

## КВАЗИРАВНОВЕСНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БОЛЬЦМАНА

*А.В. Нетребко, О.А. Чичигина*

Получено стационарное распределение плотности вероятности по координатам для неравновесных состояний системы, время жизни которых велико по сравнению с временем корреляций. Показано, что слабая неравновесность проявляется в уменьшении эффективной температуры. Результаты подтверждены компьютерным моделированием. Предложен способ определения пространственной зависимости потенциальной энергии по зависимости времени жизни состояния от температуры.

### Введение

Описание выхода системы из квазиравновесного состояния под действием флуктуаций является задачей, объединяющей различные разделы современной науки. Такая задача возникает, например, в теориях фазовых переходов [1] и химических реакций, при исследовании динамики сложных биомолекул [2], при вычислении коэффициента поверхностной диффузии в полупроводниках [3], при анализе срыва слежения радиотехнических и оптических систем автосопровождения [4]. В большинстве случаев динамика таких систем может быть смоделирована как движение броуновской частицы в сложном потенциальном поле.

Рассмотрим броуновское движение одной частицы в потенциальной яме  $U$  под действием внешних шумов, характеризующихся температурой  $T$ . Если частица может с течением времени выйти из этой ямы, то процесс является неравновесным и, строго говоря, не описывается стационарным распределением вероятностей. Для вычисления зависимости вероятности выхода от начальных условий и от времени необходимо решать уравнение Понтрягина [5] (см. также [6,7]), причем в случае сложного вида потенциала не удастся получить решение аналитическими методами. Это уравнение неприменимо, если среднее время до выхода  $\tau_{av}$  много больше времени «забывания» начального условия или времени корреляции

$$\tau_{av} \gg \tau_c, \quad (1)$$

то есть процесс является близким к стационарному. Тогда вероятность выхода не зависит от времени и начальных условий.

В таком квазиравновесном приближении можно описать ансамбль Гиббса, задаваемый температурой и потенциальной энергией, ввести не зависящее от

времени распределение вероятностей в фазовом пространстве  $w(q, v)$  и вычислить вероятность попадания частицы в область фазового пространства, соответствующую выходу частицы.

В работах [8–10] получена формула для нахождения константы выхода  $a$  (то есть величины, обратной среднему времени жизни) квазиравновесной системы. Постоянная  $a$  имеет смысл вероятности выхода в единицу времени. Вероятность такого события в единицу времени описывается интегралом от скалярного произведения вектора скорости и внешней нормали к поверхности  $S_0$ , выход частицы за которую считается выходом из ямы, и распределения вероятностей по всем скоростям и по  $S_0$ . Для частицы, описываемой координатами и скоростями, это выражение запишется в виде:

$$a = \int_{S_0} w(q, v) v_j n_j dS_0 dv, \quad (2)$$

где  $S_0$  – гиперповерхность в пространстве координат, пересечение которой означает выход из ямы;  $n_j$  – единичный вектор внешней нормали к  $S_0$ ;  $v_j n_j$  – скалярное произведение многомерных векторов. Гиперповерхность  $S_0$ , пересечение которой изображающей точкой символизирует выход из потенциальной ямы, естественно поместить на гребне потенциального барьера.

В работах [8–10] было показано также, что ввиду малости константы  $a$  процесс распада является экспоненциальным, напоминая тем самым спонтанный распад. А вероятность того, что частица, находившаяся в начальный момент в яме, будет там обнаружена в момент времени  $t$ , определяется выражением

$$P(t) = \exp(-at). \quad (3)$$

Задача данной работы – нахождение распределения вероятностей  $w(q, v)$  для частицы, движущейся в потенциальной яме до выхода. Очевидно, что при уменьшении вероятности выхода полученное нами распределение должно стремиться к распределению Гиббса, то есть это новое квазиравновесное распределение связано с константой  $a$ . Константа  $a$ , в свою очередь, определяется из (2) с помощью  $w(q, v)$ . Эта взаимная зависимость распределения и вероятности выхода и будет использована в работе.

## 1. Зависимость вероятности выхода частицы от ее средней потенциальной энергии

Рассмотрим две потенциальные ямы ( $U_1, U_2 \leq 0$ ) одинакового объема, такие что частица может переходить только из одной ямы в другую и процесс этих переходов является равновесным. Время выхода из  $i$ -й ямы  $\tau_{av,i}$  совпадает с временем перехода из одной ямы в другую и удовлетворяет условию (1). Если считать микросостоянием положение частицы в данной точке пространства, то согласно (1) номер ямы, в которой находится частица, окажется макропараметром, задающим ансамбль Гиббса. Тогда можно ввести распределения вероятностей только для каждой ямы в отдельности, но они не будут равновесными. Единственный способ определить ансамбль Гиббса для всей области движения частицы – это рассматривать номер ямы  $i$  как микросостояние, а температуру считать макропараметром, задающим этот ансамбль. Каждое такое микросостояние характеризуется энергией  $\langle U \rangle_i$ , имеющей смысл средней энергии частицы при движении ее в  $i$ -й потенциальной яме. Система находится в равновесном состоянии и вероятность нахождения частицы в той или иной яме (то есть в  $i$ -м микросостоянии) задается распределением Больцмана

$$w_1^B = \exp[-\langle U \rangle_1 / (kT)] / \{\exp[-\langle U \rangle_1 / (kT)] + \exp[-\langle U \rangle_2 / (kT)]\},$$

$$w_2^B = \exp[-\langle U \rangle_2 / (kT)] / \{\exp[-\langle U \rangle_1 / (kT)] + \exp[-\langle U \rangle_2 / (kT)]\},$$
(4)

где  $k$  – постоянная Больцмана. Выберем время  $\tau$  такое, что  $\tau_c \leq \tau \leq \tau_{av}$ , где  $\tau_c$  – время корреляции при движении внутри ямы, то есть время, за которое теряется информация о начальном положении частицы. Переходы в такой системе через время  $\tau$  можно считать марковским процессом, но вероятность того, что частица успеет за это время перейти в другую яму и вернуться обратно, пренебрежимо мала. При этих условиях марковская матрица (см., например, [6,7]), состоящая из вероятностей переходов в  $i$ -ю яму из  $j$ -й, согласно (3) запишется следующим образом:

$$A = \begin{pmatrix} \exp(-a_1\tau) & 1 - \exp(-a_2\tau) \\ 1 - \exp(-a_1\tau) & \exp(-a_2\tau) \end{pmatrix}$$

Найдем собственные значения матрицы  $A$ :  $\lambda_1=1$ ,  $\lambda_2=2[\exp(-a_1\tau)+\exp(-a_2\tau)]-1 < 1$ . Собственный вектор, соответствующий  $\lambda_1$ , компонентами которого являются нормированные вероятности нахождения частицы в  $i$ -й яме, имеет вид

$$w_1 = [1 - \exp(-a_2\tau)] / [2 - \exp(-a_1\tau) - \exp(-a_2\tau)]$$

$$w_2 = [1 - \exp(-a_1\tau)] / [2 - \exp(-a_1\tau) - \exp(-a_2\tau)].$$
(5)

В то же время, матрица  $A^n$ , описывающая переходы за  $n \rightarrow \infty$  шагов, то есть за время  $t = n\tau \gg \tau_{av}$ , должна любое начальное распределение вероятностей переводить в распределение Больцмана (4).

Матрица, удовлетворяющая этому условию, выглядит следующим образом:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} A^n = \begin{pmatrix} w_1^B & w_1^B \\ w_2^B & w_2^B \end{pmatrix}.$$

Эта матрица должна иметь общие собственные векторы с матрицей  $A$ , одно из ее собственных значений равно  $\lambda_1^n=1$ , так как второе собственное значение матрицы  $A$  зануляется при возведении в  $n$ -ю степень. Соответствующий этому значению собственный вектор матрицы  $A^n$  задает распределение Больцмана (4). Приравнявая (4) и (5), получаем

$$1 - \exp(-a_1\tau) \approx a_1\tau \approx C \exp[\langle U \rangle_1 / (kT)],$$
(6)

где  $C$  – некоторая функция, зависящая только от  $T$  и не зависящая от  $U$ . Итак, (6) дает экспоненциальную зависимость вероятности выхода от средней «глубины» ямы.

## 2. Среднее время выхода из двумерной потенциальной ямы

Для удобства рассмотрим двумерное броуновское движение в потенциальной яме  $U(x_1, x_2)$ , занимающей область  $\Omega$ , выход из которой происходит при пересечении замкнутой границы  $S_0$  длиной  $L \sim \Omega^{1/2}$ . Считаем, что  $U(S_0)=0$ . Частица находится в тепловом равновесии с поверхностью, на которой происходит движение. Распределение в фазовом пространстве может быть представлено в

виде произведения квазиравновесного распределения Больцмана  $w(x_1, x_2)$  и условного распределения по скоростям  $w'(v_1, v_2 | x_1, x_2)$ . Такая ситуация реализуется, например, в биологических системах [2], и ее исследование важно при вычислении времен перехода от одной конформации полипептидной цепи к другой. Этот переход можно описать как выход пробной частицы из потенциальной ямы размером порядка  $10^{-9}$  м, глубина которой (примерно  $10^{-21}$  Дж) сравнима с тепловой энергией. Такая задача встречается также при вычислении коэффициента поверхностной диффузии в полупроводниках [4].

При вычислении интеграла (2) выполним сначала интегрирование по скоростям. Условие теплового квазиравновесия частицы с поверхностью позволяет считать, что распределение по скоростям будет максвелловским везде, кроме области  $\delta S$  вблизи границы. Ширина  $\delta S$  порядка длины свободного пробега. Дело в том, что весь процесс движения частицы рассматривается до первого пересечения границы, и, значит, попасть в область  $\delta S$  частица может, двигаясь только по направлению к границе. Для каждой точки границы  $S_0$  можно ввести систему координат для скоростей, направив оси перпендикулярно ( $v_1$ ) и параллельно ( $v_2$ ) границе. Тогда распределение по скоростям на  $S_0$  будет аналогичным максвелловскому, но в диапазоне  $v_1 > 0$ ,

$$w'(v_1, v_2 | x_1, x_2 \notin \delta S) = w_M,$$

$$w'(v_1, v_2 | x_1, x_2 \in \delta S) = 2w_M \theta(v_1).$$

Окончательно получаем выражение для  $a$  в нашем случае

$$a = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dv_2 \int_0^{\infty} dv_1 \int_{S_0} dl v_1 w(x_1, x_2) w_M.$$

Интегрирование для  $a$  может быть разбито на две части – координатную и связанную со скоростями:  $a = a' a''$ , где

$$a' = Lw(S_0),$$

$$a'' = \langle v_1 \rangle = [2kT/(m\pi)]^{1/2}.$$

Итак, получаем окончательное выражение для константы распада

$$a = [2kT/(m\pi)]^{1/2} Lw(S_0) = 1/\tau_{av}. \quad (7)$$

### 3. Квазиравновесное распределение Больцмана

Сравнение формул (6) и (7) показывает, что

$$w(S_0) = A \exp[\langle U \rangle / (kT)],$$

где  $A$  не зависит от  $U$ . Значит, стационарное распределение Больцмана не описывает квазиравновесное состояние частицы. Однако очевидно, что квазиравновесное распределение не должно кардинально отличаться от распределения Больцмана, и это отличие можно учесть с помощью некоторой поправки. Введем эту поправку  $\alpha$  следующим образом:

$$w(x, y) = (1/\Omega) \exp[(\langle U \rangle - U(x, y)\alpha) / (kT)]. \quad (8)$$

Это и есть квазиравновесное распределение Больцмана, удовлетворяющее условиям (6) и (7). Константа  $\alpha$  определяется из условия нормировки и характеризует неравновесность системы. Для определения  $\alpha$  и  $\langle U \rangle$  имеем систему уравнений

$$\begin{cases} \int \exp[-U\alpha/(kT)] dx dy = \Omega \exp[-\langle U \rangle / (kT)], \\ \int U \exp[-U\alpha/(kT)] dx dy = \langle U \rangle \Omega \exp[-\langle U \rangle / (kT)]. \end{cases} \quad (9)$$

Первое из этих уравнений получается из условия нормировки, а второе – из того факта, что  $\langle U \rangle$  является математическим ожиданием  $U$ .

Ряд важных соотношений может быть получен в общем виде. А именно, из очевидного математического неравенства

$$\int U \exp[-U\alpha/(kT)] dx dy \geq U_{\min} \int \exp[-U\alpha/(kT)] dx dy$$

получаем не менее очевидное с физической точки зрения соотношение

$$\langle U \rangle \geq U_{\min}. \quad (10)$$

Знак равенства в (10) соответствует прямоугольной потенциальной яме.

Во введении была упомянута необходимость наличия предельного перехода (8) к распределению Больцмана ( $\alpha \rightarrow 1$ ) при уменьшении вероятности выхода  $a$ , то есть согласно (6) при  $\langle U \rangle / (kT) \rightarrow -\infty$ . Однако средняя энергия не является заданной величиной, поэтому в дальнейшем будем характеризовать глубину ямы минимальным значением потенциальной энергии  $U_{\min}$ .

Для сокращения вычислений введем безразмерные переменные  $\beta = U_{\min} / kT < 0$ ,  $0 < \gamma = \langle U \rangle / U_{\min} < 1$ ,  $0 < u = U / U_{\min} < 1$ . Тогда уравнения (9) перепишутся в виде

$$\begin{cases} \int \exp(-u\alpha\beta) dx dy = \Omega \exp(-\beta\gamma), \\ \int u \exp(-u\alpha\beta) dx dy = \Omega \gamma \exp(-\beta\gamma). \end{cases} \quad (11)$$

Далее продифференцируем первое уравнение в (11) по  $\beta$  и с учетом второго уравнения получим

$$(\partial\alpha/\partial\beta) \beta + \alpha = 1 + \partial\gamma/\partial\beta(\beta/\gamma). \quad (12)$$

В равновесном пределе  $\beta \rightarrow -\infty$  в левой части второго уравнения (11) можно вынести из-под знака интеграла максимальное значение медленно меняющейся по сравнению с экспонентой функции  $u$ , равное единице. Используя первое уравнение из (11), получаем

$$\gamma = 1. \quad (13)$$

Очевидно, что при малых температурах средняя энергия близка к минимальной. В этом случае второе слагаемое в правой части (12) зануляется, и получающееся уравнение дает искомый результат

$$\lim_{\beta \rightarrow -\infty} \alpha = 1.$$

В пределе больших температур  $\beta \rightarrow 0$  из (12) получается  $\alpha \rightarrow 1$ . В этом случае отсутствие искажений, которые могли бы возникнуть из-за конечного времени измерения, объясняется тем, что распределение само по себе (и в больцмановском варианте) является близким к равномерному, то есть искажать, фактически,

нечего. Однако важно учесть, что параметр  $\beta$  ограничен снизу условием (1), так как при больших температурах заметно возрастает вероятность выхода.

Кроме предельных значений  $\alpha$  (12) позволяет представить общий вид зависимости этого параметра неравновесности от  $\beta$ . Данная функция имеет максимум и, следовательно, всегда  $\alpha \geq 1$ . Покажем это.

Условие экстремума зануляет первое слагаемое в левой части (12). Для выяснения знака второго слагаемого в правой части, определяющего значение  $\alpha$  по сравнению с единицей, выразим  $\gamma$  из (11)

$$\gamma = \int u \exp(-u\alpha\beta) dx dy / \int \exp(-u\alpha\beta) dx dy.$$

Знак производной  $\partial\gamma/\partial\beta$  будет определяться знаком числителя, а именно, знаком выражения

$$-\int u^2 \exp(-u\alpha\beta) dx dy \int \exp(-u\alpha\beta) dx dy + \int u \exp(-u\alpha\beta) dx dy \int u \exp(-u\alpha\beta) dx dy. \quad (14)$$

Домножая (14) на

$$[(1/\Omega)\exp(\gamma\beta)]^2 > 0$$

и учитывая (8), получаем

$$-\langle u^2 \rangle + \langle u \rangle^2 \leq 0.$$

Следовательно, второе слагаемое в правой части (12) больше нуля и  $\alpha > 1$ . Данный результат подтверждается рассмотрением кусочно-постоянных потенциалов в работе [11]. Из этого можно сделать важный вывод, что влияние неравновесности процесса сводится к уменьшению эффективной температуры, то есть к сужению распределения по координатам. Это происходит из-за того, что маловероятные состояния не успевают реализоваться. Важно отметить, что формула (8) и уравнения (9) верны для любой размерности фазового пространства.

Полученный результат можно также интерпретировать как увеличение глубины потенциальной ямы в  $\alpha$  раз. Подобный эффект описан в работе [12], где показано, что одномерное движение массивной частицы под действием только упругих ударов более легких частиц может быть представлено как движение внутри некой потенциальной ямы с выполнением закона сохранения энергии.

#### 4. Оценка применимости метода квазиравновесных распределений

Рассмотренное описание не учитывает особенностей взаимодействия частицы с термостатом, поскольку квазиустановившееся распределение не зависит, например, от коэффициента трения  $h$ . Однако от него зависит время установления этого распределения  $\tau_c$ . Существуют два ограничения на применение формулы (8), описываемые неравенством (1). В случае сильного трения под временем корреляции следует понимать время, за которое броуновская частица проходит расстояние, равное характерному размеру ямы  $R$ , то есть

$$\tau_c \sim R^2/D,$$

где  $D$  – коэффициент самодиффузии. Причем  $D = kT/(hm)$ , следовательно

$$\tau_c \sim R^2 hm / (kT).$$

Это означает, что при слишком большом трении частица будет долгое время локализована в небольшой области ямы, то есть время корреляции оказывается

сравнимым с временем выхода  $\tau_{av}$  и вычисления времени выхода по формулам (8) дадут сильно искаженный результат.

В случае слишком малого трения время корреляции оценивается следующим образом:

$$\tau_c \sim h^{-1}.$$

Воздействие внешних шумов на частицу мало, и ее движение долгое время остается механическим, а не тепловым, возникают квазиустойчивые циклы. И опять время выхода, вычисленное без учета времени установления распределения, будет отличаться от истинного.

Итак, мы получили ограничения на допустимые значения коэффициента трения

$$1/\tau_{av} \ll h \ll \tau_{av} kT/(R^2 m).$$

В работе [2] приведены результаты компьютерного эксперимента по исследованию зависимости  $\tau_{av}$  от  $h$ , где величины

$$kT/(L^2 m) \sim 1, \quad \tau_{av} \sim 100$$

даны в безразмерных единицах. На интервале  $0.1 \leq h \leq 10$  показано отсутствие зависимости  $\tau_{av}$  от  $h$ , по мере удаления от указанного интервала в обе стороны  $\tau_{av}$  возрастает. Этот результат хорошо согласуется с нашей оценкой и доказывает применимость квазиравновесного распределения в пределах изменения коэффициента трения в сто раз.

## 5. Примеры вычислений для различных видов потенциалов

Рассмотрим параболическую потенциальную яму  $U=U_{\min}(1-r^2/R^2)$ . Для такой ямы соотношения (11) запишутся в виде

$$\begin{cases} e^{-\beta\alpha} - 1 = -\alpha\beta e^{-\gamma\beta}, \\ (\gamma\beta - \beta - 1/\alpha)\alpha e^{-\gamma\beta} = -1. \end{cases}$$

Для конусообразной ямы,  $U=U_{\min}(1-r/R)$ , получаются уравнения

$$\begin{cases} \beta\alpha - 1 + e^{-\beta\alpha} = 1/2 (\alpha\beta)^2 e^{-\gamma\beta}, \\ (\gamma\beta - \beta - 2/\alpha)\alpha e^{-\gamma\beta}/2 = -1. \end{cases}$$

Для ямы вида  $U=U_{\min}[1-(r/R)^{1/2}]$  имеем

$$\begin{cases} (6e^{-\beta\alpha} + (\beta\alpha)^3 - 3(\beta\alpha)^2 + 6\beta\alpha - 6)(\beta\alpha)^4/4 = e^{-\gamma\beta}, \\ (\gamma\beta - \beta - 4/\alpha)\alpha e^{-\gamma\beta}/4 = -1. \end{cases}$$

На рис. 1 представлены результаты вычислений зависимости  $\alpha$  от  $\beta$  для параболической потенциальной ямы (сплошная линия), для конусообразной (пунктирная линия), для корневой (штриховая линия) и для ямы вида  $U=U_{\min}[1-(r/R)^4]$  (штрихпунктирная линия).

Сравнение этих графиков позволяет сделать вывод, что изменение распределения, связанное с неравновесностью процесса, больше всего проявляется при  $|\beta| \sim 4$ . Причем это проявление тем меньше, чем ближе к прямоуголь-

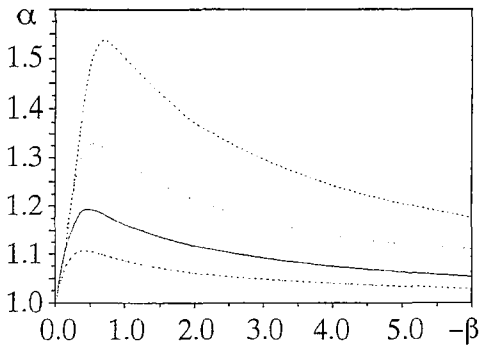


Рис. 1

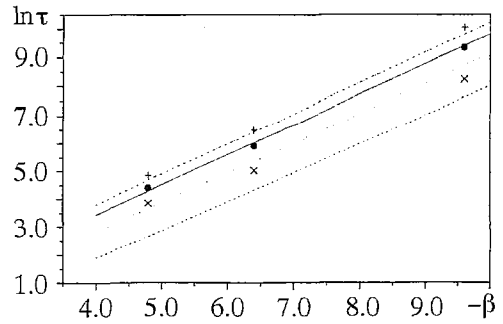


Рис. 2

ной оказывается вид потенциальной ямы. На рис. 2 представлена зависимость логарифма безразмерного среднего времени выхода частицы из потенциальной ямы в зависимости от  $\beta$  для тех же случаев, что и на рис. 1. Вычисления проводились по формуле

$$t = (-\pi \beta / 8)^{1/2} e^{-\gamma \beta},$$

следующей из формулы (7). Параметр приведения времени к безразмерному виду равен  $(mR^2/U_{\min})^{1/2}$ .

## 6. Компьютерное моделирование

В компьютерном эксперименте моделировалось движение частицы массы  $m=1$  под действием  $\delta$ -коррелированных сил  $\xi_x$  и  $\xi_y$  в потенциальном поле  $U(x,y)$  в соответствии с уравнениями

$$d^2x/dt^2 = -\partial U/\partial x - hv_x + w\xi_x,$$

$$d^2y/dt^2 = -\partial U/\partial y - hv_y + w\xi_y,$$

где  $\xi_x$  и  $\xi_y$  – случайные величины, равномерно распределенные на интервале  $[-1,1]$ . Воздействие этих случайных сил происходило с шагом по времени  $\tau_0=1/100$ , за единицу выбрано время прохождения через всю яму. Начальное положение частицы было выбрано на дне потенциальной ямы. Интегрирование проводилось методом Рунге – Кутты 4-го порядка точности с автоматическим выбором шага интегрирования. Среднее время выхода находилось по 500 реализациям.

Для определения температуры, соответствующей амплитуде шумов  $w$ , учтем, что корреляционная функция такого шума определяется выражением

$$K = w^2 \langle \xi^2 \rangle = w^2/3.$$

С другой стороны, для шума, близкого к  $\delta$ -коррелированному,

$$K \approx 2kTh/\tau_0.$$

Из этих двух выражений получаем температуру

$$kT = w^2 \tau_0 / (6h).$$



В случае малых температур полученное время выхода было уточнено с учетом ненулевого времени корреляции случайных воздействий  $\tau_0$ , аналогичного времени свободного пробега. Дело в том, что после удара, предшествовавшего выходу частицы, она на протяжении времени  $\tau_0$  движется (без дополнительных ударов) с замедляющим ускорением  $(1/m)\partial U/\partial r|_{r=R}$ , и средняя скорость на границе, входящая в (7), будет меньше

$$\langle \tilde{v}_1 \rangle_{s_0} = \langle v_1 \rangle_{s_0-\delta} - (\tau_0/m)\partial U/\partial r|_{r=R},$$

где  $\langle v_1 \rangle_{s_0-\delta}$  – средняя скорость, направленная к границе, задаваемая просто распределением Максвелла, то есть вдвое меньшая скорости в (7). Эта поправка не превышает нескольких процентов. Результаты эксперимента представлены на рис. 2. Кружками показаны времена выхода из параболической ямы (сплошная линия), прямыми крестиками – из ямы, соответствующей штрихпунктирной линии, и косыми крестиками – из конусообразной ямы (пунктирная линия).

Компьютерное моделирование подтверждает также линейную зависимость среднего времени жизни состояния от радиуса ямы. На рис. 3 представлена экспериментальная зависимость времени жизни от коэффициента трения. Верхний график, маркированный крестиками, соответствует радиусу ямы, вдвое большему, чем радиус ямы, время выхода из которой показано на графике, маркированном квадратиками. Видно, что в области применимости теории время выхода из большей ямы вдвое больше, чем из меньшей.

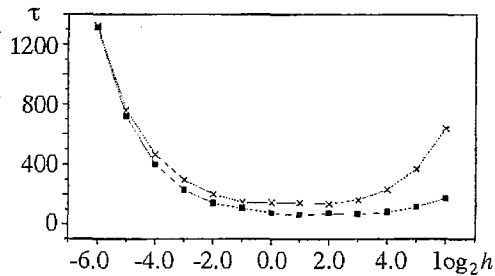


Рис. 3

За пределами этой области заметно влияние времени корреляции, которое описано в разделе 4.

## 7. Восстановление координатной зависимости потенциальной энергии по зависимости времени выхода от температуры

Показанная в разделах 5, 6 зависимость времени жизни состояния  $\tau(kT)$  от «кривизны стенок» потенциальной ямы  $U(x_1, x_2)$  позволяет решить и обратную задачу в том случае, когда потенциальная энергия точно не определена. Такая задача возникает, например, при попытке моделировать молекулярную структуру сложного биологического соединения по имеющимся данным о времени его распада или времени удерживания им какой-либо частицы.

Нами предложен алгоритм восстановления вида простейшей симметричной двумерной потенциальной ямы (заданного размера  $R$ ) по известной зависимости от температуры времени выхода  $\tau(kT)$  из этой ямы частицы массой  $m$ . При этом предполагаем, что потенциальную энергию можно представить в виде

$$U = U_{\min}[1 - (r/R)^p].$$

Таким образом, задача сводится к вычислению и последующему уточнению величин  $U_{\min}$  и  $p$ .

Согласно (7) и (8), учитывая, что  $L=2\pi R$ ,  $\Omega=\pi R^2$  и  $\tau=1/a$ , получаем

$$\langle U \rangle(\tau, kT) = kT \ln(2\tau/R)[2kT/(\pi m)]^{1/2}. \quad (15)$$

Подставляя имеющуюся зависимость  $\tau(kT)$ , получаем  $\langle U \rangle(kT)$ . Возьмем две точки на этой кривой в диапазоне наименьших температур, когда распределение (8) близко к распределению Гиббса ( $\alpha \approx 1$ ). Согласно теореме о распределении энергии по степеням свободы, следующей из распределения Гиббса [13],

$$\langle U \rangle(kT) = U_{\min} + 2/(pkT). \quad (16)$$

Записав (16) для каждой из выбранных точек, находим приближенные значения  $U_{\min}$  и  $p$ . Далее вычисляем по формулам (8) и (9)  $\alpha$  и более точную зависимость  $\langle U \rangle(kT)$  с учетом неравновесности процесса и, выбирая две новые точки на новой кривой  $\langle U \rangle(kT)$ , находим уточненные значения  $U_{\min}$  и  $p$ . Далее эту операцию можно повторять, получая все более точные их значения.

### Выводы

В случае квазиравновесного процесса распределение по координатам оказывается более узким, чем распределение Больцмана, и описывается формулами (8) и (9). Оно применимо в широком диапазоне значений коэффициента трения. В ряде случаев удается получить вид зависимости потенциальной энергии от координат по известной зависимости времени жизни состояния от температуры.

В заключение авторы благодарят Юрия Михайловича Романовского за привлечение внимания авторов к данной проблеме, Бориса Андреевича Гришанина за ценные замечания, позволившие существенно улучшить работу, а также Юрия Александровича Кравцова за интерес к работе.

*Работа проведена при частичной финансовой поддержке РФФИ 98-03-33191А и Государственной программы «Научные школы России» 00-15-97-843.*

### Библиографический список

1. Климонтович Ю.Л. Статистическая физика. М.: Наука, 1982. С. 521.
2. Romanovsky Yu.M., Netrebko A.V. // Izv. VUZ «AND». 1998. Т. 6, № 4. С. 31.
3. Болтакс Б.И. Диффузия в полупроводниках. М.: Физматгиз, 1961.
4. Обрезков Г.В., Разевиг В.Д. Методы анализа срыва слежения. М.: Сов. радио, 1977.
5. Понтрягин А., Андронов А., Витт А. // ЖЭТФ. 1933. Т. 3. С. 165.
6. Тихонов В.И., Миронов М.А. Марковские процессы. М.: Сов. радио, 1977.
7. Стратонович Р.Л. Избранные вопросы флюктуаций в радиотехнике. М.: Сов. радио, 1961.
8. Стратонович Р.Л. // ЖЭТФ. 1995. Т. 81. С. 729.
9. Стратонович Р.Л., Чичигина О.А. // ЖЭТФ. 1996. Т. 110. С. 1284.
10. Чичигина О.А. // Вестник Московского Университета. Сер. 3. Физика, Астрономия. 1997. № 5. С. 6.
11. Чичигина О.А. // Сб. памяти А.Н. Малахова/Под ред. А.И. Саичева. Н.Новгород: ТАЛАН, 2000. С. 98.
12. Синай Я.Г. ТМФ. 1999. Т. 121, № 1. С. 110.
13. Стратонович Р.Л., Полякова М.С. Элементы молекулярной физики, термодинамики и статистической физики. Изд-во Моск. ун-та, 1981. С. 44.

Институт механики МГУ  
Физический факультет МГУ

Поступила в редакцию 26.12.2000

## QUASI-EQUILIBRIUM BOLTZMANN DISTRIBUTION

*A.V. Netrebko, O.A. Chichigina*

Stationary coordinate distribution is received for nonequilibrium states of system, which lifetime is much more than correlations time. It is shown, that this weak nonequilibrium is revealed by decrease of effective temperature. Results are confirmed by computer simulations. The way of potential energy coordinate dependence determination by means of lifetime's temperature dependence is proposed.



*Нетребко Алексей Васильевич* – родился в 1955 году. Окончил механико-математический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова в 1977 году, кандидат физико-математических наук. В настоящее время ведущий сотрудник Института механики Московского государственного университета. Область научных интересов: динамическая теория пластичности, математическое моделирование в механике деформируемого твердого тела, численные методы. Имеет около 30 научных работ.



*Чичигина Ольга Александровна* – родилась в 1971 году. Окончила физический факультет МГУ (1994), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник физического факультета МГУ. Область научных интересов включает динамический хаос, случайные процессы, теорию информации. Автор более 10 научных работ.

E-mail: [chichigina@squeeze.phyz.msu.su](mailto:chichigina@squeeze.phyz.msu.su)