

УДК 531.19

Г.С. Бокун, доцент; В.С. Вихренко, профессор; Р.Н. Ласовский, ассистент

**КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ  
ДВУХ ЧАСТИЦ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ**

It is shown, that the steady state the two particle system subjected to a bias along one of the axes is described by the equilibrium Gibbsian distribution. The Gibbsian distribution is violated if the transition probabilities do not contain multipliers that correspond to thermally activated hops.

Отыскание стационарных состояний в решеточных системах является важной задачей [1–3]. Используем систему координат  $Oxy$ , начало которой совпадает с положением одного из занятых узлов. Положение второй частицы относительно избранной характеризуем координатами  $x$  и  $y$ , измеряемыми в единицах параметра  $h$  – расстояния между ближайшими узлами решетки. Таким образом, состояние системы задается координатами  $x$  и  $y$  и характеризуется функцией распределения  $f(x,y)$ , имеющей смысл вероятности реализации этого состояния. Движение частиц по узлам решетки описываем в рамках прыжкового механизма, когда вероятность перескока частицы из занятого узла в ближайший вакантный определяется выражением

$$P = C \cdot W, \tag{1}$$

причем  $C = 1$  при перескоках вдоль оси  $y$  и  $C = A$  или  $B$  при перескоке частицы слева направо или справа налево вдоль от  $x$ , соответственно.  $W = 1$ , когда обе частицы не являются ближайшими соседями и  $w = \exp\{\beta J\}$  в противном случае ( $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура,  $J$  – энергия взаимодействия между частицами, расположенными на ближайших узлах; более далекие взаимодействия не учитываются).

С учетом (1) уравнение эволюции для  $f(x,y)$  при  $\{x,y\} > h$  представляется в форме

$$\frac{df(i,j)}{dt} = 2[f(i,j+1) - 2f(i,j) + f(i,j-1)] + (A+B)[f(i+1,j) - 2f(i,j) + f(i-1,j)], \quad i = x/h, \quad j = y/h, \quad \{i,j\} > 1. \tag{2}$$

Для функций  $f(0,1)$  и  $f(1,0)$ , соответствующих состояниям, когда частицы являются ближайшими соседями, определяющие уравнения имеют другой вид:

$$\frac{df(1,0)}{dt} = -4wf(1,0) + 4f(1,1) + (A+B)[f(2,0) - wf(1,0)], \tag{3}$$

$$\frac{df(0,1)}{dt} = 2f(0,2) - 2wf(0,1) + 2(A+B)[f(1,1) - wf(0,1)]. \tag{4}$$

Уравнения (2)–(4) записаны с учетом симметрии  $f(i,j)$  относительно начала координат и координатных осей. В свою очередь, уравнения для функций  $f(2,0)$  и  $f(0,2)$  имеют такой же вид, как и уравнения системы (2), с тем отличием, что в правых частях этих уравнений при функциях  $f(1,0)$  и  $f(0,1)$  содержатся множители  $w$ . Таким образом, вид уравнений, определяющих искомые функции, можно унифицировать, осуществив замену

$$wf(1,0) \rightarrow \tilde{f}(1,0), \quad wf(0,1) \rightarrow \tilde{f}(0,1). \tag{5}$$

С учетом (5) совокупность уравнений (2)–(4) может быть записана в единой форме для произвольных  $i, j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  (знак  $\sim$  в дальнейшем опускаем):

$$\frac{df(i, j)}{dt} = 2[f(i, j+1) - 2f(i, j) + f(i, j-1)] + (A+B)[f(i+1, j) - 2f(i, j) + f(i-1, j)] - \alpha\delta_{ij}^{10} - \beta\delta_{ji}^{10} + C\delta_{i0}\delta_{y0}, \quad (6)$$

где

$$\delta_{i,j}^{k,0} = (\delta_{ik} + \delta_{i,-k})\delta_{j0}, \quad (7)$$

$$\alpha = (A+B)[f(0,0) - f(1,0)], \quad (8)$$

$$\beta = 2[f(0,0) - f(0,1)], \quad (9)$$

$$C = 2\alpha + 2\beta. \quad (10)$$

При конструировании системы (6) с целью унификации добавлено уравнение для формально введенной функции  $f(0,0)$ , не имеющей физического смысла и выражаемой через константу  $C$ , определяемой из условий нормировки. Представление системы уравнений эволюции в форме (6) позволяет использовать для ее решения решеточное преобразование Фурье по пространственным переменным  $x$  и  $y$ . Далее ограничиваемся рассмотрением стационарных состояний, когда производные по времени от функций распределения равны нулю.

Преобразование Фурье позволяет записать

$$f(\mathbf{r}_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k f_k \exp(-ik\mathbf{r}_{ij}), \quad (11)$$

где  $N$  – число узлов в зоне периодичности бесконечной решетки,  $\mathbf{r}_{ij} = \{hi, hj\}$ .

Суммирование в (11) осуществляется по квазинепрерывным значениям  $k_x = \pm(\pi/h)(n/\sqrt{N})$ ;  $k_y = \pm(\pi/h)(n/\sqrt{N})$  ( $n = 0, 1, \dots, \sqrt{N}$ ) и может быть заменено интегралом по объему первой зоны Бриллюэна обратной решетки:

$$\sum_k \varphi_k = \frac{Nh^2}{(2\pi)^2} \int_{-a}^a \int_{-a}^a \varphi_k dk_x dk_y, \quad a = \pi/h. \quad (12)$$

Разложение  $f(\mathbf{r}_{ij})$  в форме (11) с учетом условий ортогональности

$$\sum_k \exp(ik\mathbf{r}_{ij}) = N\delta_{0i}\delta_{0j}, \quad \sum_{i,j} \exp(-ik\mathbf{r}_{ij}) = N\delta_{k0}, \quad (13)$$

в свою очередь, дает

$$f_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i,j} f(\mathbf{r}_{ij}) e^{ik\mathbf{r}_{ij}}. \quad (14)$$

Подставив (11) в (6), с учетом условия стационарности получим

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k f_k U_k \exp(-ik\mathbf{r}_{ij}) = \alpha\delta_{i,j}^{1,0} + \beta\delta_{j,i}^{1,0} - C\delta_{i0}\delta_{j0}, \quad (15)$$

где

$$U_k = [4(\cos k_y h - 1) + 2(A + B)(\cos k_x h - 1)]^{-1}. \quad (16)$$

Умножив (16) на  $\exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r}_{ij})$  и выполнив суммирование по  $j$ , получим с учетом (13)

$$\sqrt{N} \sum_k \delta_{kk'} f_k U_k = \alpha (e^{ik_x h} + e^{-ik_x h}) + \beta (e^{ik_y h} + e^{-ik_y h}) - C. \quad (17)$$

Отсюда находим

$$f_k = [2(\cos k_x h - 1)\alpha + 2(\cos k_y h - 1)\beta] / U_k \sqrt{N}. \quad (18)$$

В свою очередь, используя (11) в (8),(9), получим

$$\alpha = \frac{(A+B)}{\sqrt{N}} \sum_k f_k (1 - e^{-ik_x h}), \quad (19)$$

$$\beta = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_k f_k (1 - e^{-ik_y h}). \quad (20)$$

Из (16) и (18) следует, что  $f_k$  является действительной и симметрично по  $\mathbf{k}$  функцией. Поэтому  $(1 - e^{ikh})$  в (19) и (20) следует заменить на  $(1 - \cos kh)$ .

Подставив (18) в (19) и (20) и используя (12), получим систему однородных уравнений относительно неизвестных  $\alpha$  и  $\beta$ :

$$\alpha \left( \frac{1}{2(A+B)} + L\{(1 - \cos k_x h)^2\} \right) + \beta L\{(1 - \cos k_x h)(1 - \cos k_y h)\} = 0, \quad (21)$$

$$\alpha L\{(1 - \cos k_x h)(1 - \cos k_y h)\} + \beta \left( \frac{1}{4} + L\{(1 - \cos k_y h)^2\} \right) = 0. \quad (22)$$

В уравнениях (22) введен интегральный оператор

$$L\{\dots\} = \frac{h^2}{(2\pi)^2} \int_{-a}^a \int_{-a}^a \frac{1}{U_k} \{\dots\} dk_x dk_y. \quad (23)$$

Расчеты показывают, что при любых значениях  $(A+B)$  определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных в системе (22), не обращается в ноль. Отсюда следует, что в системе двух частиц существует лишь единственное решение для коррелятивных функций, и оно не зависит от значений коэффициентов  $A$  и  $B$ . Этому решению отвечает равновесное гиббсовское распределение, выраженное условиями

$$wf(1,0) = wf(0,1) = f(1,1) = f(0,2) = \dots = c^2, \quad (24)$$

где  $c = 2/N$  – решеточная концентрация частиц.

При  $A \neq B$  возникает поток частиц в направлении оси  $x$ , так что всегда можно перейти в равномерно движущуюся систему координат, в которой систему двух частиц можно рассматривать находящейся в состоянии статистического равновесия. Интересным является тот факт, что анизотропия в частотах прыжков вдоль разных осей не приводит к анизотропии функций распределения.

Так как использованный в работе метод отыскания решения применяется обычно при  $N \gg 1$ , нами осуществлена проверка полученного результата для случая ограниченных систем с циклическими граничными условиями. В результате установлено, что получен-

ные результаты полностью сохраняются для решеток из  $3 \times 3$  узлов, и лишь в случае решеток с областью периодичности в  $2 \times 2$  узла возникает решение, отличающееся от равновесного. В заключение отметим, что предложенная схема решения может быть использована для системы трех частиц. Последняя задача представляет особый интерес, так как равновесное гиббсовское распределение в этом случае уже не является решением уравнений эволюции.

Наряду с рассмотренной, представляет интерес задача, где величины внешнего поля столь значительны, что при перескоках вдоль поля межчастичное взаимодействие становится несущественным. В этом случае для прыжков частицы вдоль оси  $x$   $w = 1$ , и соответственно видоизменяется система исходных уравнений. Так как построение этой системы аналогично предыдущему, приведем вид новой системы, используя для компактности записи оператор

$$\hat{D} = \Delta_y + (A + B)\Delta_x, \quad (25)$$

где действие операторов  $\Delta_x$  и  $\Delta_y$  определяется соотношениями

$$\Delta_y f(i, j) = f(i, j + 1) - 2f(i, j) + f(i, j - 1), \quad (26)$$

$$\Delta_x f(i, j) = f(i + 1, j) - 2f(i, j) + f(i - 1, j), \quad (27)$$

и константу

$$e = (A + B)(w^{-1} - 1). \quad (28)$$

С учетом (25)–(28) запишем систему определяющих уравнений в форме

$$\hat{D}f(0, 0) = -c, \quad (29)$$

$$\hat{D}f(1, 0) = \alpha + ef(1, 0), \quad (30)$$

$$\hat{D}f(0, 1) = \beta + 2ef(0, 1), \quad (31)$$

$$\hat{D}f(2, 1, 0) = -ef(1, 0), \quad (32)$$

$$\hat{D}f(1, 1) = -ef(0, 1), \quad (33)$$

$$\hat{D}f(i, j) = 0 \quad (34)$$

для всех остальных комбинаций значений  $i$  и  $j$ .

В системе (29)–(34) подлежащие определению функции  $f(i, j)$ , как и ранее, сохраняют симметрию относительно координатных осей и относительно центра.

Система линейных уравнений (29)–(34) является вырожденной, так как удовлетворяет, как и предыдущая, условию

$$\hat{D} \left( \sum_{i, j} f(i, j) \right) = 0, \quad (35)$$

но, в отличие от предыдущего случая, условия (24) уже не являются ее решением. Таким образом, равновесное гиббсовское распределение не удовлетворяет (29)–(34), а в силу (35) система имеет нетривиальное параметрическое решение, которое находится по развитой выше схеме. Для этого используем (11) в левых частях (29)–(34). В результате приходим к уравнениям

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} U_{k'} f_{k'} \exp(-ik' \mathbf{r}_{ij}) = -c \delta_{i0} \delta_{j0} + [\alpha + ef(1,0)] \delta_{ij}^{10} +$$

$$+ (\beta + 2ef(0,1)) \delta_{ji}^{10} - ef(h,0) \delta_{ij}^{20} - ef(0,h) (\delta_{i,1} \delta_{j,1} + \delta_{i,-1} \delta_{j,1} + \delta_{i,1} \delta_{j,-1} + \delta_{i,-1} \delta_{j,-1}). \quad (36)$$

Умножив (36) на  $e^{ikr_{ij}}$  и выполнив суммирование по всем  $\mathbf{r}_{ij}$ , получим

$$f_k = \frac{1}{\sqrt{NU_k}} [f(0,0)a_{00} + f(1,0)a_{10} + f(0,1)a_{01}], \quad (37)$$

где

$$a_{00} = 2(A+B)(\cos k_x h - 1) + 4(\cos k_y h - 1),$$

$$a_{10} = 2e(\cos k_x h - \cos 2k_x h) - 2(A+B)(\cos k_x h - 1),$$

$$a_{01} = 4e(\cos k_y h - \cos k_y h \cos k_x h) - 4(\cos k_y h - 1). \quad (38)$$

Используя (11) для  $f(0,0)$ ,  $f(0,h)$  и  $f(h,0)$  с учетом (37), получаем систему

$$f(0,0) = f(0,0)L\{a_{00}\} + f(1,0)L\{a_{10}\} + f(0,1)L\{a_{01}\},$$

$$f(0,h) = f(0,0)L\{a_{00} \cos k_y\} + f(1,0)L\{a_{10} \cos k_y\} + f(0,1)L\{a_{01} \cos k_y\},$$

$$f(h,0) = f(0,0)L\{a_{00} \cos k_x\} + f(1,0)L\{a_{10} \cos k_x\} + f(0,1)L\{a_{01} \cos k_x\}. \quad (39)$$

Согласно (35), система (39) является вырожденной, что позволяет выразить  $f(0,1)$  и  $f(1,0)$  через  $f(0,0)$ . В итоге  $f_k$ , определяемое по (37), позволяет рассчитать согласно (11) искомые корреляционные функции.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Schnakenberd J. // Rev. Mod. Phys. 1976. V. 48. P. 571.
2. Schmittmann B., R.K.P.Zia // Phase Transitions and Critical Phenomena. 1995. V. 17.
3. Бокун Г.С., Ласовский Р.Н. // Автоматический контроль и автоматизация производственных процессов / Материалы Международной научно-технической конференции. – Мн.: БГТУ, 2003. С. 345.

## СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

Computer simulations and analytical investigations of steady states of one-dimensional systems of particles with linear and nonlinear interactions are performed. The method of slowly varying amplitudes has indicated that the stability conditions select vibrational frequencies and spatial structures of the systems considered.

### Введение

Распространение энергии вдоль одномерных структур привлекает внимание [1] как в связи с вопросами обоснования закона теплопроводности Фурье [2,3], так и ввиду необходимости понимания процессов передачи энергии в реальных квазиодномерных системах (биологические и органические молекулы, анизотропные кристаллы, наноразмерные трубки и т. д.) [4 – 6]. При этом основное внимание уделяется именно процессу распространения энергии вдоль одномерной системы.

При исследовании теплопроводности компьютерным моделированием этого неравновесного процесса часто рассматривают стационарное состояние системы, поддерживаемое с помощью подсистем, расположенных на ее границах, которые играют роль термостатов, соответствующих разным температурам. В некоторых случаях в качестве термостатов используют автоколебательные системы [7,8], обеспечивающие необходимые потоки энергии к одномерной цепочке или из нее. Ясно, что автоколебательные системы ввиду их детерминированности не могут в полной мере играть роль термостатов. Целью настоящей работы является исследование эффектов, возникающих в таких системах при переносе энергии вдоль одномерной цепочки, в том числе выявление и анализ структурных неоднородностей, а также аналитическое обоснование полученных результатов.

### 1. Уравнения движения системы частиц и их численное интегрирование

Рассматривается система  $n+2$  частиц одинаковой массы  $m$ , линейно взаимодействующих между собой и с подложкой посредством упругих связей жесткости  $c$  и  $c_1$ , соответственно (рис. 1). На крайние тела действуют силы, зависящие от скорости ( $\mu$  и  $\gamma$  – соответствующие коэффициенты), которые моделируют связь системы с окружающей средой и обеспечивают устойчивое стационарное состояние. В качестве обобщенных координат принимаются смещения грузов от их положений равновесия.

Сформулируем систему  $n+2$  дифференциальных уравнений движения:

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_0 &= -cx_0 + \mu_0\dot{x}_0 - \gamma_0\dot{x}_0^3 + c(x_1 - x_0), \\ m\ddot{x}_j &= c(x_j - x_{j-1}) + c(x_{j+1} - x_j) - c_1x_j, \quad j = 1, \dots, n, \\ m\ddot{x}_{n+1} &= -cx_{n+1} + \mu_{n+1}\dot{x}_{n+1} - \gamma_{n+1}\dot{x}_{n+1}^3 - c(x_{n+1} - x_n). \end{aligned} \quad (1)$$

Полученная система дифференциальных уравнений нелинейна, и возможности ее

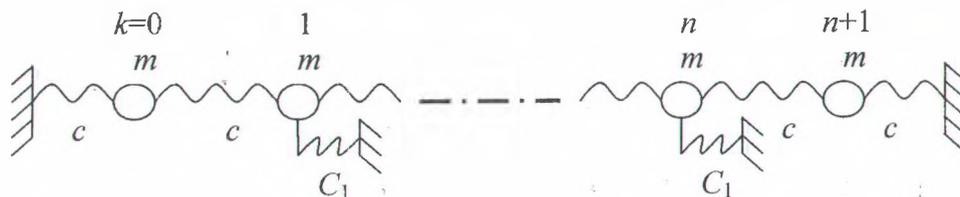


Рис. 1. Механическая модель системы частиц