис. 3.1 е). На стыке минимумов и максимумов имеется минимум 6-го порядка (рис. 3.1 ж) с любопытным симметричным расположением уровней энергии.

На рис. 3.1 приведены некоторые типичные симметричные формы потенциалов, которые отвечают различным соотношениям между энергетическими величинами κ_m : профиль "а" отвечает параметрам $\kappa_1 / \kappa_2 = 2$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 2$, профиль "б" – параметрам $\kappa_1 / \kappa_2 = 2.2$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 2.5$, профилю "в" соответствуют параметры $\kappa_1 / \kappa_2 = 1.1$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 2.4$, профилю "г" – параметры $\kappa_1 / \kappa_2 = 1.1$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 1.2$, профиль "д" возникает при $\kappa_1 / \kappa_2 = 2.1$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 3$, профиль "е" – при $\kappa_1 / \kappa_2 = 1.73$ и $\kappa_0 / \kappa_2 = 2$, профиль "ж" появляется при значениях

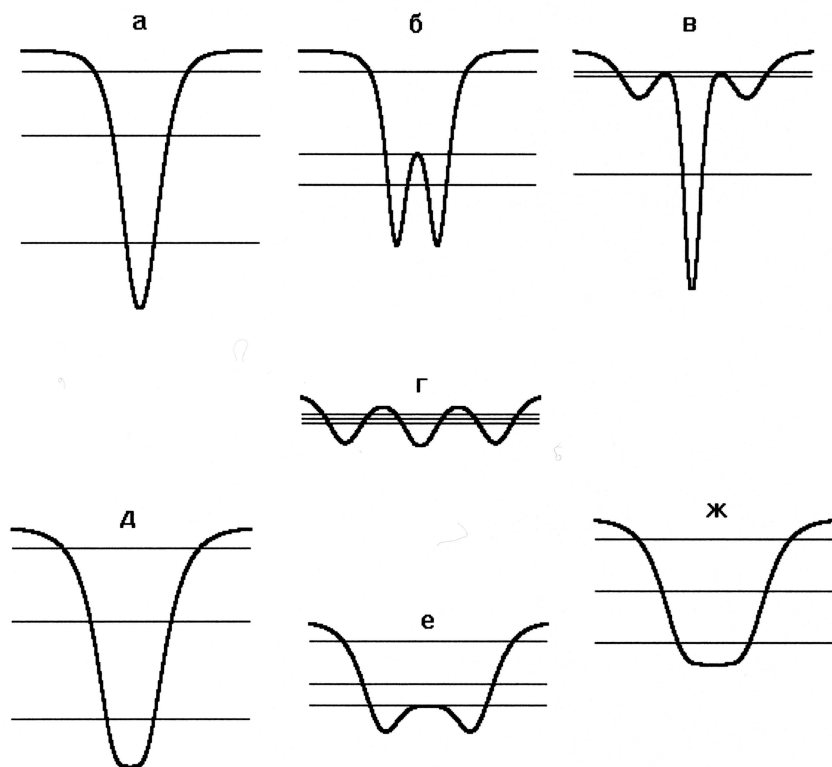


Рис. 3.1. Характерные профили трехуровневых симметричных локализованных потенциальных моделей солитонного происхождения.

$$\kappa_1 / \kappa_2 = \sqrt{2 + \sqrt{2}} \quad \text{и} \quad \kappa_0 / \kappa_2 = \sqrt{3 + 2\sqrt{2}}.$$

При $t \neq 0$ и (или) $\delta_2 \neq 0$ получаем несимметричные профили (некоторые из них представлены на рис. 3.2).

Что касается волновых функций, то в случае $N = 3$ из системы уравнений (3.4) имеем для них такие выражения в основном и двух возбужденных состояниях:

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \sqrt{2\kappa_0} \exp(\Delta_0) [\operatorname{ch}(\gamma_1 + \gamma_2) + \exp(\Delta_2 + \Delta_1 - \Delta_0) \operatorname{ch}(\gamma_1 - \gamma_2)] / d_3; \\ \psi_1(x) &= -\sqrt{2\kappa_1} \exp(\Delta_1) [\operatorname{sh}(\gamma_0 + \gamma_2) + \exp(\Delta_2 + \Delta_0 - \Delta_1) \operatorname{sh}(\gamma_0 - \gamma_2)] / d_3; \\ \psi_2(x) &= \sqrt{2\kappa_2} \exp(\Delta_2) [\operatorname{ch}(\gamma_0 + \gamma_1) - \exp(\Delta_1 + \Delta_0 - \Delta_2) \operatorname{ch}(\gamma_0 - \gamma_1)] / d_3, \end{aligned} \quad (3.18)$$

Добавим, что результаты для $N = 2$ можно получить предельным переходом $\kappa_2 \rightarrow 0$ в формулах (3.16), (3.18) и (3.17) с учетом явного вида величин γ_n из (3.1) и Δ_n из (3.2).

В случае $N = 4$, если $t = 0$ и все $\delta_n = 0$, потенциальные энергии (3.1) при $x = 0$ принимают значения $u(0) = -2(\kappa_0^2 - \kappa_1^2 + \kappa_2^2 - \kappa_3^2)$, а их экстремумам 4-го порядка в пространстве переменных $(\kappa_2^2 / \kappa_3^2, \kappa_1^2 / \kappa_3^2, \kappa_0^2 / \kappa_3^2)$ отвечает однополостный гиперboloид, внутри которого потенциал имеет максимумы, а снаружи – минимумы. На этой поверхности проходят также линии экстремумов 6-го порядка, пересечение которых дает точку минимума 8-го порядка, где потенциал оказывается с весьма уплощенным дном:

$$u(x) = -2(3 + \sqrt{5})\kappa_3^2 + \frac{4}{315}(123 + 55\sqrt{5})\kappa_3^{10}x^8 + O(x^{10}),$$

при таких значениях энергетических параметров:

$$\kappa_2 / \kappa_3 = \sqrt{(5 + \sqrt{5}) / 2}; \quad \kappa_1 / \kappa_3 = \sqrt{(7 + 3\sqrt{5}) / 2};$$

$$\kappa_0 / \kappa_3 = \sqrt{5 + 2\sqrt{5}}.$$

Аналогичные особенности имеют и многоуровневые модели с $N > 4$.

Для изучения особенностей потенциалов солитонного типа нами было проведено также компьютерное моделирование влияния различных параметров на форму моделей (3.1). Как часто бывает,

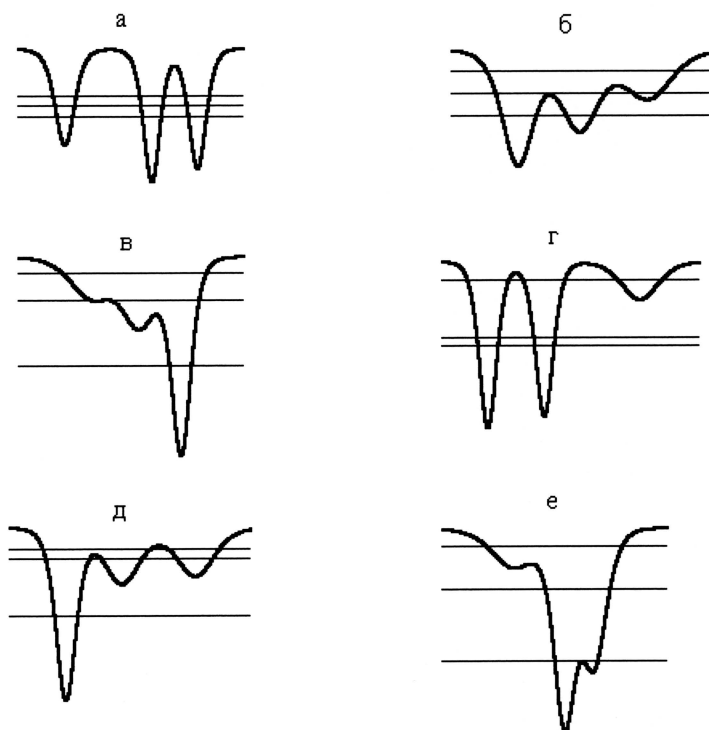


Рис. 3.2. Некоторые профили трехуровневых
 несимметричных потенциальных ям
 солитонного происхождения.

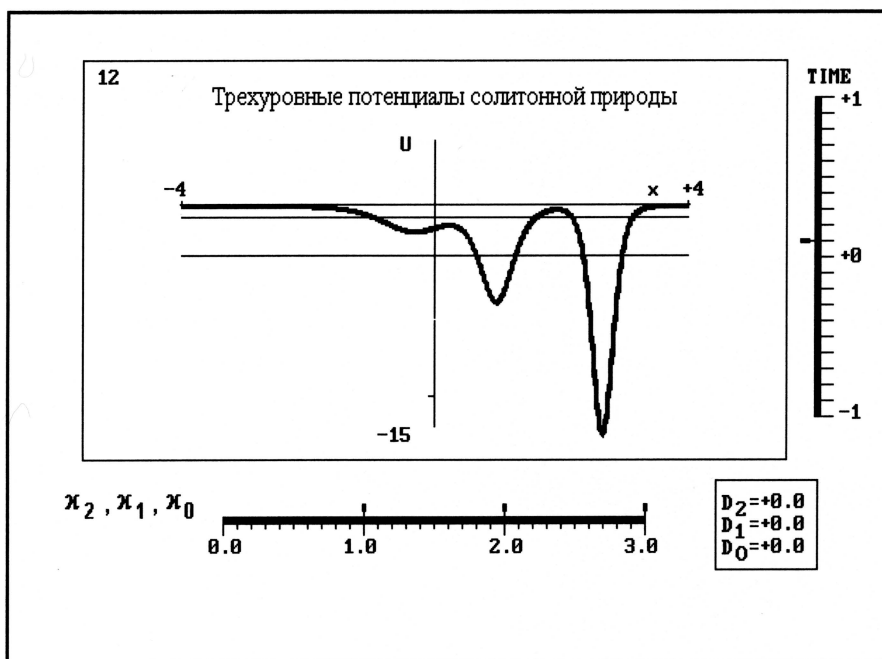


Рис. 3.3. Стенд для компьютерного моделирования трехуровневых потенциалов солитонной природы.

аналитические результаты не только проверяются численными, но и существенно дополняются в условиях компьютерной визуализации, обнаруживая новые особенности изучаемых объектов и приводя к неожиданным аспектам исследуемых явлений.

Необходимо также отметить особую роль компьютерных методов контроля аналитических расчетов как на основе символьных преобразований с помощью специальных математических программных средств, так и в численном и графическом виде.

Разработанный нами оригинальный стенд (см. рис. 3.3) позволяет изучать особенности как солитонных решений уравнения Кортевега-де Фриза, так и соответствующих потенциальных полей с точными решениями для уравнения Шредингера. С его помощью отображены характерные формы солитонных потенциалов. Можно записывать, хранить в сжатом виде и воспроизводить видеокартинки с типичными профилями потенциальных полей. На стенде имеется возможность плавного изменения основных параметров – квазивремени t , фазовых добавок δ_n и энергетических величин K_m , для чего созданы специальные шкалы с ползунками-указателями.

Компьютерные методы исследования указанных потенциальных моделей подразумевают их графическое представление, количественные оценки различных приближений, детализацию сочетаний параметров, наблюдение за поведением соответствующих волновых функций и т. п.

Приведем еще пример компьютерного исследования влияния энергетических параметров. Так, на рис. 3.4 (с экрана дисплея) показана схема сканирования области параметров K_1 / K_2 и K_0 / K_2 при условии $t = 0, \delta_2 = 0$, на которой отмечены участки различных экстремумов симметричных потенциальных моделей.

В правом нижнем углу при этом появляется текущий профиль потенциала с расположением уровней энергии. Над ним, в маленьком окне, показаны конкретные значения параметров K_2, K_1, K_0 , а также изменяемый шаг dK передвигающегося указателя (крестик в круге). В левом маленьком окне обозначены характерные линии и области: жирная кривая показывает минимумы 4-го порядка, тонкая – максимумы 4-го порядка, а на их пересечении имеем минимум 6-го порядка. Большие цифры показывают часть площади, где размещены: 1 – профили с одним, 2 – двумя и 3 – тремя минимумами.

Аналогичным образом сканируются профили моделей с $N > 3$.

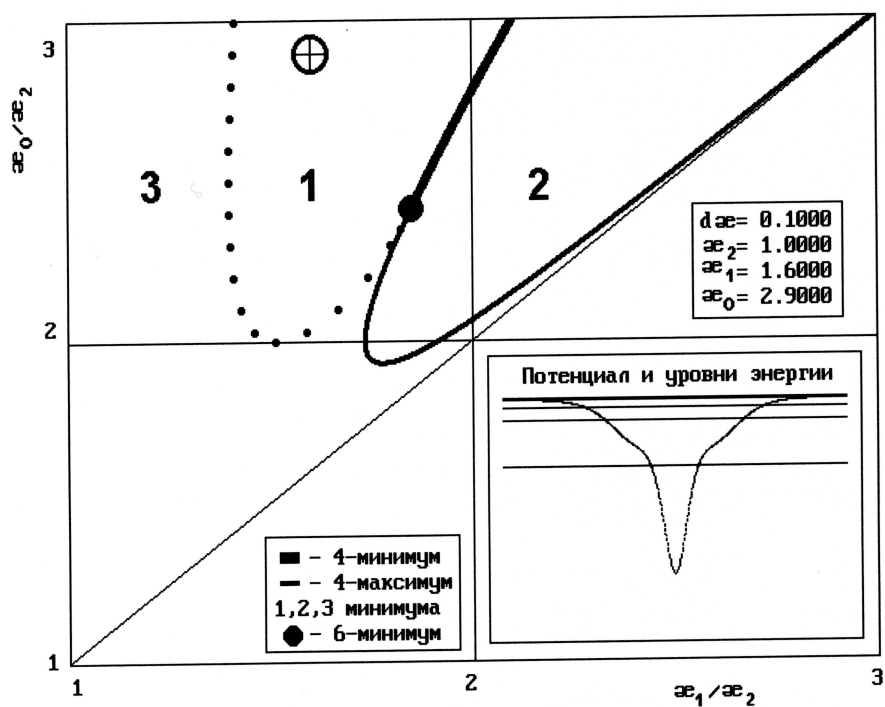


Рис. 3.4. Компьютерное исследование профилей трехуровневых симметричных потенциалов.

3.3. Спин-солитонная аналогия. Итоговые замечания

Между спиновыми и солитонными моделями потенциальных полей имеется много общего. Так, спин-координатное соответствие в теории спиновых систем [24] является аналогом так называемой "пары Лакса" [19] теории солитонов, т.е. солитон-координатного соответствия. В обоих случаях имеется некоторое ассоциированное уравнение Шредингера, с помощью которого решаются главные задачи – проблема энергетического спектра в спиновых системах и задача Коши в теории солитонов для нелинейного эволюционного уравнения Кортевега-де Фриза. В спин-координатном соответствии [24] связующую роль играет представление спиновых когерентных состояний, тогда как в солитон-координатном соответствии аналогичную роль играет интегральное преобразование Гельфанда-Левитана-Марченко в методе обратной задачи рассеяния [17-19].

В обоих случаях исходные элементы – дискретные (спин и солитон), а им ставятся в соответствие непрерывные координатные представления с одномерными потенциальными полями и некоторым энергетическим соответствием. В спиновом случае имеем спиновый спектр и надспиновые уровни энергии для нелокализованных потенциалов, а в солитонном случае имеем у локализованных потенциалов дискретный солитонный спектр и непрерывный "надсолитонный" с полной прозрачностью.

Еще один общий аспект – целочисленная аналогия: в спиновом случае основным параметром потенциальных моделей является целое число $2S+1$, тогда как эквивалентным элементом в солитонном случае служит число солитонов N . И в том, и в другом случае имеются потенциалы и волновые функции стационарных состояний построенные из экспоненциальных (или гиперболических) функций, а в периодических потенциалах и солитонного, и спинового типа есть выражения, содержащие эллиптические функции. У локализованных потенциалов солитонной природы уровни энергии связанных состояний неизменны при деформациях потенциалов. У спиновых эффективных потенциалов также встречаются случаи, когда некоторые уровни энергии остаются фиксированными при изменении профилей потенциалов, что специально подчеркивалось в соответствующих местах второго раздела монографии.

Типичная для солитонных периодических (и почти периодических) моделей конечнозонность [17] встречается и в спиновых моделях [24].

Общей спин-солитонной особенностью является четкое разбиение энергетического спектра на две части: в спиновых системах это выражается в квазиточнорешаемости, а в солитонных – в безотражательности. При этом можно считать, что соответствующее уравнение Шредингера описывает состояния некоторых псевдочастиц – "спинзона" в случае спиновых систем и "фризона" в случае солитонных систем. Особенность спинзона – спиновой системе могут соответствовать как нелокализованные, так и периодические потенциалы. Особенность фризона – солитонной системе могут соответствовать как локализованные, так и периодические потенциалы. Для спиновых моделей спинзон описывается эффективным уравнением Шредингера с потенциалом, найденным с помощью спин-координатного соответствия, уровни энергии частично совпадают со спектром спинового гамильтониана, волновые функции определяют спиновые векторы состояния. В случае солитонных моделей некая псевдочастица фризон описывается ассоциированным уравнением Шредингера с потенциалом, являющимся солитонным решением уравнения Кортевега-де Фриза, уровни энергии связаны со скоростью солитонов, а волновые функции определяют решения модифицированного уравнения Кортевега-де Фриза.

Кроме того, в обоих случаях потенциальным моделям присущи разнообразие форм, наличие нескольких параметров, помимо отмеченных дискретных, появление аналогичных особых профилей потенциалов: с минимумом четвертого порядка, двухъямных с возможным попаданием уровней энергии в критический диапазон вблизи максимума разделяющего ямы барьера и т. п.

И в том, и в другом случае наряду с симметричными моделями существуют разнообразные несимметричные, а также периодические потенциалы. Как в спиновом, так и в солитонном случаях имеются "внеспиновые" и "внесолитонные" ситуации, образующиеся для спиновых моделей при нецелых значениях $2S+1$, а в солитонном случае для несолитонных профилей потенциалов.

Аналогия может проследиваться во многих аспектах, среди которых важное место занимает ввод в обиход новых понятий (квазиточнорешаемость, ассоциированное уравнение Шредингера, спин-координатное соответствие, безотражательность, конечнозонность, псевдочастицы и пр.)

Далее, в обоих случаях открытие точных решений явилось побочным результатом основных исследований – разработки новых

методов в теории спиновых и солитонных систем. Солитонный бум в значительной степени эксплуатировал квантовую теорию, но его достижения остались в основном в трудах по солитонике и не перешли еще в монографии по квантовой механике и ее приложениям (см., однако, [22]). Та же ситуация сложилась и в отношении проблемы квазиточнорешаемых задач и новых подходов в теории спиновых систем, хотя здесь речь идет главным образом о связи между двумя разделами самой квантовой механики. В проблеме квазиточнорешаемых задач все большую долю забирает себе матфизика и чистая математика [34, 35], как было и в теории солитонов.

Таким образом, между двумя совершенно различными системами, поставляющими в квантовую теорию модели с точными решениями, имеется целый ряд соответствий. Видимо, еще предстоит выяснить вопрос о том, является ли это чисто внешней аналогией, или за этим скрыто глубокое структурное сходство.

В отличие от упоминавшихся в первом разделе монографии простых стандартных моделей потенциалов, у которых волновые функции стационарных состояний выражаются через специальные функции (кроме случаев дельта-потенциала и прямоугольной ямы), рассматриваемые солитонные потенциалы строятся из элементарных гиперболических функций, и волновые функции для них также состоят из гиперболических функций. Еще одно отличие заключается в том, что стандартные модели являются однопрофильными и в лучшем случае однопараметрическими (не считая размерных коэффициентов), тогда как у солитонных потенциалов для каждого набора уровней энергии находится не один фиксированный профиль потенциала, а бесконечное многопараметрическое семейство потенциальных моделей.

Особое отличие солитонных моделей от всех других состоит в том, что в них можно совершенно произвольно задавать уровни энергии $E_n < 0$ связанных стационарных состояний, а затем с помощью величин $\kappa_n = \sqrt{|E_n|}$ строить как потенциалы (с включением дополнительных параметров – квазивремени t и фазовых добавок δ_n), так и волновые функции стационарных состояний.

Таким образом, количество потенциалов с простыми точными решениями в квантовой механике существенно обогащается многопараметрическими моделями разнообразного вида.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Цель будет достигнута, если нам удалось, хотя бы частично, разъяснить новые и недостаточно привычные идеи.

И.М.Лифшиц

Проблеме обнаружения новых точных решений уравнения Шредингера посвящено большое количество работ. Этот вопрос актуален со времени появления квантовомеханической теории и по сей день, поскольку точно решаемые модели составляют основу квантовой механики, фонд, пригодный как для постановки и решения новых задач, так и имеющий самостоятельное значение.

В связи с этим найденные в работе новые точные решения представляют несомненный интерес, так как удается записать в явном и достаточно простом аналитическом виде точные выражения как для уровней энергии, так и для волновых функций стационарных состояний.

В монографии найдены новые точные решения для потенциальных моделей, полученных с помощью метода спин-координатного соответствия, а также исследован многопараметрический класс моделей солитонного происхождения.

Следует отметить, что результаты работы, касающиеся спиновых точных решений, уже нашли применение в рамках самой монографии при изучении физических свойств анизотропных парамагнетиков в квантовой теории спиновых систем.

Резюмируем полученные результаты.

Найденные в работе дополнительные качественно новые точные решения уравнения Шредингера спинового происхождения содержат простые явные выражения для потенциалов, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний, что существенно пополнило класс подобных решений.

Специфика спиновых точных решений состоит прежде всего в разнообразии профилей потенциалов, а их отличительная особенность – физический смысл уже при своем появлении, поскольку они явились

не плодом математических преобразований, а результатом исследования конкретных физических систем.

Одним из приложений полученных в книге результатов является изучение физических свойств анизотропных парамагнетиков в магнитных полях (энергетического спектра, намагниченности, восприимчивости). Исследование легкоосных парамагнетиков в поперечном магнитном поле показывает, что при низких температурах восприимчивость как функция поля обладает максимумом при всех значениях спина. С повышением температуры максимум заостряется, а при некоторой температуре профиль восприимчивости становится двугорбым.

Другим приложением является новый метод расчета уровней энергии четверного осциллятора на основе найденных точных решений для эффективных потенциалов с минимумом 4-го порядка.

Связь стационарного уравнения Шредингера с нелинейным эволюционным уравнением Кортевега-де Фриза в теории солитонов приводит к появлению разнообразных локализованных моделей потенциальных полей, у которых имеются простые явные аналитические формулы для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний в квантовой механике. Существенно, что в отличие от других случаев с точными решениями в моделях солитонной природы задаются уровни энергии и каждому набору уровней соответствует бесконечное многопараметрическое семейство потенциальных моделей.

Проведенные в работе исследования позволили установить характерные формы таких многоуровневых потенциалов, вывести формулы для соответствующих волновых функций стационарных состояний и выявить фазовые добавки, определяющие несимметричные профили таких моделей.

Как показано в книге, между двумя совершенно различными системами – спиновой и солитонной, – поставляющими в квантовую теорию модели потенциальных полей с точными решениями, имеется целый ряд соответствий. В обоих случаях точные решения являются побочным результатом основных исследований – разработки новых методов в теории спиновых и солитонных систем. В обеих системах исходные элементы – дискретные (спин и солитон), а им отвечают ассоциированное уравнение Шредингера и непрерывное координатное представление с потенциалами и некоторым энергетическим сопоставлением. В каждой из этих систем потенциальным моделям

присущи многопараметричность, разнообразие форм, экстремумы высокого порядка, симметричные и несимметричные профили. Квазиточнорешаемости спиновых моделей соответствует безотражательность солитонных.

В монографии широко используются компьютерные методы исследования, которые, в частности, позволяют контролировать аналитические расчеты как на основе аналитических же преобразований с помощью пакетов типа Mathematica [84], так и в численном и графическом виде. При этом графическое изображение часто служит стимулом аналитических расчетов, являясь аналогом физического эксперимента. Кроме того, аналитические результаты существенно дополняются в условиях компьютерной визуализации, обнаруживая новые особенности изучаемых объектов.

Точные решения являются основой теории стационарных состояний, фундаментом новых задач, базой приближенных методов, тестовыми примерами для компьютерных методов исследования. Они используются при изучении сложных явлений с неизвестными закономерностями и при проверке новых теорий, важны для методических целей при демонстрации квантовых эффектов.

Найденные точные решения уравнения Шредингера с простыми явными выражениями для потенциалов, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний существенно обогатили множество точно решаемых моделей в квантовой механике, которое образует незыблемое ценное достояние квантовой теории, ее "золотой" фонд. Как образно подмечено в предисловии книги [85],

"Важную роль в математическом моделировании природных явлений играют решаемые модели. Они дают возможность понять основные черты явления и указывают направление поиска методов, пригодных в более сложных и более реалистических ситуациях".

Надеемся, что выводы монографии будут способствовать более глубокому пониманию физических свойств спиновых систем типа анизотропных парамагнетиков в магнитном поле. Книга может служить также учебным пособием по квантовой теории и быть использованной при проведении соответствующих лекционных и практических занятий. Полагаем, что материалы монографии найдут практическое применение в работах специалистов-теоретиков, так как относятся к общетеоретическим и фундаментальным проблемам квантовой теории.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). - М.: Наука, 1989. - 768 с.
2. Давыдов А.С. Квантовая механика. - М.: Наука, 1973. - 704 с.
3. Мессиа А. Квантовая механика. - М.: Наука, 1978. - Т.1. - 480 с.
4. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. - М.: Наука, 1981. - 648 с.
5. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. - М.: Мир, 1974. - Т.1. - 341 с.; Т.2. - 315 с.
6. Ульянов В.В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике. - Х.: Вища шк., 1980. - 216 с.
7. Точные решения релятивистских волновых уравнений/ Багров В.Г., Гитман Д.М., Тернов И.М. и др. - Новосибирск: Наука, 1982. - 144 с.
8. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. - М.: Наука, 1976. - 320 с.
9. Ульянов В.В. Интегральные методы в квантовой механике. - Х.: Вища шк., 1982. - 160 с.
10. Морс Ф.М., Фешбах Г. Методы теоретической физики. Т.1. - М.: ИЛ, 1958. - 930 с.
11. Морс Ф.М., Фешбах Г. Методы теоретической физики. Т.2. - М.: ИЛ, 1960. - 886 с.
12. Захарьев Б.Н. Уроки квантовой интуиции. - Дубна: ОИЯИ, 1996. - 300 с.
13. Mielnik B. Factorization method and new potentials with the oscillator spectrum // J. Math. Phys. - 1984. - V. 25, № 12. - P. 3387-3389.
14. Натанзон Г.А. Исследование одномерного уравнения Шредингера, порождаемого гипергеометрическим уравнением // Вестник ЛГУ. - 1971. - № 10. - С. 22-28.
15. Puzkarski H. Kronig-Penny model with energy-dependent δ -potential strength // Physica. - 1984. - V. 125B. - P. 179-184.
16. Stec B. Solution of the one-dimensional Schrödinger equation for a double-well potential with finite walls // Acta Physica Polonica. - 1985. - V. A68, № 5. - P. 681-693.
17. Теория солитонов. Метод обратной задачи / Захаров В.Е., Манаков С.В., Новиков С.П., Питаевский Л.П. - М.: Наука, 1980. - 320 с.
18. Абловиц М., Сигур Х. Солитоны и метод обратной задачи. - М.:

- Мир, 1987. - 479 с.
19. Солитоны и нелинейные волновые уравнения / Додд Р., Эйлбек Дж., Гиббон Дж., Моррис Х. - М.: Мир, 1988. - 694 с.
 20. Лэм Дж. Введение в теорию солитонов. - М.: Мир, 1983. - 294 с.
 21. Бхатнагар П. Нелинейные волны в одномерных дисперсных системах. - М.: Мир, 1983. - 136 с.
 22. Ульянов В.В. Методы квантовой кинетики. - Х.: Вища шк., 1987. - 144 с.
 23. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. - М.: Наука, 1979. - 528 с.
 24. Ulyanov V.V., Zaslavskii O.B. New methods in the theory of quantum spin systems // Phys. Rep. - 1992. - V. 216, № 4. - P. 179-251.
 25. Заславский О.Б., Ульянов В.В., Цукерник В.М. К теории низкотемпературной восприимчивости спиновых систем с магнитной анизотропией // ФНТ. - 1983. - Т. 9, № 5. - С. 511-519.
 26. Заславский О.Б., Ульянов В.В. Новые классы точных решений уравнения Шредингера и описание спиновых систем с помощью потенциальных полей // ЖЭТФ. - 1984. - Т. 87, в. 5. - С. 1724-1733.
 27. Заславский О.Б., Ульянов В.В. Периодические эффективные потенциалы для спиновых систем и новые точные решения одномерного уравнения Шредингера для энергетических зон // ТМФ. - 1987. - Т. 71, № 2. - С. 260-271.
 28. Zaslavskii O.B. Spin tunneling and the effective potential method // Phys. Lett. A. - 1994. - V. 145, № 8,9. - P. 471-475.
 29. Турбинер А.В. Квантовая механика: задачи промежуточные по отношению к точнорешаемым и точнонерешаемым // ЖЭТФ. - 1988. - Т. 94, в. 2. - С. 33-44.
 30. Заславский О.Б. Новые точные решения уравнения Шредингера на основе конечномерных матриц // Изв. вузов. Физика. - 1990. - № 1. - С. 17-23.
 31. Zaslavskii O.B. Two-dimensional quasi-exactly solvable models with a magnetic field // Phys. Lett. A. - 1994. - V. 190. - P. 373-376.
 32. Zaslavskii O.B. Quasi-exactly solvable models with an inhomogeneous magnetic field // J. Phys. A. - 1994. - V. 27. - P. L447-L452.
 33. Zaslavskii O.B. Two-dimensional quasi-exactly solvable models and classical orthogonal polynomials // J. Phys. A. - 1994. - V. 27. - P. L323-L328.
 34. Turbiner A.V. Quasi-Exactly-Solvable Problems and $sl(2)$ Algebra //

- Commun. Math. Phys. - 1988, - V. 118. - P. 467-474.
35. Ушверидзе А.Г. Квазиточнорешаемые модели в квантовой механике // ЭЧАЯ. - 1989. - Т. 20, в. 5. - С. 1185-1245.
 36. Ульянов В.В., Заславский О.Б., Василевская Ю.В. Новые точные решения уравнения Шредингера с потенциалами спинового и солитонного происхождения // ФНТ. - 1997. - Т. 23, № 1. - С. 51-60.
 37. Заславский О.Б., Ульянов В.В., Василевская Ю.В. К теории низкотемпературных свойств спиновых систем с магнитной анизотропией // ФНТ. - 1997. - Т. 23, № 12. - С. 1289-1295.
 38. Заславский О.Б., Ульянов В.В., Василевская Ю.В. Низкотемпературные свойства одноосных парамагнетиков в наклонном магнитном поле // ФНТ. - 1998. - Т. 24, № 7. - С. 627-634.
 39. Василевська Ю.В., Ульянов В.В. Точнорозв'язувані моделі потенціалів надпрозорового типу в квантовій механіці // УФЖ. - 1998. - Т.43, № 3. - С. 363-367.
 40. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. О точных решениях уравнения Шредингера для потенциалов солитонного происхождения // Изв.вузов. Физика. - 1998. - № 2. - С. 116-117.
 41. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Точные решения уравнения Шредингера в случае солитонных моделей потенциальных полей // Вісник ХДУ. Серія "Фізика". - 1998. - № 417, в. 1. - С. 9-13.
 42. Василевская Ю.В., Заславский О.Б., Ульянов В.В. О солитонных и спиновых точных решениях уравнения Шредингера // Материалы 2-й конференции "Физические явления в твердых телах". - Харьков: ХГУ. - 1995. - С. 8.
 43. Vasilevska J.V., Ulyanov V.V., Zaslavskii O.B. New approach to the quantum theory of the spin systems // 15th General Conf. of the Condensed Matter Division of EPS. - Baveno-Stresa (Italy). - 1996. - P. 220.
 44. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Компьютерный стенд для исследования солитонных потенциальных моделей // Материалы 2-й конф. "Применение перс. компьютеров в научн. исследованиях и уч. процессе". - Харьков: ХГУ. - 1996. - С. 16.
 45. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Моделирование солитонных явлений // Тезисы докладов 3-й Международной конф. "Компьютерные программы учебного назначения". - Донецк: ДонГУ. - 1996. - С. 91.
 46. Ulyanov V.V., Zaslavskii O.B., Vasilevska J.V. Quantum spin systems: new methods and exactly solvable potential models // Proc.

- of the III International Conf. on Physical Phenomena in Solids. - Kharkov (Ukraine). - 1997. - P. 23.
47. Zaslavskii O.B., Ulyanov V.V., Vasilevskaya J.V. On the theory of quasi-exactly solvable models // Proc. of the III International Conf. on Physical Phenomena in Solids. - Kharkov (Ukraine). - 1997. - P. 36.
48. Василевская Ю.В., Ульянов В.В., Заславский О.Б. Дополнительные новые точные решения уравнения Шредингера для спиновых эффективных потенциалов // Материалы 3-й Междунар. конф. "Физические явления в твердых телах". - Харьков: ХГУ. - 1997. - С. 37.
49. Ульянов В.В., Заславский О.Б., Василевская Ю.В. Спин-солитонная аналогия в квантовых точнорешаемых потенциальных моделях // Материалы 3-й Междунар. конф. "Физические явления в твердых телах". - Харьков: ХГУ. - 1997. - С. 38.
50. Василевська Ю.В., Ульянов В.В. Точні розв'язки рівняння Шредінгера у випадку солітонних потенціалів // Матеріали 3-ї Міжнар. конф. "Фізичні явища в твердих тілах". - Харків: ХДУ. - 1997. - С. 39.
51. Zaslavskii O.B., Vasilevskaya J.V., and Ulyanov V.V. New approach to the theory of magnetic spin systems // International Conf. on Magnetism. - Cairns (Australia). - 1997. - Abstracts Q3-75.
52. Vasilevskaya J.V., Zaslavskii O.B., and Ulyanov V.V. Theoretical Investigation of Quantum Properties of Spin Systems // 16-th General Conf. of the EPS-Condensed Matter Division. - Leuven (Belgium). - 1997. - P. 110.
53. Vasilevskaya Yu.V., Zaslavskii O.B., and Ulyanov V.V. Physical properties of easy-axis paramagnets in a transverse magnetic field // Book of Abstracts 20-th International Conf. on Statistical Physics. - Paris (France). - 1998. - POa01/40.
54. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Моделирование взаимодействия солитонов уравнения Кортевега-де Фриза // Материалы конф. "Применение перс. компьютеров в научн. исследованиях и уч. процессе". - Харьков: ХГУ. - 1994. - С. 29.
55. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Анимационное моделирование решений уравнения Кортевега-де Фриза // Материалы 2-й конф. "Применение перс. компьютеров в научн. исследованиях и уч. процессе". - Харьков: ХГУ. - 1996. - С. 17.
56. Василевская Ю.В., Заславский О.Б., Ульянов В.В. Исследование

- спин-солитонных четверных потенциалов // Материалы 2-й конф. "Применение перс. компьютеров в научн. исследованиях и уч. процессе". - Харьков: ХГУ. - 1996. - С. 18.
57. Василевская Ю.В., Гаврилова Е.В., Ульянов В.В. Учебно-исследовательские программы по квантовой механике // Тезисы докладов 3-й Международной конф. "Компьютерные программы учебного назначения". - Донецк: ДонГУ. - 1996. - С. 90.
 58. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Компьютерные технологии в обучении дисциплинам теоретической физики // Труды междунар. конф. "Современные проблемы дидактики высшей школы". - Донецк, ДонГУ. - 1997. - С. 62.
 59. Гришко Д.Ю., Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Обучение дисциплинам теоретической физики с помощью современных компьютерных технологий // Материалы 3-й конф. "Применение перс. компьютеров в научн. исследованиях и уч. процессе". - Харьков: ХГУ. - 1998. - С. 17.
 60. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Компьютерное моделирование солитонобразных потенциальных полей с точными решениями в квантовой механике // Материалы 3-й конф. "Применение перс. компьютеров в научн. исследованиях и уч. процессе". - Харьков: ХГУ. - 1998. - С. 19.
 61. Миллер У. Симметрия и разделение переменных. - М.: Мир, 1981. - 344 с.
 62. Zheng W.M. The Darboux transformation and solvable double-well potential models for Schrödinger equations // J. Math. Phys. - 1984. - V. 25, № 1. - P. 88-90.
 63. Razavy M. An exactly soluble Schrödinger equation with a bistable potential // Am. J. Phys. - 1980. - V. 48, № 4. - P. 285-288.
 64. Генденштейн Л.Э. Нахождение точных спектров уравнения Шредингера с помощью суперсимметрии // Письма в ЖЭТФ. - 1983. - Т. 38, в. 6. - С. 299-302.
 65. Переломов А.М. Обобщенные когерентные состояния и их применения. - М.: Наука, 1987. - 272 с.
 66. Малкин И.А., Манько В.И. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. - М.: Наука, 1979. - 320 с.
 67. Уайт Р.М. Квантовая теория магнетизма. - М.: Мир, 1985. - 304 с.
 68. Абрагам А., Блини Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. - М.: Мир, 1972. - 647 с.
 69. Хейне В. Теория групп в квантовой механике. - М.: Изд-во иностр.

- лит., 1963. - 522 с.
70. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика. Ч.2. - М.: Наука, 1978. - 448 с.
 71. Hudak O., Trlifaj L. Exact bound-state wavefunctions for potentials varying from the double well to the single well // J.Phys. A: Match. Gen. - 1985. - V. 18. - P. 445-453.
 72. Somorjai R.L., Hornig D.F. Double-Minimum Potentials in Hydrogen-Bonded Solids // J. Chem. Phys. - 1962. - V. 36, № 8. - P. 1980-1987.
 73. Ильин В.П., Кузнецов Ю.И. Трехдиагональные матрицы и их приложения. - М.: Наука, 1985. - 208 с.
 74. Математический анализ (функции, пределы, ряды, цепные дроби). - М.: Физматгиз, 1961. - 440 с.
 75. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и таблицами. - М.: Наука, 1979. - 832 с.
 76. Chan S.I., Stelman D. Some Energy Levels and Matrix Elements of the Quartic Oscillator // J. Mol. Spectr. - 1963. - V. 10, № 4. - P. 278-299.
 77. Chan S.I., Stelman D., Thompson L.E. Quartic Oscillator as a Basis for Energy Level Calculations of Some Anharmonic Oscillators // J. Chem. Phys. - 1964. - V. 41, № 9. - P. 2828-2835.
 78. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч.1. - М.: Наука, 1976. - 584 с.
 79. Филатова Л.Д., Цукерник В.М. Термодинамические и высокочастотные свойства парамагнетика с отрицательной константой анизотропии при низких температурах // ЖЭТФ. - 1969. - Т. 56, № 4. - С. 1290-1296.
 80. Розенфельд Е.В. О квантовых скачках намагниченности в магнетиках с анизотропией типа "легкая плоскость" // Письма в ЖЭТФ. - 1976. - Т. 24, № 2. - С. 60-64.
 81. Kay I., Moses H.E. Reflectionless Transmission through Dielectrics and Scattering Potentials // Journal of Applied Physics. - 1956. - V. 27, № 12. - P. 1503-1508.
 82. Курош А.Г. Курс высшей алгебры. - М.: Физматгиз, 1963. - 432 с.
 83. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). - М.: Наука, 1977. - 832 с.
 84. Дьяконов В.П. Системы символьной математики Mathematica2 и Mathematica3. - М.: СК Пресс, 1998. - 320 с.
 85. Решаемые модели в квантовой механике / Альбеверьо С., Гестези Ф., Хеэг-Крон Р., Хольден Х.. - М.: Мир, 1991. - 568 с.

86. Ulyanov V.V. and Zaslavskii O.B. Spin systems, spin coherent states and quasi-exactly solvable models // Proc. of the XXII Int. Colloquium on Group Theor. Methods in Physics (Cambridge, MA: Int. Press). - 1998. - P.213-217.
87. Василевская Ю.В. Точно решаемые квантовые потенциальные модели спинового и солитонного происхождения. Кандидатская диссертация. - Х.: ХГУ, 1998. - 129 с.
88. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. К теории квантовых ангармонических осцилляторов // Вісник ХДУ. Серія "Фізика". - 1999. - № 440, в. 3. - С.7-12.
89. Ulyanov V. V. and Zaslavskii O. B. Tunneling series in terms of perturbation theory for quantum spin systems // Phys. Rev. B.- 1999. - V. 60, № 9. - P. 6212-6214.
90. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. К теории квантовых ангармонических осцилляторов. II //Вісник ХНУ. Серія "Фізика". - 2000. - № 476, в. 4. - С. 37-41.
91. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Компьютерные методы исследования спиновых и солитонных систем // Материалы 4-й рег. конф. "Применение перс. компьютеров в научн. исслед. и уч. процессе", Харьков, 24-26 октября 2000 года. - Х.: ХНУ, 2000. - С. 15.
92. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Осцилляции магнитной восприимчивости в спиновых системах // Вісник ХНУ. Серія "Фізика". - 2001. - № 516, в. 5. - С. 27-29.
93. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Об осцилляциях магнитной восприимчивости в спиновых системах // Физические явления в твердых телах. Материалы 5-й Международной конференции 25-26 октября 2001 г. - Харьков: ХНУ, 2001. - С. 37.
94. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. К теории квантовых ангармонических осцилляторов. III. Осцилляционные явления в энергетических спектрах // Вісник ХНУ. Серія "Фізика". - 2002. - № 558, в. 6. - С. 14-17.
95. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Осцилляционные явления в энергетических спектрах квантовых ангармонических осцилляторов // Материалы 5-й регион. конференции "Применение персональных компьютеров в науч. исследованиях и уч. процессе", Харьков, 30-31 октября 2002 года. - Х.: ХНУ, 2002. - С. 16.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Решение кубического уравнения с действительными коэффициентами

Если в кубическом уравнении

$$x^3 + a_1x^2 + a_2x + a_3 = 0 \quad (\text{П1.1})$$

с действительными коэффициентами a_k все корни также действительны и различны, то их можно вычислять по формулам так называемого "тригонометрического" решения [82, 83], которые удобно преобразовать к следующему виду:

$$x_3 = -\frac{a_1}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{W} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{W^{3/2}}\right),$$
$$x_2 = -\frac{a_1}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{W} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{W^{3/2}} - \frac{2}{3}\pi\right), \quad (\text{П1.2})$$

$$x_1 = -\frac{a_1}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{W} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{W^{3/2}} + \frac{2}{3}\pi\right),$$

где компактную запись обеспечивают вспомогательные величины W и V , связанные с коэффициентами исходного уравнения соотношениями

$$W = a_1^2 - 3a_2, \quad V = -a_1^3 + \frac{9}{2}a_1a_2 - \frac{27}{2}a_3. \quad (\text{П1.3})$$

При этом они автоматически удовлетворяют условиям $W > 0$ и $|V| < W^{3/2}$

Поскольку $0 \leq \arccos \alpha \leq \pi$, то нетрудно видеть, что указанная нумерация корней всегда будет отвечать их возрастанию с увеличением номера, т. е.

$$x_1 < x_2 < x_3. \quad (\text{П1.4})$$

Именно такая последовательность записи корней подходит для вычисляемых в книге невырожденных уровней энергии.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Решение уравнения четвертой степени методом Феррари

Если уравнение четвертой степени записать в виде

$$x^3 + a_1x^3 + a_2x^2 + a_3x + a_4 = 0 \quad (\text{П2.1})$$

то в соответствии с методом Феррари [82, 83] искомые 4 корня этого уравнения можно компактно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} x_4 &= -\frac{a_1}{4} + \sqrt{y} + \sqrt{F - y + R / \sqrt{y}}, \\ x_3 &= -\frac{a_1}{4} + \sqrt{y} - \sqrt{F - y + R / \sqrt{y}}, \end{aligned} \quad (\text{П2.2})$$

$$\begin{aligned} x_2 &= -\frac{a_1}{4} - \sqrt{y} + \sqrt{F - y - R / \sqrt{y}}, \\ x_1 &= -\frac{a_1}{4} - \sqrt{y} - \sqrt{F - y - R / \sqrt{y}}. \end{aligned}$$

Здесь величины F и R связаны с коэффициентами a_k уравнения соотношениями

$$F = \frac{3}{16}a_1^2 - \frac{1}{2}a_2, \quad R = -\frac{1}{32}a_1^3 + \frac{1}{8}a_1a_2 - \frac{1}{4}a_3, \quad (\text{П2.3})$$

а величина y является корнем некоторого вспомогательного кубического уравнения (кубической резольвенты) и может быть записана в виде

$$y = \frac{F}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{W} \cos\left(\frac{1}{3}\arccos\frac{V}{W^{3/2}}\right), \quad (\text{П2.4})$$

где параметры резольвенты W и V также выражаются через коэффициенты исходного уравнения:

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{16}a_2^2 - \frac{3}{16}a_1a_3 + \frac{3}{4}a_4, \\ V &= \frac{27}{128}a_1^2a_4 + \frac{1}{64}a_2^3 + \frac{27}{128}a_3^2 - \frac{9}{128}a_1a_2a_3 - \frac{9}{16}a_2a_4. \end{aligned} \quad (\text{П1.5})$$

ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

A – нормировочный множитель	T – температура
a – характерная длина; коэффициент	t – квазивремя
B – магнитное поле	U – потенциальная энергия
b – коэффициент	u – солитонный потенциал
c – вектор состояния в спиновом представлении	V – вспомогательная величина
d – вспомогательная величина	W – вспомогательная величина
E – полная энергия системы	x – координата
e – основание натуральных логарифмов	y – координата; резольвента
F – вспомогательная величина; формирующая матрица спинового потенциала	z – координата
f – вспомогательная функция	α – константа магнитной анизотропии
G – вспомогательная величина	β – константа магнитной анизотропии
g – вспомогательная величина	γ – фазовая величина
H – гамильтониан системы	Δ – фазовая величина; энергетическая щель
$\hbar$ – постоянная Планка	δ – фазовая добавка в солитонных потенциалах
j – вспомогательный номер	$\delta(x)$ – дельта-функция Дирака
K – функция Макдональда	ε – уровни энергии
k – вспомогательный номер	κ – энергетический параметр солитонного потенциала
M – намагниченность	λ – вспомогательный параметр
m – масса частицы; номер	σ – квантовое число
N – число солитонов	Φ – множитель волновой функции
n – номер уровня энергии	ϕ – фазовая добавка
P – полином характеристического уравнения	χ – магнитная восприимчивость
Q – коэффициент	Ψ – волновая функция
R – вспомогательная величина	ψ – волновая функция
r – сферическая координата	ω – классическая частота осциллятора
S – спин (квазиспин, псевдоспин)	

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Аналогия спин-солитонная 104-106
Анизотропии магнитной константы 21
Безотражательность солитонных потенциалов 95, 105
Вектор состояния в спиновом представлении 23
Внеспиновые состояния 18, 22, 79
Волновые функции стационарных состояний 69-77
Восприимчивость магнитная 42-43, 78-79
Гамильтониан
– легкоосного парамагнетика 16, 20, 22, 39
– легкоплоскостного парамагнетика 16, 34, 41
– двухосного парамагнетика 21, 43, 65
Гармонический осциллятор 9
Двухъямный потенциал 18, 20
Дельта-функция Дирака 10
Деформации спиновых потенциалов 18, 26
Значение точных решений 3, 13-14, 109
Квазивремя 91

Квазиточнорешаемость спиновых моделей 4, 22, 105
Компьютерные стенды 101-103
Магнитное поле 16
Магнитная восприимчивость 42-43, 78-79
Метод
– Дарбу 11-12
– тригонометрический 117
– Феррари 118
– цепных дробей 23
– факторизации 11-12
– эффективных потенциалов 4, 12, 16-22
Модели солитонных потенциалов
– несимметричные 99-100
– симметричные 97-98
Надспиновые состояния 77
Намагниченность 42
Основные обозначения 119
Парамагнетик
– легкоосный 16, 20, 22, 39
– легкоплоскостной 16, 34, 41
– двухосный 21, 43, 65

Периодические спиновые
потенциалы 21

Потенциал

– квадратичный 9

– кулоновский 9

– Морса 10

– Пешля-Теллера 10

– солитонный 91

– спиновый 20

– четверной 33, 38

– Экарта 9, 92, 93, 95

Резольвента 118

Рекуррентные соотношения 23,
39, 44

Солитонные потенциалы 91

Спин 16, 18, 88

Спинзон 105

Спин-солитонная аналогия
104-106

Спин-координатное
соответствие 12, 15, 104

Стандартные модели
потенциалов 8-11

Температурные трансформации
магнитной восприимчивости
81-87

Уравнение

– Кортевега-де Фриза 13, 90, 91,
104, 105, 108

– Шрёдингера 8, 17, 90, 92

Фазовые параметры

солитонных потенциалов
91-103

Формирующая матрица
солитонных потенциалов 91

Фризон 105

Функция Макдональда 71

Характеристическое уравнение
для спиновых точных решений
23, 39, 45

Цепные дроби 23

Четверной гиперболический
осциллятор 33, 35-38

Четверной осциллятор 33, 38

Энергетические параметры
солитонных потенциалов 91

Энергетические уровни для
спиновых точных решений
22-68

Эффективные потенциалы 4,
16-22

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
1. ПРОБЛЕМА ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА . . .	8
1.1. Стандартные точно решаемые модели потенциалов	8
1.2. Методы поисков новых точно решаемых моделей	11
1.3. Значение точно решаемых моделей потенциалов	13
2. КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ СПИНОВОЙ ПРИРОДЫ . . .	15
2.1. Метод эффективных потенциалов для спиновых систем. . .	16
2.2. Уровни энергии для спиновых точных решений	22
2.3. Волновые функции для спиновых точных решений	69
2.4. Свойства парамагнетиков в магнитном поле	79
2.5. Обсуждение результатов	88
3. ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ СОЛИТОННОЙ ПРИРОДЫ	90
3.1. Общие особенности локализованных полей	90
3.2. Исследование многоуровневых потенциальных полей . . .	94
3.3. Спин-солитонная аналогия. Итоговые замечания	104
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	107
ЛИТЕРАТУРА	110
ПРИЛОЖЕНИЕ 1	117
ПРИЛОЖЕНИЕ 2	118
ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ	119
ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ	120

Д Л Я З А М Е Т О К

Наукове видання

Юлія Володимирівна Василевська
Володимир Володимирович Ульянов

НОВІ КВАЗІТОЧНОРОЗВ'ЯЗУВАНІ МОДЕЛІ
В КВАНТОВІЙ ТЕОРІЇ СПІНОВИХ СИСТЕМ

Відповідальний за випуск Г.І.Рашба

Підп. до друку 25.05.05. Формат 60х84 1/16. Папір офсетний.
Друк ризографічний. Ум. друк. арк. 5,6. Обл.-вид. арк. 6,5.

ХНУ, 61077, Харків, пл. Свободи, 4.
Видавничий центр.

