

Негиббсовское распределение в модели Изинга

П. К. Ильин, Г. В. Коваль,^а А. М. Савченко^б

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра квантовой статистики и теории поля.
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2*

Поступила в редакцию 17.06.2020, после доработки 24.07.2020, принята к публикации 27.07.2020.

Настоящая работа лежит в русле новых подходов, связанных с получением и исследованием негиббсовских равновесных распределений. На основе модели Изинга получено новое равновесное распределение для случая термостата соразмерного с системой. Также показано, что равновесное распределение сильно отклоняется от гиббсовского при термостате, меньшем или соразмерном с выделенной системой, и стремится к гиббсовскому в пределе большого термостата.

Ключевые слова: распределение Гиббса, модель Изинга, негиббсовское распределение.

УДК: 531.19, 537.611.2. PACS: 05.20.-у, 64.60.De.

ВВЕДЕНИЕ

В абсолютном большинстве подходов, связанных с построением равновесной статистической механики, при получении равновесных распределений Гиббса, канонического и большого канонического, используется формализм, связанный с моделью термостата много большей системы, для которой изучается и выводится соответствующее распределение [1–3]. Именно в этом приближении и выводятся распределения Гиббса. В связи с этим представляется логичным рассмотреть модель с термостатом соразмерным с изучаемой системой, что для системы большого числа частиц, но лабораторных размеров, выглядит даже более реалистичным подходом.

Важно отметить, что сам Гиббс говорил о своем распределении, введенном им фактически без вывода, что оно «по-видимому, является наиболее простым мыслимым случаем, так как оно обладает тем свойством, что когда система состоит из частей с отдельными энергиями, закон распределения по фазам для отдельных частей обладает одинаковой природой — свойство, которое чрезвычайно упрощает исследование и которое является основанием для весьма важных отношений к термодинамике» [4]. Академик Н. Н. Боголюбов писал, что «среди всех этих (возможных) распределений полностью privilegiрованное значение имеет каноническое распределение...» [5]. Академик В. В. Козлов [6] также подчеркнул, что Гиббс «предположил», что соответствующее распределение имеет экспоненциальный вид.

За последние годы вышло большое количество публикаций, связанных с усовершенствованием и в каком-то смысле критикой распределения Гиббса. Данные новые подходы связаны с тем, что для сложных систем (к примеру, фрактальных, социальных, биологических) у распределения Гиббса не наблюдается согласия с экспериментальными данными, а именно, важным его недостатком является тот факт, что из распределения Гиббса ни при каких условиях, за исключением абсолютно экзотических и нефизических [7], не следует степенное распределение [8].

Данные альтернативные подходы основаны на новых формах энтропий, среди которых самое широкое применение нашли энтропия Реньи [9] и энтропия Тсаллиса [10], и на соответствующих распределениях, получаемых из них. Любопытно отметить, что энтропия Тсаллиса, как правило, вводится независимо, но при этом является частным, предельным случаем энтропии Реньи.

Среди работ несколько другого направления выделим те, в которых сделаны всевозможные попытки обобщить распределение Гиббса для учета, к примеру, еще и распределения по температуре, которая в каноническом и большом каноническом распределении Гиббса строго фиксирована. Некоторые из полученных результатов уже получили громкие названия «суперстатистики» или «суперканонического» распределения [11–14]. Из последних публикаций выделим статью [15], в которой обсуждается распределение для системы осцилляторов, взаимодействующих с конечным малым термостатом, и способ получения этого распределения.

В представленном в настоящей работе исследовании негиббсовское распределение по энергии получено из микроканонического распределения Гиббса для модели Изинга в случае термостата, соразмерного рассматриваемой системе.

1. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛЯ ПОДСИСТЕМЫ В МОДЕЛИ ИЗИНГА

Рассмотрим одномерную цепочку из N изинговских спинов на окружности (периодические граничные условия) [16, 17]. Энергия такой системы имеет вид

$$E(\{\sigma\}) = -J \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1},$$

где J — константа взаимодействия соседних спинов, а $\sigma_j = \pm 1$ — изинговские переменные, характеризующие состояния спинов. Возможные значения энергии такой системы нумеруются четным целым числом M , которое удовлетворяет очевидным условиям:

$$0 \leq M \leq N.$$

Для заданной спиновой конфигурации M равно числу пар соседних спинов, имеющих разные значения

^а E-mail: kovgen@mail.ru

^б E-mail: a.m.savchenko@gmail.com

$(\sigma_j = -\sigma_{j+1})$. Энергия спиновой конфигурации тогда равна

$$E(M) = -J(N - 2M), \quad (1)$$

а число конфигураций с такой энергией есть

$$\Gamma(M) = 2 \frac{N!}{M!(N-M)!}. \quad (2)$$

В дальнейшем будем считать, что система N спинов является изолированной, ее энергия определена точно и соответствует некоторому конкретному числу M . Согласно микроканоническому распределению Гиббса все состояния с заданной энергией равновероятны.

Выделим подсистему из L спинов, начиная с первого и заканчивая L -м. Далее будем называть эту подсистему «системой», а подсистему спинов с $(L+1)$ -го по N -й будем считать «термостатом», с которым взаимодействует система. Система и термостат обмениваются энергией, поскольку их граничные спины взаимодействуют — 1-й с N -м и L -й с $(L+1)$ -м. Значения энергии системы задаются целым числом K , которое для данной спиновой конфигурации системы $\sigma_1, \dots, \sigma_L$ равно числу разнонаправленных соседних спинов. Соответствующая энергия системы есть

$$E_S(K) = -J(L - 1 - 2K), \quad (3)$$

а число состояний системы с такой энергией равно

$$\Gamma_S(K) = 2 \frac{(L-1)!}{K!(L-1-K)!}. \quad (4)$$

Условия, которым удовлетворяют возможные значения K , следующие:

$$\max(0, M - N + L - 1) \leq K \leq \min(M, L - 1). \quad (5)$$

Найдем теперь вероятность того, что система находится в состоянии, соответствующем определенному значению K . Так как для полной системы из N спинов предполагаем микроканоническое распределение при фиксированной энергии, то такая вероятность равна:

$$w_n = \frac{1}{\Gamma(M)} \frac{(N-L+1)!}{(M-K)!(N-L+1-M+K)!}. \quad (6)$$

Биномиальный коэффициент, стоящий в этой формуле справа, выражает число способов выбрать из $N-L+1$ пар соседей, не входящих в систему, ровно $M-K$ пар спинов, которые будут разнонаправлены, а деление на общее число состояний (2) естественно возникает из микроканонического распределения. Важным результатом является то, что в общем случае это выражение для вероятности явно не сводится к каноническому распределению Гиббса при некоторой температуре.

1.1. Средняя энергия системы

На основе полученного распределения (6), используя формулу для энергии системы (3) и тот факт, что число микросостояний системы с энергией $E_S(K)$

определяется соотношением (4), запишем выражение для средней энергии системы:

$$\begin{aligned} \langle E_S \rangle &= \sum_{K=\max(0, M-N+L-1)}^{\min(M, L-1)} \frac{\Gamma_S(K) E_S(K)}{\Gamma(M)} \times \\ &\times \frac{(N-L+1)!}{(M-K)!(N-L+1-M+K)!} = \\ &= -\frac{2J}{\Gamma(M)} \sum_{K=\max(0, M-N+L-1)}^{\min(M, L-1)} (L-1-2K) \times \\ &\times \binom{L-1}{K} \binom{N-L+1}{M-K}. \end{aligned}$$

После рассмотрения различных случаев для границ переменной K и применения свертки Вандермонда было получено точное общее выражение для средней энергии системы:

$$\langle E_S \rangle = -J(L-1) \left(1 - 2 \frac{M}{N} \right). \quad (7)$$

2. ПРЕДЕЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ БОЛЬШОГО ТЕРМОСТАТА

Покажем, что в случае, когда «термостат» заметно больше системы, формула (6) действительно принимает вид распределения Гиббса. Пусть далее $N \gg L$. Будем также считать, что энергия системы N спинов такова, что

$$\frac{M}{N} = \alpha \sim 1, \quad (8)$$

где параметр α лежит в интервале $(0, 1)$. Термодинамический предел $E, N \rightarrow \infty, E/N = \text{const}$ в силу формулы (1) эквивалентен пределу $N, M \rightarrow \infty, \alpha = \text{const}$. В этом случае условия (5) на возможные значения числа K сводятся к

$$0 \leq K \leq L-1. \quad (9)$$

В силу (8) и (9) тогда имеем неравенства

$$L-1 \ll N, \quad K \ll M, \quad L-1-K \ll N-M. \quad (10)$$

Используя приближенное равенство

$$(N-n)! \approx \frac{N!}{N^n},$$

которое выполняется при $n \ll N$, в силу (10) можем переписать вероятность (6) следующим образом:

$$\begin{aligned} w_n &= \frac{1}{2} \frac{M!(N-M)!}{N!} \times \\ &\times \frac{(N-L+1)!}{(M-K)!(N-L+1-M+K)!} \approx \\ &\approx \frac{1}{2} \frac{M!(N-M)!}{N!} \frac{N!}{N^{L-1}} \frac{M^K}{M!} \frac{(N-M)^{L-1-K}}{(N-M)!}, \end{aligned}$$

откуда приходим к

$$w_n \approx \frac{1}{2} \left(\frac{M}{N-M} \right)^K \left(\frac{N-M}{N} \right)^{L-1}. \quad (11)$$

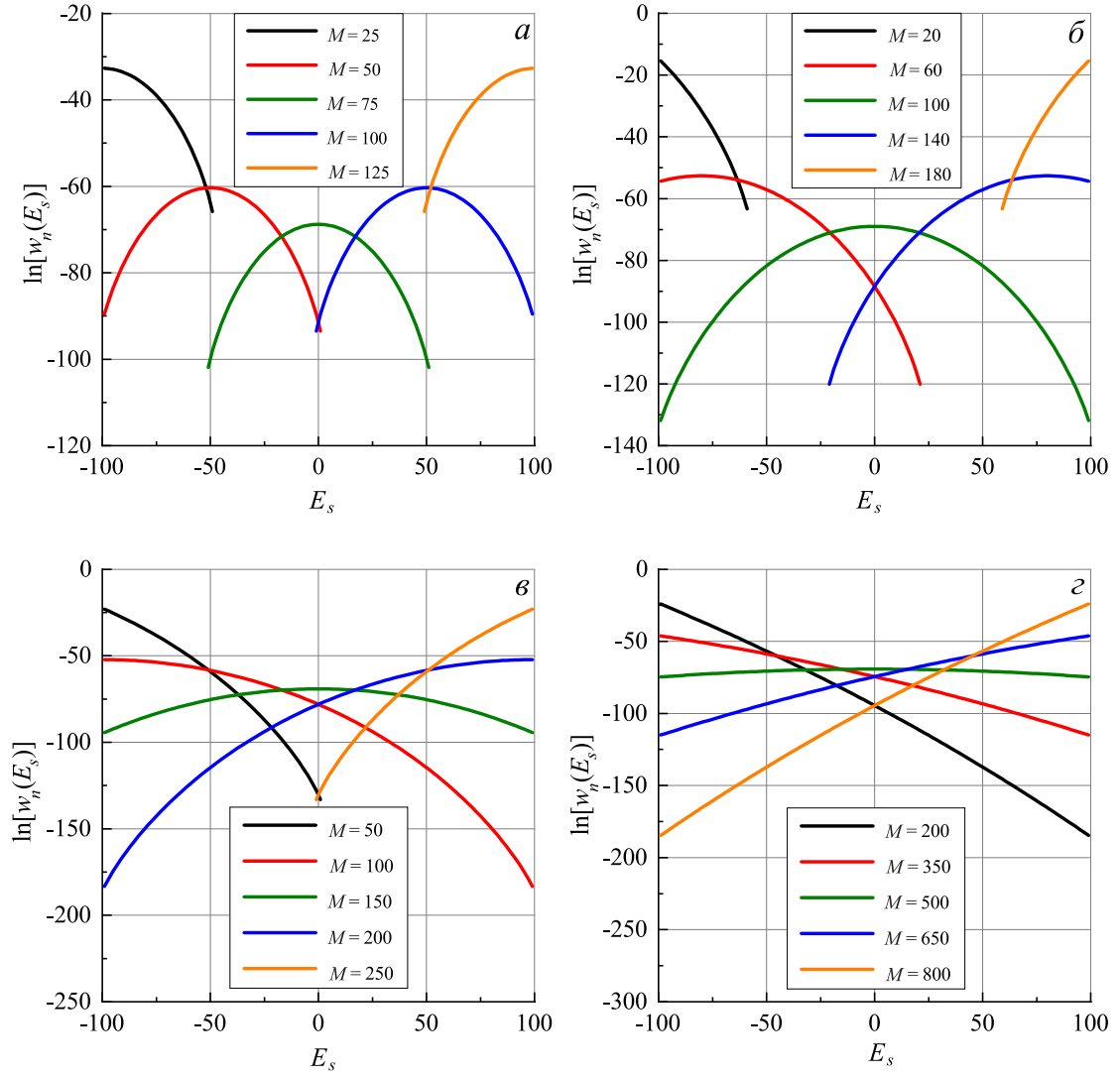


Рисунок. Зависимость логарифма вероятности реализации микросостояния системы $\ln[w_n(E_s)]$ от энергии E_s , соответствующей данному микросостоянию. Параметры системы фиксированы ($L = 100$ и $J = 1$), варьируются размеры термостата и полная энергия цепочки («система + термостат»): а — $(N - L) = 50$, б — $(N - L) = 100$, в — $(N - L) = 200$ и г — $(N - L) = 900$

Отметим, что с учетом кратностей состояний (4) сумма этих вероятностей равна единице. Теперь выразим число K через энергию состояния системы E_n из формулы (3), $K = (E_n/J + L - 1)/2$ и подставим в формулу (11), получим для вероятностей:

$$w_n = \frac{1}{2} \left(\frac{M}{N-M} \right)^{\left(\frac{E_n}{J} + L - 1\right)\frac{1}{2}} \left(\frac{N-M}{N} \right)^{L-1} = e^{E_n \frac{1}{2J} \log\left(\frac{M}{N-M}\right)} \frac{1}{2} \left(\frac{M}{N-M} \right)^{\frac{L-1}{2}} \left(\frac{N-M}{N} \right)^{L-1}.$$

Согласно последней формуле вероятности w_n имеют вид канонического распределения Гиббса

$$w_n = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_n}{\theta}},$$

в котором температура θ равна

$$\theta = -2J / \log\left(\frac{M}{N-M}\right) = -2J / \log\left(\frac{\alpha}{1-\alpha}\right), \quad (12)$$

а статистическая сумма имеет вид

$$Z = 2 \left(\frac{N-M}{M} \right)^{\frac{L-1}{2}} \left(\frac{N}{N-M} \right)^{L-1} = 2 \left(\frac{1}{\alpha(1-\alpha)} \right)^{\frac{L-1}{2}}. \quad (13)$$

Сделаем два замечания. Первое: статистическая сумма (13) зависит только от размера системы L и отношения $M/N = \alpha$, то есть от температуры θ , связанной с α по формуле (12). От размера термостата, таким образом, статистическая сумма не зависит, как и должно быть.

Второе: если термостат «перенасыщен» энергией, так что в случае $J < 0$ имеем $\alpha < 1/2$, а при $J > 0$ имеем $\alpha > 1/2$, то температура (12), которую он задает для системы, является отрицательной.

На рисунке представлены графики зависимости логарифма вероятности реализации микросостояния системы $\ln[w_n(E_s)]$ от энергии E_s , соответствующей данному микросостоянию (расчеты проведены по формулам (3) и (6)). Размер системы L и константа J

езде одинаковые, а различные блоки графиков соответствуют различным размерам термостата. Внутри каждого из блоков графики отличаются фиксированным параметром M , который отвечает за общую энергию замкнутой цепочки — «система + термостат». Мы видим, что при увеличении относительных размеров термостата (соотношение L/N приближается к нулю) линии графиков стремятся к прямым, а следовательно, к виду, соответствующему каноническому распределению Гиббса. Также наблюдаются кривые, аппроксимируемые прямой с положительным угловым коэффициентом, что в предельном случае соответствует отмеченному выше появлению отрицательной температуры.

2.1. Средняя энергия системы, как функция температуры

Выразим из выражения для температуры (12) отношение M к N :

$$\frac{M}{N} = \frac{1}{\exp\left(\frac{2J}{\theta}\right) + 1}.$$

Подставив в (7), получаем

$$\begin{aligned} \langle E_S \rangle &= -J(L-1) \left(1 - \frac{2}{\exp\left(\frac{2J}{\theta}\right) + 1} \right) = \\ &= -J(L-1) \operatorname{th} \left(\frac{J}{\theta} \right). \end{aligned}$$

Полученный результат для средней энергии в предельном случае демонстрирует совпадение с результатом при усреднении энергии по распределению Гиббса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе показано, что в случае модели Изинга общепринятое каноническое распределение Гиббса является лишь частным предельным случаем, а при модели термостата соразмерного с изучаемой системой или даже меньшим ее наблюдается заметное отличие от распределения Гиббса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Квасников И. А. // Статистическая физика. Теория равновесных систем. Т. 2. М.: УРСС, 2002.
2. Фейнман Р. // Статистическая механика. М.: Мир, 1978.
3. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. // Статистическая физика. Т. 5. Ч. 1. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002.
4. Гиббс Джозайя Виллард // Термодинамика. Статистическая механика. М.: Наука, 1982.
5. Боголюбов Н. Н. // Избранные труды в трех томах. Т. 2. Киев: Наукова думка, 1970. С. 297.
6. Козлов В. В. // Тепловое равновесие по Гиббсу и Пуанкаре. Москва–Ижевск, 2002. С. 38.
7. Montroll E. W., Shlesinger M. F. // J. Stat. Phys. 1983. **32**. P. 209.
8. Bak P. // How Nature works. The Science of Self-Organized Criticality. Springer. Berlin. 1996.
9. Renyi A. // Probability theory. North-Holland, Amsterdam. 1970.
10. Tsallis C. // J. Stat. Phys. **52**. 1988. P. 479.
11. Башкиров А. Г., Суханов А. Д. // ЖЭТФ. 2002. **122**. Вып. 3(9). С. 513.
12. Wilk G., Włodarczyk Z. // Phys. Rev. Lett. 2000. **84**. P. 2770.
13. Beck C., Cohen E. G. D. // Physica A. 2003. **322**. P. 267.
14. Ramshaw John D. // Phys. Rev. E. 2018. **98**, 020103(R).
15. Hasegawa H. // C Phys. Rev. E. 2011. **83**, 021104.
16. Ising E. // Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetismus. Ph.D. Thesis. University of Hamburg. 1924.
17. Ising E. // Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. Zeitschrift fur Physik. 1925. Bd. 31. P. 253.

A Non-Gibbs Distribution in the Ising Model

P. K. Ilin, G. V. Koval^a, A. M. Savchenko^b

Department of Quantum Statistics and Field Theory, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia.

E-mail: ^akovgen@mail.ru, ^ba.m.savchenko@gmail.com.

This work is in line with new approaches for obtaining and studying non-Gibbs equilibrium distributions. Based on the Ising model, a new equilibrium distribution is obtained for the case of a thermostat that is commensurate with the system. It is also shown that the equilibrium distribution significantly deviates from the Gibbs distribution when the thermostat is smaller or commensurate with a separated system and tends to the Gibbs distribution in the limit of a large thermostat.

Keywords: Gibbs distribution, Ising model, non-Gibbs distribution.

PACS: 05.20.-y, 64.60.De.

Received 17 June 2020.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2020. **75**, No. 5. Pp. 415–419.

Сведения об авторах

1. Ильин Павел Константинович — студент; тел.: (495) 939-12-90, e-mail: ilin.pk@yandex.ru.
2. Коваль Геннадий Васильевич — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-12-90, e-mail: kovgen@mail.ru.
3. Савченко Александр Максимович — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-12-90, e-mail: a.m.savchenko@gmail.com.