



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Metastability for low-temperature Kawasaki dynamics with two types of particles

Troiani, A.

Citation

Troiani, A. (2012, October 30). *Metastability for low-temperature Kawasaki dynamics with two types of particles*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/20065>

Version: Corrected Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/20065>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/20065> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Troiani, Alessio

Title: Metastability for low-temperature Kawasaki dynamics with two types of particles

Date: 2012-10-30

Nederlandse Samenvatting

Metastabiliteit is een fenomeen dat voor kan komen in een systeem dat beïnvloed wordt door een drukke dynamiek. Het wordt gekarakteriseerd door het bestaan van verschillende tijdsschalen waarover het systeem evolueert. Op de korte termijn is het systeem ogenschijnlijk in evenwicht en verkent het slechts een beperkt gebied van de toestandruimte, terwijl het systeem op de lange termijn snelle overgangen tussen de verschillende gebieden van de toestandruimte ondergaat. In de thermodynamica is metastabiliteit gerelateerd aan eerste-orde fase transities. Het klassieke voorbeeld van metastabiel gedrag is het bevriezen van een supergekoelde vloeistof: het systeem blijft lang in de (metastabiele) vloeibare fase voordat het de (stabiele) vaste fase bereikt. De overgang hiertussen wordt geactiveerd door het verschijnen van een kritieke druppel van de vaste fase binnen de vloeibare fase. Daarentegen komen metastabiele fenomenen niet alleen voor in de natuurkunde, maar ook in veel andere gebieden, zoals in de biologie, scheikunde, economie en informatica.

Het gedrag van het bovenstaande soort model kan gemodelleerd worden door het definiëren van een energie functie H op de toestandruimte $\mathcal{X}$. Deze energie functie staat met een kleine kans overgangen naar toestanden met hogere energie toe. In deze opzet corresponderen de metastabiele en de stabiele staat respectievelijk met een lokale en een globale minimizer van de energie. De overgangstijd richting een stabiele staat wordt bepaald door de diepte van het diepste dal dat de stabiele en de metastabiele staat scheidt.

Het soort vragen die gesteld kunnen worden over metastabiliteit hebben betrekking tot de kansverdeling van de tijd die nodig is om de overgang van metastabiliteit naar stabiliteit waar te nemen, de vorm van de kritische configuraties die de overgang activeren en de typische trajecten die het dynamische systeem volgt om de overgang te realiseren. Door de jaren heen zijn verschillende benaderingen ontwikkeld om deze vragen te kunnen beantwoorden. Echter, een uniforme theorie bestaat nog niet en gedetailleerde analyses van specifieke modellen en van model-afhankelijke eigenschappen zijn genoodzaakt om alleen de voor dat model belangrijkste vraag te behandelen.

In dit proefschrift bekijken we een gas model op een twee dimensionaal lattice met

een lage temperatuur en lage dichtheid. Dit model heeft 2 verschillende soorten deeltjes in een grote eindige doos Λ met een open rand. Deze deeltjes worden beïnvloed door Kawasaki dynamiek. Elk tweetal deeltjes die zich bevinden op aangrenzende posities hebben een negatieve bindingsenergie wanneer hun types verschillend zijn, terwijl elk deeltje een positieve activatie energie heeft, die afhangt van zijn type. Er is geen bindingsenergie tussen deeltjes van dezelfde soort. Op de rand van Λ worden deeltjes gecreëerd en vernietigd op een manier die de aanwezigheid van een oneindig gas reservoir weergeeft. We starten deze dynamiek vanuit de configuratie waarin Λ leeg is (genoteerd met $\square$) en zijn geïnteresseerd in de overgangstijd tot de configuratie waarin Λ volledig gevuld is (genoteerd met $\boxplus$). Deze overgang wordt getriggerd door een kritieke druppel ergens in Λ .

Dit proefschrift is als volgt opgebouwd. In Hoofdstuk 1 introduceren we de belangrijkste benaderingen uit al bestaande literatuur om om te gaan met metastabiliteit en geven we de belangrijkste relevante resultaten die verkregen gerelateerd aan ons model. In Hoofdstuk 2 introduceren we ons model en identificeren we de waarden van de parameters waarvoor de overgang van $\square$ naar $\boxplus$ metastabiël gedrag vertoont in het limiet geval van lage temperaturen. Onder drie hypothesen, bepalen we de verdeling en de verwachting van de overgangstijd en identificeren we de zogenaamde kritische configuraties die voldoen aan een zekere “poort eigenschap”. De eerste hypothese neemt aan dat configuratie $\boxplus$, die correspondeert met de vloeibare fase een minimizer van H is. De tweede hypothese stelt dat de verschillende dalen van het energie landschap niet te diep zijn. De derde hypothese eist dat de kritische configuraties een geschikte geometrie hebben. Onder deze drie hypothesen leiden we verschillende stellingen af en hiervoor is het noodzakelijk om ook de volgende drie model-afhankelijke grootheden te identificeren: (1) de energie barrière Γ^* die $\square$ van $\boxplus$ scheidt; (2) de verzameling $\mathcal{C}^*$ van kritische configuraties; (3) de kardinaliteit N^* van de verzameling van protokritische configuraties, die gezien kunnen worden als de “ingangs” verzameling van $\mathcal{C}^*$. In Hoofdstuk 3 worden de eerste 2 hypothesen geverifieerd en de waarde Γ^* van de energie barrière die $\square$ en $\boxplus$ scheidt geïdentificeerd. Deze resultaten zijn voldoende om de exponentiele kansverdeling van de kernvormingstijd gedeeld door zijn gemiddelde te bepalen en om de gemiddelde kernvormingstijd te berekenen in de lage temperatuur limiet, op een multiplicatieve factor $1 + o(1)$ na. In Hoofdstuk 4 laten we zien dat het model voldoet aan de derde hypothese en we identificeren de verzameling van kritische configuraties. We geven tenslotte een geometrische karakterisatie van de configuraties in $\mathcal{C}^*$ en berekenen de waarden van N^* .