Известия НАН Армении, Физика, т.55, №4, с.415–430 (2020)

УДК 538.91

ПЕРВЫЕ ПРИНЦИПЫ КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ И ОСНОВЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ НА ПРИМЕРЕ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СПИНОВОЙ СИСТЕМЫ

А.С. ГЕВОРКЯН[1,2*], В.В. СААКЯН[1]

[1]Институт проблем информатики и автоматизации, НАН Армении, Ереван, Армения
[2]Институт химической физики, НАН Армении, Ереван, Армения

[*]e-mail: g_ashot@sci.am

(Поступила в редакцию 12 сентября 2019 г.)

Мы изучаем классическую многокомпонентную неупорядоченную 3D спиновую систему с учетом температуры среды в рамках модели ближайших соседей. Последнее позволяет 3D задачу с кубической решеткой свести к 1D задаче спинового стекла Гейзенберга со случайным окружением. Используя уравнения движения Гамильтона, получено рекуррентное уравнение, связывающее три спина в последовательных узлах 1D решетки с учетом влияния случайного окружения. Это уравнение, вместе с соответствующими условиями локального минимума энергии в узлах, позволяет узел за узлом построить устойчивые спин-цепочки и, соответственно, вычислить все параметры статистического ансамбля (СА) из первых принципов классической механики (ППКМ) без использования каких-либо дополнительных предположений, в частности, основной аксиомы статистической механики – равновероятности статистических состояний. На примере 1D модели спинового стекла Гейзенберга детально изучены особенности нового подхода и построена статистическая механика системы без использования стандартного представления для статистической суммы (СС), построенного в рамках гипотезы Гиббса.

1. Введение

Статистическая механика (СМ), несомненно, является одной из наиболее изученных и успешно используемых областей современной физики. Тем не менее, ее основные постулаты и основанные на них концепции остаются предметом постоянных дискуссий спустя много лет после ее основания (см., например, [1]). Чтобы прояснить ряд фундаментальных аксиом и понятий статистической физики необходимо провести сравнительный анализ результатов точно решаемой модели статистической физики в рамках стандартного представления СС с результатами, полученными из первых принципов классической механики. Напомним, что широкий класс явлений в физике, химии, материаловедении, биологии, экологических и социальных структурах, науке нано масштабных структур, нейронной сети, эволюции, организационной динамике, комплексной оптимизации, гуманных логических системах и т. д., математически хорошо описывается с помощью моделей спиновых стекол [2–11]. Как было показано в работах [12–15], проблема спиновых стекол, даже в случае термодинамического равновесия, часто является NP-сложной задачей, которая связана с расходимостью в симуляциях Монте-Карло [16]. В последнее время в статистической физике происходит быстрый рост числа работ по методам комбинаторной оптимизации [17–19]. В частности, ряд неупорядоченных статистических систем был сформулирован как комбинаторные задачи, для которых доступны быстрые алгоритмы [20–21]. Отметим, что комбинаторные методы и соответствующие алгоритмы часто используются для моделирования спиновых стекол, особенно при изучении таких явлений, как фазовые переходы, где они дали ценную информацию по вопросам, которые трудно исследовать с помощью традиционных методов, например, с помощью моделирования Монте-Карло [12].

Несмотря на многочисленные исследования, существует ряд актуальных вопросов в области спиновых стекол и неупорядоченных спиновых систем в целом, решение которых чрезвычайно важно как с точки зрения развития теории, так и приложений. Ниже мы перечислим ряд из них:

1. Моделирование спиновых стекол вдали от термодинамического равновесия. Очевидно, что в таких случаях мы не можем ввести температуру среды и, соответственно, написать и использовать стандартное представление для статистической суммы (СС).
2. Даже если предположить, что спиновое стекло находится в состоянии термодинамического равновесия и для него СС можно записать в стандартном виде, вопрос изучения метастабильных состояний остается открытым. Напомним, что методы моделирования Монте-Карло позволяют изучать спиновые системы только в основном состоянии, тогда как реальная статистическая система, тем более спиновые стекла, всегда находится в метастабильных состояниях, т.е. в состоянии, где характеризующие параметры спинового стекла задаются некоторыми распределениями.
3. При определении СС априори предполагается, что общий вес нефизических спиновых конфигураций (НСК) в пространстве конфигурации равен нулю, что никак не доказанное утверждение, а в ряде случаев может быть неверным предположением. Напомним, что под НСК мы подразумеваем такие спиновые цепочки, которые, основываясь на первых принципах классической механики, являются неустойчивыми.
4. Вычислительная сложность спиновых стекол часто относится к классу NP-сложных задач. Это обстоятельство требует разработки новых эффективных алгоритмов для численного моделирования спиновых стекол, что

так или иначе приводит к проблеме редукции NP-сложной задачи к P задаче.

Очевидно, что вышеперечисленные проблемы, на которые мы хотим получить четкие ответы, требуют разработки принципиально новых подходов и вычислительных алгоритмов. В этой статье мы преследуем две основные цели:

- Сформулировать классическую 3D задачу неупорядоченной многокомпонентной спиновой системы (спины с разными длинами) и показать возможность ее редукции к 1D задаче спинового стекла Гейзенберга со случайным окружением.
- Доказать возможность моделирования 1D задачи спинового стекла Гейзенберга (точно решаемая задача [22]) из первых принципов классической механики (ППКМ) и вычисления всех параметров СА в конечных температурах с помощью P алгоритма (см. также [23]).

2. Кубическая модель спинового стекла Гейзенберга с учетом температуры среды

Для изучения конденсированной фазы при низких температурах, вблизи точки фазового перехода, часто используется классические 2D (см. [24–29]) и 3D (см. [30–37]) модели Гейзенберга в рамках стандартного представления СС. В данной работе мы ставим задачу смоделировать аморфные соединения- спиновые стекла структуры типа SiO_2 (см. рис.1). Отметим, что этот класс материалов – не ферромагнит и не антиферромагнит, однако, состоит из молекул, которые обладают жесткими дипольными моментами, случайно ориентированными в 3D пространстве, и, соответственно, образуют неупорядоченные системы магнитных атомов.

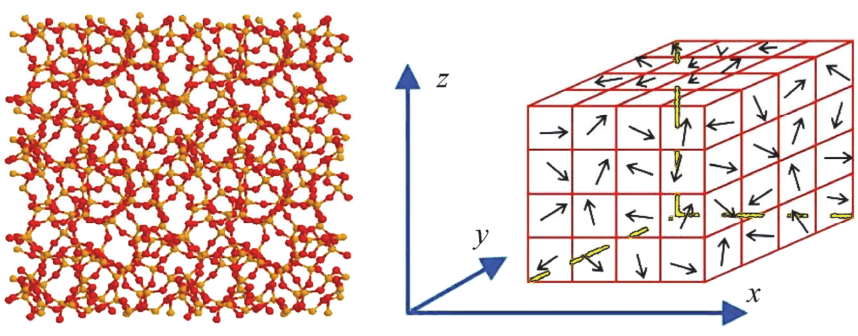

Рис.1. Левая картинка – смоделированное на суперкомпьютере аморфное соединение- SiO_2 стекло (см. [17]), где красные точки изображают атомы силиция- Si а желтоватые точки изображают атомы кислорода- O. На правой картинке кубическая решетка, где в каждой ячейке изображен случайно ориентированный в 3D пространстве вектор постоянной (единичной) длины, который изображает дипольный момент молекулы SiO_2.

Рассмотрим классический 3D гамильтониан Гейзенберга с кубической симметрией:

$$H_0 = -\sum_{<i,j>}^{N} J_{i,j}\,\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j\,, \quad \mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j \in R^3, \tag{1}$$

где $i, j = (1,...,N) = \overline{1,N}$, символ $<.>$ обозначает суммирование, которое производится только по ближайшим соседям (узлам) 3D решётки, а $J_{i,j}$ константа обменного взаимодействия между i и j спинами, которая – случайная величина и ее распределение будет найдено в результате численного моделирования, $N = L_x \times L_y \times L_z = L^3$ обозначает число узлов в решетке, а L – длина решетки по одному из измерений (расстояние между двумя ближайшими узлами предполагаем равным 1, т.е. $N_x = N_y = N_z = L$). Если предположить, что в узлах решетки магнитные частицы (спины) совершают тепловые колебания, гамильтониан системы можно написать в виде:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} - \sum_{<i,j>}^{N} J_{i,j}\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j\,, \tag{2}$$

$\mathbf{p}_i = m_i\dot{\mathbf{s}}_i$ обозначает импульс частицы в i-ом узле (m_i – масса частицы, которая считается равной 1), который обладает спином $\mathbf{s}_i$, кроме того, вектор скорости $\dot{\mathbf{s}}_i = \partial \mathbf{s}_i / \partial t$ будем считать случайно ориентированным в R^3, а t обозначает время. Конечную спиновую систему в 3D пространстве условно можно представить в виде множества случайно взаимодействующих одномерных спиновых цепочек со случайно ориентированными в R^3 спинами. Учитывая приближение ближайших соседей, лежащее в основе представления (1)–(2), 3D спиновую систему можно рассматривать как множество невзаимодействующих 1D спиновых цепочек со случайными «окружениями». Напомним, что каждая спиновая цепочка окружена четырьмя ближайшими неупорядоченными спиновыми цепочками, с которыми она взаимодействует случайно (см. рис.2). Гамильтониан 1D спиновой цепочки со случайным окружением можно представить в виде суммы:

$$H(N_x) = H^{(1)}(N_x) + H^{(2)}(N_x), \tag{3}$$

где сделаны следующие обозначения:

$$\begin{aligned} H^{(1)}(N_x) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N_x} \dot{\mathbf{s}}_i^2 - \sum_{i=1}^{N_x} J_{i,\,i+1}\,\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1}, \\ H^{(2)}(N_x) &= -\sum_{i=1}^{N_x} \mathbf{U}_i \cdot \mathbf{s}_i\,, \quad \mathbf{U}_i = \sum_{i_\sigma=1}^{4} J_{i,\,i_\sigma}\mathbf{s}_{i_\sigma}. \end{aligned} \tag{4}$$

Подставляя (3) в классические уравнения Гамильтона [38]:

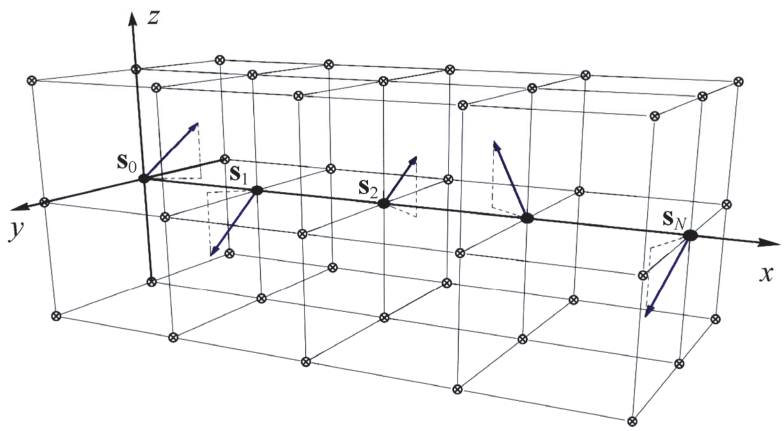

Рис.2. Одномерная неупорядоченная спин-цепочка (начала спинов на оси $0x$ показаны знаком •) в окружении случайно ориентированных и взаимодействующих спинов (начала спинов окружения показаны знаком ⊗).

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i}, \tag{5}$$

сделав замены $\mathbf{r}_i \to \mathbf{s}_i$ и $\mathbf{p}_i \to \dot{\mathbf{s}}_i$, для системы спин-цепочки с окружением получим уравнение:

$$\ddot{\mathbf{s}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{s}_i} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{s}_i}\left[J_{i-1,i}\,\mathbf{s}_{i-1}\cdot\mathbf{s}_i + J_{i,i+1}\mathbf{s}_i\cdot\mathbf{s}_{i+1} + \mathbf{U}_i\cdot\mathbf{s}_i\right]. \tag{6}$$

Учитывая то, что спины локализованы вблизи узлов $1D$ -решетки и совершают квазипериодические тепловые колебания $\xi_i(t)$ $(\xi_i = (x_i, y_i, z_i))$, а так же то, что нас будут интересовать статистические свойства спиновой системы на временных масштабах $\Delta t \gg \tau_0$, (τ_0 – характерный период спиновых колебаний вблизи узлов решетки), мы можем усреднить уравнение (6) на масштабе периода τ_0. Очевидно, что в этом случае будут иметь место равенства $\langle \ddot{x}_i \rangle_{\tau_0} = \langle \ddot{y}_i \rangle_{\tau_0} = \langle \ddot{z}_i \rangle_{\tau_0} = 0,$ используя которые, уравнение (6) можно написать в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{s}_i}\left[J_{i-1,i}\,\mathbf{s}_{i-1}\cdot\mathbf{s}_i + J_{i,i+1}\,\mathbf{s}_i\cdot\mathbf{s}_{i+1} + \mathbf{U}_i\cdot\mathbf{s}_i\right] = 0\,. \tag{7}$$

Переходя от (6) к уравнению (7), мы накладываем ограничение на константу $J_{i,i+1}$:

$$|\,J_{i,i+1}\,| \geq \beta^{-1}, \quad \beta = 1/(k_B T), \tag{8}$$

где k_B и T – соответственно, постоянная Больцмана и температура среды. Внеся в алгоритм вычисления – это дополнительное условие, мы тем самым будем учитывать влияние температуры среды на статистику системы. Проводя несложные вычисления с использованием уравнения (7), можно показать, что усредненный гамильтониан $\bar{H} = \langle H \rangle_{\tau_0}$ в i-ом узле будет иметь локальный экстремум, если в $(i+1)$-ом узле спин определяется следующим выражением:

$$\mathbf{s}_{i+1} = \frac{1}{J_{i\,,\,i+1}} \times \left\{ \left[\left(J_{i-1,\,i}\,\mathbf{s}_{i-1} + \mathbf{U}_i \right) \mathbf{s}_i \pm \sqrt{J_{i,i+1}^2 - \left\| \mathbf{s}_i \times \left(J_{i-1\,,\,i}\,\mathbf{s}_{i-1} + \mathbf{U}_i \right) \right\|^2} \right] \cdot \mathbf{s}_i - J_{i-1,i}\,\mathbf{s}_{i-1} + \mathbf{U}_i \right\}, \tag{9}$$

где константа обменного взаимодействия $J_{i\,,\,i+1}^2 \geq \left\| \mathbf{s}_i \times \left(J_{i-1,i}\,\mathbf{s}_{i-1} + \mathbf{U}_i \right) \right\|^2$.

Для стабильности спиновой цепочки необходимо, чтобы каждый спин находился в состоянии локального минимума энергии. Последнее эквивалентно тому, чтобы гамильтониан $\bar{H}$, как функция многих переменных, в каждом узле решетки имел локальный минимум. Это возможно если у гессиана функции $\bar{H}$:

$$\mathrm{M} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{N-1\;N-1} & a_{N-1\;N} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{N\;N-1} & a_{N\;N} \end{pmatrix}, \tag{9a}$$

$$a_{ii} = \begin{pmatrix} a_{ii}^{xx} & a_{ii}^{xy} \\ a_{ii}^{yx} & a_{ii}^{yy} \end{pmatrix}, \qquad a_{ij} = \begin{pmatrix} a_{ij}^{xx} & a_{ij}^{xy} \\ a_{ij}^{yx} & a_{ij}^{yy} \end{pmatrix},$$

диагональные миноры положительны; $\det\left(\mathrm{M}_{1,j}\right) > 0$, $\forall\;\; j = \overline{1,N}$. Элементы $a_{i\,j} \in M$ в (9a) являются матрицами размера 2×2 (см. (9a)), и определяются с помощью выражений:

$$a_{ij}^{xx} = \partial^2 \bar{H} \big/ \partial x_i\, \partial x_j, \quad a_{ij}^{xy} = a_{ij}^{yx} = \partial^2 \bar{H} \big/ \partial x_i \partial y_j, \;\; a_{ij}^{yy} = \partial^2 \bar{H} \big/ \partial y_i \partial y_j .$$

Другими словами, размер матрицы M на самом деле $(2N) \times (2N)$.

3. Рекуррентные уравнения для построения спин-цепочки без окружения

Для демонстрации эффективности и точности предложенного подхода рассмотрим наиболее простой случай, когда $\mathbf{U}_i = 0$ и $\|\mathbf{s}_i\| = 1\;\; \forall\; i \in \overline{1,N}$, что соответствует тому, что 1D спин цепочки не взаимодействуют в ансамбле (идеальный ансамбль), и кроме того, все спины – случайно ориентированные единичные вектора. С учетом сказанного из (9) можно получить следующие рекуррентные уравнения для определения экстремального значения гамильтониана в i -ом узле [23]:

$$\begin{aligned} &J_{i-1,\,i}\left(x_{i-1} - x_i\, z_i^{-1} z_{i-1}\right) + J_{i,\,i+1}\left(x_{i+1} - x_i\, z_i^{-1} z_{i+1}\right) = 0, \\ &J_{i-1,\,i}\left(y_{i-1} - y_i\, z_i^{-1} z_{i-1}\right) + J_{i,\,i+1}\left(y_{i+1} - y_i\, z_i^{-1} z_{i+1}\right) = 0, \end{aligned} \tag{10}$$

где x_i и y_i – соответствующие проекции вектора $\mathbf{s}_i$, кроме того, $z_i = \left(1 - x_i^2 - y_i^2\right)^{1/2} > 0$.

Решая уравнения (10) относительно переменных x_{i+1} и y_{i+1}, мы получаем:

$$x_{i+1} = C_x / J_{i,\,i+1}, \quad y_{i+1} = C_y / J_{i,\,i+1}\,, \tag{11}$$

где константы C_x и C_y определяются с помощью следующих выражений:

$$\begin{aligned} &C_{x(y)} = \left(A_{x(y)} - B_{x(y)}\left(C \pm D\right)\right)\left(1 + B_x^2 + B_y^2\right)^{-1}, \\ &D = \left(1 - A_x^2 - A_y^2 + B_x^2 + B_y^2 - C\right), \\ &A_\xi = \xi_i\, z_i^{-1} z_{i-1} - \xi_{i-1}, \quad B_{x(y)} = \xi_i z_i^{-1} q_i, \;\; C = A_x B_y - A_y B_x. \end{aligned}$$

Теперь важно установить условия для нахождения решений уравнения (11), которые удовлетворяют условию локального минимума в узлах 1D решетки.

Пусть спиновая цепочка состоит из числа N спинов $\left(\mathbf{s}_1, \ldots, \mathbf{s}_N\right)$, где первый и последний спины 1D цепочки, $\mathbf{s}_1$ и $\mathbf{s}_N$, предполагается заданы, исходя из других физических принципов. Тогда гессиан гамильтониана $\bar{H}$ (см. (9а)) может быть упрощен и записан в следующем виде:

$$\mathrm{M} = \begin{pmatrix} \gamma_1 + \gamma_2 & -\gamma_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\gamma_2 & \gamma_2 + \gamma_3 & -\gamma_3 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_3 & \gamma_3 + \gamma_4 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \gamma_{N-2} + \gamma_{N-1} & -\gamma_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\gamma_{N-1} & \gamma_{N-1} + \gamma_N \end{pmatrix}, \tag{12}$$

где $\gamma_i = J_{i-1,\,i}\, \mathbf{s}_{i-1} \cdot \mathbf{s}_i$.

Чтобы в 1D спин-цепочке спины находились в состояниях локального минимума энергии необходимо, чтобы все диагональные миноры матрицы (12) были положительными. Используя тождество Шура к матрице (12), можно привести ее к диагональному виду, а определитель, соответственно, можно факторизовать:

$$\det(\mathrm{M}_{i,j}) = r_1 \cdot r_2 \cdots r_N = \prod_{k=1}^{N} r_k > 0 \ , \tag{13}$$

что эквивалентно следующим условиям:

$$\begin{aligned} & r_k > 0, \quad k = \overline{1,N}, \qquad r_1 = \gamma_1 + \gamma_2, \\ & r_k = \gamma_k + \gamma_{k+1} - \gamma_k^2 r_{k-1}^{-1}, \qquad r_0^{-1} = 0. \end{aligned} \tag{14}$$

Таким образом, с помощью решения (11) и с учетом условий (8) и (14), мы можем построить устойчивые спиновые цепочки, шаг за шагом, методом их «выращивания». Отметим, что условие (8) учитывает влияние температуры среды на образование спин-цепочки.

4. Неупорядоченная спин-цепочка как ветвь поддерева Фибоначи

Решения (11), удовлетворяющие неравенствам (14) в зависимости от знака параметра

$$\delta_i = \gamma_{i+1} - r_i = \frac{\gamma_i\, \delta_{i-1}}{\gamma_i - \delta_{i-1}} \ ,$$

где $\delta_0^{-1} = 0$, могут быть двух типов:

1. Пусть корень в (9) положительный; $\sqrt{J_{i,i+1}^2 - J_{i-1,i}^2 \left|\mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i\right|^2} > \delta_i$. Тогда возможны два случая;) $\sqrt{\cdots} > \delta_i$ при $\delta_i \ge 0$, и, соответственно, б) $\sqrt{\cdots} > \delta_i$ при $\delta_i < 0$. В случае а) для константы обмена мы имеем условие $\left|J_{i,i+1}\right| \ge \sqrt{\delta_i^2 + J_{i-1,i}^2 \left|\mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i\right|^2}$, в то время как в случае б) это условие имеет следующий вид $\left|J_{i,i+1}\right| > \left|J_{i-1,i}\mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i\right|$. Исходя из этого анализа можно заключать, что в рассматриваемом случае есть только одно решение, которое мы обозначим через $\mathbf{s}_{i+1}^{+}$ (ниже будет называться царица-queen).
2. Когда же в решении (9) корень имеет отрицательное значение, т.е. $-\sqrt{J_{i,i+1}^2 - J_{i-1,i}^2 \left|\mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i\right|^2} > \delta_i$, тогда, чтобы существовало хоть одно решение, параметр δ_i должен быть отрицательным $\delta_i < 0$. Аналогичные рассуждения для константы обмен очевидно приводят к следующим условиям; $\left|J_{i,i+1}\right| \le \sqrt{\delta_i^2 + J_{i-1,i}^2 \left|\mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i\right|^2}$ и $\left|J_{i,i+1}\right| \ge \left|J_{i-1,i}\mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i\right|$, при $\delta_i < 0$. В этом случае кроме решения $\mathbf{s}_{i+1}^{+}$, возможно так же решение $\mathbf{s}_{i+1}^{-}$ (ниже будет называться тунеядец-drone).

Важно отметить, что решения «+» и «–» характеризуются следующим образом: если предыдущим решением является царица, т.е. «+» тогда на следующем шаге встречается два разных решения «+» и «–» тогда как после решения тунеядец $\mathbf{s}_{i+1}^{-}$ встречается только одно решение – царица, т.е. «+». В частности, при расчете незамкнутой на себя спиновой цепочки предполагается, что заданы начальные данные или ориентации первых двух спинов и константа связи между ними. Отметим, что предполагается, что два спина, первый и последний, находятся в состоянии локального минимума на основании других физических принципов (назовем это краевым эффектом). Учитывая вышесказанное, мы можем провести последовательные расчеты стабильных спиновых цепочек. Как было доказано в работе [23], даже в простейшем одномерном случае задача спинового стекла Гейзенберга с точки зрения вычисления является NP-сложной задачей. В

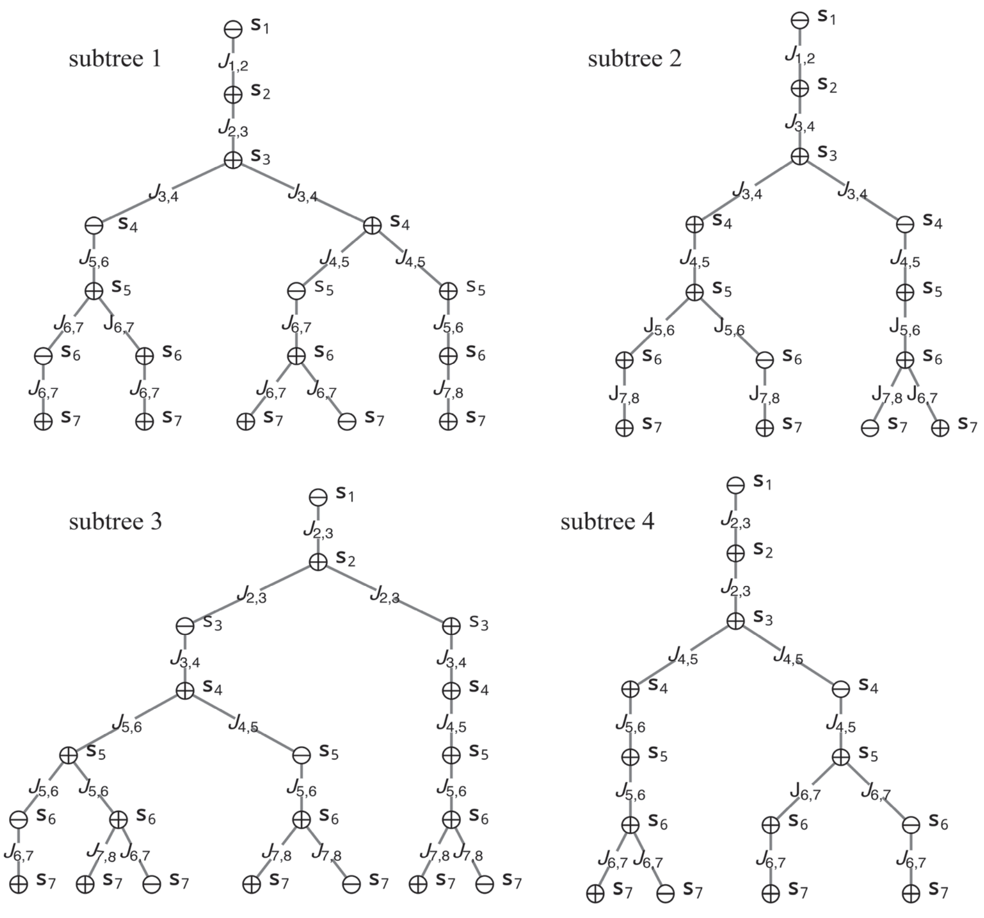

Рис.3. Четыре различных поддеревьев Фибоначчи (графы) – $G_i(n)$, где $i = \overline{1,4}$, каждое из которых имеет высоту n = 7. Все эти графы получены из одних начальных данных в результате шести независимых расчетов. Значения $\mathbf{s}_i$ и $J_{i,j}$ на разных графах в зависимости от n могут быть совершенно разными.

частности, как показывают численные расчеты, из одних и тех же начальных данных (из одного «корня»), при вычислении каждый раз получается не одна спиновая цепочка, а новое поддерево Фибоначчи или граф $G_i(n)$, где $i = 1,...,N = \overline{1,N}$ обозначает номер графа, а «n» соответственно, его высоту (см. рис.3). Следовательно, когда мы говорим об ансамбле спиновых цепочек, мы подразумеваем множество графов $\{G(n)\}_N$. Математическое ожидание ветвлений графа $G_i(n)$ в зависимости от его высоты n легко можно рассчитать по следующей формулам:

$$M(n) = M(n-1)\lfloor 2\varsigma_n \rfloor = \lfloor 2^{n\eta(n)} \rfloor, \quad \eta(n) = 1 + n^{-1}\sum_{k=1}^{n}\log_2(\varsigma_k) > 0, \tag{15}$$

где $M(n-1)$ – число ветвлений графа на шаге $(n-1)$, а $\lfloor \cdot \rfloor$ обозначает целую часть величины, ς_n – случайный коэффициент из интервала [0.5,1]. Напомним, что для упрощения формулы (17) опущено обозначение номера поддерева «i». Отметим, что каждый граф $G_i(n) \cong \{g_j(n), j \in M\}$, где $g_j(n)$ является случайной строкой с длиной «n» и характеризуется колмогоровской сложностью [39–40]. Подчеркнем, что каждый граф $G_i(n)$, в зависимости от n, может быть интерпретирован как дискретно развивающийся случайный процесс. Математическое ожидание случайной величины f, характеризующей ансамбль $\{G(n)\}_N$, можно рассчитать по формуле:

$$E[f] = \bar{f} = \sum_{i=1}^{N}\omega_i \bar{f}_i \Big/ \sum_{i=1}^{N}\omega_i, \quad \omega_i = N_i / \bar{N}, \tag{16}$$

где N_i и $\bar{N}$ обозначают количество строк графа $G_i(n)$ и общее количество строк в ансамбле, соответственно. В (16) параметр $\bar{f}_i = \sum_{G_i(n)} f$ обозначает математическое ожидание случайной величины f на графе $G_i(n)$, которая вычисляется аналогично $E[f]$. Напомним, что выражение (16) является основой для вычисления статистических распределений разных параметров ансамбля.

5. Численный эксперимент «идеального ансамбля» 1D спин-цепочек

Мы будем рассматривать ансамбль невзаимодействующих спин цепей или «идеальный ансамбль». Для моделирования задачи нам нужно задать начальные условия в виде большого количества независимых спиновых конфигураций, что эквивалентно большому набору случайно выбранных начальных данных (корней), т.е. первых двух спинов и соответствующих констант связи между ними

$$\widehat{\Omega}=\left\{\Omega_1^1=(\mathbf{s}_1^1,\mathbf{s}_2^1;J_{1,2})_1,...,\Omega_N^1=(\mathbf{s}_1^1,\mathbf{s}_2^1;J_{1,2})_N\right\}.$$

В работе [23] для модели спинового стекла Гейзенберга подробно исследованы условия, при которых вычислительная NP сложная задача с заданной точностью алгоритмически редуцируется к P задаче. Как показано, для такой редукции основным условием является статистическое равновесие в ансамбле, которое для свободного от внешнего воздействия ансамбля эквивалентно изотропному и однородному распределению проекций спинов в 3D пространстве. Как показывают расчеты по формулам (11), с учетом неравенств (14), уже для ансамбля, состоящего из 50 и более спин-цепей, такое равновесие имеет место. На рис.4 показаны картинки, на которых отчетливо видны изотропность и однородность распределений проекций спинов в 3D пространстве, что эквивалентно установлению статистического равновесия в ансамбле при температуре $T=0$. Как следует из вычислений, это равновесие практически не нарушается с увеличением температуры среды (см. условие (8)), точнее, при увеличении температуры плотность точек уменьшается, но изотропность распределений практически не нарушается еще очень долго. В данной работе выведены все необходимые формулы для создания высокопроизводительного алгоритма, позволяющего осуществить все необходимые вычисления, характеризующие статистическую систему магнитных атомов, включая оценку величины параметра $l=<\langle\mathbf{s}_i\rangle_T^2>$ – степени неупорядоченности системы, где $\langle\cdots\rangle_T$ обозначает термодинамическое усреднение, а $<\cdots>$ – усреднение по расположению магнитных атомов [41]. Напомним, что под системой магнитных атомов мы подразумеваем ферромагниты, антиферромагниты, а также отличный от них широкий класс аморфных материалов, в которых атомы обладают магнитными моментами (жесткими

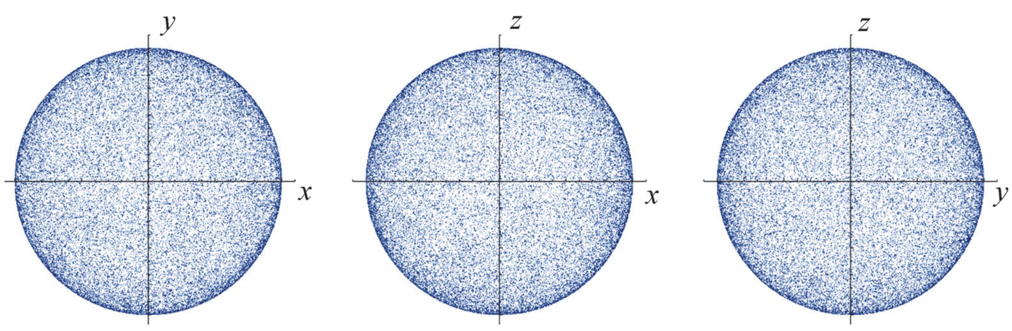

Рис.4. На рисунках точками обозначены вершины проекций 3D спинов ансамбля при температуре $T = 0$, где расстояние каждой точки до центра круга обозначает величину соответствующей проекции. Как видно, в ансамбле состоящего из 2×10^3 спин-цепей длиной 30 точки распределены почти равномерно и изотропно.

диполями), и которые в ряде условий играют ключевую роль в формирования тех или иных нетривиальных свойств статистической системы. Предлагаемый подход универсален и после уточнения дополнительного условия, специфичного для среды, пригоден для изучения перечисленных материалов.

6. Заключение

В работе развит новый подход для исследования классической многокомпонентной неупорядоченной 3D спиновой системы с кубической решеткой, учитывающий температуру среды. Показана возможность сведении 3D задачи к 1D задаче пространственных спинов со случайным окружением. Получено рекуррентное уравнение (9) и условия (9а), позволяющие минимизировать Гамильтониан во всех узлах 1D решетки, за исключением первого и последнего. Развитое представление дает возможность создавать новые высокопроизводительные Р алгоритмы для моделирования широкого класса статистических систем типа НСС из первых принципов классической механики. Последнее создает необходимые условия для построения всех статистических параметров и соответствующих распределений системы без использования стандартного представления СС в рамках гипотезы Гиббса.

Для демонстрации эффективности и точности развитого подхода подробно исследован простейший случай 1D спинового стекла Гейзенберга без окружения (идеальный ансамбль) с использованием решения (11) и условия Сильвестра (14). Показано, что из каждого набора начальных данных (из одного корня) при каждом вычислении вырастает новое поддерево Фибоначи рис.3, у которого отдельные ветки-колмогоровские строки описывают стабильные 1D спиновые цепи. Как показывают вычисления, условие (8), отражающее

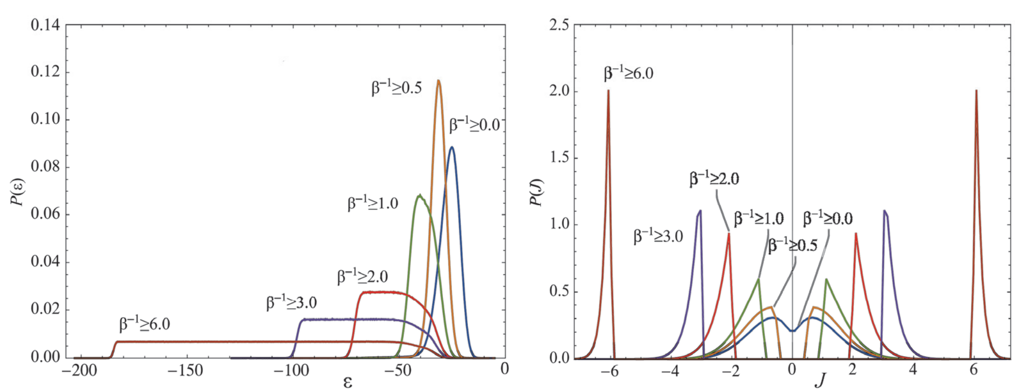

Рис.5. На левой картинке кривые распределения энергий в ансамбле при разных температурах. На правой картинке – распределения констант спин-спиновой связи для разных значений температуры среды.

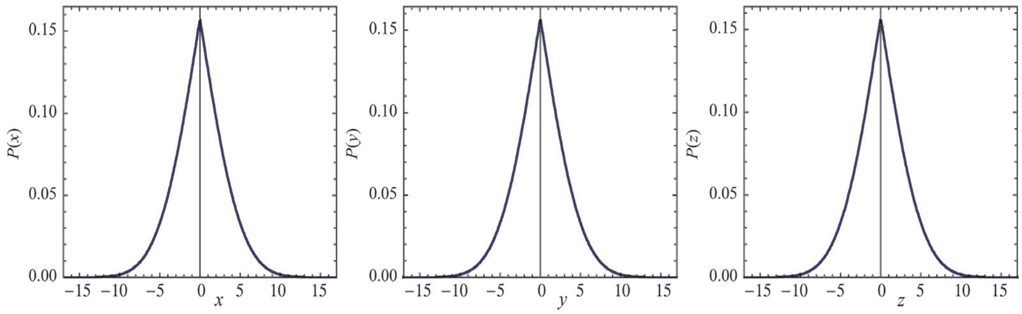

Рис.6. Распределения поляризации в ансамбле спиновых цепочек по разным осям. Как и следовало ожидать, они симметричны и от температуры практически не зависят.

температуру среды, влияет на формирование поддерева Фибоначчи и, соответственно, на характеризующее статистический ансамбль множество $\{G(n)\}_N$. Зависимость распределений ряда основных параметров ансамбля представлена на рисунках 4–6. В работе подробно исследован параметр неупорядоченности спиновой системы в зависимости от температуры (см. рис.7).

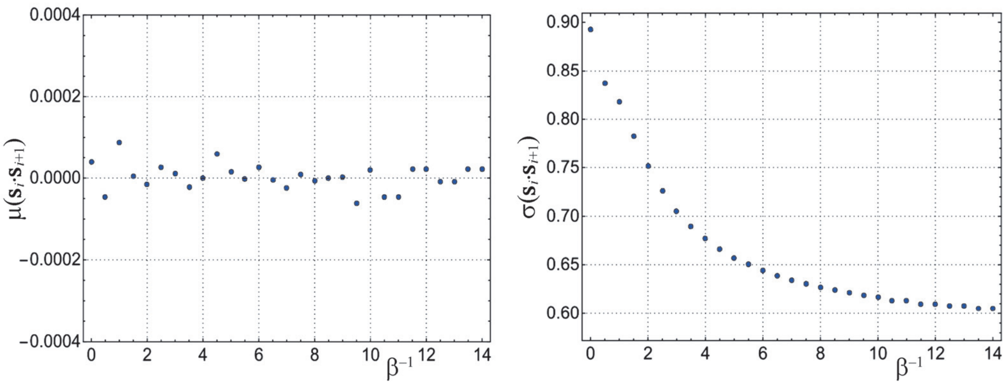

Рис.7. Слева на графике показано поведение среднего значения угла между спинами ближайших соседей $\mu(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1})$ в зависимости от температуры. Как видно из распределения точек, оно практически не зависит от температуры. На правом графике показано поведение параметра неупорядоченности системы от температуры. Видно, что с уменьшением температуры среды величина параметра $\sigma(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1}) = l =< \langle \mathbf{s}_i \rangle_T^2 >$ растет, т. е., система упорядочивается.

Отметим, что идея построения статистической механики из первых принципов классической механики базируется на алгоритмическом подходе, целью которого является вычисление статистических параметров системы и их распределений без дополнительных, и часто неочевидных, аксиом. Напомним, что одной из основополагающих аксиом стандартной СМ является равновероятность статистических состояний, которая отсутствует в логической схеме построений развитого представления. Другими словами, основываясь на данной работе и предыдущих исследованиях авторов (см. [23]), очевидно, что в пределе статистического равновесия можно построить все параметры и статистические распределения неупорядоченной спиновой системы из первых принципов классической механики без использования стандартного представления СС.

В конце перечислим ряд основных достижений развитого подхода:

- Подход позволяет обойти все перечисленные выше трудности стандартного представления статистической механики и построить его основной объект – СС в виде 1D интеграла по распределению энергии спиновых цепей, используя вычисления из первых принципов КМ [23].
- Разработанное представление в пределе статистического равновесия является асимптотически точным и поэтому может использоваться также для исследования статистических ансамблей, далеких от термодинамического равновесия или где температура не определена.
- Идеи, лежащие в основе разработанного подхода, являются достаточно универсальными и позволяют обобщить рассматриваемую модель и адаптировать ее для изучения более сложных и реалистичных статистических систем, с учетом их многомерности и влияния внешних полей.

ЛИТЕРАТУРА

1. **S. Popescu, A.J. Short, A. Winter.** Nature Physics, **2**, 754 (2006).
2. **K. Binder, A. Young.** Rev. Mod. Phys., **58**, 801 (1986).
3. **M. Mezard, G. Parisi, M. Virasoro.** Spin Glass Theory and Beyond, World Scientific, 1987.
4. **A. Young.** Spin Glasses and Random Fields, World Scientific, 1998.
5. **R. Fisch, A. Harris.** Phys. Rev. Let., **47**, 620 (1981).
6. **C. Ancona-Torres, et al.** Phys. Rev. Let., **101**(5), 057201 (2008).
7. **A. Bovier.** Statistical Mechanics of Disordered Systems: A Mathematical Perspective, Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics, Cambridge: Cambridge University Press, 2006.
8. **Y. Tu, J. Tersoff, G. Grinstein.** Phys. Rev. Let., **81**, 2490 (1998).
9. **K. Chary, G. Govil.** NMR in Biological Systems: From Molecules to Human, Springer, 2008.
10. **E. Baake, M. Baake, H. Wagner.** Phys. Rev. Let., **78**, 559 (1997).
11. **A.S. Gevorkyan, H.G. Abajyan.** Physics of Particles and Nuclei Letters, **9(**6-7), 530 (2012).
12. **F. Liers, et al.** Phys. Rev. **B, 68**, 094406 (2003).
13. **J.C. Angles, et al.** Mathl. Comput. Modeling, **26(**8-10), 1 (1997).

14. **C. Papadimitriou.** Computational Complexity (1st Ed.). Addison-Wesley. Section 2.7, 1993.
15. **H.R. Lewis, C. Papadimitriou.** Elements of the Theory of Computation (1st Ed.). Prentice-Hall. Section 4.6, 1981.
16. **N. Metropolis et al.** J. Chem. Phys., **21**(6), 1087 (1953).
17. **B. Hayes.** Am. Scient., **85**, 108 (1997).
18. **R. Monasson, et al.** Nature (London), **400**, 133 (1999).
19. **O. Dubois, R. Monasson, B. Selman, R. Zecchina.** Theoretical Computer Science, **265**, 3 (2001).
20. **M.J. Alava et al.** In Phase Transitions and Critical Phenomena, ed. by C. Domb, J. Lebowitz, New York: Academic Press, 2001.
21. **A.K. Hartmann, H. Rieger.** Optimization Algorithms in Physics, Berlin: While-VCH, 2001.
22. **C.J. Thompson.** Phase Transitions and Critical Phenomena, Academic Press, **1**, 177-226 (1972).
23. **A.S. Gevorkyan, V.V. Sahakyan**, Phys. Atomic Nuclei, **80**(2), 366 (2017).
24. **E. Dagotto, A. Moreo,** Phys. Rev. Lett., **63**, 2148 (1989).
25. **E. Manousakis.** Rev. Mod. Phys., **63**, 1 (1991).
26. **H. Rosner, R.R.P. Singh, W.H. Zheng, J. Oitmaa, W.E. Pickett.** Phys. Rev. B, **67**, 014416 (2003).
27. **J. Sirker, Z. Weihong, O.P. Sushkov, J. Oitmaa.** Phys. Rev. B, **73**, 184420 (2006).
28. **H.H. Wen, G. Mu, L. Fang, H. Yang, X. Zhu.** Europhys. Lett., **82**, 17009 (2008).
29. **M. Rotter, M. Tegel, D. Johrendt.** Phys. Rev. Lett., **101**, 107006 (2008).
30. **R. Schmidt, J. Schulenburg, J. Richter, D.D. Betts.** Phys. Rev. B, **66**, 224406 (2002).
31. **J. Oitmaa, W. Zheng.** Phys. Rev. B, **69**, 064416 (2004).
32. **K. Majumdar, T. Datta.** J. Phys.: Condens. Matter, **21**, 406004 (2009).
33. **M.R. Pantic, D.V. Kapor, S.M. Radosevic, P.M. Mali.** Sol. St. Comm., **182**, 55 (2014).
34. **J. Richter, P. Muller, A. Lohmann, H.-J. Schmidt.** Phys. Proc., **75**, 813 (2015).
35. **P. Muller, J. Richter, A. Hauser, D. Ihle.** Eur. Phys. J. B, **88**, 159 (2015).
36. **D.J.J. Farnell et al.** Phys. Rev. B, **93**, 235123 (2016); **B.-Z. Mi.** Sol. St. Comm., **239**, 20 (2016).
37. **B.-Z. Mi.** Sol. St. Comm., **251**, 79 (2017).
38. **E.T. Whittaker.** A Treatise on the Analytical Dynamicals of Particles and Rigid Bodies. With an Introduction to the Problem of Three Bodies, Cambridge University Press, 1988.
39. **A.N. Kolmogorov.** IEEE Transactions on Information Theory, **14**(5), 662 (1968).
40. **M. Li, P. Vitányi.** An introduction to Kolmogorov complexity and its applications, New York: Springer-Verlag, 1997.
41. **И.Я. Коренблит, Е.Ф. Шендер,** Спиновые стекла и неэргодичность, УФН, **157**(2), 267 (1989).

ԴԱՍԱԿԱՆ ՄԵԽԱՆԻԿԱՅԻ ԱՌԱՋԻՆ ՍԿԶԲՈՒՆՔՆԵՐԸ ԵՎ ՎԻՃԱԿԱԳՐԱԿԱՆ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ՀԻՄՆԱԴՐՈՒՅԹՆԵՐԸ ՉԿԱՐԳԱՎՈՐՎԱԾ ՍՊԻՆԱՅԻՆ ՀԱՄԱԿԱՐԳԻ ՕՐԻՆԱԿՈՎ

Ա.Ս. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Վ.Վ. ՍԱՀԱԿՅԱՆ

Մենք ուսումնասիրում ենք բազմաբաղադրիչ չկարգավորված դասական 3D սպինային համակարգը՝ հաշվի առնելով միջավայրի ջերմաստիճանը, մոտակա հարևաններ մոդելի շրջանակներում: Վերջինս թույլ է տալիս խորանարդ համաչափությամբ 3D խնդիրը հանգեցնել պատահական շրջակայքով Հայզենբերգի 1D սպինային ապակու խնդրին: Օգտագործելով Համիլթոնի շարժման հավասարումները, ստացված է հետադարձային հավասարում, որը կապում է 1D ցանցի հաջորդական հանգույցներում երեք սպինները՝ հաշվի առնելով պատահական շրջակայքի ազդեցությունը: Այս հավասարումը, ցանցի հանգույցներում տեղային նվազագույն էներգիայի որոշման պայմանների հետ միասին, թույլ է տալիս հանգույց առ հանգույց կառուցել կայուն սպինային շղթաներ և, համապատասխանաբար, դասական մեխանիկայի առաջին սկզբունքներից ելնելով հաշվարկել վիճակագրական անսամբլի բոլոր պարամետրերը՝ առանց որևէ լրացուցիչ ենթադրություններ օգտագործելու, մասնավորապես, վիճակագրական մեխանիկայի հիմնական կանխավարկածի – վիճակագրական վիճակների հավասարահավանականության: Հեյզենբերգի 1D սպինային ապակու մոդելի օրինակի վրա, մանրամասն ուսումնասիրված են նոր մոտեցման առանձնահատկությունները և համակարգի վիճակագրական մեխանիկան կառուցված է առանց օգտագործելու վիճակագրական գումարի սովորական պատկերացումը:

FIRST PRINCIPLES OF THE CLASSICAL MECHANICS AND THE FOUNDATIONS OF STATISTICAL MECHANICS ON THE EXAMPLE OF A DISORDERED SPIN SYSTEM

A.S. GEVORKYAN, V.V. SAHAKYAN

We study the classical multicomponent disordered 3D spin system taking into account the temperature of the medium in the framework of the model of nearest neighbors. The latter allows the 3D problem with a cubic lattice to reduce to the 1D Heisenberg spin glass problem with a random environment. Using the Hamilton equations of motion, a recurrent equation is obtained that connects three spins in successive nodes of 1D lattice, taking into account the influence of a random environment. This equation, together with the corresponding conditions of a local minimum energy in nodes, allows to construct node-by-node a stable spin chains and, accordingly, to calculate all parameters of a statistical ensemble from the first principles of classical mechanics, without using any additional assumptions, in particular, the main axiom of statistical mechanics – the equiprobability of statistical states. Using the example of 1D Heisenberg spin glass model, the features of the new approach are studied in detail and the statistical mechanics of the system are constructed without using the standard representation of the partition function.