切比雪夫方程在科研上的应用一例[1]

(1) 微分方程的建立

本节利用切比雪夫方程来求解磁化强度的一般表达式.但是方程的求解区域在表 3.1 中所规定的区域之外.这是作者在自己的科研中遇到的一个实例[2-6].

从海森伯模型可以了解磁性系统的一些物理性质.我们用自旋算符 S^z 来表示磁化强度的 z 分量.那么可测量的磁化强度的数值就是 $\langle S^z\rangle$.磁化强度的数值与自旋量子数 S 是有关的.显然，S 越大，那么磁化强度的数值就越大.S 只能取整数和半整数

$$S=\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\frac{5}{2},3,\cdots. \tag{1}$$

利用多体格林函数方法[17]，分别取 $S=\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\frac{5}{2}$ 等，我们可以得到 $\langle S^z\rangle$ 和关联函数 $\langle S^zS^z\rangle$ 的表达式.然后我们综合这些公式，猜测出，对于任意 S，它们的表达式应该是[3,4]

$$\langle S^z\rangle=\frac{[(2S+1)R+Q](Q-R)^{2S+1}+[(2S+1)R-Q](Q+R)^{2S+1}}{2R^2[(Q+R)^{2S+1}-(Q-R)^{2S+1}]} \tag{2}$$

和 $\langle S^zS^z\rangle=\dfrac{2S(S+1)-Q\langle S^z\rangle(3-R^2)}{2R^2}$.其中 Q 和 R 是已知常量，它们与系统的能谱有关.这两个表达式毕竟是归纳得到的，必须有一个对于任意 S 适用的严格的证明.

为了严格求出一般的表达式，我们发现定义如下的一个函数是方便的.

$$f(u)=\langle\exp(uS^z)\rangle \tag{3}$$

其中 u 是函数自变量.因为由泰勒展开知道，这个函数包含了各级关联函数，就是各级导数的初始值.例如，磁化强度和最低级关联函数分别是一次和二次导数的初始值.

$$f'(0)=\langle S^z\rangle \tag{4}$$

$$f''(0)=\langle (S^z)^2\rangle \tag{5}$$

函数本身的初始值为 1.

$$f(0)=1 \tag{6}$$

运用多体格林函数方法并且做了无规相近似之后，我们可以得到函数(3)所满足的方程如下[5].

$$f''(u)-\frac{V(u)}{W(u)}\frac{[W(u)]^2-2(R^2-1)}{[W(u)]^2+4(R^2-1)}f'(u)-\frac{[W(u)]^2}{[W(u)]^2+4(R^2-1)}S(S+1)f(u)=0 \quad (7)$$

其中

$$W(u)=(Q+1)\mathrm{e}^{u/2}-(Q-1)\mathrm{e}^{-u/2} \quad (8a)$$

$$V(u)=(Q+1)\mathrm{e}^{u/2}+(Q-1)\mathrm{e}^{-u/2} \quad (8b)$$

(2) 微分方程的求解

我们现在来求二阶常微分方程(7)的解析解[6].方程的形式看上去比较复杂，幸好我们找到了正确的求解途径.为此先做变量代换.令

$$p=\frac{V(u)}{2\sqrt{Q^2-R^2}}=\frac{(Q+1)\mathrm{e}^{u/2}+(Q-1)\mathrm{e}^{-u/2}}{2\sqrt{Q^2-R^2}} \quad (9)$$

和

$$n=2S \quad (10)$$

方程(7)变换为

$$(p^2-1)f''(p)+3pf'(p)-[(n+1)^2-1]f(p)=0 \quad (11)$$

这是连带切比雪夫方程.在一般的连带切比雪夫方程中，宗量$-1\le p\le 1$.因此解为第一类和第二类切比雪夫函数$T(p)$和$U(p)$，它们都是三角函数，我们称之为**正常切比雪夫函数**或者**三角切比雪夫函数**.函数值的绝对值都是小于等于 1 的，$|T_n(p)|\le 1$，$|U_n(p)|\le 1$.在定义区间上属于不同特征值的特征函数具有正交规一性.但是在我们的方程(11)中，宗量p是大于 1 的.

当$p>1$时，变量代换$p=\cosh t$，则将方程(11)变为$f''(t)-n^2f(t)=0$，得到方程(11)的解为

$$T_n^{\times}(p)=\cosh(n\cosh^{-1}p) \quad (12a)$$

$$U_n^{\times}(p)=\sinh(n\cosh^{-1}p) \quad (12b)$$

这两个函数的适用区间是：$[1,\infty)$和$(-\infty,-1]$.其中$T_n^{\times}(p)$是多项式.函数值大于零.

$$T_n^{\times}(p)\ge 1，\ U_n^{\times}(p)\ge 0 \quad (13)$$

且没有上限.我们称之为**第一类和第二类双曲切比雪夫函数**或者**反常切比雪夫函数**.实际上，只要记住公式$\cos \mathrm{i}p=\cosh p$和$\sin \mathrm{i}p=\mathrm{i}\sinh p$，有一部分三角切比雪夫函数适用的公式对于双曲三角切比雪夫函数也适用[7].在文献[8]中，有关于切

比雪夫多项式的详尽的介绍.

和三角切比雪夫函数一样，连带切比雪夫方程(11)的解是双曲切比雪夫函数的导数，

$$T_n^{\times(m)}(p)=\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}p^m}T_n^{\times}(p)\text{，}\quad U_n^{\times(m)}(p)=\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}p^m}U_n^{\times}(p)$$

取 $m=1$，得到就是方程(11)的两个线性无关的解.

经过一些步骤，我们得到方程(7)的解析解：

$$f(u)=R\frac{\left[V(u)+\sqrt{[V(u)]^2-4(Q^2-R^2)}\right]^{n+1}-\left[V(u)+\sqrt{[V(u)]^2-4(Q^2-R^2)}\right]^{-n-1}}{2^n[(Q+R)^{n+1}-(Q-R)^{n+1}]\sqrt{[V(u)]^2-4(Q^2-R^2)}} \tag{14}$$

最后，我们要提一下，(10)式表明自旋量子数 S 确实只能取正整数或者半正整数，如(1)式那样.否则方程(11)是无解的.

此例表明，在宗量大于 1 的区域，虽然泰勒展开级数是不收敛的，方程还是有解的.

此例还表明，宗量大于 1 的切比雪夫方程和切比雪夫函数也是有着其物理应用的.

此例又表明，可以有这样的情况：方程的解本身并不是可测量的物理量，解的导数的初值则是可测量的物理量.本例中方程的解 $f(u)$ 不是可测量的物理量，可测量的物理量是由(2)式决定的磁化强度.

[1] 本节内容可看我书《物理学中的数学方法》第三章 3.5 节.
[2] Wang Huai-Yu, Chen Ke-Qiu, Wang En-Ge, The fermion Green's function theory for calculation of magnetization, Int. J. Mod. Phys. B, 2002, 16(25): 3803.
[3] Wang Huai-Yu, Wang Chong-Yu, and Wang En-Ge, Magnetization in the case of anisotropic exchange interaction, Phys. Rev. B, 2004, 69: 174431.
[4] Wang Huai-Yu, Dai Zhen-Hong, Fröbrich P, Jensen P J, and Kuntz P J, Many-body Green’s function theory of ferromagnetic systems with single-ion anisotropies in more than one direction, Phys. Rev. B, 2004, 70: 134423.
[5] Wang Huai-Yu, Zhou Bin and Chen Nian-Xian, Statistical average of spin operators for calculation of three-component magnetization, Commun. Theor. Phys., 2005, 43: 753.
[6] Wang Huai-Yu, Long Yao and Chen Nian-Xian, Statistical average of spin operators for calculation of three-component magnetization: (II) the solution of the equation, Commun. Theor. Phys., 2006, 45 (1): 175.
[7] 王怀玉.凝聚态函数的格林函数理论.北京：科学出版社，2008.
[8] J. C. Mason and D. C. Chenbyshev Polynomials. Chapman & Hall/CRC, New York, (2000).