Ντετερμινιστικό χάος κατά Hamilton και κατά Nambu σε μαγνητικά υλικά

Σταμάτης Νίκολης

CNRS–Institut Denis–Poisson(UMR7013)
Département de Physique, Université de Tours, Université d'Orléans
Parc Grandmont, 37200 Tours, France

25ο Θερινό Σχολείο–Συνέδριο Δυναμικά Συστήματα και Πολυπλοκότητα
9-17 Ιουλίου 2018 ΕΚΕΦΕ 'Δημόκριτος'

Outline

Αναφορές

Σε συνεργασία με Pascal Thibaudeau (CEA Le Ripault), Julien Tranchida (LMPT, CEA Le Ripault) και Thomas Nussle (LMPT/IDP, CEA Le Ripault)

1) A group action principle for Nambu dynamics of spin degrees of freedom By Stam Nicolis, Pascal Thibaudeau, Thomas Nussle. arXiv:1801.03405 [cond-mat.mes-hall].
2) Coupling magneto-elastic Lagrangians to spin transfer torque sources By Thomas Nussle, Pascal Thibaudeau, Stam Nicolis. arXiv:1711.08062 [cond-mat.mes-hall].
3) Nambu mechanics for stochastic magnetization dynamics By Pascal Thibaudeau, Thomas Nussle, Stam Nicolis. arXiv:1610.04598 [cond-mat.mes-hall]. 10.1016/j.jmmm.2017.01.088. J.Magn.Magn.Mater. 432 (2017) 175-180.

Αναφορές

4) Finite-dimensional colored fluctuation-dissipation theorem for spin systems By Stam Nicolis, Pascal Thibaudeau, Julien Tranchida. arXiv:1610.01622 [cond-mat.stat-mech]. 10.1063/1.4975132. AIP Adv. 7 (2017) 056012.
5) Probing the hue of the stochastic magnetization dynamics By Stam Nicolis, Julien Tranchida, Pascal Thibaudeau. arXiv:1607.01616 [cond-mat.stat-mech]. 10.1088/1742-6596/738/1/012005. J.Phys.Conf.Ser. 738 (2016) no.1, 012005.
6) A functional calculus for the magnetization dynamics By Julien Tranchida, Pascal Thibaudeau, Stam Nicolis. arXiv:1606.02137 [cond-mat.stat-mech].

Αναφορές

7) Colored-noise magnetization dynamics: from weakly to strongly correlated noise By Julien Tranchida, Pascal Thibaudeau, Stam Nicolis. arXiv:1511.02008 [cond-mat.stat-mech]. 10.1109/TMAG.2016.2527362. IEEE Trans.Magnetics 52 (2016) no.7, 1300504.
8) Closing the hierarchy for non-Markovian magnetization dynamics By Julien Tranchida, Pascal Thibaudeau, Stam Nicolis. arXiv:1506.00544 [cond-mat.stat-mech]. 10.1016/j.physb.2015.10.012. Physica B486 (2016) 57.
9) Quantum Magnets and Matrix Lorenz Systems By J Tranchida, P Thibaudeau, S Nicolis. arXiv:1504.06161 [math.MP]. 10.1088/1742-6596/574/1/012146. J.Phys.Conf.Ser. 574 (2015) 012146.

Γενικό Πλαίσιο

Τα μαγνητικά υλικά είναι προφανούς σημασίας γιά την καθημερινή ζωή. Η τεχνολογική πρόοδος επιβάλλει εφεύρεση νέων μεθόδων περιγραφής της συμπεριφοράς τους, καθότι οι συνθήκες λειτουργίας τους ξεπερνούν τις υποθέσεις των συνήθων προσεγγίσεων.
Μέχρι τώρα τα κβαντικά, θερμικά και τα χαοτικά φαινόμενα μπορούσαν να μελετηθούν ξεχωριστά.
Θα προσπαθήσουμε να καταλάβουμε πώς είναι δυνατό να περιγραφούν μαζί.
Αυτά τα ζητήματα παρουσιάζονται ιδιαίτερα χτυπητά στους λεγόμενους νανομαγνήτες.
Το βασικό εργαλείο θα είναι η στατιστική περιγραφή του χώρου των καταστάσεων της μαγνήτισης μέσω της πυκνότητας πιθανότητας $P(\boldsymbol{m}, t)$ και του ορίου της, εν ισορροπία, $P_{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{m}) = \lim_{t\to\infty} P(\boldsymbol{m}, t)$.

Αναδρομές: Τι είναι το χάος

Υπάρχουν δύο είδη χάους:

- Το μοριακό χάος του Boltzmann: Αναφέρεται στην άτακτη κίνηση μικροσκοπικών βαθμών ελευθερίας, των οποίων η συλλογική δυναμική είναι πολύ πιό ήρεμη και προβλέψιμη. Η κατανομή των συλλογικών βαθμών ελευθερίας έχει τυπική τιμή ίδια με την μέση τιμή και διακυμάνσεις γύρω από αυτήν, που είναι αμελητέες στο θερμοδυναμικό όριο.
- Το ντετερμινιστικό χάος: Ανακαλύφθηκε από τον Poincaré (1892-1899) και απασχόλησε τον Einstein(1917) αλλά πραγματικά έγινε αντικείμενο έρευνας χάρις στην δουλειά του Lorenz(1963) και του Feigenbaum(1976) και μετέπειτα.

Αναδρομές: Τι είναι το χάος

Το ντετερμινιστικό χάος, με την σειρά του, διακρίνεται σε Χαμιλτονιανό και σε dissipative χάος.

- Χαμιλτονιανό: Αν υπάρχει Χαμιλτονιανή, ένας και μοναδικός γεννήτορας των χρονικών μετατοπίσεων, μπορούμε να ορίσουμε μέτρο στον χώρο φάσεων. Δεν διαθέτουμε, όμως, κατ΄ανάγκην, αρκετά διατηρήσιμα μεγέθη, ώστε το σύστημα να είναι ολοκληρώσιμο-να προσδιορίζεται η δυναμική του από τις αρχικές συνθήκες και μόνο.

Αναδρομές: Τι είναι το χάος

- dissipative: Σ'αυτήν την περίπτωση ο όγκος του χώρου φάσεων συρρικνούται και μπορεί να καταλήξει σε ελκυστή μηδενικού μέτρου. Οι ιδιότητες του ελκυστή μπορούν να μελετηθούν με υπολογιστικές μεθόδους. Βασικό χαρακτηριστικό είναι ότι οι τυπικές τιμές απέχουν των μέσων τιμών και οι διακυμάνσεις δεν είναι καθόλου αμελητέες. Ανοιχτό ζήτημα: ποιά είναι τα κβαντικά συστήματα, που έχουν σαν κλασσικό όριο ντετερμινιστικά χατικά συστήματα, που δεν επιδέχονται Χαμιλτονιανής περιγραφής;

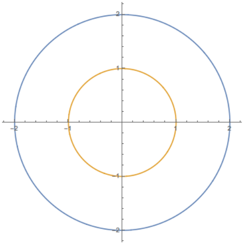
Αναδρομές: Τι είναι χώρος φάσεων

Ο χώρος φάσεων μπορεί να οριστεί ως ο χώρος των (ανεξαρτήτων) αρχικών συνθηκών ενός φυσικού συστήματος. Η σημασία του κατανοήθηκε από τον Hamilton και τον Liouville–ο όγκος του χώρου των φάσεων παραμένει σταθερός κατά την χρονική εξέλιξη ενός Χαμιλτονιανού συστήματος.
Είναι ένας χώρος αρτίου αριθμού διαστάσεων–γιά πεπερασμένο αριθμό βαθμών ελευθερίας–και δεν είναι δυνατόν να διακριθεί ποιά συντεταγμένη είναι θέση και ποιά ορμή...
Ακόμη πιό σημαντικό: Ο όγκος αυτός είναι μη μηδενικός, αλλά και πεπερασμένος, γιά να έχει νόημα καν η περιγραφή του! Το ερώτημα είναι ποιό είναι το σωστό μέτρο;

Απλά παραδείγματα

Ο απλός μονοδιάστοτος αρμονικός ταλαντωτής:

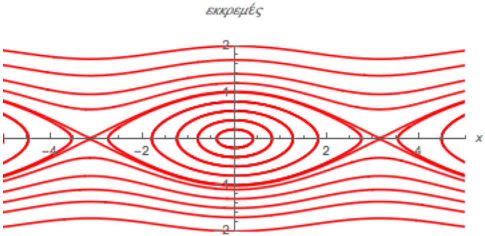
$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m^2\omega^2}{2} q^2$$



Παραδείγματα πιό πολύπλοκα

Το εκκρεμές:

$$H = \frac{p^2}{2m} + mg\ell(1 - \cos q)$$



Παρατηρούμε την διαμέριση του επιπέδου από μη τεμνόμενες καμπύλες.

Άπειροι βαθμοί ελευθερίας–ολοκληρώσιμο σύστημα

Το ελεύθερο βαθμωτό πεδίο: άπειροι αρμονικοί ταλαντωτές, φαινομενικά συζευγμένοι:

$$H = \int d^D\boldsymbol{x}\left\{\frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}\nabla\phi\cdot\nabla\phi + \frac{m^2}{2}\phi^2\right\}$$

στην πραγματικότητα ασύζευκτοι:

$$H = \int d^D\boldsymbol{k}\,\phi_{\boldsymbol{k}}\left\{\frac{p^2}{2} + \frac{\boldsymbol{k}^2 + m^2}{2}\right\}\phi_{-\boldsymbol{k}}$$

Ενδιαφέρουσα παρατήρηση: Υπάρχουν συστήματα απείρων βαθμών ελευθερίας, στα οποία η μη γραμμική σύζευξη μεταξύ των ταλαντωτών είναι, επίσης, οφθαλμαπάτη (ένα παράδειγμα είναι μιά αλυσίδα εκρεμμών, το λεγόμενο sine–Gordon μοντέλο)!

Η μετακίνηση στον χώρο των φάσεων

Γίνεται με τις εξισώσεις του Χάμιλτον

$$\frac{dx^I}{dt} = \omega^{IJ}(\boldsymbol{x})\partial_J H \equiv \left\{x^I, H\right\}$$

Ο τανυστής $\omega^{IJ}(\boldsymbol{x})$ λέγεται *συμπλεκτική μορφή* και η έκφραση $\{,\}$ λέγεται *αγκύλη του Poisson* .

Το μέτρο στο χώρο των φάσεων Χαμιλτονιανών συστημάτων

Έχοντας στην διάθεσή μας την Χαμιλτονιανή μπορούμε να ορίσουμε το εξής μέτρο:

$$\rho(p,q) = \frac{\delta(H(p,q)-E)}{\int\, dpdq\,\delta(H(p,q)-E)}$$

αυτό είναι το λεγόμενο μικροκανονικό μέτρο: η ενέργεια διατηρείται ακριβώς.
Αν το σύστημά μας είναι σε ισορροπία με ένα μακροσκοπικό σύστημα, των οποίων δεν μπορούμε να ξεχωρίσουμε τους βαθμούς ελευθερίας, τότε το μέτρο είναι το Boltzmann–Gibbs μέτρο

$$\rho(p,q) = \frac{e^{-\beta H(p,q)}}{\int\, dpdq\, e^{-\beta H(p,q)}}$$

Αυτές οι εκφράσεις ισχύουν και στην περίπτωση του βαθμωτού πεδίου, σε θερμοδυναμική ισορροπία επίσης!

Οι εξισώσεις συνέχειας του μέτρου

Το μέτρο $\rho(\boldsymbol{x})$ ικανονοποιεί μιά εξίσωση συνέχειας

- Στα Χαμιλτονιανά συστήματα είναι η εξίσωση του Liouville:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{\rho, H\}$$

- Στα θερμοδυναμικά συστήματα είναι η 'κύρια" εξίσωση

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \boldsymbol{J}$$

που, υπό ορισμένες προϋποθέσεις, μπορεί να γραφεί υπό μορφή Fokker–Planck:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla\rho + \nabla V\rho)$$

Οι ροπές του μέτρου

Στην πράξη–πειραματική ή και υπολογιστική–δεν γνωρίζουμε την πυκνότητα $\rho(p, q)$. Μετράμε και υπολογίζουμε τις ροπές της:

$$\left\langle \boldsymbol{x}^k \right\rangle = \int d^{2N}\boldsymbol{x}\, \boldsymbol{x}^k\, \rho(\boldsymbol{x})$$

Το ερώτημα, λοιπόν, είναι, κατά πόσον πεπερασμένος αριθμός ροπών αρκεί γιά τον προσδιορισμό της πυκνότητας. Στο Χαμιλτονιανό χάος η απάντηση είναι καταφατική, όταν η Χαμιλτονιανή είναι πολυωνυμικής μορφής–στο μη Χαμιλτονιανό χάος η απάντηση είναι, σίγουρα, αρνητική.

Το βασικό ερώτημα

Οι διακυμάνσεις της μαγνήτισης στα μαγνητικά υλικά περιγράφονται από μοριακό ή από ντετερμινιστικό χάος;

Κλασσικά και κβαντικά φαινόμενα διαταραχών μαγνήτισης

Χαρακτηρίζονται από κλίμακες ενέργειας:

- Θερμικές διαταραχές: $k_{\mathrm{B}} T$.
- Διαταραχές αταξίας: ν-στοχαστικές διακυμάνσεις μαγνητικών πεδίων και ατελειών των υλικών.
- Χαοτικές διαταραχές: Λόγω μη γραμμικής απόκρισης της μαγνήτισης στο μαγνητικό πεδίο.

Ο μαγνητισμός είναι κβαντικό φαινόμενο. Με τη μείωση του μεγέθους των μαγνητικών συσκεών, αρχίζουν οι

- Κβαντικές διαταραχές, με κλίμακα $\hbar\omega$, να γίνονται αισθητές. Σε αντίθεση με τις κλασσικές πηγές διαταραχών, οι κβαντικές δεν μπορούν να περιγραφούν από μεγάλο αριθμό συνηθισμένων βαθμών ελευθερίας.

Larmor precession

$$\frac{d\boldsymbol{m}}{dt} = \boldsymbol{m} \times \boldsymbol{\omega}$$

Αυτή είναι γραμμική εξίσωση, που μπορεί να λυθεί σε κλειστή μορφή, γιά σταθερό ω.
Αυτή η εξίσωση δεν περιγράφει Hamiltonian δυναμική: Δεν μπορεί να γραφεί υπό την μορφή

$$\frac{d\boldsymbol{m}}{dt} = \{\boldsymbol{m}, H\}$$

διότι η μαγνήτιση έχει τρεις συνιστώσες! Είτε μιά περισσεύει, είτε μιά λείπει...
Μιά περισσεύει, όντως-στην κλασσική περιγραφή–η συνιστώσα παράλληλη στο εξωτερικό πεδίο ω. Αλλά στην κβαντική περιγραφή δεν θα περισσεύει... Οπότε να δούμε πώς να την συμπεριλάβουμε...

Η μηχανική κατά Nambu

Ο Nambu το 1973 πρότεινε την γενίκευση της Χαμιλτονιανής μηχανικής γιά χώρους φάσεων οιουδήποτε αριθμού διαστάσεων, όχι μόνο άρτιων. Η ιδέα του ήταν γιά την περιγραφή αντικειμένων όπως χορδών ή μεμβρανών.

Η γενίκευση της αγκύλης Poisson γιά την μηχανική Nambu γιά την εξίσωση του Larmor:

$$\frac{d\boldsymbol{m}}{dt} = \{\boldsymbol{m}, H_1, H_2\}$$

με $H_2 = ||\boldsymbol{m}||^2/2$ και $H_1 = \boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{\omega}$ διατηρήσιμες ποσότητες και η αγκύλη Nambu ορίζεται από την σχέση:

$$\{f(\boldsymbol{m}), g(\boldsymbol{m}), h(\boldsymbol{m})\} \equiv \varepsilon^{IJK} \partial_I f \partial_J g \partial_K h$$

Εισάγοντας εξωτερικά πεδία

Η δυναμική του Larmor είναι ολοκληρώσιμη (**Ασκηση**: Αποδείξτε το!)
Οπότε προσπαθούμε να εισαγάγουμε νέους όρους στις εξισώσεις του Nambu,

$$\frac{d\boldsymbol{m}}{dt} = \{\boldsymbol{m}, H_1, H_2\} + \boldsymbol{D}(\boldsymbol{m})$$

που να μην μπορούν να απαλειφούν με αλλαγή μεταβλητών. ¨Ενας τέτοιος μηχανισμόε φέρει τα ονόματα των Bloch–Bloembergen.

Bloch–Bloembergen

Το μοντέλο των Bloch–Bloembergen μπορεί να οριστεί ώς έξής:

$$
\begin{aligned}
\frac{dm_1}{dt} &= (\eta_2 - \eta_3)m_2 m_3 - \beta_2 m_3 + \beta_3 m_2 - \frac{m_1}{\tau_1} \\
\frac{dm_2}{dt} &= (\eta_3 - \eta_1)m_3 m_1 - \beta_3 m_1 + \beta_1 m_3 - \frac{m_2}{\tau_2} \\
\frac{dm_3}{dt} &= (\eta_1 - \eta_2)m_1 m_2 - \beta_1 m_2 + \beta_2 m_1 - \frac{m_3}{\tau_3}
\end{aligned}
$$

Άσκηση: *Πώς μπορούν αυτές οι εξισώσεις να γραφούν υπό μορφή Nambu ; Τι ελευθερία υπάρχει στον προσδιορισμό των Χαμιλτονιανών και του όρου τριβής και εξωτερικής ροπής;*

Φαίνεται Bloch–Bloembergen–είναι Lorenz

Με την επιλογή:

$$\boldsymbol{\eta} = (2,1,1) \qquad \boldsymbol{\beta} = (0,0,\sigma) \qquad \boldsymbol{\tau} = (1/\sigma, 1, 1/b)$$
$$d = -b(r+\sigma)$$

και την αλλαγή μεταβλητών:

$$\boldsymbol{m} = (x, y, z - r - \sigma)$$

οι εξισώσεις του μοντέλου Bloch–Bloembergen γράφονται υπό την μορφή:

$$\frac{dx}{dt} = \sigma(y-x)$$
$$\frac{dy}{dt} = x(r-z) - y$$
$$\frac{dz}{dt} = xy - bz$$

που αναγνωρίζουμε ως τις εξισώσεις του μοντέλου του Lorenz!

Η σημασία της ισοδυναμίας Bloch–Bloembergen και Lorenz

Το μοντέλο των Bloch–Bloembergen φαίνεται να περιγράφει την αλληλεπίδραση μιάς ανισότροπης μαγνητικής ροπής με ενα μεγάλο αριθμό βαθμών ελευθερίας, των οποίων το μόνο ενδιαφέρον χαρακηριστικό φαίνεται να είναι οι χρόνοι επανάταξης κάθε συνιστώσας. Η εξωτερική ροπή έχει απλώς σκοπό να επιστρέψει την ροπή που χάνεται λόγω της αλληλεπίδρασης. Αν η επιστροφή μπορούσε να γίνει ακριβώς, το σύστημα θάταν περιοδικό ή περίπου περιοδικό.
Η χαοτική συμπεριφορά κατά Lorenz σημαίνει ότι λίγοι βαθμοί ελευθερίας του περιβάλλοντος, πράγματι, είναι σημαντικοί. Η πυκνότητα πιθανότητας $P_{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{m})$ είναι fractal. Αυτή είναι η βασική διαφορά ανάμεσα στο μοριακό και το ντετερμινιστικό χάος.

Πρώτες ιδέες γιά κβάντωση κατά Nambu

Η κβάντωση Χαμιλτονιανών συστημάτων είναι γνωστή από την εποχή του Dirac–αντικαθιστούμε τις δυναμικές μεταβλητές με τελεστές, που δρούν σε χώρο Hilbert και τις αγκύλες Poisson με μεταθέτες των τελεστών:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{d\mathcal{O}}{dt} = \left[\mathcal{O}, \widehat{H}\right]$$

Αν επιχειρήσουμε να κάνουμε κάτι παρόμοιο με την μηχανική του Nambu, όμως,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{d\mathcal{O}}{dt} = \left[\mathcal{O}, \widehat{H}_1, \widehat{H}_2\right]$$

βρισκόμαστε προ αινίγματος, διότι δεν είναι γνωστό πώς πρέπει να οριστεί ο 'τριπλός μεταθέτης' $\left[\mathcal{O}, \widehat{H}_1, \widehat{H}_2\right]$.

Προοπτικές

- Υπάρχει μοριακό χάος και ντετερμινιστικό χάος-εδώ μελετήσαμε μιά τάξη συστημάτων, όπου το ντετερμινιστικό χάος είναι το σημαντικό, παρά την φαινομενική παρουσία μοριακού χάους.
- Η φυσική περιγαφή της δυναμικής μαγνητικών συστημάτων δεν είναι Χαμιλτονιανή, αλλά η γενίκευσή της, από τον Nambu. Ακόμη γνωρίζουμε πολύ λίγα πράγματα γι΄αυτήν. Αλλά αρχίζουμε να κάνουμε τα πρώτα βήματα.