

УДК 539.216:519.876.5

ТРАНСПОРТ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛАХ В НЕДОДЕМПФИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

И.Г. Марченко^{1,2}, И.И. Марченко³

¹Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина

²Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина
пл. Свободы 4, г. Харьков, 61077, Украина

³НТУ «Харьковский политехнический институт»
ул. Фрунзе 21, г. Харьков 61145, Украина

E-mail: march@kipt.kharkov.ua

Received July 12, 2013, accepted September 19, 2013

В работе методами компьютерного моделирования в широком диапазоне температур исследуется подвижность частиц под воздействием внешней силы в пространственно-периодических потенциалах. На основе предыдущих и полученных в настоящей статье данных показано, что недодемпфированное движение частиц в периодическом потенциале можно рассматривать как передемпфированное движение в пространстве скоростей в эффективном двухъямном потенциале. Сформулирована феноменологическая модель движения ансамбля частиц в недодемпфированном случае. Получены простые аналитические выражения для подвижности и динамической температуры частиц. Результаты аналитических расчетов согласуются с данными численного моделирования.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: диффузия, компьютерное моделирование, уравнения Ланжевена, периодические потенциалы, подвижность

PARTICLE TRANSPORT IN SPACE-PERIODIC POTENTIALS IN UNDERDAMPED SYSTEMS

I.G. Marchenko^{1,2}, I.I. Marchenko³

¹National Scientific Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology"
1, Akademicheskaya St., Kharkov, 61108, Ukraine

²V.N. Karazin Kharkov National University
4 Svobody Sq., Kharkov, 61077, Ukraine

³NTU „Kharkov Polytechnic Institute”
21 Frunze St., Kharkov, 61145, Ukraine

This scientific paper uses the methods of computer simulation to study the motion of particles in a washboard potentials in a wide temperature range. Using the previous data and the data obtained for this scientific paper we showed that the underdamped motion of particles in a spatial periodic potential can be considered as the overdamped motion in the velocity space in the effective double-well potential. A phenomenological model of the motion of the ensemble of underdamped particles has been formulated. Simple analytic expressions for the particle mobility and diffusion coefficient have been derived. The results of analytical computations match well with numerical simulation data.

KEY WORDS: diffusion, computer simulation, Langevin equation, space-periodic potentials, mobility

ТРАНСПОРТ ЧАСТИНОК У ПРОСТОРОВО-ПЕРІОДИЧНИХ ПОТЕНЦІАЛАХ У НЕДОДЕМПФІРОВАНІХ СИСТЕМАХ

И.Г. Марченко^{1,2}, И.И. Марченко³

¹Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»
вул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна

²Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
пл. Свободи 4, м. Харків, 61077, Україна

³НТУ «Харківський політехнічний інститут»
вул. Фрунзе 21, м. Харків 61145, Україна

У роботі методами комп'ютерного моделювання у широкому діапазоні температур вивчається рухомість частинок під впливом зовнішньої сили у просторово періодичних потенціалах. На базі попередніх та отриманих у теперішній статті даних показано, що недодемпфований рух частинок у періодичному потенціалі можна розглядати як передемпфований рух у просторі швидкості в ефективному двох ямному потенціалі. Сформульована феноменологічна модель руху ансамбля частинок у недодемпфированому випадку. Отримані прості аналітичні вирази для рухомості та динамічної температури. Результати аналітичних розрахунків співпадають з даними численного моделювання.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: дифузія, комп'ютерне моделювання, рівняння Ланжевена, періодичні потенціали, рухливість

Несмотря на то, что транспорт и диффузия частиц в пространственно-периодических потенциалах изучаются продолжительное время [1,2], эти исследования по-прежнему продолжают приносить неожиданные результаты. Так, в частности, в работе [3] было показано, что в системах с малым трением коэффициент диффузии частиц может экспоненциально возрастать с уменьшением температуры. Такие исследования имеют не только общетеоретический, но и практический интерес. Они тесно связаны с физическими процессами,

протекающими в контактах Джозефсона, в системах фазовой автоподстройки частоты, в суперионных проводниках и пр. [1]. Особый интерес вызывает изучение, так называемых, Броуновских моторов [2,4]. Исследование особенностей транспорта атомов, а так же точечных и линейных дефектов кристаллической решетки во внешних полях представляются так же чрезвычайно важными для развития новых технологий в материаловедении.

Хотя были достигнуты значительные успехи в аналитических исследованиях диффузии и транспорта частиц в передемфированном случае [5], для систем с малой диссипацией энергии разработанные методы мало приемлемы.

Целью данной работы является построение простой феноменологической модели транспорта частиц в недодемфированных системах. Для этого мы продолжаем исследования, начатые в работе [3] и методом компьютерного моделирования изучаем изменение подвижности и диффузии частиц в широком температурном интервале. А затем, используя полученные данные, формулируем феноменологическую модель и сравниваем результаты аналитических вычислений и компьютерного моделирования.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рассмотрим движение ансамбля частиц, находящихся в контакте с классическим тепловым резервуаром в периодическом потенциале. Для упрощения рассмотрен только случай одномерной диффузии в пространственно-периодическом потенциале $U(x)$. Движение частиц описывалось уравнениями Ланжевена:

$$m \ddot{x} = -\frac{\partial}{\partial x} U(x) - \gamma \dot{x} + F + \xi(t), \quad (1)$$

где x – координата частицы на плоскости, m – ее масса, F – постоянная сила, действующая на частицу, $U(x)$ – потенциальная энергия частицы, γ – коэффициент трения. Член $\xi(t)$ описывает термические флуктуации. Точка сверху означает дифференцирование по времени. Предполагается, что шум является гауссовым белым и соответственно для термических флуктуаций выполняется соотношение:

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = 2\gamma k T \delta(t - t'), \quad (2)$$

где k – постоянная Больцмана, T – температура.

Потенциальная энергия частицы задавалась следующим выражением:

$$U(x) = -\frac{U_0}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{a} x\right), \quad (3)$$

где a – постоянная одномерной решетки.

На движущуюся частицу действует периодическая в пространстве сила со стороны кристаллической решетки $F_{lat} = F_0 \sin\left(\frac{2\pi}{a} x\right)$, где $F_0 = \frac{\pi}{a} U_0$.

Параметры используемого периодического потенциала были теми же что и в работах [3,6]. Величина активационного барьера составляла 80 мэВ, что является типичной величиной для диффузии атомов по плотноупакованным плоскостям металлов с ГЦК и ГПУ структурой. Постоянная одномерной решетки a была выбрана равной 2 Å.

Уравнения движения (1) для каждой частицы решались численно с шагом по времени $\Delta t \approx 0,1$ фмтс, что составляет менее 1/100 периода собственных колебаний. Статистическое усреднение проводилось по ансамблю с количеством частиц $N = 4 \cdot 10^4$. Для проверки полученных результатов отдельные вычисления проводились с $N = 4 \cdot 10^6$. Начальные условия задавались следующим образом. Частица помещалась в начале координат и ей случайным образом сообщалась скорость, имеющая Максвелловское распределение по температуре. Затем проводилась термализация системы в течение 10^4 временных шагов. После этого частица с имеющейся скоростью перемещалась в первую элементарную ячейку.

Для сопоставления данных полученных в данной работе с данными других авторов использовались безразмерные величины температуры T' и трения γ' [1,7].

$$T' = \frac{Tk}{U_0}; \quad \gamma' = \frac{\gamma a}{(mU_0)^{1/2}}. \quad (4)$$

Поскольку в работе изучалось недодемфированное движение частиц, то рассматривался только случай $\gamma' < 1$.

В предыдущей работе [3] исследовались температурные зависимости коэффициентов диффузии ансамбля частиц, движущихся под воздействием внешней силы. В данной статье рассматривается направленный транспорт этих частиц. В качестве характеристики этого движения использовалась величина средней скорости ансамбля частиц:

$$\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} VN(V)dV, \quad (5)$$

где $N(V)$ - нормированная функция распределения частиц по скоростям.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТА ЧАСТИЦ

На рис. 1 приведены зависимости подвижности $\mu = \frac{\langle V \rangle}{F}$ умноженной на коэффициент трения от действующей силы для различных температур, полученные в результате компьютерного моделирования. Как известно, при малых значениях силы, величина μ является постоянной, не зависящей от F . В этом случае μ удовлетворяет соотношению Эйнштейна: $\mu = \frac{D}{kT}$. Эта зависимость приведена на вставке рис. 1 штриховой линией. В пространственно периодических структурах коэффициент диффузии D частиц в решетке, удовлетворяет соотношению Арениуса: $D = D_0 \exp(-U_0/kT)$. На вставке пунктирной линией так же представлена зависимость $\langle V \rangle = \mu F$ для случая движения частиц в бесструктурной среде с трением. Как видно из рисунка, в области больших значений силы так же выполняется соотношение Эйнштейна. Однако коэффициент диффузии в этом случае соответствует движению частиц в среде с трением: $D = kT/\gamma$. Из рис. 1 следует, что подвижность при произвольном значении силы находится между двумя зависимостями, соответствующими соотношению Эйнштейна для периодической решетки и бесструктурной среды с трением. С уменьшением температуры происходит более резкий переход от одной функциональной зависимости к другой.

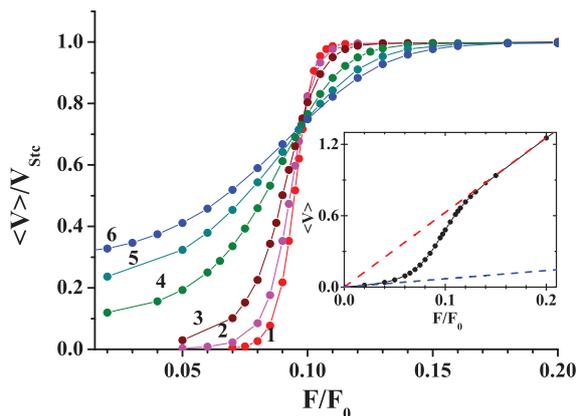


Рис. 1. Зависимость нормированной средней скорости $\langle V \rangle / V_{Stc} = \gamma \mu$ от величины приложенной силы для различных температур. $V_{Stc} = F/\gamma$. Коэффициент трения $\gamma' = 0,141$ 1 – $T' = 0,097$, 2 – $T' = 0,129$, 3 – $T' = 0,194$, 4 – $T' = 0,388$, 5 – $T' = 0,582$, 6 – $T' = 0,776$.

Вставка: Зависимость средней скорости от силы при $T' = 0.388$. Нижняя штриховая линия - соотношение Эйнштейна для частиц в периодической решетке, верхняя - для частиц в бесструктурной среде с трением.

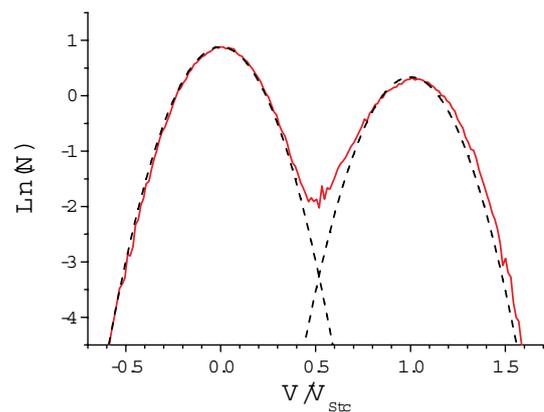


Рис. 2. Функция распределения частиц по скоростям для $F = 0,09F_0$. $T' = 0,129$, $\gamma' = 0,141$. Аппроксимация двумя гауссианами с дисперсией $(2kT/m)^{1/2}$ показана штриховой линией.

Качественно изменение подвижности частиц при малом трении описано в монографии Рискена [1]. В отсутствии тепловых флуктуаций, при последовательном увеличении силы, действующей на частицу, ее подвижность будет равна нулю вплоть до некоторого значения силы F_{03} . Это, так называемое, связанное решение. В точке $F = F_{03}$ подвижность скачкообразно изменяется до значения $\mu = 1/\gamma$. Частица будет иметь энергию больше чем энергия связи с узлом одномерной решетки и, совершая колебания, будет продвигаться в направлении действующей силы. При этом усредненная по периоду колебаний скорость частицы будет равна $\bar{V} = F/\gamma$. Это - бегущее (running) решение [1]. Если затем уменьшать силу, то подвижность будет оставаться постоянной вплоть до значения $F = F_{01}$, где произойдет обратный скачок к нулевой подвижности. Эта качественная картина гистерезиса часто используется при интерпретации результатов моделирования. Впервые методом компьютерного моделирования диффузия и транспорт частиц в недодемпфированном случае были

исследованы Марчезони [8]. В работах [9-10] более подробно изучались зависимости $\mu(F)$ для различных значений γ . В то же время, полученных данных недостаточно для установления функционального вида температурной зависимости подвижности частиц. В данной работе мы методами компьютерного моделирования подробно исследуем эту зависимость. Как видно из рис. 1, увеличение температуры приводит к тому, что кривые $\mu\gamma$ становятся более пологими. Однако, все они пересекаются в одной точке, соответствующей значению $F_{int} \approx 0,095F_0$. Это величина силы соответствует значению F_{02} по классификации Рискена.

Для объяснения особенностей поведения $\langle V \rangle$ рассмотрим, как изменяется функция распределения $N(V)$ с увеличением силы. Хотя давно известно, что функция $N(V)$ является бимодальной [1,9-10], необходимо знать ее вид и характер изменения с увеличением силы.

На рис. 2 приведено изменение $N(V)$ с возрастанием F взятое из предыдущей нашей статьи [3]. Один максимум соответствует нулевому значению скорости, а второй – $V = F/\gamma$. Несмотря на то, что при увеличении силы происходит существенное перераспределение частиц между связанным и бегущим решением, качественный вид кривых не изменяется. Функция $N(V)$ представляет собой сумму двух Гауссовых распределений с одинаковыми дисперсиями и разными средними, которые изображены пунктиром. Подгонка по методу наименьших квадратов показала, что во всем исследованном диапазоне действующих сил температурные зависимости $N(V)$ с хорошей точностью могут быть описаны следующей функциональной зависимостью:

$$N(V) = A \exp(-mV^2/2kT) + B \exp(-m\left(V - \frac{F}{\gamma}\right)^2/2kT), \quad (6)$$

где величины A и B зависят от F .

ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЙ ТРАНСПОРТ ЧАСТИЦ

Для объяснения температурных особенностей транспорта частиц качественная картина, описанная Рискеном [1], нуждается в уточнении. Вначале рассмотрим случай детерминированного движения частиц.

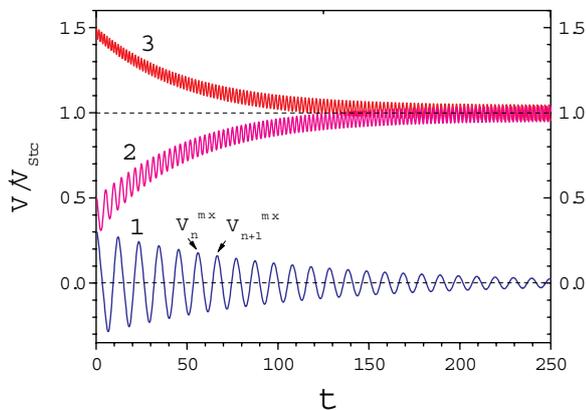


Рис. 3. Изменение во времени скорости частицы при различных начальных скоростях V_0 . $V_0 \cdot V_{Stc} = F/\gamma$.

Частицы могут находиться в различных начальных условиях. В частности, обладать различной начальной скоростью. При фиксированных значениях F и γ , в зависимости от величины начальной скорости V_0 , могут реализовываться различные решения уравнения движения. На рис. 3 приведены численные решения уравнений движения для различных начальных условий. Частица, на которую действовала постоянная во времени внешняя сила F , в момент времени $t = 0$ находилась в точке с минимальной потенциальной энергией. В зависимости от величины начальной скорости V_0 , частица с течением времени либо переходит в связанное состояние (кривая 1), либо совершает осциллирующее движение и движется со средней во времени скоростью $\bar{V}_F = \frac{F}{\gamma}$ (кривые 2 и 3). Как видно из рисунка,

существует некоторое критическое значение начальной скорости V_{cr} . При $V_0 < V_{cr}$ частица переходит в связанное состояние, а при $V_0 > V_{cr}$ возникает устойчивое бегущее решение. Как следует из рис. 3 даже значительное отклонение V_0 не влияет на величину \bar{V} , если не осуществляется переход через критическое значение V_{cr} .

Величина V_{cr} зависит от значений F и γ . На рис. 4 показана диаграмма существования связанных и бегущих решений в зависимости от величины действующей силы F при фиксированном значении $\gamma' = 0,141$. Если F меньше некоторого критического значения F_{cr1} в системе возможно только одно локализованное решение. При $F > F_{cr1}$ возникают два устойчивых решения: локализованное и бегущее. Реализация того или иного решения зависит от начальной скорости V_0 . При $V_0 < V_{cr}$ - это локализованное решение, а при $V_0 > V_{cr}$ - бегущее. Пунктирная линия, разделяющая решения, - это зависимость $V_{cr}(F)$ для данного коэффициента

трения.

На рис. 5 приведена зависимость $V_{cr}(F)$ для различных значений γ' . Как следует из рисунка, для всех исследованных значений γ' вблизи критической силы величина $V_{cr}(F)$ изменяется линейно с увеличением силы. Анализ данных компьютерного моделирования так же показывает, что величина F_{cr} является линейной функцией γ' при малом трении.

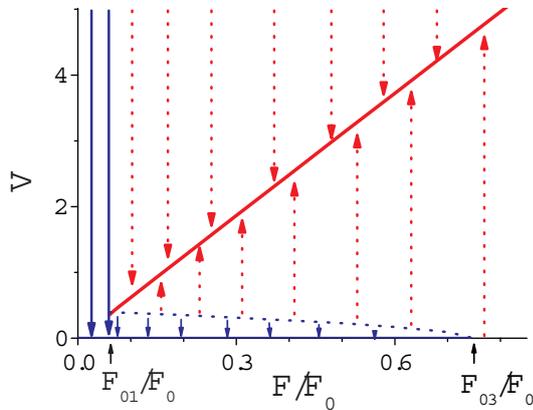


Рис. 4. Диаграмма существования связанных и локализованных решений в зависимости от величины действующей силы F . $\gamma' = 0,141$

Стрелками на рисунке показано стремление частицы к стационарному во времени решению. Сплошные линии – бегущее решение, пунктирные линии – локализованное решение. При $F < F_{01}$ существует только локализованное решение, а при $F \geq F_{03}$ - только бегущее решение. При промежуточных значениях силы существуют оба решения: при начальных значениях скорости меньше критической частица стремится к точке минимума потенциальной энергии; при больших значениях скорости реализуется бегущее решение со средней скоростью F/γ (сплошная красная линия). $\gamma' = 0,141$

значениям действующей силы. Каждый из графиков строился по совокупности данных, полученных для различных значений начальных скоростей частицы.

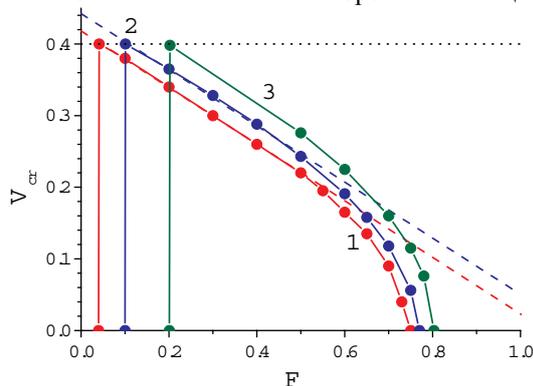


Рис. 5. Изменение критической скорости в зависимости от приложенной силы в отсутствие внешнего шума для различных коэффициентов трения. Штриховыми линиями показана линейная зависимость $V_{cr}(F)$. Кривая 1 соответствует $\gamma' = 0,141$, 2 – $\gamma' = 0,354$, 3 – $\gamma' = 0,707$.

Пунктирная линия – $V_{cr} = V_{cr}^0$

Из рисунка видно, что вблизи стационарных значений $V = 0$ и $V = F/\gamma$ ускорение линейно зависит от

Рассмотрим к чему приведет контакт ансамбля частиц с тепловым резервуаром. Обычно при исследовании движения такого ансамбля под воздействием внешней силы основное внимание уделяется термическим флуктуациям этой силы. Классическое рассмотрение этой ситуации приведено в гл. 11 книги Рискена [2]. При контакте с тепловым резервуаром при медленном изменении силы образовывается, так называемая, петля гистерезиса и возникает еще одно критическое значение силы $F = F_2$. В точке $F = F_2$ при стремлении температуры к нулю происходит скачок от нулевой подвижности к конечному значению.

Как было показано выше, не менее важны следующие вопросы. Если частица каким либо образом отклонилась от стационарного решения, к какому из двух стационарных решений она придет? Как быстро осуществляется этот переход? Для ответа на эти вопросы исследуем как происходит переход к стационарному решению в отсутствии теплового шума. На рис. 6 приведено изменение ускорения частиц в зависимости от скорости частицы. Дискретные значения $\dot{V}_{n+1/2}^{mx}$ ускорения частиц рассчитывалось по разнице двух последовательных во времени максимальных значениях скорости: $\dot{V}_{n+1/2}^{mx} = \frac{V_{n+1}^{mx} - V_n^{mx}}{t_{n+1} - t_n}$, где индекс внизу показывает номер дискретных событий. Схематично значения V_n^{mx} показаны на рис. 3. Представленные кривые соответствуют различным

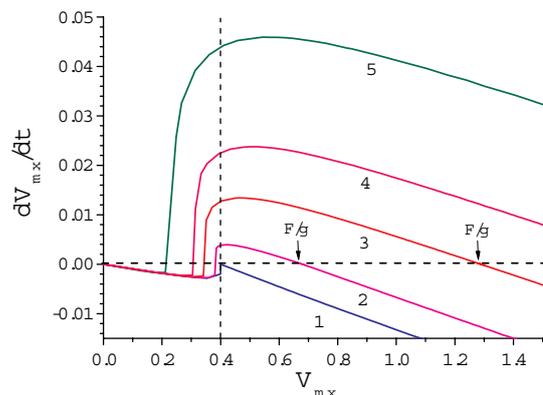


Рис. 6. Ускорения в зависимости от величины скорости для различных значений действующей силы. Стрелками показано точки с нулевым ускорением.

$T=0$. 1 – $F = 0,04F_0$, 2 – $F = 0,098F_0$, 3 – $F = 0,2F_0$, 4 – $F = 0,3F_0$, 5 – $F = 0,5F_0$.

скорости. При отклонении скорости от стационарных значений возникает ускорение которое “подталкивает” частицу к стационарному решению. При $V < V_{cr}$ ускорение пропорционально $\gamma/2$, а при $V > V_{cr}$ – γ . При контакте с тепловым резервуаром частицы ансамбля находятся под воздействием случайной силы и могут приобретать скорости которые отличаются от двух возможных стационарных значений ($V = 0$ или $V = F/\gamma$). Изменение функции распределения частиц по скоростям зависит от начального их распределения и действующего ускорения.

ЭВРИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ АНСАМБЛЯ ЧАСТИЦ В СИСТЕМАХ С МАЛОЙ ДИССИПАЦИЕЙ

Исходя из результатов компьютерного моделирования, сформулируем следующую эвристическую модель движения ансамбля частиц в системах с малой диссипацией. Будем считать, что частицы находятся в некотором эффективном потенциале скоростей $W(V)$, зависящем от величин γ и F . Внешне этот подход похож на метод, предложенный в книге [1]. Однако, вводимый потенциал имеет совсем другую размерность ($[V]^2/[t]$). Как это будет показано далее, предлагаемый подход приводит к качественно другим результатам, чем в [1]. Данная модель скорее отвечает модели движения активных частиц для некоего частного вида потенциала [11].

Движение ансамбля частиц можно описать следующими уравнениями:

$$\begin{cases} \dot{x} = V \\ \dot{V} = -\frac{\partial W(V, F)}{\partial V} + \zeta(t) \end{cases}, \quad (7)$$

где флуктуации случайной величины удовлетворяют соотношению:

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2Q\delta(t-t') = 2\frac{\gamma kT}{m}\delta(t-t'). \quad (8)$$

Исходя из (6) и данных приведенных на рис. 2 и рис. 6 постулируем следующий вид эффективного потенциала:

$$W(V) = \begin{cases} \frac{\gamma}{2}V^2 + c; V < V_{cr} \\ \frac{\gamma}{2}\left(V - \frac{F}{\gamma}\right)^2 + d; V > V_{cr} \end{cases}, \quad (9)$$

где c и d некоторые константы, которые могут быть получены из следующих условий.

Из непрерывности потенциала в точке V_{cr} следует:

$$\frac{\gamma}{2}V_{cr}^2 + c = \frac{\gamma}{2}\left(V_{cr} - \frac{F}{\gamma}\right)^2 + d. \quad (10)$$

Исходя из данных рис. 5, полагая, что при $V > V_{cr}$ существует два состояния с одним и тем же значением W , получаем условие нормировки функции распределения:

$$\int_{-\infty}^{\infty} N(V)dV = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{V_{cr}} \exp\left(-\frac{m}{2kT}V^2 - c\frac{m}{\gamma kT}\right)dV + 2\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} \int_{-V_{cr}}^{\infty} \exp\left(-\frac{m}{2kT}\left(V - \frac{F}{\gamma}\right)^2 - d\frac{m}{\gamma kT}\right)dV = 1 \quad (11)$$

Это - второе условие для определения констант c и d . Проведя интегрирование, получаем:

$$\exp\left(-c\frac{m}{\gamma kT}\right) \left[1 + \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{m}{2kT}}V_{cr}\right)\right] + 2\exp\left(-d\frac{m}{\gamma kT}\right) \left[1 - \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{m}{2kT}}\left(V_{cr} - \frac{F}{\gamma}\right)\right)\right] = 1. \quad (12)$$

Совместив уравнения (10)- (11) можно получить величины c и d .

В выражения (10) и (12) входит величина V_{cr} , которую необходимо вычислить. Исходя из данных компьютерного моделирования (рис. 5), значение $V_{cr}(F, \gamma)$ вблизи F_{01} можно аппроксимировать следующим

образом:

$$V_{cr}(F, \gamma) = V_{cr}^0 \cdot \left(\alpha + \beta \gamma' - \varepsilon \frac{F}{F_0} \right). \quad (13)$$

Величина V_{cr}^0 соответствует скорости частицы, необходимой чтобы преодолеть потенциальный барьер в отсутствии трения: $V_{cr}^0 = \left(\frac{2U_0}{m} \right)^{1/2}$. Безразмерные константы α , β и ε являются подгоночными параметрами модели. Подгонка констант осуществлялась методом наименьших квадратов только по одной зависимости $\langle V \rangle(F)$ для температуры $T' = 0,129$ и $\gamma' = 0,141$. В дальнейших расчетах эти константы не изменялись. Их значения равны:

$$\alpha = 0,88; \beta = 0,60; \varepsilon = 2,125. \quad (14)$$

Проведя интегрирование можно получить аналитические выражения для функции распределения по скоростям. Зная $N(V)$ и используя (5) найдем среднюю скорость частиц. Выражения для средних скоростей можно получить как аналитически, проведя интегрирование, так и численно. Графики функций $\langle V \rangle$ в зависимости от величины действующей силы приведены в нижней части рис. 7. Маркеры на рисунке соответствуют данным компьютерного моделирования уравнений Ланжевена (1)-(2), а непрерывные кривые – расчетам по формулам (10) –(13). Видно, что недодемпфированное движение частиц в пространственно периодическом потенциале может быть описано как передемпфированное движение в двухъямном потенциале скоростей (9). Результаты расчетов обоими методами дают практически не различающиеся друг от друга данные как для температуры $T = 120\text{K}$ ($T' = 0,129$), так и для температуры 360K ($T' = 0,388$).

Если пренебречь перекрытием гауссиан (заменяв в уравнении (11) V_{cr} на ∞), то выражение для расчета средней скорости существенно упростится. И для $\langle V \rangle$ получаем:

$$\langle V \rangle = \frac{F}{\gamma} \frac{2}{2 + \exp\left(-\frac{m}{\gamma k T} F \left(\frac{F}{2\gamma} - V_{cr} \right)\right)}. \quad (15)$$

Аппроксимация по этой формуле приведена на рис. 7 штриховой линией. Видно, что результаты вычислений соответствуют данным компьютерного моделирования.

Предложенный вид эффективного потенциала не только описывает изменение $\langle V \rangle(F)$ с температурой, но и с изменением коэффициента трения. На рис. 8 приведены расчеты температурной зависимости подвижности частиц для трех различных значений γ . Кривые 1 и 2 соответствуют значению $\gamma = 0,02$. Для кривой 3 $\gamma = 0,04$, а для кривой 4 - $\gamma = 0,01$. Из рисунка видно, что предложенный метод хорошо описывает поведение $\langle V \rangle(F)$ для различных значений γ в недодемпфированном случае.

Рассмотрим, как предложенная модель описывает особенности температурного поведения диффузии. Используя соотношение Кубо, коэффициент диффузии может быть найден как интеграл от автокорреляционной функции скорости, который может быть записан через дисперсию скорости $\langle \Delta v^2 \rangle = \langle (v - \langle v \rangle)^2 \rangle$ и корреляционное время τ_{corl} [11]:

$$D = \int_0^{\infty} d\tau \langle v(t)v(t+\tau) \rangle = \langle \Delta v^2 \rangle \tau_{corl} = \frac{k}{m} T^* \tau_{corl}. \quad (16)$$

В последнем выражении, аналогично работе [11], введена кинетическая температура $T^* = \frac{m}{k} \langle \Delta v^2 \rangle$.

Таким образом, зная кинетическую температуру и корреляционное время, можно получить коэффициент диффузии. Кинетическая температура находится следующим образом:

$$T^* = \frac{m}{k} \int_{-\infty}^{\infty} (V - \langle V \rangle)^2 N(V) dV. \quad (17)$$

Проводя численное интегрирование с полученной ранее функцией распределения $N(V)$, построим графики зависимости динамической температуры от действующей силы. Они приведены в верхней части рис. 7.

Проведя упрощение, такие же как и при расчете $\langle V \rangle$, для динамической температуры получим простое

аппроксимирующие выражение:

$$T^* = T + \frac{m}{k} \langle V \rangle \left(\frac{F}{\gamma} - \langle V \rangle \right) = T + \Delta T^*. \quad (18)$$

Расчеты по этой формуле приведены на рис. 7 штриховой линией. Как следует из рисунка, данные аналитических расчетов хорошо совпадают с численными решениями.

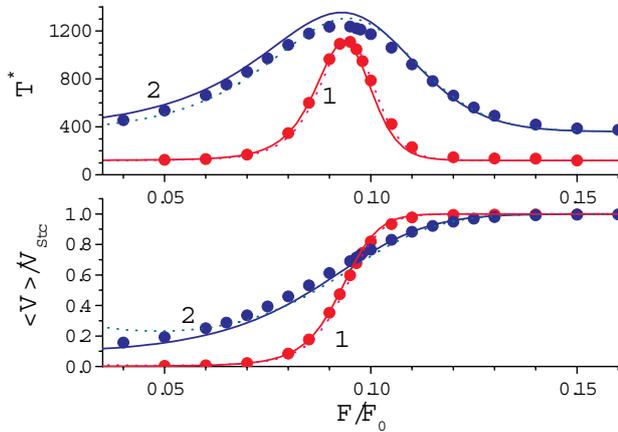


Рис. 7. Изменение кинетической температуры (верхний рисунок) и подвижности (нижний рисунок) в зависимости от приложенной силы. Маркеры – результаты моделирования, сплошные кривые – расчет по формулам (11) – (14), штриховая линия аппроксимация по формулам (15), (17). 1 – $T' = 0,129$, 2 – $T' = 0,388$. $\gamma' = 0,141$.

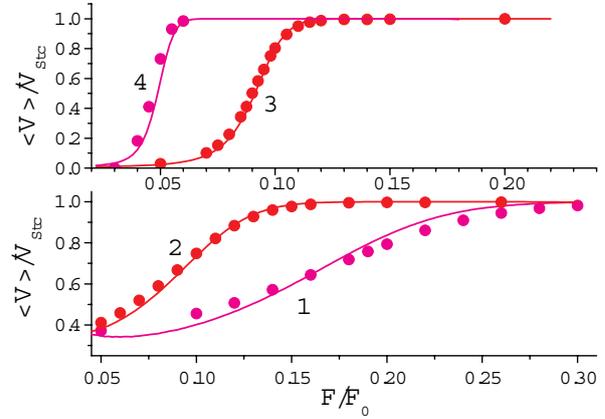


Рис. 8. Изменение средней скорости в зависимости от приложенной силы для различных коэффициентов трения. Кривые соответствуют вычислениям согласно (11)-(14), маркеры – результаты моделирования.

Верхний рисунок – $T' = 0,194$, нижний рисунок – $T' = 0,776$. кривая 1 – $\gamma' = 0,282$, 2 и 3 – $\gamma' = 0,141$, 4 – $\gamma' = 0,071$.

Анализ результатов свидетельствует о том, что максимальное значение добавки эффективной температуры ΔT_{mx}^* приблизительно равно U_0/k и практически не зависит от величины T . Максимум ΔT^* наблюдается при одном и том же значении F/F_0 . Таким образом, в области низких температур ($T \ll U_0/k$), при фиксированном корреляционном времени коэффициент диффузии должен мало изменяться с температурой. В то же время, в работе [3] был обнаружен экспоненциальный рост D с температурой. Для объяснения этого факта, оценим изменение величины τ_{corl} при низких температурах ($Q \ll \Delta W_{\pm}$). Для этого используем теорию скоростей реакции Крамера [12]. Скорости перехода между двумя состояниями V_- и V_+

равны $r_- = \frac{\varpi_{cr} \varpi_-}{2\pi} \exp\left(-\frac{\Delta W_-}{Q}\right)$ и $r_+ = \frac{\varpi_{cr} \varpi_+}{2\pi} \exp\left(-\frac{\Delta W_+}{Q}\right)$, где ϖ_-^2 и ϖ_+^2 кривизна потенциала $W(V)$ в r точках $V = 0$ и $V = \frac{F}{\gamma}$, а ϖ_{cr}^2 – кривизна потенциала $W(V)$ в $V = V_{cr}$.

Приближенное выражение (9) хорошо описывает эффективный потенциал вблизи его максимумов. Это позволило получить выражения для $\langle V \rangle$ и T^* , которые воспроизводят данные моделирования. Однако, как следует из (9), производная потенциала $W(V)$ вблизи $V = V_{cr}$ имеет разрыв. Поэтому мы не можем напрямую использовать (9) для расчета ϖ_{cr}^2 . Однако, считая ϖ_{cr}^2 конечной величиной, мы можем выяснить вид температурной зависимости τ_{corl} . Согласно [12] корреляционное время будет равно: $\tau_{corl} = \frac{1}{r_- + r_+}$.

Так как из вида потенциала $W(V)$ (9) следует $\varpi_-^2 = \varpi_+^2$ и для корреляционного времени получим:

$$\tau_{corl}^* = \tau_{corl} / \tau_0 = \exp\left(\frac{mV_{cr}^2}{2kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{mF}{2\gamma kT} \left(V_{cr} - \frac{F}{2\gamma} \right) \right) \right], \quad (19)$$

где $\tau_0 = \frac{\varpi_+ \varpi_{cr}}{2\pi}$.

На рис 9. приведены графики величины τ_{corl}^* в зависимости от F для различных температур. Как следует из (19) в точке максимума величина τ_{corl} экспоненциально растет с уменьшением температуры.

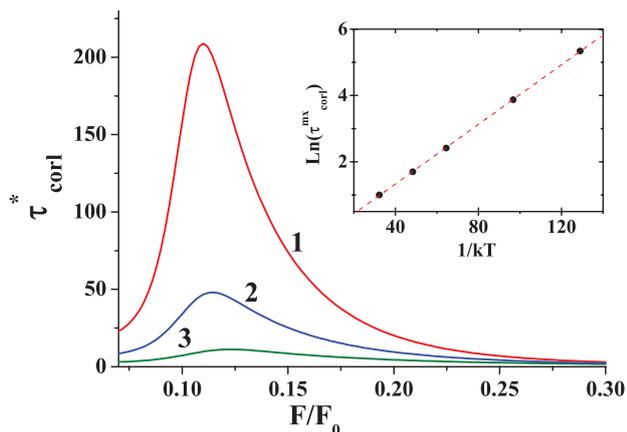


Рис. 9. Изменение τ_{corl}^* в зависимости от действующей силы для различных температур.

1 – $T = 90$ К ($T' = 0,097$), 2 – $T = 120$ К ($T' = 0,129$), 3 – $T = 180$ К ($T' = 0,194$). $\gamma' = 0,141$.

На вставке - Изменение логарифма максимальной величины τ_{corl}^* от обратной температуры.

на широком классе физических систем.

Этот результат полностью совпадает с результатами компьютерного моделирования в работе [3] где корреляционное время экспоненциально возрастало с уменьшением T .

ВЫВОДЫ

Таким образом, нами показано, что транспорт частиц в пространственно периодических потенциалах в недодемпфированном случае может рассматриваться как частный случай движения активных броуновских частиц. При этом недодемпфированный случай в пространстве координат может быть сведен к передемпфированному случаю в пространстве скоростей с двухямыным потенциалом. Это позволяет эффективно использовать аналитические методы разработанные для передемпфированного случая. Впервые получены аналитические выражения для средней скорости, динамической температуры и времени корреляции потока частиц хорошо согласующиеся с результатами численного решения уравнений Ланжевена. Эти простые выражения могут эффективно использоваться при планировании, проведении и анализе экспериментов

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Risken H. The Fokker-Planck equation and methods of solution and applications. – Springer, 1989. – 485 p.
2. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // Rev. Mod. Phys. – 2009. – Vol. 81. – P. 337–442.
3. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Diffusion in the systems with low dissipation: Exponential growth with temperature drop // Europhysics Letters. – 2012. – Vol. 100. –P. 5005.
4. Machura L., Kostur M., Talkner P., et. al. Brownian motors: Current fluctuations and rectification efficiency // Phys. Rev. – 2004.- Vol. E70.- P. 061105.
5. Reimann P., Van den Broeck C., Linke H., Hänggi P., Rubi J.M., Perez-Madrid A. Diffusion in tilted periodic potentials: Enhancement, universality, and scaling // Phys. Rev. – 2002.- Vol. E 65. – P. 031104.
6. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Anomalous Temperature Dependence of Diffusion in Crystals in Time-Periodic External Fields // JETP Letters. – 2012. - Vol.95, №3. – P. 137–142.
7. Sancho J.M., Lacasta A.M. The rich phenomenology of Brownian particles in nonlinear potential landscapes // Eur. Phys. J. Special Topics. - 2010. – Vol.187. – P. 49–62.
8. Costantini G., Marchesoni F. Threshold diffusion in a tilted washboard potential // Europhys. Lett. – 1999. – Vol. 48 (5). - P.491-497.
9. Lindenberg K., Lacasta A.M., Sancho J.M., Romero A.H. Transport and diffusion on crystalline surfaces under external forces // New Journal of Physics. – 2005. – Vol.7. – P.29.
10. Lindenberg K., Sancho J.M., Lacasta A.M., Sokolov I.M. Dispersionless Transport in a Washboard Potential // Phys. Rev. Lett. – 2007. – Vol.98. – P.020602.
11. Lindner B., Nicola E.M. Critical Asymmetry for Giant Diffusion of Active Brownian Particles // Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol. 101. – P.190603.
12. Gardiner C.W. Handbook of stochastic methods for Physics, chemistry and natural sciences (Springer-Verlag), 1981.