

ՀՀ ԿՐԹՈՒԹՅԱՆ, ԳԻՏՈՒԹՅԱՆ, ՄՇԱԿՈՒՅԹԻ ԵՎ ՍՊՈՐՏԻ ՆԱԽԱՐԱՐՈՒԹՅՈՒՆ
ԵՐԵՎԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆ

ՍՏԵՓԱՆՅԱՆ ՎԱՐԱԶԴԱՏ ԱՐՏԵՄԻ

ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԵՎ ԴԱՍԱԿԱՆ ԵՐԵՎՈՒՅԹՆԵՐԸ ԿԵՆՍԱՊՈԼԻՄԵՐՆԵՐԻ
ԿԱՌՈՒՅՎԱԾՔՈՒՄ

Ա.04.07 - «Կոնդենսացված վիճակի ֆիզիկա» մասնագիտությամբ
ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի
գիտական աստիճանի հայցման ատենախոսության

ՍԵՂՄԱԳԻՐ

ԵՐԵՎԱՆ 2025

THE MINISTRY OF EDUCATION, SCIENCE, CULTURE AND SPORT OF RA
YEREVAN STATE UNIVERSITY

STEPANYAN VARAZDAT

QUANTUM AND CLASSICAL PHENOMENA IN THE STRUCTURE OF BIOPOLYMERS

Thesis for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences
Speciality 01.04.07 “Condensed State Physics”

ABSTRACT

YEREVAN 2025

Ատենախոսության թեման հաստատվել է Երևանի պետական համալսարանում

Գիտական ղեկավար՝ Ֆիզ.-մաթ. գիտ. դոկտոր, Ե. Շ. Մամասախլիսով
Պաշտոնական

Ընդդիմախոսներ՝ Ֆիզ.-մաթ. գիտ. դոկտոր, Ա. Հ. Պողոսյան
Ֆիզ.-մաթ. գիտ. թեկնածու, Վ. Ռ. Օհանյան

Առաջատար կազմակերպություն՝ ՀՀ ԳԱԱ Ֆիզիկական հետազոտությունների
ինստիտուտ

Ատենախոսության պաշտպանությունը կայանալու է 2025թ. Փետրվարի 22-ին
ժամը 12:00-ին Երևանի պետական համալսարանում գործող Ֆիզիկայի 049
Մասնագիտական խորհրդի նիստում:

Հասցե՝ 0025 Երևան, Ալեք Մանուկյան փ. 1, ԵՊՀ

Ատենախոսությանը կարելի է ծանոթանալ ԵՊՀ գրադարանում:

Սեղմագիրն առաքված է 2025թ. Հունվարի 21-ին:

Մասնագիտական խորհրդի
գիտական քարտուղար՝



Ֆիզ.-մաթ. գիտ. թեկնածու
Վ. Պ. Քալանթարյան

The thesis theme is approved at the Yerevan State University

Scientific Supervisor: Doctor of Phys. Math. Sciences, Y. Sh. Mamasakhlisov
Official Opponents: Doctor of Phys. Math. Sciences, A. H. Poghosyan
Candidate of Phys. Math. Sciences, V. R. Ohanyan

Leading Organization: Institute for Physical Research of NAS RA

The defence of the thesis will take place at 12:00 on February 22, 2025, during the
session of the Specialized Council 049 of Physics at the Yerevan State University.

Address: 1 Alex Manoogian Street, 0025 Yerevan, Armenia.

The thesis is available in the Yerevan State University library.

The abstract was distributed on 21 January, 2025.

Scientific secretary of
the Specialized Council՝



Candidate of Phys. Math. Sciences
V. P. Kalantaryan

ԱՏԵՆԱԽՈՍՈՒԹՅԱՆ ԸՆԴՀԱՆՈՒՐ ԲՆՈՒԹԱԳԻՐԸ

Թեմայի արդիականությունը: Կենսապոլիմերների կենսաբանական գործառույթները որոշվում են դրանց կառուցվածքային և էլեկտրաստատիկ հատկությունների բարդ համադրությամբ: Կոնդենսացված վիճակի ֆիզիկայի հիմնական նպատակներից է լուծույթներում կենսապոլիմերների կառուցվածքի և հատկությունների ֆիզիկական օրինաչափությունները գտնելը: Բաց հարցերի թվում մնում է քվանտային մեխանիկական և դասական ազատության աստիճանների փոխազդեցության խնդիրը: Այս առումով կարևոր է ուսումնասիրել նման համակարգերը տարբեր մասշտաբներով՝ օգտագործելով դասական և քվանտային ֆիզիկայի մեթոդները:

Բիոֆիզիկական համակարգերը բարդ, բաց համակարգեր են, որոնք սովորաբար գոյություն ունեն հավասարակշռությունից դուրս: Այս պատճառով բիոֆիզիկական համակարգերում լինում են բազմաթիվ անսպասելի և էքստրեմալ ֆիզիկական հատկություններ: Օրինակ, հայտնի է, որ որոշ կենսաբանական համակարգեր օգտվում են բացասական թերմոդինամիկ ճնշումներից՝ տարբեր ֆունկցիաներ իրականացնելու համար, ինչպես օրինակ՝ հեղուկների տեղափոխումը կենդանիներում և մեծ ծառերում: Այս էքստրեմալ ֆիզիկական վիճակը բավարար չափով ուսումնասիրված չէ և դեռ հիմնականում հարցերով է պատված գաղտնիության մեջ, գիտնականները վիճում են, արդյոք նման վիճակներ ընդհանրապես կարող են գոյություն ունենալ: Մեկ այլ էքստրեմալ վիճակ, որը զարմանալիորեն կարող է տեղի ունենալ կենսապոլիմերներում, հեռահար կոհերենտությունն է, որը նման է Բոզե կոնդենսացմանը: Սա դինամիկ կոնդենսացիայի երևույթ է, որը տեսականորեն ենթադրվել է Հերբերտ Ֆրյոլիխի կողմից: Քանի որ այս վարքագիծը չի պահանջում շատ ցածր ջերմաստիճաններ, այն շատ խոստումնալից է Բոզե կոնդենսացման դինամիկական ուսումնասիրելու համար:

Ինչպես նշվեց, կենսապոլիմերների կարևոր ֆիզիկական հատկություններից մեկը նրանց տարածական կառուցվածքն է: Կոնֆորմացիոն անցումները, որոնք փոխում են նշված կառուցվածքը, կարևոր կենսաբանական դեր են խաղում կենսապոլիմերների գործառույթը կարգավորելու գործում: Անցած դարի ընթացքում մեծ քանակությամբ գիտական հետազոտություններ են հատկացվել կենսապոլիմերների կառուցվածքի և կոնֆորմացիոն անցումների ուսումնասիրությանը: Այս ուսումնասիրությունների տեսական մոտեցումը մաթեմատիկորեն բավականին մոտ է տարբեր քվանտային մեխանիկական մոդելներին և մեթոդներին: Հետևա-

բար, սա, կենսաֆիզիկական համակարգերում գոյություն ունեցող էապես քվանտային երեվոյթների հետ միասին, նրբորեն կապում է հետազոտության երկու ոլորտները, որտեղ յուրաքանչյուր նոր արդյունք մի ոլորտում բացում է մյուսի համար ուսումնասիրման նոր հետաքրքիր ուղղություններ:

Ատենախոսության նպատակը քվանտային և դասական ֆիզիկայի տեսական մեթոդների և մոդելների կիրառումն է կենսապոլիմերների կառուցվածքային հատկությունների համար կարևոր փորձում դիտարկված կամ տեսականորեն կանխատեսված երևույթների ուսումնասիրության և քվանտային մեխանիկայի և կենսաֆիզիկայի միջև կապերի հետագա զարգացման համար: Դիտարկվում են հետևյալ խնդիրները՝

- Թերմոդինամիկ բացասական ճնշման գոյության խնդիրը:
- Տարածական սահմանափակված անվերջ անկարգավորված պոլիէլեկտրոլիտի կառուցվածքի խնդիրը՝ անկարգավորվածությունից կախված կարճ հեռավորությունների փոխազդեցությունների ներքո:
- Միաչափ համակարգերում ջերմային անցումների խնդիրը:
- Քվանտմեխանիկական լոկալ էներգիայի խտության ընտրության խնդիրը:
- Բոզոնային համակարգերում փոխազդեցությունների գծայինությամբ պայմանավորված դինամիկ սահմանափակումները, ինչպես նաև փոխազդեցություններին ոչ գծայինություն ավելացնելով այդ սահմանափակումները խախտելու ճանապարհները:

Գիտական նորույթը: Ընդհանուր ոչ հավասարակշռված քվանտային մեխանիկական վիճակում ճնշման հավասարումը ստացվել է քվանտային թերմոդինամիկայի մեթոդներով ադիաբատիկ և իզոթերմային ռեժիմներում: Այս հավասարումը վիրիալ թեորեմի մոդիֆիկացիա է: Օգտագործելով այս հավասարումը, ապացուցվել է no-go թեորեմ, որն արգելում է բացասական ճնշման վիճակների առկայությունը հատուկ սահմանափակումներով համակարգերում: Երկու անսահման զուգահեռ լիցքավորված թիթեղների միջև անկարգավորված պոլիէլեկտրոլիտի ազատ էներգիան հաշվվել է միջին դաշտի մոտավորությամբ: Դրանով հայտնաբերվել է առաջին կարգի փուլային անցում բացասականից դեպի դրական թերմոդինամիկ ճնշում:

Իզինգի միաչափ մոդելում հաշվվել են միջին մագնիսացման և տիրույթի պատի թվի բաշխման ֆունկցիաները, որոնց միջոցով բացահայտվում և ուսումնասիրվում է ջերմային անցումների նոր ձև Իզինգի միաչափ մոդելում: Ցուցադրվում է համարժեքություն Դիրակի հավասարման ոչ-ռեյատիվիստիկ սահմանում, Մադելունգի հավասարման և Թերլեցկի Մարգենաու Հիլ քվազիհավանականության մեթոդներով ստացվող քվանտմեխանիկական լոկալ էներգիայի խրտությունների միջև: Գտնվել է լոկալ պահպանվող էներգիայի խտության նոր ձև, որը կախված է համակարգի սպինի և իմպուլսի վեկտորային արտադրյալից: Գծային փոխազդեցություններով բավական ընդհանուր բոզոնային համակարգում անհավասարություններ են ստացվում էնտրոպիայի, ընդհանուր միջին լրացվածության թվի և դիսպերսիայի համար: Այս ռեժիմի համար ապացուցվել է սառեցումն արգելող թեորեմ: Դինամիկ կոնդենսացիայի Ֆրյոլիխի արդյունքը հաստատվել է քվանտային ռեժիմում՝ ցույց տալով, որ դինամիկ կոնդենսացիայի հասնելու համար պահանջվում է ոչ գծայնություն: Սառեցման առավելագույն քանակը, ինչպես նաև դրա արտադրողականության և օգտակար գործողության գործակիցները գտնվել են ջերմային վիճակից սկսած երկրեժիմ համակարգի համար:

Գործնական արժեքը: Կենսաբանական մակրոմոլեկուլների կառուցվածքի և առանձնահատկությունների հետազոտությունը, օգտագործելով քվանտմեխանիկական և դասական մոտեցումները, լուրջ գործնական նշանակություն ունի տարբեր գիտական և տեխնոլոգիական ոլորտներում: Կենսաբանական մակրոմոլեկուլների՝ նուկլեինաթթուների և սպիտակուցների էլեկտրոնային կառուցվածքն ու փոխազդեցությունը հասկանալը հնարավորություն է տալիս, օրինակ, դեղամիջոցների նախագծման, որոնք ճշգրիտ թիրախավորում են որոշակի տեղամասեր՝ բարելավելով արդյունավետությունը և նվազեցնելով կողմնակի ազդեցությունները: Կենսաբանական մակրոմոլեկուլների ուսումնասիրումից ստացված պատկերացումները ուղղորդում են սինթետիկ նյութերի նախագծումը, որոնք ընդօրինակում են դրանց հատկությունները, ինչպիսիք են կարծրությունը, ճկունությունը և ինքնուրույն հավաքումը: Ամփոփելով՝ կենսաբանական մակրոմոլեկուլների ուսումնասիրության մեջ քվանտմեխանիկական և դասական մոտեցումների ինտեգրումը կենսական նշանակություն ունի կյանքի գործընթացների մեր ըմբռնումն առաջ մղելու, մարդու առողջության բարելավման և կենսատեխնոլոգիայի և նյութերի գիտության մեջ նորարարությունների խթանման համար:

Պաշտպանության ներկայացվող հիմնական դրույթները:

1. Ստացվել է no-go թեորեմ և դրա ընդհանրացում, որոնք արգելում են բացասական ճնշման վիճակների առկայությունը հատուկ սահմանափակումներով համակարգերում: Կառուցվել են օրինակներ, որոնցում գտնվել են բացասական ճնշումներով վիճակներ: Մասնավորապես ցույց է տրվել, որ անկարգավորված պոլիէլեկտրոլիտային համակարգում տեղի է ունենում փուլային անցում բացասականից դեպի դրական ճնշում:
2. Միաչափ Իզինգի մոդելում հայտնաբերվել է ջերմային անցում, որը նմանություններ ունի առաջին կարգի փուլային անցումների և կենսապոլիմերներում կոնֆորմացիոն անցումների հետ:
3. Քվանտային մեխանիկայի համար լոկալ էներգիայի խտության ընտրության խնդիրը ձեկվակերպվել է մախընտրելի հատկություններով և լուծվել՝ վերցնելով Դիրակի հավասարման ոչ ռելյատիվիստիկ սահմանը: Դիրակի հավասարումից ստացվել է նոր ոչ ռելյատիվիստիկ լոկալ պահպանվող էներգիայի խտություն, որը կախված է համակարգի սպինից և իմպուլսից:
4. Գծային փոխազդեցությամբ բավական ընդհանուր բոզոնային համակարգի համար ապացուցվել է թերմոդինամիկայի երկրորդ օրենքից ավելի ընդհանուր օրենք, որը ցույց է տալիս, որ ընդհանուր լրացվածության թիվը և աղմուկը համակարգում չեն կարող նվազել:
5. Ֆրյոլիխի արդյունքը, որը պարտադրում է դինամիկ կոնդենսացիայի հասնելու համար ոչ գծային փոխազդեցությունների առկայություն, ապացուցվել է քվանտային ռեժիմում:

Աշխատանքի ներկայացումը: Թեզի արդյունքները զեկուցվել են «Quantum Thermodynamics 2022», «Quantum Thermodynamics 2023» և «Coarse-graining the finer structure of macromolecular interactions» գիտաժողովներում և քննարկվել Ա. Ալիխանյանի անվան ազգային լաբորատորիայի Քվանտային գիտության և տեխնոլոգիաների բաժնի սեմինարներում:

Հրապարակումները: Ատենախոսության թեմայով տպագրվել է 5 հոդված:

Ատենախոսության կառուցվածքը: Ատենախոսությունը բաղկացած է Ներածությունից, չորս Գլուխներից և Եզրակացությունից: Այն պարունակում է 130 էջ, 216 հղում և 17 պատկեր:

ԱՏԵՆԱԽՈՍՈՒԹՅԱՆ ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆԸ

Ներածությունում քննարկվում են թեմայի արդիականությունն ու մոտիվացիան, ներկայացվում են երկու հիմնական մաթեմատիկական մոդելները, որոնց վրա հիմնված է թեզը, և նկարագրվում են հիմնական արդյունքները:

Առաջին Գլխում վերլուծված է բացասական թերմոդինամիկական ճնշման գոյության խնդիրը: Ներկայացված է բացասական ճնշման դեմ հիմնական տեսական փաստարկը, և քննարկվում են դրա կիրառելիության սահմանները: Այս սահմանների և բացասական ճնշման վիճակների հնարավորության ֆորմալ վերլուծությունը կատարելու համար դուրս է բերվել ճնշման հավասարում ընդհանուր քվանտային մեխանիկական վիճակի համար անսահման պոտենցիալ հորի ներսում՝ մասնիկների և պատի միջև փոխազդեցության պոտենցիալի հետ համատեղ: Պարզվել է, որ այս հավասարումը գործում է ինչպես ադիաբատիկ, այնպես էլ ջերմային ռեժիմների համար և հանդիսանում է վիրիալ թեորեմի փոփոխություն:

Մենք սկսել ենք տրված Համիլտոնյանից

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\Delta + \mathcal{U}(\mathbf{x}; \Omega) = -\frac{1}{2}\Delta + \mathcal{U}_{\text{in}}(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N) + \sum_{j=1}^n U_{\text{ex}}(\mathbf{x}_j; \Omega), \quad (1)$$

որտեղ $m = \hbar = 1$, \mathbf{x}_j -ը j -րդ մասնիկի D -չափային կոորդինատն է, $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N)$ -ը ND -չափանի վեկտոր է, $\nabla, \Delta = \sum_{j=1}^N (\partial/\partial \mathbf{x}_j)^2$ գրադիենտի և Լապլասի օպերատորներն են այդ ND -չափանի տարածությունում, և U_{ex} -ը կախված է Ω -ից, բայց չի ներառում պատի անվերջ պոտենցիալը: Անվերջ պոտենցիալը հաշվի է առնվել Դիրիխլեյի սահմանային պայմաններով: Ճնշումը դուրս է բերվել, որպես Ω -ով սահմանված V ծավալի փոփոխությամբ ուղեկցվող համակարգի էներգիայի փոփոխության արագությունը՝

$$P = \frac{1}{DV} \sum_n p_n \left[\frac{1}{2} \oint_{\partial\Omega} (\mathbf{x}\hat{r}) |\nabla \psi_n|^2 ds + \sum_{j=1}^N \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\langle n | U_{\text{ex}}(\mathbf{x}_j; \Omega) - U_{\text{ex}}(\mathbf{x}_j; \Omega'(\alpha)) | n \rangle}{\alpha} \right], \quad (2)$$

որտեղ $\psi_n = \langle \mathbf{x} | n \rangle$ -ը համակարգի n -րդ սեփական վիճակն է և p_n -ը հավանականությունը, որ համակարգը կգտնվի n -րդ վիճակում.

Այս հավասարման անմիջական արդյունքը ու-ցօ թեորեմն է, որն ասում է՝ *քվանտային համակարգը, որը չի փոխազդում այն պատերի հետ, որոնք սահմանափակում են նրան տրված*

ծավալի մեջ, չի կարող ունենալ կայուն բացասական ճնշումով վիճակներ: Այս թեորեմը պնդում է, որ կայուն համակարգը միշտ լրացնում է պատերով սահմանափակված ծավալը՝ երբեք չի սեղմվում ավելի փոքր ծավալի: Դա նաև ցույց է տալիս, որ վան դեր Վալսի հեղուկի բացասական ճնշումով վիճակները կան միջին դաշտի մեթոդի արտեֆակտ են, կան մատնանշում են վան դեր Վալսի մոդելում մասնիկների և պատի միջև թաքնված փոխազդեցություն, որը ի հայտ է գալիս միջին դաշտի մեթոդը կիրառելիս: No-go թեորեմը նաև հուշում է, թե որ համակարգերը կարող են բացասական ճնշում ունենալ: Օգտագործելով (2) ճնշման հավասարումը, ներկայացվում են քվանտային և դասական պարզ մոդելներ, որտեղ առկա են բացասական ճնշումով վիճակներ:

Առաջին Գլխի երկրորդ կեսում լուծվում է երկու անսահման լիցքավորված թիթեղների միջև անկարգավորված պոլիէլեկտրոլիտի խնդիրը, որի արդյունքում առաջանում է առաջին կարգի փուլային անցում բացասականից դրական թերմոդինամիկական ճնշման: Համակարգի անկարգավորված փոխազդեցությունները կարճ հեռավորության վրա են և կառավարվում են ստորև բերված պոտենցիալով՝

$$v_{\tau\tau'}(\mathbf{x}) = v_0 \xi_\tau \xi_{\tau'} \delta(\mathbf{x}), \quad (3)$$

որտեղ τ, τ' մոնոմերների համարներն են, $v_0 > 0$ փոխազդեցության կոնստանտը, δ -ն Դիրակի դելտա ֆունկցիան է և ξ_τ անկախ, զրո միջինով և ξ դիսպերսիայով նորմալ բաշխումով պատահական մեծություններ են: Համակարգի թամբի կետի մոտավորությամբ լուծումը բերում է ոչ գծային Շրյոդինգերի հավասարման

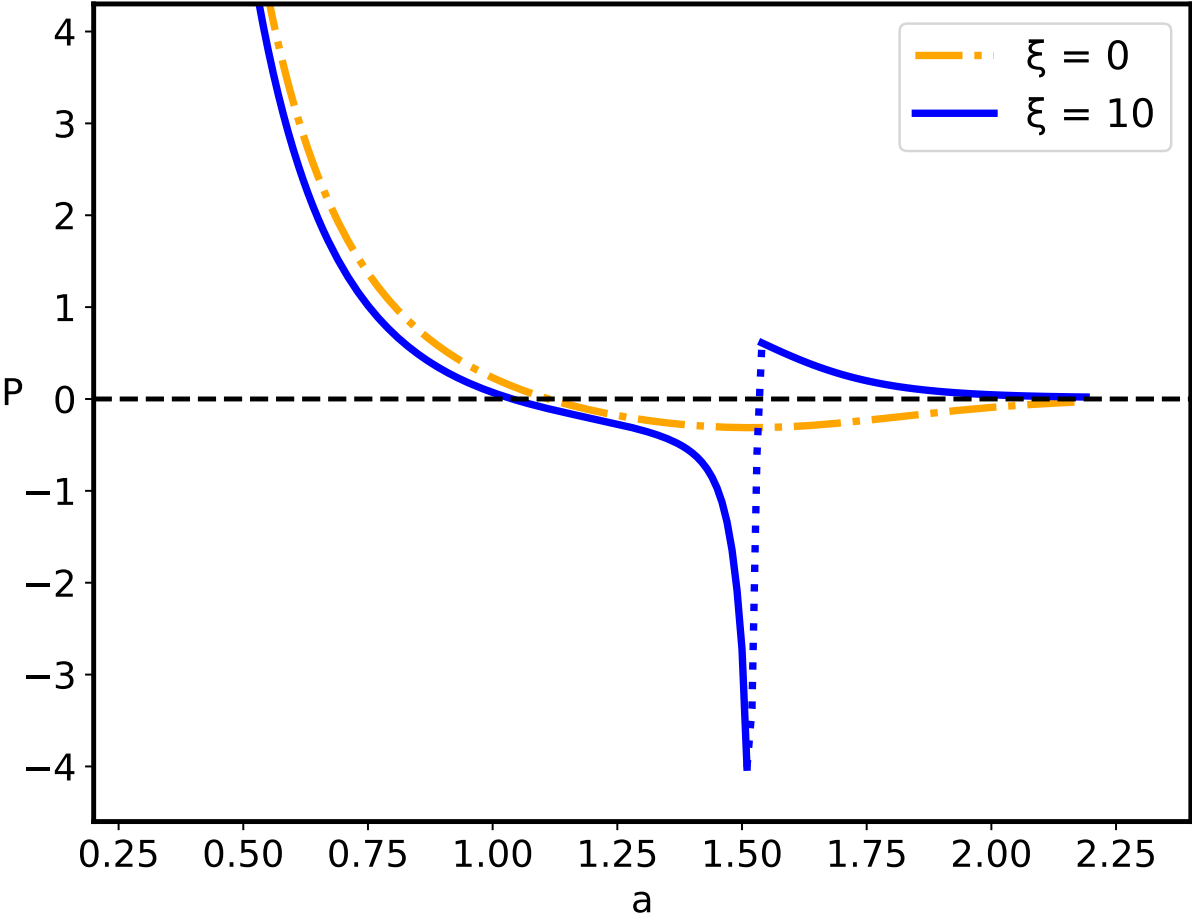
$$\Phi''(z) = -\left(6\mathcal{E}_0 + \alpha v z\right)\Phi(z) + \frac{3}{\tilde{v}} \frac{\Phi(z)}{\mu + v\Phi^2(z)}, \quad (4)$$

որտեղ Φ^2 մոնոմերների խտության ֆունկցիան է, \mathcal{E}_0 համապատասխան սեփական արժեքը, v -ն մոնոմերների կոնցենտրացիան, $\alpha = 12\pi p^2 l^2 \lambda_B$, p -ն մասնակի լիցքի գործակիցը, իսկ λ_B Բյերումի երկարություն: Համակարգի բերված ազատ էներգիան ներկայացվում է՝

$$\begin{aligned} \tilde{A} = \mathcal{E}_0 + \frac{\alpha v}{12} a + \frac{\alpha v}{12} \int_{-a}^a dz \int_{-a}^a dz' |z - z'| \Phi^2(z') \Phi^2(z) - \int_{-a}^a dz \frac{\Phi^2(z)}{2\tilde{v}\mu + 2\tilde{v}v\Phi^2(z)} + \\ + \frac{1}{2\tilde{v}v} \int_{-a}^a dz \ln\left(1 + \frac{v}{\mu} \Phi^2(z)\right), \end{aligned} \quad (5)$$

որտեղ $\tilde{A} = A/(K_B T v l)$, A միավոր մակերեսին հասնող ազատ էներգիան է, K_B -ն Բոլցմանի կոնստանտը, T -ն՝ ջերմաստիճանը, l -ը՝ Կուլոնի երկարությունը, իսկ $2a$ -ն՝ երկու թաղանթների

միջև հեռավորությունը: Համակարգի ճնշումը հաշվված է որպես $P = -\frac{1}{l} \frac{\partial \tilde{A}}{\partial a}$ և ներկայացված է Պատկեր 1-ում: Ինչպես երևում է ստորև $\xi \neq 0$ անկարգավորված վիճակում գոյություն ունի փուլային անցում բացասականից դրական ճնշում a_c կրիտիկական հեռավորության վրա:



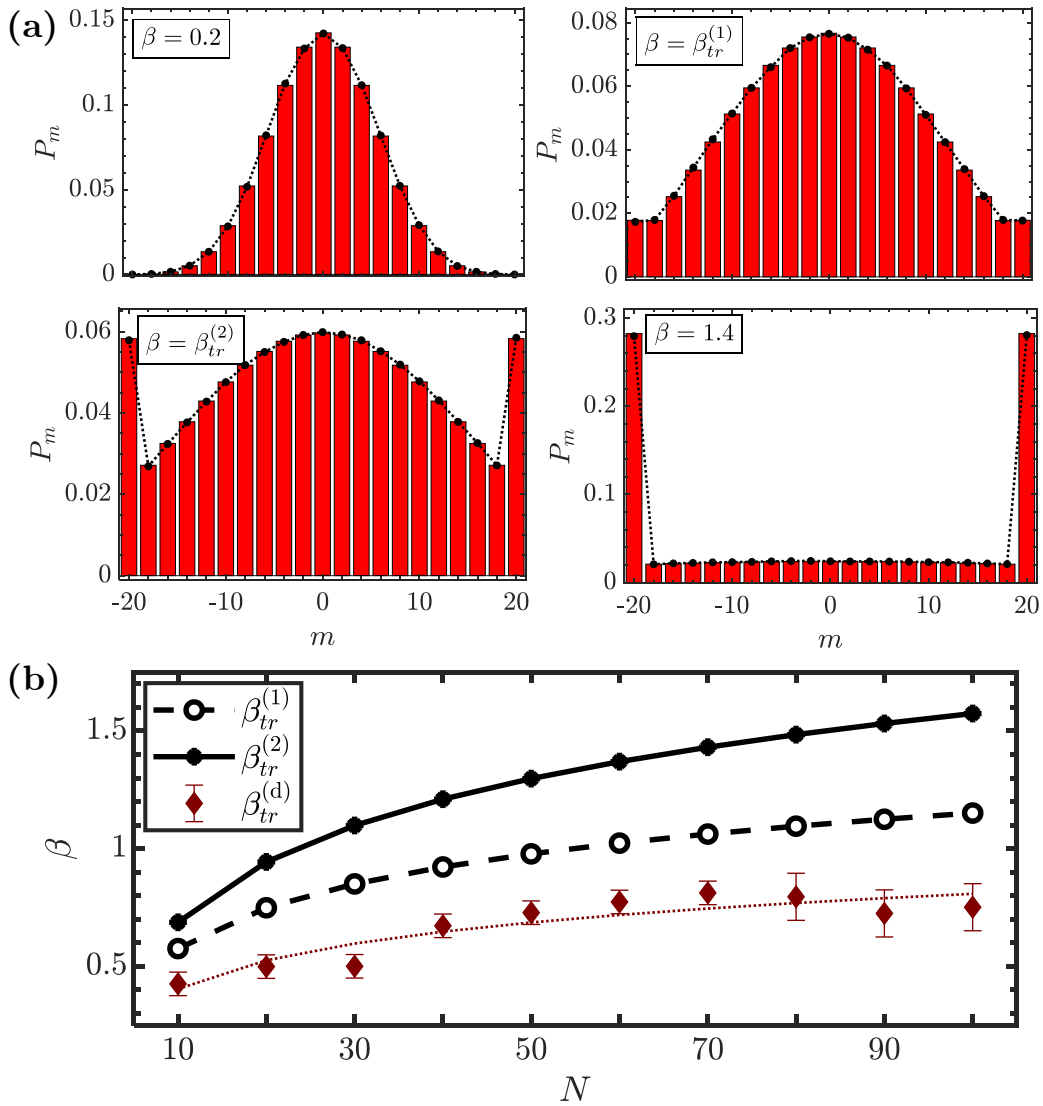
Պատկեր 1: Միջթաղանթային ճնշման կախվածությունը a -ից: $a_c = 1,525$ կրիտիկական հեռավորության ժամանակ տեղի է ունենում պոլիէլեկտրոլիտային շղթայի առաջին կարգի փուլային անցում, որը բնութագրվում է փոխազդեցության ճնշման ընդհատ թռիչքով, որը փոխվում է ձգողից դեպի վանող՝ միջթաղանթային հեռավորության կրիտիկական արժեքից a_c անցնելու դեպքում:

Երկրորդ Գլուխը նվիրված է միաչափ համակարգերում տեղի ունեցող ջերմային անցումներին: Վերլուծության պարզության համար ընտրված է Իզինգի մոդելը: Այս մոդելում մենք գտել ենք ջերմային անցում իր անցման ջերմաստիճաններով, որոնք նման են առաջին կարգի փուլային անցումների ջերմաստիճաններին: Այս անցումները հայտնվում են տարբեր միջին

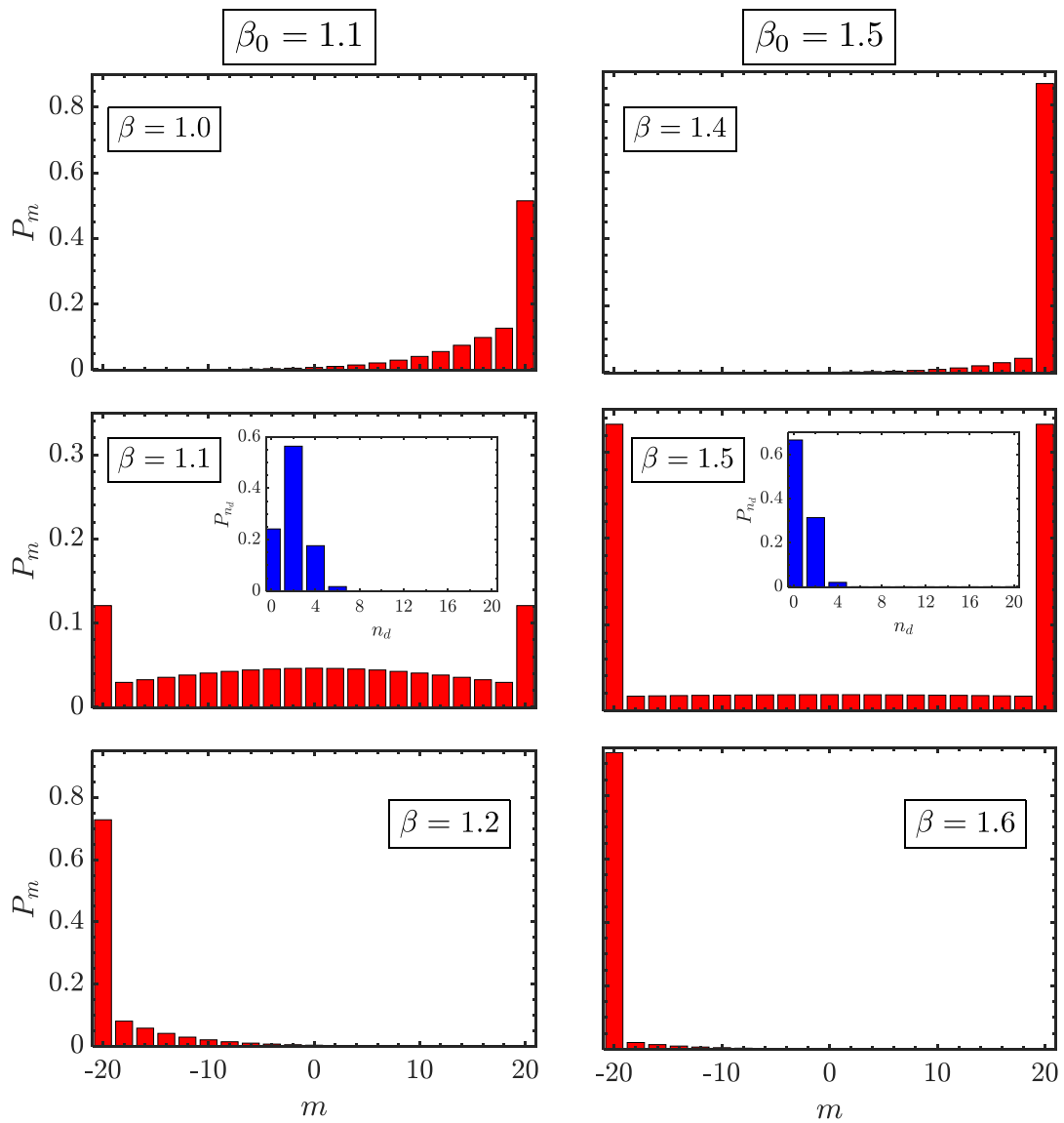
մագնիսացվածությամբ վիճակների հավանականության բաշխումներում: Առանց արտաքին դաշտի ջերմաստիճանն իջեցնելիս նախ ֆերոմագնիսական վիճակների հավանականությունները դառնում են ավելի մեծ, քան մագնիսացման հարևան արժեքները (անցման առաջին ջերմաստիճան) և ապա ավելի մեծ, քան մյուս բոլոր հավանականությունները (անցման երկրորդ ջերմաստիճան), ինչպես երևում է Պատկեր 2-ում:

Արտաքին դաշտի առկայության դեպքում այս անցումները ուսումնասիրելիս ստանում ենք այս դաշտի համար կրիտիկական արժեք: Այս արժեքից ավելի մեծ դաշտերը հանգեցնում են մեր երկու անցումային ջերմաստիճանների միաձուլմանը, արդյունավետորեն երկու անցումները միաժամանակ են տեղի ունենում: Այս անցումների դինամիկ հատկությունները ուսումնասիրելու համար չափվել են միջին մագնիսացման և տիրույթի պատերի թվի բնակեցվածության ժամանակը դինամիկ Մոնտե Կառլո սիմուլյացիաներում: Օգտագործելով բնակեցվածության ժամանակները հավանականությունների փոխարեն գտնվել է դինամիկ անցումային ջերմաստիճանը, որը ներկայացված է Պատկեր 2-ում:

Գծելով պարոյրության հավանականության և տիրույթի պատերի թվի բաշխումները պարոյր-կծիկ անցումների Զիմ Բրեգ մոդելի համար, մենք գտնում ենք, որ պարոյր-կծիկ անցումը դառնում է ավելի կտրուկ, եթե պարոյր-կծիկ անցման ջերմաստիճանը ցածր է համապատասխան երկրորդ անցումային ջերմաստիճանից՝ զրո դաշտով Իզինգի մոդելում Պատկեր 3:



Պատկեր 2: (a) m մագնիսացման P_m հավանականության բաշխումը $N = 20$ սպիներով շղթայի համար տարբեր հակադարձ ջերմաստիճաններում $\beta = 1/T$ ($1/J$ միավորներով) և զրոյական մագնիսական դաշտով $h = 0$: Լցված գծերը ներկայացնում են անալիտիկ արդյունքները, մինչդեռ աստղով նշանները, որոնք միացված են կետագծերով, համապատասխանում են Մոնտե Կառլո սիմուլյացիաների արդյունքներին: (b) Առաջին և երկրորդ հակադարձ անցումային ջերմաստիճաններն կախված սպիների քանակից N , $\beta_{tr}^{(1)} = 0,25 \ln(N)$ և $\beta_{tr}^{(2)} \approx 0,3864 \ln(N) - 0,21055$ ($1/J$ միավորներով), ինչպես ստացվել է P_m բաշխումներից; և դինամիկ հակադարձ ջերմաստիճանը $\beta_{tr}^{(d)}$ (շագանակագույն շեղանկյուններով՝ սխալանքի նշումներով), ինչպես ստացվել է Մոնտե Կառլո սիմուլյացիաներից՝ համապատասխանությամբ $\beta_{tr}^{(d)} \approx 0,1755 \ln(N)$ (կետագիծ):



Պատկեր 3: $N = 20$ երկարությամբ շղթայի պարույրության P_m հավանականության բաշխումը $\beta_0 = 1, 1$ (ձախ սյունակ) և $\beta_0 = 1, 5$ (աջ սյունակ) հակադարձ անցման ջերմաստիճանով $\beta <, =, >$ β_0 ($1/J$ միավորներով): Կենտրոնական վահանակների ներդիրները ցույց են տալիս տիրույթի պատերի թվի n_d համապատասխան հավանականության P_{n_d} բաշխումը $\beta = \beta_0$ դեպքում:

Երրորդ Գլխում քննարկվում է լոկալ էներգիայի խտության խնդիրը քվանտային մեխանիկայում: Քանի որ կենսապոլիմերների կառուցվածքը նկարագրող շատ մոդելներ հանգում են Շրյոդինգերանման հավասարումների, սա կարևոր խնդիր է և քվանտային մեխանիկայի, և՛ բիոֆիզիկայի համար: Քվանտային մեխանիկայի մեջ Համիլտոնի և կորոդինատի օպերատորները կոմուտատիվ չեն, ինչը արգելում է Համիլտոնյանի և կորոդինատի միաժամանակյա չափումը: Լագրանժյան խտության ֆունկցիայի մոտեցումը նույնպես ապարդյուն է, քանի որ Շրյոդինգերի Լագրանժյան խտությունը ընտրված է լրիվ ածանցյալի ճշտությամբ: Արդյունքում, փոխելով նշված Լագրանժի էներգիայի խտությունը, կարելի է ստեղծել բազմաթիվ հնարավոր էներգիայի խտություններ՝ առաջ բերելով այս մեծության ընտրության խնդիրը:

Այս խնդիրը ֆորմալիզացվում է էներգիայի խտության նախընտրելի պայմանների բազմությամբ:

1. էներգիայի խտությունը պիտի լինի քառակուսային ալիքի ֆունկցիայից (կամ գծային խտության մատրիցից)՝ լոկալությունը պահպանելու համար: Այլ կերպ ասած՝ մարգինալիզացված խտությունը պետք է վերաբերվի քվանտային ենթահամակարգին:
2. էներգիայի խտությունը պետք է լոկալ պահպանվի:
3. էներգիայի խտության ինտեգրալը պիտի լինի հավասար ընդհանուր էներգիային:
4. Կամընտիր հատկություն է էներգիայի խտության կինետիկ մասի դրական լինելը:
5. Մեկ այլ կամընտիր հատկություն է էներգիայի սեփական վիճակներում էներգիայի և մասնիկի խտությունների համընկումը:

Առաջին կամընտիր հատկության հնարավոր հիմնավորումն այն է, որ կինետիկ էներգիան դրական օպերատոր է, և, հետևաբար, դրա խտությունը նույնպես պիտի լինի դրական: Երկրորդ կամընտիր հատկության հիմնավորումն այն է, որ էներգիայի սեփական վիճակները լավ սահմանված էներգետիկ վիճակներ են, և, որպես այդպիսին, այդ վիճակներում կորոդինատի և էներգիայի անորոշությունների միջև տարբերություն չպետք է լինի: Կարևոր է, որ այս երկու պայմանները հակասում են միմյանց, օրինակ՝ թունելային անցումներով սեփական վիճակներում, որտեղ ընդհանուր էներգիան փոքր է պոտենցիալ էներգիայից, և, այնուամենայնիվ, այդ կորոդինատի հավանականությունը զրոյական չէ:

Լավ մոտիվացված էներգիայի խտություն գտնելու համար մենք սկսում ենք հնարավորինս ֆունդամենտալ, ռեյատիվիստիկ համակարգից՝ Դիրակի հավասարումից: Օգտագործելով դրա էներգիայի իմպուլսի տենզորը և գնալով դեպի ոչ ռեյատիվիստիկ սահմանը՝ մենք գտնում ենք լոկալ պահպանված ոչ ռեյատիվիստիկ էներգիայի խտություն, որը սահմանվում է Տերլեցկի Մարգենաու Հիլ քվազիհավանականության միջոցով (որն այսպիսով ընտրվում է մնացած բոլոր քվազի հավանականություններից):

$$\rho = \text{tr} \left[R \{ H, |\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}| \} \right], \quad (6)$$

որտեղ R -ը խտության մատրիցն է իսկ H -ը՝ Շրյոդինգերի Համիլտոնյանը: Այն համընկնում է էներգիայի թույլ արժեքի հետ, ինչպես նաև հիդրոդինամիկ էներգիայի հետ Մադելունգի ներկայացման մեջ, որը ներառում է Բոհմի քվանտային պոտենցիալը: Այս արդյունքները կիրառելի են վիճակներում, որտեղ լոկալ էներգիայի ներկայացումը էական է, օրինակ՝ մենք ցույց ենք տալիս, որ էներգիայի փոխանցման արագությունը ազատ ալիքային փաթեթների մեծ դասի համար (ներառյալ Գաուսի և էյրիի ալիքային փաթեթները) ավելի մեծ է, քան դրա խմբային (այսինքն՝ կորորդինատի փոխանցման) արագությունը:

Մենք նաև գտնում ենք սպինին առնչվող լոկալ էներգիայի նոր ձև, որը վերջավոր է ոչ ռեյատիվիստիկ սահմանում և անջատ մնացած էներգիայից պահպանվում է լոկալ: էներգիայի այս ձևն ունի հոլոգրաֆիկ բնույթ, այսինքն՝ դրա արժեքը տվյալ ծավալի համար արտահայտվում է այս ծավալի մակերևույթի միջոցով և նրա ընդհանուր էներգիան զրո է:

$$\rho_s = \nabla \mathbf{Y}, \quad \mathbf{Y} = \frac{\hbar}{4m} \mathfrak{R} \text{tr} \left[|\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{x}| \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{P} R \right], \quad (7)$$

որտեղ $\boldsymbol{\sigma}$ -ն Պաուլիի վեկտորն է իսկ \mathbf{P} -ն իմպուլսի օպերատորը:

Չորրորդ Գլխում քննարկվում են գծային փոխազդեցությամբ բոզոնային համակարգերի վրա դրված սահմանափակումները: Ֆրյոլիխի դինամիկ կոնդենսացիան տեսական երեվույթ է, որը սերտորեն կապված է Բոզե էնշտեյն կոնդենսացման հետ, որն առաջարկվում է որպես բիոֆիզիկայում բազմիցս հանդիպող մեխանիզմ: Դասական մեթոդներով ուսումնասիրված այս երևույթը առաջ է բերում վարկած, որ կոնդենսացիայի դինամիկ առաջացման համար պարտադիր է ոչ գծային փոխազդեցությունների գոյությունը: Աշխատելով զուտ քվանտային ռեժիմում, մենք ցույց ենք տալիս վարկածի ճշտությունը սկզբնական վիճակների լայն

դասի համար և մի հարաբերություն, որն ավելի ընդհանուր է, քան թերմոդինամիկայի երկրորդ օրենքը՝ գծային փոխազդեցությունների ժամանակ ընդհանուր միջին լրացվածության թիվը (Ֆոնոնների թիվը) չի նվազում: Այս հարաբերությունը կապված է աղմուկի բարձրացման (կամ ջեռուցման) հետ և նման է երկրորդ օրենքին: Մենք ցույց ենք տալիս, որ ջեռուցումը կարող է շրջվել մոդերի միջև ոչ գծային փոխազդեցությունների միջոցով: Նրանք կարող են սառեցնել ջերմային վիճակում գտնվող համակարգը (նվազեցնել միջին լրացվածության լրիվ թիվը և դրա հետ կապված աղմուկը)՝ պայմանով, որ մոդերի հաճախականությունները տարբեր են: Նման երևույթ չի կարող լինել էներգետիկ սառեցման դեպքում, որտեղ հավասարակշռված համակարգի միայն մի մասն է սառում:

ԵԶՐԱԿԱՑՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐ

1. Ստացվել է ճնշման ոչ հավասարակշիռ ընդհանուր հավասարում քվանտային թերմոդինամիկայից՝ որպես վիրիալ թեորեմի մոդիֆիկացիա: Ապացուցվել է no-go թեորեմ, որն արգելում է բացասական ճնշումը կոնկրետ պայմաններ դեպքում: Կառուցված են պարզ քվանտային և դասական մոդելներ, որոնցում ցույց է տրված բացասական ճնշումով վիճակների առկայությունը: Ուսումնասիրվել է անկարգավորված պոլիէլեկտրոլիտային համակարգ միջին դաշտի մոտավորությամբ, և ցույց է տրվել, որ այս համակարգում կա առաջին կարգի փուլային անցում բացասականից դեպի դրական ճնշում:
2. Վերջավոր միաչափ Իզինգի մոդելում ցույց է տրվել, որ տեղի է ունենում անցում կարգավորվածության պարամետրի հավանականության բաշխումում: Ցույց է տրվել, որ այս անցումը նման է առաջին կարգի փուլային անցումներին, քանի որ այն ունի երկու անցումային ջերմաստիճաններ: Այս անցումային ջերմաստիճանների կարևորությունը ցուցադրվել է կենսապոլիմերների կոոպերատիվ անցումների համատեքստում:
3. Լոկալ էներգիայի խտության ընտրության խնդիրը ոչ ռելյատիվիստիկ քվանտային մեխանիկայում ձևակերպվել է հատկությունների բաց բազմությամբ, որոնք նման արժեքը պիտի ունենա: Լոկալ էներգիայի խտությունը ընտրվել է իր կառավարող հատկության հետ միասին՝ հաշվելով Դիրակի հավասարման ոչ ռելյատիվիստիկ սահմանը: Անհավասարություն է ներկայացվել էներգիայի և կոորդինատի փոխանցման արագությունների վերաբերյալ, որը գործում է ալիքային փաթեթների մեծ մասի համար: Դիրակի հավասար-

րումից ստացվել է նոր ոչ ռելյատիվիստիկ լոկալ պահպանվող էներգիայի խտություն, որը կախված է համակարգի սպինինգ և իմպուլսից:

4. Բավականին ընդհանուր բոզոնային համակարգերի համար ապացուցվել է, որ գծային փոխազդեցությունները չեն կարող նվազեցնել համակարգի ընդհանուր լրացվածության թիվը: Ֆրյուլիխի արդյունքը կոնդենսացիայի համար պարտադիր ոչ գծային փոխազդեցությունների գոյության մասին ապացուցվել է քվանտային ռեժիմում: Ուսումնասիրվել է ոչ գծային փոխազդեցություններով առավելագույն սառեցումը իր արտադրողականության և օգտակար գործողության գործակիցների սահմաններով: Ցուցադրվել է հասանելի սառեցման համար ոչ գծային Համիլտոնյանի օրինակ:

ԱՏԵՆԱԽՈՍՈՒԹՅԱՆ ԹԵՄԱՅՈՎ ՀՐԱՏԱՐԱԿՎԱԾ ՀՈԴՎԱԾՆԵՐԻ ՑՈՒՑԱԿ

1. A. Hovhannisyán, V. Stepanyán, and A. E. Allahverdyán. Photon cooling: Linear versus non-linear interactions. *Phys. Rev. A*, 106:032214, 2022
2. V. Stepanyán, A. F. Tzortzakakis, D. Petrosyán, and A. E. Allahverdyán. Thermal transitions in a one-dimensional, finite-size ising model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2024:033202, 2024
3. V. Stepanyán, A. V. Badasyán, V.F. Morozov, Y. Sh. Mamasakhlisov, and R. Podgornik. Sequence disorder-induced first order phase transition in confined polyelectrolytes. *J. Chem. Phys.*, 161:134906, 2024.
4. V. Stepanyán and A. E. Allahverdyán. Energy densities in quantum mechanics. *Quantum*, 8:1223, 2024
5. V. Stepanyán. No Bose-Einstein Condensation in Closed Systems with Linear Dynamics. *Arm. J. Phys.*, 17:65, 2024

Stepanyan Varazdat

Quantum and Classical Phenomena in the Structure of Biopolymers

Abstract

The aim of the thesis is to apply theoretical methods and models of quantum and classical physics to study the experimentally observed or theoretically predicted phenomena important in the structural properties of biopolymers and to further develop the connections between quantum mechanics and biophysics. The thesis studies several extreme thermodynamic conditions such as negative thermodynamic pressure and dynamic boson condensation which are thought to be vital for the biological functions of biopolymers. Different structural transitions within the context of these extreme thermodynamic conditions have been studied.

1. A general equation for non-equilibrium pressure is derived from quantum thermodynamics as a modification of the virial theorem. A no-go theorem is proven forbidding negative pressure if specific conditions are met. A quantum and a classical toy models are constructed showing negative pressure in both cases. A disordered polyelectrolyte system is studied with mean field approximation, showing that this system undergoes a first order phase transition from negative to positive pressure.
2. In the context of the finite one dimensional Ising model it is shown that a transition occurs with respect to the distribution of the order parameter. It is shown that this transition is similar to the first order phase transition in that it has two transition temperatures. The importance of these transition temperatures are shown in the context of cooperative transitions in biopolymers.
3. The problem of choice of a local energy density in non-relativistic quantum mechanics is formalized with an open set of properties that such a value should have. A local energy density is chosen along with its governing property by taking the non-relativistic limit of the Dirac equation. An inequality is presented about energy and probability transfer velocities that holds for most wave-packets. A new non-relativistic locally conserved energy density is derived from the Dirac equation which depends on the spin and momentum of the system.

4. It is proven for a very general boson system that linear interactions cannot decrease the total occupation number of the system. Frohlich's result of the requirement of non-linear interactions for condensation is proven in a quantum regime. The maximum cooling with non-linear interactions is studied with bounds on the efficiency and the coefficient of performance in different limits. An example of achievable cooling is shown for a non-linear Hamiltonian.

Степанян Вараздат

Квантовые и классические явления в структуре биополимеров

Абстракт

Целью диссертации является применение теоретических методов и моделей квантовой и классической физики для изучения экспериментально наблюдаемых или теоретически предсказанных явлений, важных для структурных свойств биополимеров, и дальнейшее развитие связей между квантовой механикой и биофизикой. В диссертации изучаются несколько экстремальных термодинамических условий, таких как отрицательное термодинамическое давление и динамическая бозонная конденсация, которые считаются жизненно важными для биологических функций биополимеров. Были изучены различные структурные переходы в контексте этих экстремальных термодинамических условий.

1. Общее уравнение для неравновесного давления выводится из квантовой термодинамики как модификация теоремы вириала. Доказана теорема запрета, запрещающая отрицательное давление при выполнении определенных условий. Построены квантовая и классические простые модели, показывающие отрицательное давление в обоих случаях. Неупорядоченная полиэлектролитная система изучается с помощью приближения среднего поля, показывающего, что эта система претерпевает фазовый переход первого рода от отрицательного давления к положительному.
2. В контексте конечной одномерной модели Изинга показано, что переход происходит относительно распределения параметра порядка. Показано, что этот переход аналогичен фазовому переходу первого рода тем, что имеет две температуры перехода. Показана важность этих температур перехода в контексте кооперативных переходов биополимеров.
3. Проблема выбора локальной плотности энергии в нерелятивистской квантовой механике формализуется с открытым набором свойств, которыми должно обладать такое значение. Локальная плотность энергии выбирается вместе с ее определяющим свойством путем принятия нерелятивистского предела уравнения Дирака. Представлено неравенство относительно скоростей переноса энергии и вероятности, которое справедливо для большинства волновых пакетов. Из уравнения Дирака выводится новая нерелятивистская

локально сохраняющаяся плотность энергии, зависящая от спина и импульса системы.

4. Доказано для очень общей системы бозонов, что линейные взаимодействия не могут уменьшить общее число заполнения системы. Результат Фрёлиха о требовании нелинейных взаимодействий для конденсации доказан в квантовом режиме. Максимальное охлаждение с нелинейными взаимодействиями изучается с ограничениями на эффективность и коэффициент полезного действия в различных пределах. Показан пример достижимого охлаждения для нелинейного гамильтониана.

