

# Динамический фазовый переход в простейшей модели цепочки молекул

Степан Музычка

(Московский Государственный Университет)

XXI Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов»  
Москва, Апрель 7–11, 2014

# Аннотация

Рассматривается линейная гамильтонова система, являющаяся простейшей моделью твердого тела. Изучается ее поведение под действием различных возмущающих факторов. А именно, рассматриваются случаи

- постоянной внешней силы.
- возмущения белым гауссовским шумом.

# Описание модели

Рассмотрим одномерную цепочку из  $N$  частиц (молекул) одинаковой массы  $m$ .

$$z_0, z_1, z_2, \dots, z_{N-1}.$$

Предположим, что в момент времени  $t = 0$

$$z_k(0) = ka, \quad \dot{z}_k(0) = 0, \quad k = 0, \dots, N-1.$$

Кроме того, будем считать, что

- $z_0(t) \equiv 0$  — левая частица закреплена.
- На крайнюю правую частицу действует постоянная сила  $f > 0$ .

# Описание модели

Динамика системы описывается гамильтонианом

$$H(z, \dot{z}) = \sum_{k=1}^{N-1} \frac{p_k^2}{2m} + \sum_{k=1}^{N-1} V(z_k - z_{k-1}) - fz_{N-1},$$

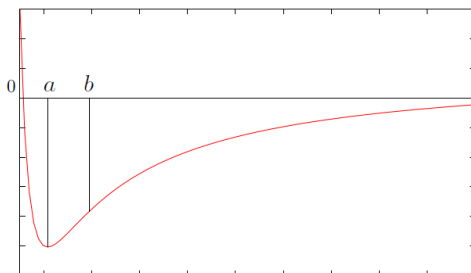
где

- $p_k = m\dot{z}_k$  — импульсы частиц.
- $V(z) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  — потенциал взаимодействия между соседями.

# Описание модели

Относительно  $V(z)$  обычно предполагается, что

- $V(z) \rightarrow \infty$  при  $z \rightarrow 0$ ,  $V(z) \rightarrow 0$  при  $z \rightarrow \infty$ .
- $V(z)$  выпукла на интервале  $(0, b)$  и вогнута на интервале  $(b, \infty)$ .
- $V(z)$  имеет единственный минимум  $V(a) < 0$  в точке  $a > 0$ , причем  $a < b < \infty$ .



# Потенциал Леннард-Джонса

На практике чаще всего используется потенциал Леннард-Джонса

$$V(z) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{z} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{z} \right)^6 \right].$$

Здесь

- $\varepsilon$  – глубина потенциальной ямы.
- $\sigma$  – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю.

# Мотивация

При наложенных условиях мера Гиббса

$$p(z, \dot{z}) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta H(z, \dot{z})}, \quad \beta > 0,$$

для системы не определена (напомним, что  $f > 0$ ) (система метастабильна). Существуют два подхода:

- Изменить  $V(z)$  при больших  $z$  так, что  $V(z) \rightarrow \infty$  при  $z \rightarrow \infty$ . Тогда можно применять гиббсовскую идеологию в условиях равновесия для исследования температурного и упругого расширения.
- Искать окрестность  $O(a)$  точки минимума такую, что при начальных данных траектория никогда не выходит за  $O(a)$ , и рассматривать меру Гиббса на соответствующем компактном множестве.

# Постановка задачи

Мы идем по второму пути, предполагая дополнительно, что в некоторой окрестности точки  $a$  потенциал имеет квадратичный вид

$$V(z) = \frac{\kappa(z - a)^2}{2}.$$

Определим функционал

$$A(N, k, l, f, \kappa, m) = \sup_{t \geq 0} |z_{k+l}(t) - z_k(t)|.$$

Основная задача состоит в оценке введенного функционала при различных параметрах  $N$ ,  $k$  и  $l$ .

# Необходимые обозначения

Введем

- $x_k(t) = z_k(t) - ka$  — отклонения частиц от положения равновесия.
- $F_N(x) = x \ln \frac{N}{x}, x > 0$ , — вспомогательная функция.
- $\sigma = f/\kappa$  — основной параметр.

Отметим, что в состоянии равновесия

$$x_{k+l}(t) - x_k(t) = \sigma l, \quad 0 \leq k < k+l < N$$

# Основное утверждение

## Теорема

Пусть  $\varepsilon \in (0, 1)$  — произвольное число, тогда для всех  $k \in \mathbb{Z}_+$ ,  $l \in \mathbb{N}$ , удовлетворяющих условию

$$0 \leq k < k + l \leq (1 - \varepsilon)N,$$

имеют место неравенства

$$\sigma(l + c_1 F_N(l)) \leq \sup_{t \geq 0} (x_{k+l}(t) - x_k(t)) \leq \sigma(l + c_2 F_N(l)),$$

$$\sigma(l - c_3 F_N(l)) \leq \inf_{t \geq 0} (x_{k+l}(t) - x_k(t)) \leq \sigma(l - c_4 F_N(l))$$

для некоторых  $c_1, c_2, c_3, c_4 > 0$ , причем  $c_1, c_3$  могут зависеть от  $\varepsilon$ .

# Основное утверждение

## Следствие

Пусть  $\varepsilon \in (0, 1)$  — произвольное число, тогда для всех  $k \in \mathbb{Z}_+$ ,  $l \in \mathbb{N}$ , удовлетворяющих условию

$$0 \leq k < k + l \leq (1 - \varepsilon)N,$$

имеет место асимптотика

$$\sup_{t \geq 0} |x_{k+l}(t) - x_k(t)| \simeq \sigma l \ln \frac{N}{l}.$$

# Динамический фазовый переход

Положим  $a = 1/N$ , и будем рассматривать различные скейлинги  $\sigma = \sigma(N)$ . Получим

double scaling limit

$$\sup_{\substack{0 \leq k \leq (1-\varepsilon)N \\ t \geq 0}} a^{-1} |z_{k+1}(t) - z_k(t)| = \begin{cases} 1, & \sigma(N)N \ln N \rightarrow 0; \\ \infty, & \sigma(N)N \ln N \rightarrow \infty. \end{cases}$$

## Сравнение со статическим случаем

Рассмотрим случай нулевой температуры (статический). В случае квадратичного потенциала неподвижная точка существует и единственна:  $z_k - z_{k-1} = h = a + \sigma$ . Поэтому здесь

$$\sup_{0 \leq k \leq N-1} a^{-1} |z_{k+1} - z_k| = \begin{cases} 1, & \sigma(N)N \rightarrow 0; \\ \infty, & \sigma(N)N \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Таким образом, различие определяется логарифмическим множителем.

# Сравнение со статическим случаем

Аналогично, в случае потенциала типа Леннард-Джонса

$$V(r) = -\frac{c_n}{r^n} + \frac{c_m}{r^m}, 0 < n < m, c_n > 0, c_m > 0,$$

имеет место утверждение.

## Предложение

Если  $a = 1/N$ , то неподвижная точка существует тогда и только тогда, когда

$$\sigma = \frac{f}{\kappa} \leq \frac{C}{N},$$

где  $\kappa = V''(a)$ , и

$$C = C(n, m) = \frac{1}{m-n} \left( \left( \frac{m+1}{n+1} \right)^{-\frac{n+1}{m-n}} - \left( \frac{m+1}{n+1} \right)^{-\frac{m+1}{m-n}} \right).$$



- Составим систему дифференциальных уравнений для  $x_k(t)$ . Ее можно решить при помощи дискретного преобразования Фурье и получить

$$I_{n,k,l}(t) = \sigma^{-1}(x_{k+l}(t) - x_k(t) - \sigma l) = -\frac{2}{2N-1} \sum_{m=1}^{2N-2} c_m \cos \omega_m t, \text{ где}$$

$$c_m = \sin^{-2} \frac{\pi m}{4N-2} \sin \frac{\pi m}{2} \cos \frac{\pi m}{4N-2} \sin \frac{\pi m l}{4N-2} \cos \frac{\pi m(k+l/2)}{2N-1},$$

$$\omega_m = 2\sqrt{\frac{k}{m}} \sin \frac{\pi m}{2N}.$$

- Разложим  $I_{n,k,l}(t)$  в виде суммы двух слагаемых

$$I_{n,k,l}(t) = \sum_{m < N/\ln \ln N} + \sum_{m \geq N/\ln \ln N} = I_1 + I_2.$$

- Оценим каждое из двух слагаемых по отдельности

$$\sup_{t \geq 0} |I_1| \simeq N^{-1} \sum_{m < N/\ln \ln N} |c_m| \simeq l \ln \frac{N}{l};$$

$$\sup_{t \geq 0} |I_2| \leq N^{-1} \sum_{m > N/\ln \ln N} |c_m| = O(\ln \ln N).$$

# Описание модели

Рассмотрим все ту же систему из  $N$  частиц, однако на этот раз будем предполагать, что

- левая частица не закреплена.
- на крайнюю правую частицу воздействует белый гауссовский шум  $f_\varepsilon(t) = \varepsilon \dot{w}_t$ .

# Постановка задачи

## Задача

Оценить время достижения некоторого уровня  $h$  разности

$$\Delta_i^\varepsilon = z_{i+1} - z_i - a$$

$$\tau_i^\varepsilon = \inf\{t \geq 0 : |\Delta_i^\varepsilon| \geq h\}, i = 0, \dots, N-2,$$

в зависимости от параметров  $i, h, \varepsilon$  и  $N$ .

# Основное утверждение

## Теорема

При всех  $N \geq 2$ ,  $i = 0, 1, \dots, N - 2$ ,

$$\varepsilon^2 \tau_i^\varepsilon \rightarrow \tau_i,$$

где  $\tau_i$  — момент выхода  $2(N - 1)$ -мерного броуновского движения из непустого выпуклого компакта  $D_{i,N,h}$  в  $\mathbb{R}^{2(N-1)}$ .

# Основное утверждение

## Теорема (продолжение)

Область  $D_{i,N,h}$  имеет вид

$$D_{i,N,h} = \{\mathbf{r} \in \mathbb{R}^{2(N-1)} : J_{i,N}(\mathbf{r}) \leq h\},$$

где

$$J_{i,N}(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sqrt{\frac{2m}{k}} \sup_{s \in \mathbb{R}} \left| \sum_{m=1}^{N-1} a_{m,i} (x_m \cos(\omega_m s) + y_m \sin(\omega_m s)) \right|,$$

$$\mathbf{r} = (\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (x_1, y_1, \dots, x_{N-1}, y_{N-1}),$$

$$a_{m,i} = \cos \frac{\pi m}{2N} \sin \frac{\pi m(i+1)}{N}, \omega_m = 2\sqrt{\frac{k}{m}} \sin \frac{\pi m}{2N}.$$



# Следствие

## Теорема (продолжение)

Причем для всех  $i \in \{0, 1, \dots, N-2\}$   $\tau_i$  и  $\tau_{N-i-2}$  распределены одинаково.

**Замечание.** Таким образом, несмотря на то, что сила

действует только на одну крайнюю частицу, асимптотика времени разрыва с левой и правой стороны совпадают.

# План доказательства

- Составим систему дифференциальных уравнений для  $x_k(t)$ . Ее можно решить при помощи дискретного преобразования Фурье и получить

$$x_{k+1}(t) - x_k(t) = -\frac{2}{N} \sum_{m=1}^{N-1} \sin \frac{\pi m}{N} \sin \frac{\pi m(i+1)}{N} \alpha_m^\varepsilon(t), \text{ где}$$

$$\ddot{\alpha}_m^\varepsilon(t) + \omega_m^2 \alpha_m^\varepsilon(t) = \varepsilon \dot{w}_t, \quad \alpha_m(0) = \dot{\alpha}_m(0) = 0,$$

$$\omega_m = 2\sqrt{\frac{k}{m}} \sin \frac{\pi m}{2N}.$$

- Используя формулу Ито, проверим, что

$$r^\varepsilon(t) = (q_1^\varepsilon, p_1^\varepsilon, \dots, q_{N-1}^\varepsilon, p_{N-1}^\varepsilon) \left( \frac{t}{\varepsilon^2} \right) \rightarrow W^{2(N-1)}, \text{ где}$$

$$\begin{pmatrix} q_m^\varepsilon \\ p_m^\varepsilon \end{pmatrix} = \sqrt{2}\omega_m \begin{pmatrix} \cos \omega_m t & -\sin \omega_m t \\ \sin \omega_m t & \cos \omega_m t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_m^\varepsilon \\ \omega_m^{-1} \dot{\alpha}_m^\varepsilon \end{pmatrix}$$

- Остается переписать  $x_{k+1}(t) - x_k(t)$  в терминах  $r^\varepsilon(t)$  и проанализировать формулу.



Музыка С. А., *"Среднее время до разрыва цепочки из  $N = 2, 3, 4$  осцилляторов."*, Вестник Московского Университета. Серия 1, Математика. Механика, 2013 г.



Малышев В. А., Музыка С. А., *"Динамический фазовый переход в простейшей модели цепочки молекул"*, Теоретическая и математическая физика, т. 179, № 1, стр. 123-133, 2014 г.