Math-Net.Ru
Общероссийский математический портал

В. А. Малышев, Фазовые переходы в одномерной кулоновской среде, *Пробл. передачи информ.*, 2015, том 51, выпуск 1, 36–41

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
http://www.mathnet.ru/rus/agreement

Параметры загрузки:
IP: 18.97.9.170
13 января 2025 г., 23:36:43

ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕДАЧИ ИНФОРМАЦИИ

Том 51 **2015** **Вып. 1**

УДК 621.391.1 : 519.2

© 2015 г. **В.А. Малышев**

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ОДНОМЕРНОЙ КУЛОНОВСКОЙ СРЕДЕ

Кулоновской средой на отрезке называется система N частиц одного заряда с кулоновским взаимодействием ближайших соседей и внешним электрическим полем. Показано, что асимптотически при $N \to \infty$ устойчивые конфигурации имеют четыре возможные фазы в зависимости от силы внешнего поля, предполагаемой функцией от N. Более того, эти фазы находятся в явном виде.

§ 1. Введение

Проблема нахождения конфигураций N точечных частиц на некотором многообразии с минимальной энергией (или даже неподвижных конфигураций) давно представлялась важной [1]. Поэтому следует кратко сказать об истории вопроса. Прежде всего речь идет о системах с кулоновским взаимодействием частиц с одинаковым зарядом. Проблема сразу разделяется на случай, когда N мало, где речь идет о точном нахождении конфигурации, и случай больших N, где основной интерес представляют асимптотики. Еще Дж. Томсон (открывший электрон) поставил задачу о нахождении таких конфигураций на сфере, и ответ был известен для $N = 2, 3, 4$ уже более 100 лет, но для $N = 5$ решение было найдено совсем недавно [2]. В одномерном случае еще Стилтьес рассматривал проблему на отрезке с логарифмическим взаимодействием и связал ее с нулями ортогональных полиномов на соответствующем отрезке (см. [3, 4]). Однако задача о нахождении минимума энергии и самой конфигурации на двумерной сфере для всех N и степенного взаимодействия (иногда называемой седьмой проблемой Смейла, она связана также с именами Рисса и Фекете) полностью решена только для квадратичного взаимодействия (см. работы [5–7] и обзор в [8]). Для более общих компактов см. обзор [9].

Здесь мы исследуем другое направление, а именно изучаем, как конфигурация зарядов может меняться в присутствии сильной или слабой внешней силы. Оказывается, что даже в упрощенной (с взаимодействием ближайших соседей) одномерной модели есть интересная структура неподвижных точек (точнее, неподвижных конфигураций), богатая как по их числу, так и по распределению заряда. Для случая постоянной силы мы выявляем четыре фазы плотности заряда, при этом параметром служит отношение констант взаимодействия и внешней силы.

Кулоновской средой мы называем пространство конфигураций

$$-L \leqslant x_N < \ldots < x_1 < x_0 \leqslant 0$$

$N + 1$ точечных частиц с одинаковыми зарядами на отрезке $[-L, 0]$. Здесь N всегда предполагается достаточно большим, однако некоторые результаты верны для всех $N \geqslant 2$. Предполагается отталкивающее кулоновское взаимодействие ближайших соседей и внешняя сила $\alpha_{\text{ext}} F_0(x)$, т.е. потенциальная энергия системы точек имеет вид

$$U = \sum_{i=1}^{N} V(x_{i-1} - x_i) - \sum_{i=0}^{N} \int\limits_{-L}^{x_i} \alpha_{\mathrm{ext}} F_0(x)\, dx, \quad V(x) = \frac{\alpha_{\mathrm{int}}}{|x|}, \tag{1}$$

где $\alpha_{\mathrm{ext}}, \alpha_{\mathrm{int}}$ – положительные константы. Это определяет динамику системы частиц, если точно определить, что случается с частицами 0 и N в точках 0 и $-L$ соответственно, а именно мы предполагаем полностью неупругие граничные условия. Точнее говоря, когда частица $x_0(t)$ в момент t достигает точки 0, имея при этом скорость $v_0(t-0) \geqslant 0$, то ее скорость $v_0(t)$ немедленно становится равной нулю, а сама частица остается в точке 0 до тех пор, пока действующая на нее сила не станет (из-за движения других частиц) отрицательной. Аналогично для частицы $x_N(t)$ в точке $-L$.

Как общепринято, для обнаружения фазовых переходов надо рассматривать асимптотику $N \to \infty$, при этом мы считаем, что L и $F(x)$ остаются фиксированными. Тогда неподвижные точки будут зависеть только от "перенормированной силы" $F = \dfrac{\alpha_{\mathrm{ext}}}{\alpha_{\mathrm{int}}} F_0$, и мы предполагаем, что перенормированная константа $\alpha_{\mathrm{ren}} = \dfrac{\alpha_{\mathrm{ext}}}{\alpha_{\mathrm{int}}}$ (или перенормированная сила) может также стремиться к бесконечности вместе с N, именно как $\alpha_{\mathrm{ren}} = cN^{\gamma}$, где $c, \gamma > 0$. Очевидно, что если $F_0 \equiv 0$, то для единственной неподвижной точки и всех $k = 1, \ldots, N$

$$\delta_k = x_{k-1} - x_k = \frac{L}{N}. \tag{2}$$

Случай, когда α_{ren} не зависит от N, был подробно разобран в [10], там нет фазовых переходов, но обнаруживается, что структура неподвижной конфигурации отличается от (2) только на субмикрошкале порядка N^{-2}.

Необходимость рассмотрения зависимости α_{ren} от N исходит из конкретных примеров, где $\alpha_{\mathrm{ren}} \gg N$. Так, для электронов в некоторых проводниках (см. [11]) их линейная плотность имеет порядок $N \approx 10^9\,\text{м}^{-1}$, $\alpha_{\mathrm{int}} = \dfrac{e^2}{\varepsilon_0} \approx 10^{-28}$ (в системе СИ), а $\alpha_{\mathrm{ext}} = 220 \dfrac{\text{эВ}}{\text{м}} \approx 352 \times 10^{-19}$. Так что α_{ren} будет порядка 10^{11}. Это находится вблизи от критической точки нашей модели, которая, как будет показано, равна $c_{\mathrm{cr}} N$, т.е. около 4×10^9 в рассматриваемом случае.

Мы изучаем плотность $\rho(x)$ (доказывая ее существование), определяемую так, чтобы на всех подынтервалах $I \subset [-L, 0]$ существовали пределы

$$\rho(I) = \int\limits_I \rho(x)\, dx = \lim_{N \to \infty} \frac{\#\{i : \, x_i \in I\}}{N}.$$

Мы находим четыре фазы: 1) равномерная (постоянная) плотность, 2) неравномерная, но ненулевая гладкая плотность, 3) непрерывная плотность, равная нулю на некотором подынтервале, 4) плотность типа δ-функции.

Одномерный случай показывает, чего можно ожидать в многомерном случае, который более сложен, но представляет большой интерес в связи с распределением статического заряда в атмосфере или в организме. Например, случай 4 теоремы 2 (см. ниже) связан с возможностью разряда, так как при исчезновении внешней силы именно в случае большой концентрации заряженных частиц может возникнуть сильный разряд.

§ 2. Основные результаты

Л е м м а. *Предположим, что $F_0(x)$ непрерывна, неотрицательна и не возрастает, т.е. $F(x) \leqslant F(y)$, если $x > y$. Тогда для всех $N, L, \alpha_{\mathrm{ren}}$ неподвижная точка* *существует и единственна. Если y такое, что $F(x) = 0$, $x \geqslant y$, и $F(x) > 0$, $x < y$, то $\delta_{k+1} > \delta_k$, если $x_{k+1} < y$.*

Далее мы предполагаем для простоты, что $F_0 > 0$ однородна (постоянна по x).

Теорема 1 (критическая сила). *Для любых N, L существует $F_{\mathrm{cr}} = F_{\mathrm{cr}}(N, L)$, такая что для неподвижной точки выполнено $x_N > -L$ при $F > F_{\mathrm{cr}}$ и $x_N = -L$ при $F \leqslant F_{\mathrm{cr}}$. Если $F = cN^\gamma$, $\gamma > 1$, то $x_N \to 0$ при $N \to \infty$ для всех $c > 0$. В то же время $F_{\mathrm{cr}} \sim_{N\to\infty} c_{\mathrm{cr}} N$, где*

$$c_{\mathrm{cr}} = \frac{4}{L^2}. \tag{3}$$

Теорема 2 (четыре фазы). 1. *Если $F = o(N)$, то плотность существует и является строго равномерной, т.е. для всех $k = 1, \ldots, N$ при $N \to \infty$*

$$\max_k \left| (x_{k-1} - x_k) - \frac{L}{N} \right| = o\Big(\frac{1}{N}\Big); \tag{4}$$

2. *Если $F = cN$, причем $0 < c \leqslant c_{\mathrm{cr}}$, то $x_N = -L$ и плотность частиц существует, нигде не равна нулю, но не является равномерной (не постоянна по x);*
3. *Если $F = cN$, причем $c > c_{\mathrm{cr}}$, то при $N \to \infty$*

$$-L < x_N \to -\frac{2}{\sqrt{c}}, \tag{5}$$

а плотность на интервале $(-\frac{2}{\sqrt{c}}, 0)$ не равномерна;

4. *Если $F = cN^\gamma$, $\gamma > 1$, то плотность $\rho(x) \to \delta(x)$ в смысле обобщенных функций.*

§ 3. Доказательства

Единственность – доказательство леммы. Положим

$$f_k = \delta_k^{-2}, \quad k = 1, \ldots, N.$$

По крайней мере одна неподвижная точка существует, поскольку минимум U, очевидно, существует. Любая неподвижная точка удовлетворяет следующим условиям:

$$x_0 = 0$$

и

$$f_{k+1} + F(x_k) = f_k, \quad k = 1, \ldots, N-1. \tag{6}$$

Однако для частицы N есть две возможности:

$$f_N \geqslant F(x_N), \tag{7}$$

если $x_N = -L$, и

$$f_N = F(x_N), \tag{8}$$

если $x_N > -L$.

Забудем на время о неподвижной точке и будем рассматривать уравнения (6) как соотношения, однозначно определяющие (индукцией по k) функции f_k от δ_1, а значит, $\delta_k = \dfrac{1}{\sqrt{f_k}}$, а также $x_k = -(\delta_1 + \ldots + \delta_k)$. Очевидно, f_k и x_k – убывающие, а δ_k – возрастающие функции от δ_1. Более того, если $\delta_1 \to 0$, то все $f_k \to \infty$, а δ_k и x_k стремятся к нулю, поэтому для достаточно малых δ_1 выполняется неравенство (7).

Поэтому, если δ_1 возрастает, то возможны два случая: 1) существует $\delta_{1,\text{final}}$, такое что

$$F(x_N) = f_N, \quad x_N > -L.$$

В то же время при $\delta_1 > \delta_{1,\text{final}}$ величины $F(x_N)$ и δ_N возрастают как функции от δ_1, а f_N убывает, поэтому $F(x_N) > f_N$. Отсюда следует, что в этом случае нет других неподвижных точек; 2) не существует такого δ_1, но тогда для некоторого δ_1 будем иметь

$$x_N = -L, \quad F(x_N) \leqslant f_N.$$

Это и определяет единственную неподвижную точку.

Замечание о неединственности. Предположение о монотонности в лемме о единственности очень существенно. Можно привести пример неединственности, где для функции $F_0(x)$ с единственным максимумом число неподвижных точек имеет порядок как минимум N, а именно на интервале $[-1, 1]$ положим для $b > a > 0$

$$F_0(x) = a - 2ax, \quad x \geqslant 0,$$
$$F_0(x) = a + 2bx, \quad x \leqslant 0.$$

Тогда существует $C_{\text{cr}} > 0$, такое что для всех достаточно больших N и $\alpha_{\text{ren}} = cN$, $c > C_{\text{cr}}$, можно аналогично показать, что для любого нечетного $N_1 < N$ существует неподвижная точка, такая что

$$-1 = x_N < \ldots < x_{N_1} < 0 < x_{N_1-1} < \ldots < x_{\frac{N_1+1}{2}} = \frac{1}{2} < \ldots < x_0 < 1.$$

При этом каждая такая точка будет локальным минимумом энергии.

Критическая сила – доказательство теоремы 1 и случая 4 теоремы 2. В случае постоянной положительной силы из (6) следует, что

$$f_i > f_{i+1} \iff \delta_i < \delta_{i+1}, \quad i = 1, \ldots, N-1, \tag{9}$$

т.е. длины интервалов δ_i строго возрастают с ростом i. Поэтому

$$\delta_1 < \frac{L}{N}. \tag{10}$$

Суммирование равенств (6) по $i = 1, \ldots, k-1$ дает для всех $k = 1, \ldots, N$

$$f_k = f_1 - (k-1)F, \quad k = 1, \ldots, N. \tag{11}$$

Аналогично (11), суммируя по $i = N-1, \ldots, k-1$, получим

$$f_k = f_N + (N-k)F. \tag{12}$$

Тогда из (11) следует

$$\delta_k = \left(\delta_1^{-2} - (k-1)F\right)^{-\frac{1}{2}} = \delta_1\left(1 - \delta_1^2(k-1)F\right)^{-\frac{1}{2}}, \tag{13}$$

и так как неподвижная точка существует, то

$$1 - \delta_1^2(k-1)F > 0, \tag{14}$$

или

$$\delta_1 < \left(\frac{1}{(N-1)F}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{15}$$

Для доказательства теоремы 1 рассмотрим более простую вспомогательную модель с $L = \infty$. Иначе говоря, частицы расположены на интервале $(-\infty, 0]$, а сила F постоянна на всем $(-\infty, 0]$. В этой модели для любой $F > 0$ есть единственная неподвижная точка, определенная явным выражением

$$f_N = F, \quad f_k = (N - k + 1)F, \quad k = N - 1, \dots, 1,$$

следующим из (12). Отсюда

$$\delta_N = F^{-\frac{1}{2}}, \quad \delta_k = \frac{1}{\sqrt{(N - k + 1)F}} \tag{16}$$

и

$$-x_N = \sum_{k=1}^{N} \delta_k = \frac{1}{\sqrt{F}} \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{k}}.$$

Связь этой вспомогательной модели с начальной проста. Если $S \leqslant L$, то неподвижные точки для обеих моделей совпадают. Если же $S \geqslant L$, то $x_N = -L$. Действительно, предполагая, что для критической точки в основной модели $x_N > -L$, получаем противоречие с вспомогательной моделью. Поэтому критическая сила находится из условия $x_N = -L$ во вспомогательной модели, т.е.

$$F = F_{\mathrm{cr}} = \left(\frac{1}{L} \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{k}} \right)^2 \sim_{N \to \infty} \left(\frac{2}{L} \right)^2 N.$$

Можно также сказать, что для любого $x < 0$ существует единственная сила $F = F_x$, такая что $x_N = x$.

Для $F = cN$, $c > c_{\mathrm{cr}}$, имеем

$$-x_N = L = \sum_{k=1}^{N} \delta_k = \frac{1}{\sqrt{F}} \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{k}} \sim \frac{2}{\sqrt{c}},$$

откуда следует (3), что дает и утверждение теоремы 1. Аналогично доказывается случай 4 теоремы 2, так как $x_N \to 0$ при $F = cN^{\gamma}$, $\gamma > 1$.

Неравномерная плотность – доказательство случаев 2 и 3 теоремы 2. Рассмотрим сначала случай $F = cN$, $c > c_{\mathrm{cr}}$. Тогда для $k = aN$ из (16) имеем

$$\delta_k = \frac{1}{\sqrt{(N - k + 1)F}} \sim \frac{1}{\sqrt{(1 - a)c}} \frac{1}{N}.$$

Поэтому плотность существует, более того, она равна нулю на $[-L, x_N]$ и неоднородна на $[x_N, 0]$.

Пусть теперь $c \leqslant c_{\mathrm{cr}}$. Можно положить $\delta_1 = b\frac{L}{N}$, $0 < b = b(N) \leqslant 1$. Тогда для $k = aN$, $a < 1$, из (13) получаем

$$\delta_k = b\frac{L}{N}\left(1 - L^2 c b^2 \frac{k-1}{N}\right)^{-\frac{1}{2}} \sim b\frac{L}{N}\left(1 - b^2 c L^2 a\right)^{-\frac{1}{2}}.$$

Поэтому плотность неоднородна.

Равномерная плотность – доказательство случая 1 теоремы 2. Из (10) имеем

$$\delta_1^2 (k - 1)F \leqslant \delta_1^2 (N - 1)F = o(1). \tag{17}$$

Тогда

$$
\begin{aligned}
L &= \sum_{k=1}^{N} \delta_k = \delta_1 \sum_{k=1}^{N} (1 - \delta_1^2 (k-1)F)^{-\frac{1}{2}} = \\
&= \delta_1 \sum_{k=1}^{N} \left(1 + \frac{1}{2}\delta_1^2(k-1)F + O\big((\delta_1^2(k-1)F)^2\big)\right) = \\
&= N\delta_1 + \frac{1}{4}\delta_1^3 F N^2 + o(\delta_1^3 F N^2).
\end{aligned} \tag{18}
$$

Но ввиду (17)

$$\delta_1^3 F N^2 = o(N\delta_1),$$

и поэтому

$$\delta_1 = \frac{L}{N} + o\Big(\frac{L}{N}\Big).$$

Таким образом, результат для всех k следует из (13).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kleine Berkenbusch M., Claus I., Dunn C., Kadanoff L.P., Nicewicz M., Venkataramani S.C.* Discrete Charges on a Two Dimensional Conductor // J. Statist. Phys. 2004. V. 116. № 5–6. P. 1301–1358.
2. *Schwartz R.E.* The Five-Electron Case of Thomson's Problem // Exp. Math. 2013. V. 22. № 2. P. 157–186.
3. *Shiv Chaitanya K.V.S.* Stieltjes Electrostatic Model Interpretation for Bound State Problems // Pramana. 2014. V. 83. № 1. P. 139–145.
4. *Ismail M.E.H.* Structure Relations for Orthogonal Polynomials // Pacific J. Math. 2009. V. 240. № 2. P. 309–319.
5. *Smale S.* The Fundamental Theorem of Algebra and Complexity Theory // Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.). 1981. V. 4. № 1. P. 1–36.
6. *Dimitrov D.K.* Smale's Conjecture on Mean Values of Polynomials and Electrostatics // Serdica Math. J. 2007. V. 33. № 4. P. 399–410.
7. *Kuijlaars A.B.J., Saff E.B.* Asymptotics for Minimal Discrete Energy on the Sphere // Trans. Amer. Math. Soc. 1998. V. 350. № 2. P. 523–538.
8. *Nerattini R., Brauchart J.S., Kiessling M.K.-H.* Optimal N-Point Configurations on the Sphere: "Magic" Numbers and Smale's 7th Problem // J. Statist. Phys. 2014. V. 157. № 6. P. 1138–1206.
9. *Korevaar J.* Electrostatic Fields due to Distributions of Electrons // Ann. Fac. Sci. Toulouse Math. Sér. 6. Special issue "100 ans après Th.-J. Stieltjes". 1996. V. S5. P. 57–76.
10. *Malyshev V.A.* Fixed Points for One-Dimensional Particle System with Strong Interaction // Mosc. Math. J. 2012. V. 12. № 1. P. 139–147.
11. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. Т. 1. М.: Мир, 1979.

Малышев Вадим Александрович
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
механико-математический факультет,
лаборатория больших случайных систем
2malyshev@mail.ru

Поступила в редакцию
26.09.2014
После переработки
13.12.2014