

PACS: 05.40.-a, 05.60.-k, 02.60.Cb

## PARTICLE DIFFUSION ACCELERATION IN SPATIALLY PERIODIC STRUCTURES EXPOSED TO RECTANGULAR TIME-PERIODIC FIELDS

**I.G. Marchenko<sup>1,2</sup>, I.I. Marchenko<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*National Scientific Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology"*

*1, Akademicheskaya St., Kharkov, 61108, Ukraine*

<sup>2</sup>*V.N. Karazin Kharkov National University*  
*4 Svobody Sq., Kharkov, 61077, Ukraine*

<sup>3</sup>*NTU „Kharkov Polytechnic Institute”*

*21 Frunze St., Kharkov, 61145, Ukraine*

*e-mail: [march@kipt.kharkov.ua](mailto:march@kipt.kharkov.ua)*

Received June 17, 2015

This scientific paper studies the abnormal diffusion of particles in spatially periodic structures exposed to the action of time –periodic rectangular fields. A choice of such a type of the field is related to the need of finding out physical reasons for an increase in the diffusion coefficient at different field amplitudes. As for the impact on the diffusion coefficient the entire eventual amplitude range was divided into three domains whose functional behavior of the diffusion coefficient differs with a change in temperature. It has been shown that the maximum increase in the diffusion can be reached only in the narrow amplitude range of the external periodic force defined by system dissipative properties. This range shows abnormal temperature relationship of the diffusion coefficient, in particular its exponential growth with a drop in temperature. A physical reason for such an abnormal increase in diffusion can be the availability of two populations of particles: “localized” and “running”. An optimal choice of the amplitude of the external field provides long jumps of running particles in comparison with localized ones. The amplification ratio of the diffusion can significantly be changed through the variation of the frequency and amplitude of the external field. This offers the challenge for new technological applications of studied effects.

**KEY WORDS:** diffusion, computer simulation, periodic structures, Langevin equation, time-periodic fields

## УСКОРЕНИЕ ДИФФУЗИИ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ПРЯМОУГОЛЬНОГО ПЕРИОДИЧЕСКОГО ВО ВРЕМЕНИ ПОЛЯ

**И.Г. Марченко<sup>1,2</sup>, И.И. Марченко<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»*

*ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина*

<sup>2</sup>*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина*

*пл. Свободы 4, г. Харьков, 61077, Украина*

<sup>3</sup>*НТУ «Харьковский политехнический институт»*

*ул. Фрунзе 21, г. Харьков 61145, Украина*

В работе исследована аномальная диффузия частиц в пространственно-периодических структурах под воздействием периодического во времени прямоугольного поля. Такой выбор поля связан с необходимостью выяснения физических причин усиления коэффициента диффузии при различных амплитудах поля. По воздействию на коэффициент диффузии весь возможный диапазон амплитуд разбивается на три области, различающиеся функциональным поведением коэффициента диффузии с температурой. Показано, что максимального усиления диффузии можно достичь лишь в узком диапазоне амплитуд внешней периодической силы, определяемом диссипативными свойствами системы. В этом диапазоне наблюдается аномальная температурная зависимость коэффициента диффузии: его экспоненциальный рост с понижением температуры. Физической причиной такого аномального роста диффузии является одновременное существование двух популяций частиц: “локализованных” и “бегущих”. При оптимальном выборе амплитуды внешнего поля осуществляются длинные прыжки бегущих частиц относительно локализованных. Степень усиления диффузии может быть существенным образом изменена вариацией амплитуды и частоты внешнего поля. Это открывает перспективы новых технологических применений исследованного явления.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** диффузия, компьютерное моделирование, периодические структуры, уравнения Ланжевена, периодические поля

## ПРИСКОРЕННЯ ДИФУЗІЇ ЧАСТОК У ПРОСТОРОВО-ПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУРАХ ПІД ДІЄЮ ПЕРІОДИЧНОГО У ЧАСІ ПРЯМОКУТНОГО ПОЛЯ

**І.Г. Марченко<sup>1,2</sup>, І.І. Марченко<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»*

*вул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна*

<sup>2</sup>*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна*

*пл. Свободи 4, м. Харків, 61077, Україна*

<sup>3</sup>*НТУ «Харківський політехнічний інститут»*

*вул. Фрунзе 21, м. Харків 61145, Україна*

У роботі досліджена аномальна дифузія частинок у просторово-періодичних структурах під дією періодичного у часі прямокутного поля. Такий вибір поля пов'язаний з необхідністю вивчення фізичних причин посилення коефіцієнту дифузії при різних амплітудах поля. По дії на коефіцієнт дифузії весь діапазон амплітуд можна поділити на три області, які відрізняються функціональною поведінкою коефіцієнту дифузії із температурою. Показано, що максимальне посилення дифузії можна очікувати тільки у вузькому діапазоні зовнішніх періодичних сил, який визначається дисипативними властивостями системи. У цьому діапазоні спостерігається аномальна температурна залежність коефіцієнту дифузії: його експоненціальне зростання із падінням температури. Фізичною причиною такого аномального росту дифузії є одночасне існування двох популяцій частинок: "локалізованих" та "рухаючихся". При оптимальному виборі амплітуди зовнішнього поля "рухаючихся" частинки здійснюють довгі стрибки відносно "локалізованих". Ступень підсилення дифузії може бути істотно змінена за рахунок варіації амплітуди та частоти зовнішнього поля. Це відкриває перспективи нових технологічних застосувань цього явища.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** дифузія, комп'ютерне моделювання, періодичні структури, рівняння Ланжевена, періодичні поля

Диффузия и транспорт частиц в пространственно-периодических потенциалах интенсивно изучаются в последние десятилетия [1-4]. Интерес к этим процессам связан с широким кругом физических систем, которые могут быть описаны как движение частиц в наклонных периодических потенциалах (washboard potentials). К таким системам относятся контакты Джозефсона, суперионные проводники, волны зарядовой плотности, системы фазовой автоподстройки частоты и пр. [5]. Исследование особенностей транспорта атомов, точечных и линейных дефектов кристаллической решетки во внешних полях так же представляются чрезвычайно важными для развития новых технологий в физике твердого тела.

В работе [6] было показано, что воздействием внешнего периодического во времени поля можно значительно усилить диффузию частиц в пространственно-периодических структурах. Более того, в определенном интервале частот наблюдалась аномальная температурная зависимость диффузии – рост коэффициента диффузии с понижением температуры. Это исследование проводилось для одного фиксированного значения амплитуды внешнего поля. Вместе с тем в работе [7], исследуя диффузию в наклонных периодических потенциалах, было установлено, что в зависимости от величины внешнего поля существуют области как обычной, так и аномальной температурной зависимости коэффициента диффузии.

Целью данной работы являлось детальное исследование амплитудной и частотной зависимостей усиления диффузии в периодических полях, а так же установление физических причин, обуславливающих ее аномальную температурную зависимость.

#### МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Движение частицы на одномерной решетке под действием внешней силы  $F_t$  описывалось уравнением Ланжевена:

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

где  $t$  - время,  $x$  – координата частицы в одномерной решетке,  $m$  - ее масса,  $\gamma$  - коэффициент трения. Точка сверху означает дифференцирование по времени. Член  $\xi(t)$  описывает термические флуктуации. Предполагается, что шум является гауссовым белым и соответственно для термических флуктуаций выполняется соотношение:

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

где  $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура.

В простейшем случае потенциальная энергия частицы  $U$  в поле кристаллической решетки может быть записана следующим образом :

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

где  $a$  - постоянная решетки, а  $U_0$  - высота потенциального барьера.

На движущуюся частицу действует периодическая сила со стороны кристаллической решетки  $F_{lat}$  :

$$F^{Lat} = -\frac{\partial U}{\partial x} = F_{cr} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right). \quad (4)$$

Величина  $F_{cr} = \frac{\pi}{a}U_0$ , называемая критической силой [8] и соответствует минимальной действующей силе, необходимой для преодоления в вязкой среде энергетического барьера, разделяющего два соседних положения частицы на одномерной решетке. Параметры используемого пространственно-периодического потенциала были теми же, что и в работах [6,7].

В работе исследовалось внешнее периодическое поле следующего вида:

$$F_t(t) = F_0 \text{sign}\{\sin(\omega t)\}, \quad (5)$$

где  $\omega$  - угловая частота внешней силы, а  $F_0$  - ее амплитуда. Его вид изображен на рис. 1 сплошной линией.

Стохастические уравнения (1)-(2) для каждой частицы решались численно методом Эйлера [9] с шагом по времени составляющим менее 0,01 периода собственных малых колебаний. Статистическое усреднение проводилось по ансамблю с количеством частиц не менее  $N = 5 \cdot 10^4$ . Для проверки полученных результатов отдельные вычисления проводились с  $N = 5 \cdot 10^6$ . 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 чего частица с имеющейся скоростью перемещалась в первую элементарную ячейку.

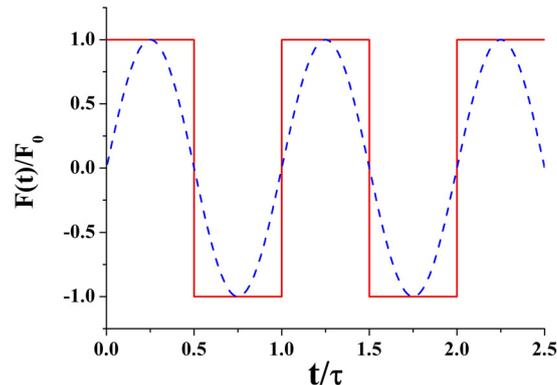


Рис. 1. Вид внешнего периодического во времени поля используемого в данном исследовании: сплошная линия – периодическая ступенчатая функция, штриховая – синусоидальная функция.

При анализе результатов моделирования удобно перейти к безразмерным величинам времени  $t'$  и расстояния  $x'$  [4,8]:

$$t' = t \frac{1}{a} \sqrt{\frac{U_0}{m}}; \quad x' = \frac{x}{a}; \quad (6)$$

Для сопоставления данных полученных в данной работе с данными других авторов использовались безразмерные величины температуры  $T'$  и трения  $\gamma'$  [4,10].

$$T' = \frac{Tk}{U_0}; \quad \gamma' = \frac{\gamma a}{(mU_0)^{1/2}}. \quad (7)$$

В работе изучалось недодемпфированное движение частиц. Значение коэффициента трения  $\gamma' = 0,14$  соответствовало использованному в ранее проведенных исследованиях [7].

Коэффициент диффузии вычислялся по дисперсии  $\sigma^2$  в распределении ансамбля движущихся частиц при стремлении времени к бесконечности:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} D_{ef}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}{2t} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{2t} \quad (8)$$

где скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают усреднение по ансамблю.

При каждом расчете коэффициента диффузии определялось время  $t_{lin}$  достижения линейной зависимости дисперсии от времени. Коэффициент диффузии определялся при времени  $t > 100t_{lin}$ .

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Ранее в работе [6] было показано, что при воздействии на частицы постоянной внешней силы, в зависимости от ее величины, могут реализовываться функционально различные температурные зависимости коэффициента диффузии. Результаты этих исследований приведены на рис. 2. Из рисунка видно, что существует три области (I- III) различающихся поведением коэффициента диффузии  $D$  с температурой. В первой области диффузия усиливается с ростом приложенной силы, а в области III – падает. Однако, в то время

как в областях I и III коэффициент диффузии возрастает с ростом температуры, в области II (на рисунке выделена штриховкой) он растет с понижением температуры. Причем этот аномальный рост коэффициента диффузии имеет экспоненциальную зависимость [6]. В то же время в работе [7], было установлено, что при воздействии на частицу периодической во времени силы так же наблюдается аномальная температурная зависимость. Однако такая зависимость наблюдалась только в определенном интервале частот. В работе [7] исследования проводились при амплитуде внешней силы  $F_0 = 0,15F_{cr}$ . То есть амплитуда  $F_0$  лежала в области III, в которой при воздействии постоянной силы аномальная температурная зависимость не наблюдалась.

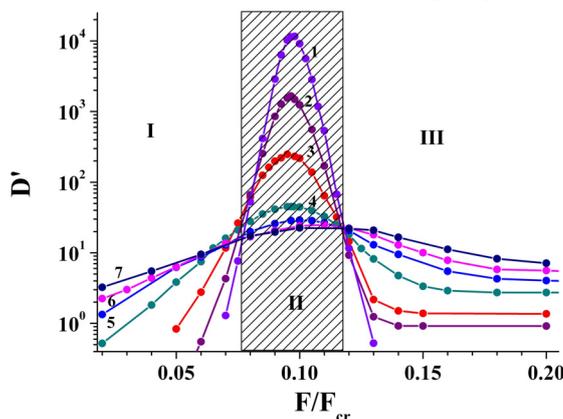


Рис. 2. Зависимость безразмерного коэффициента диффузии от величины действующей силы для различных температур. Область аномальной температурной зависимости (II) заштрихована. Коэффициент трения  $\gamma' = 0,141$ . 1 -  $T=90\text{K}$  ( $T' = 0,097$ ), 2 -  $T=120\text{K}$  ( $T' = 0,129$ ), 3 -  $T=180\text{K}$  ( $T' = 0,194$ ), 4 -  $T=360\text{K}$  ( $T' = 0,388$ ), 5 -  $T=540\text{K}$  ( $T' = 0,582$ ), 6 -  $T=720\text{K}$  ( $T' = 0,776$ ), 7 -  $T=900\text{K}$  ( $T' = 0,969$ ).

Для выяснения физических причин аномальной температурной зависимости диффузии в этих двух различных случаях рассмотрим движение частиц под воздействием внешнего периодического поля. При прямоугольной форме временной зависимости внешнего поля (рис.1), можно на интервале, соответствующем полупериоду колебаний, использовать полученные ранее данные по особенностям диффузии в постоянном силовом поле. Выберем амплитуды, относящиеся к различным областям диаграммы, приведенной на рис.2, и исследуем изменение диффузии с понижением частоты. Интуитивно понятно, что при  $\omega \rightarrow 0$  решение для периодического поля должно совпадать со случаем постоянного во времени поля.

На рис. 3 в двойном логарифмическом масштабе показано изменение дисперсии частиц во времени при воздействии внешнего поля с амплитудой, лежащей в области I диаграммы. Различным кривым соответствуют различные частоты. Кривая 4 на рисунке отвечает данным полученным при воздействии постоянной силой. Видно, что при частоте  $\omega = 10^{-3}$  кривая визуально сливается с графиком для случая постоянно действующей силы. В то же время, в области высоких частот, результаты различаются, и линейная зависимость дисперсии от времени наступает на значительно меньших временах, чем для случая воздействия постоянной силы.

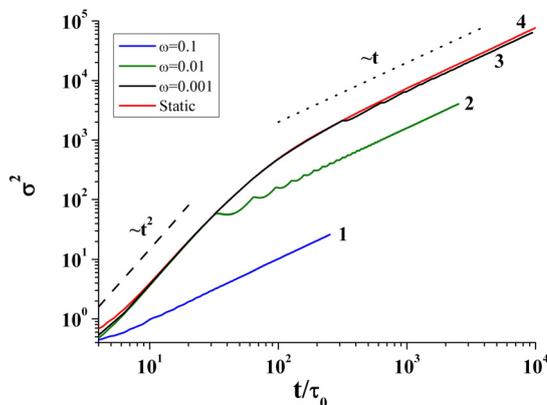


Рис. 3. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени в области I для различных частот при внешнем воздействии периодической ступенчатой функции.

Амплитуда поля  $F_0 / F_{cr} = 0,06$ ,  $T=180$  ( $T' = 0,194$ )

1 -  $\omega = 10^{-1}$ , 2 -  $\omega = 10^{-2}$ , 3 -  $\omega = 10^{-3}$ , 4 -  $\omega = 0$  (постоянная сила).

Известно, что в системах, характеризующихся низким уровнем диссипации энергии, возможно возникновение особых режимов диффузии: так называемой субдиффузии, супердиффузии и гипердиффузии [11,12]. Обычная диффузия характеризуется линейной зависимостью среднеквадратичного отклонения координаты частиц  $x$  от времени  $t$ :

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \propto t. \quad (9)$$

В случае реализации особых режимов диффузии эта зависимость изменяется:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \propto t^n. \quad (10)$$

При  $n < 1$  говорят о субдиффузии, при  $1 < n < 2$  - о супердиффузии, а при  $n > 2$  - о гипердиффузии [11]. Случай  $n = 2$  носит название баллистической диффузии.

Из рис. 3 видно, что под воздействием постоянной силы на начальном этапе (до  $t = 10^2$ ) дисперсия растет нелинейно как  $\sigma^2 \propto t^2$ . То есть в ограниченном интервале времени наблюдается режим баллистической диффузии. Как показали предыдущие исследования, по окончании фазы ускоренной диффузии устанавливается стационарное распределение частиц по скоростям, которое в дальнейшем не изменяется. Как хорошо видно из рисунка, по прошествии этого времени пространственная дисперсия в распределении частиц описывается стандартным выражением  $\sigma^2 \propto t$ .

Кривые 1-3 на рис. 3 соответствуют различным частотам воздействия внешнего поля. Кривая 1 соответствует самой высокой представленной на рисунке частоте. И как видно из рисунка, соответствующий коэффициент диффузии – самый низкий. Понижение частоты приводит к возрастанию коэффициента диффузии. Из рис. 3 видно, что чем больше период колебаний, тем большее время частица проводит в режиме супердиффузии. И соответственно тем выше коэффициент диффузии.

Как следует из рис. 3 линейная зависимость, характерная для обычной диффузии, устанавливается по прошествии времени соответствующего двум периодам колебаний внешнего поля. При этом кривые, соответствующие различным частотам, до этого момента времени совпадают с графиком при постоянно действующей силе. Однако, начиная с достигнутого на стадии ускоренной диффузии значения  $\sigma^2$ , устанавливается фаза обычной диффузии, характеризующееся зависимостью  $\sigma^2 \propto t$ . Когда период колебаний  $\tau$  сравнивается с длительностью фазы баллистической диффузии, дальнейшее увеличение  $\tau$  мало влияет на величину  $D$ . Таким образом, максимально достижимый коэффициент диффузии в области I соответствует значению  $D$  для постоянного поля. Этот вывод хорошо демонстрирует рис. 4.

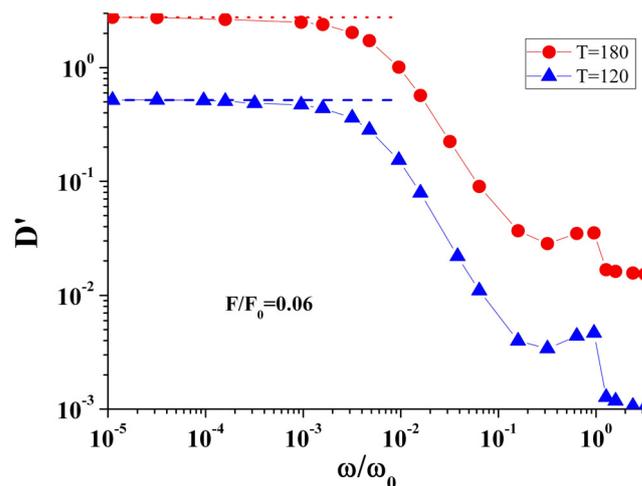


Рис. 4. Зависимость коэффициента диффузии  $D$  от частоты внешнего поля для различных температур при фиксированной амплитуде внешнего поля  $F_0 / F_{cr} = 0,06$  (область I). 1 –  $T=120\text{K}$  ( $T' = 0,13$ ), 2 –  $T=180\text{K}$  ( $T' = 0,194$ ). Штриховой и пунктирной линией отмечено значения коэффициента диффузии при постоянно действующей силе.

На рисунке приведены частотные зависимости коэффициента  $D(\omega)$  для двух температур. Штриховой и пунктирной линиями показаны значения коэффициента диффузии для случая постоянно действующей силы. Видно, что при низких частотах коэффициент диффузии выходит на плато, высота которого соответствует

значению при постоянно действующей силе. При высоких же частотах он степенным образом уменьшается с повышением частоты. В области частот, соответствующей собственной частоте колебаний, наблюдается небольшое резонансное повышение коэффициента диффузии. Из рис. 4 видно, что в области I диаграммы для переменного поля, так же как и для случая постоянного поля, во всем диапазоне частот более высокой температуре соответствует большее значение коэффициента диффузии. То есть наблюдается обычная температурная зависимость диффузии.

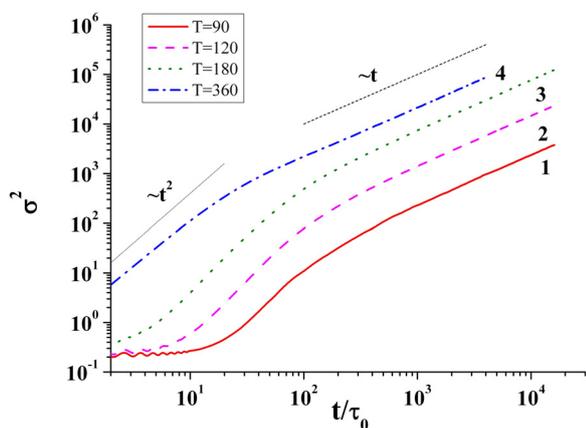


Рис. 5. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени в постоянном поле ( $\omega = 0$ ) для различных температур. Амплитуда поля  $F_0 / F_{cr} = 0,06$  (область I).

1 – T=90 ( $T' = 0,097$ ), 2 – T=120 ( $T' = 0,129$ ), 3 – T=180 ( $T' = 0,194$ ), 4 – T=360 ( $T' = 0,388$ ).

На рис. 5 приведены зависимости  $\sigma^2(t)$  в области I для различных температур при  $\omega = 0$ . Как следует из рисунка, во всем рассмотренном температурном диапазоне, более высоким температурам соответствует большее значение коэффициента диффузии.

Однако в области II ситуация изменяется. Это хорошо видно из рис. 6. Здесь меньшим значениям температуры соответствует большее значение коэффициента диффузии. Из рисунка видно, что чем ниже температура, тем большее время требуется для выхода дисперсии на линейную зависимость. Воздействие внешним периодическим полем в области II диаграммы, так же как и для области I приводит к ограничению фазы гипердиффузии во времени, и, соответственно, к уменьшению коэффициента диффузии. Эта тенденция хорошо видна на рис. 7. Аналогично с поведением дисперсии в области I, уменьшение частоты в области II приводит к возрастанию коэффициента диффузии. Однако в отличие от случая малых амплитуд колебаний внешнего поля, в этой области наблюдается аномальная температурная зависимость.

Как следует из графиков, так же как и в области I, в области II коэффициент диффузии на больших временах стремится к коэффициенту диффузии для постоянной силы. При воздействии постоянного поля в этом интервале амплитуд реализуется аномальная температурная диффузия, связанная с экспоненциальным ростом времени корреляции с понижением температуры [6]. Поэтому при периоде колебаний превышающем время фазы гипердиффузии, коэффициент  $D(\omega)$  экспоненциально растет с понижением температуры. Физической причиной такого роста является то, что частицы совершают все более длинные скачки с понижением температуры. Для перехода “бегущих” частиц в локализованное состояние необходима флуктуация энергии достаточная для уменьшения скорости ниже критического значения. С падением температуры вероятность такого процесса падает и соответственно частица проходит все большее расстояние со скоростью стационарного движения в вязкой среде под действием постоянной силы.

На рис. 8 приведены графики зависимости коэффициента диффузии от частоты для двух различных температур – 120 и 180 К. Так же как и для случая, приведенного на рис. 4, коэффициент диффузии выходит на насыщение и соответствует значению D для постоянно действующей силы. Однако, в отличие от области I, в области II при частотах  $\omega < 10^{-3} \omega_0$  более низким температурам соответствует более высокий коэффициент диффузии. Таким образом, при низких частотах наблюдается аномальная температурная зависимость коэффициента диффузии.

В области же высоких частот по-прежнему более высокой температуре соответствует и больший коэффициент диффузии. При этом увеличение частоты приводит к ослаблению диффузии. При частотах выше собственной частоты колебаний коэффициент диффузии становится равным коэффициенту диффузии

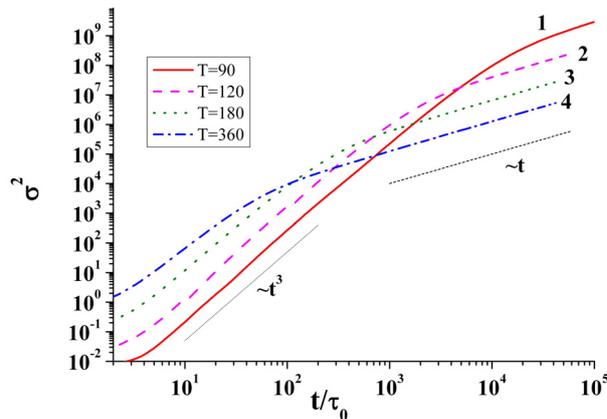


Рис. 6. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени в постоянном поле для различных температур. Амплитуда поля  $F_0 / F_{cr} = 0,095$  (область II).

1 – T=90 ( $T' = 0,097$ ), 2 – T=120 ( $T' = 0,129$ ), 3 – T=180 ( $T' = 0,194$ ), 4 – T=360 ( $T' = 0,388$ ).

свободных частиц в периодическом потенциале.

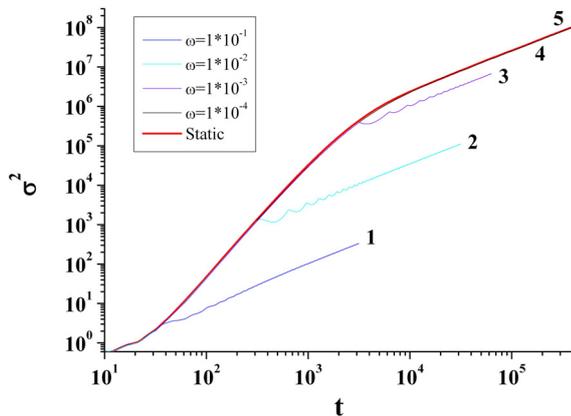


Рис. 7. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени.

1 -  $\omega = 10^{-1}$ , 2 -  $\omega = 10^{-2}$ , 3 -  $\omega = 10^{-3}$ , 4 -  
 $\omega = 10^{-4}$ , 5 -  $\omega = 0$  (постоянная сила).

Амплитуда поля  $F_0 / F_{cr} = 0,095$  (область III).

$T = 180\text{K}$  ( $T' = 0,194$ ).

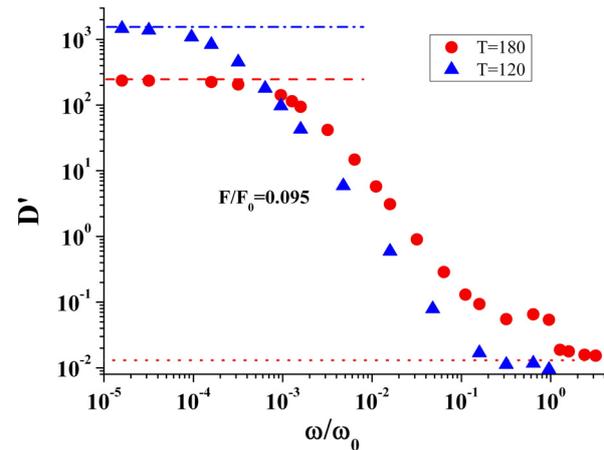


Рис. 8. Зависимость коэффициента диффузии от частоты внешнего поля для различных температур при фиксированной амплитуде внешнего поля  $F_0 / F_{cr} = 0,095$  (область II)

1 -  $T = 120\text{K}$  ( $T' = 0,129$ ), 2 -  $T = 180\text{K}$  ( $T' = 0,194$ ). Штриховой и штрих-пунктирной линией отмечено значения коэффициентов диффузии при постоянно действующей силе, а пунктирной – значение в отсутствие внешней силы.

Таким образом, аномальная температурная зависимость диффузии наблюдается только в области низких частот. При этом при фиксированной температуре с уменьшением частоты величина  $D$  стремится к своему максимальному значению. В то же время как было показано ранее в [7,13] для синусоидального внешнего воздействия в области III частотная зависимость имеет максимум. Такая же зависимость получена в данной работе и для ступенчатого периодического внешнего воздействия. На рис. 9 приведены частотные зависимости коэффициента диффузии для различных температур. Все кривые на рисунке имеют максимум. Причем с понижением температуры этот максимум смещается в область низких температур. Видно, что чем меньше температура, тем большее значение коэффициент диффузии имеет в максимуме. При этом существует частотный интервал аномальной температурной зависимости диффузии. Как следует из рис. 9 при частотах выше  $\omega \approx 2 \cdot 10^{-2} \omega_0$  наблюдается обычная температурная зависимость. В то же время при достаточно низких частотах коэффициент диффузии, так же как и в областях I и II, выходит на значение  $D$  для системы частиц подвергающейся воздействию постоянной силы. Это хорошо видно из графика для  $T = 480$ .

Для понимания физической причины возникновения максимума по частоте в области сути III обратимся к рис. 10. На рисунке (аналогично рис. 3,7) приведены зависимости дисперсии от времени для различных частот колебаний. Как следует из рисунка, линейная зависимость, характерная для обычной диффузии, устанавливается по прошествии времени соответствующего двум периодам колебаний поля. При этом кривые, соответствующие различным частотам, до этого момента времени совпадают с графиком при постоянно действующей силе. Однако, функциональная зависимость  $\sigma^2(t)$  в области III отличается от рассмотренных в областях I и II. Под воздействием постоянной силы дисперсия  $\sigma^2$  на начальном этапе растет как  $\sigma^2 \propto t^3$ . Фаза гипердиффузии продолжается до времени  $t \approx 2 \cdot 10^2 \tau_0$ . По его окончанию устанавливается стационарное распределение частиц по скоростям, которое в дальнейшем не изменяется. В то же время распределение частиц по координатам – сильно неравновесное. Оно имеет экспоненциальный вид [8].

Установление стационарного вида распределения частиц по координатам характеризуется почти неизменной во времени дисперсией. Это так называемая “dispersionless” фаза [8]. После ее завершения формируется стационарный вид функции распределения частиц по координатам, имеющий стандартный гауссов вид. В дальнейшем устанавливается зависимость  $\sigma^2 \propto t$  характерная для обычной диффузии.

При приложении внешнего периодического поля частотные кривые “следуют” графику при постоянной силе до времени одного периода колебания, а затем, начиная с достигнутого значения  $\sigma^2$ , устанавливается фаза обычной диффузии, характеризующаяся зависимостью  $\sigma^2 \propto t$ . Как следует из графиков, на больших временах коэффициент диффузии стремится к коэффициенту диффузии для постоянной силы.

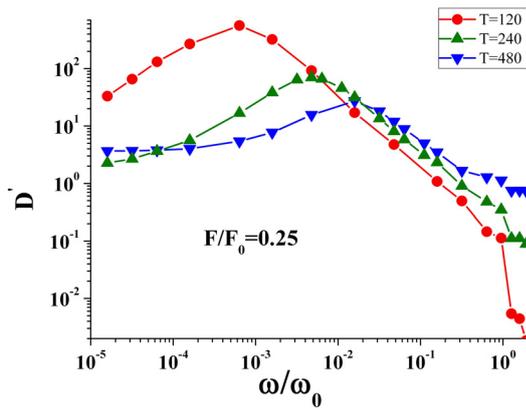


Рис. 9. Зависимость коэффициента диффузии от частоты внешнего поля для различных температур при фиксированной амплитуде внешнего поля

$$F_0 / F_{cr} = 0,25 \text{ (область III).}$$

1 – T=120K ( $T' = 0,129$ ), 2 – T=240K ( $T' = 0,258$ ), 3 – T=480K ( $T' = 0,516$ ).

Таким образом, рост коэффициента диффузии с увеличением периода внешних колебаний связан с эффективным использованием фазы гипердиффузии. Поэтому с уменьшением частоты коэффициент диффузии растет, так как частицы большее время находятся в режиме гипердиффузии. Максимум наблюдается, когда период колебаний близок к протяженности во времени режима гипердиффузии. Однако дальнейшее увеличение периода колебаний приводит к тому, что частицы большее время будут уже оказываться в режиме субдиффузии с практически неизменной во времени дисперсией. Соответственно с уменьшением частоты будет падать и коэффициент диффузии. И наконец, на больших временах колебаний устанавливается коэффициент диффузии характерный для постоянно действующего поля.

Как следует из приведенного выше рассмотрения, максимальный коэффициент диффузии будет наблюдаться при частоте, период колебания которой соответствует длительности фазы гипердиффузии. При  $\omega \rightarrow 0$  коэффициент диффузии стремится к его значению при постоянно действующей силе. При  $\omega > \omega_0$  устанавливается значение коэффициента диффузии частиц в отсутствие внешнего воздействия.

Подытоживая рассмотрение диффузии частиц в пространственно-периодических структурах при воздействии на них периодического во времени силового поля, можно сказать, что основным фактором усиления диффузии является амплитуда внешнего воздействия. Коэффициент диффузии может неограниченно возрастать с понижением температуры при приложении периодической силы, амплитуда которой лежит в достаточно узком интервале значений. Величина такой амплитуды и ширина интервала определяется безразмерной величиной, характеризующей степень диссипации энергии в системе. При низких частотах величина коэффициента диффузии для периодического поля совпадает с таковой для случая воздействия постоянной силы. При высоких частотах наблюдается степенное падение коэффициента диффузии с частотой. И при частотах превышающих частоту собственных колебаний коэффициент диффузии равен таковому в отсутствие внешнего воздействия.

Физической причиной усиления диффузии является существование двух популяций частиц: “локализованных” и “бегущих” [5,14]. При оптимальном выборе амплитуды осуществляются длинные прыжки бегущих частиц относительно локализованных. Уменьшение температуры приводит к удлинению таких прыжков. Соответственно возрастает и коэффициент диффузии.

Таким образом, максимальное увеличение  $D'$  происходит, когда период колебаний внешнего поля совпадает с длительностью фазой ускоренной диффузии (баллистической, супер- или гипердиффузии) При амплитудах поля лежащих в области III дальнейшее увеличение периода колебаний приводит к уменьшению коэффициента диффузии, а в областях I и II – к выходу на постоянное значение, не зависящее от частоты. Само разбиение действующей силы на области I- III зависит от коэффициента трения. Ранее в работе [14] было показано, что движение ансамбля частиц под действием постоянной силы может быть сведено к задаче движения частиц в эффективном потенциале скоростей  $W(V)$ . Вид потенциала зависит от коэффициента трения, массы частиц и действующей силы. Граница области I/II соответствует силе, при которой в пространстве скоростей вместо одноямыного потенциала с минимумом при  $V = 0$ , возникает двухъямный потенциал с дополнительным минимумом при  $V = F/\gamma$ . Граница области II/III возникает при значении силы,

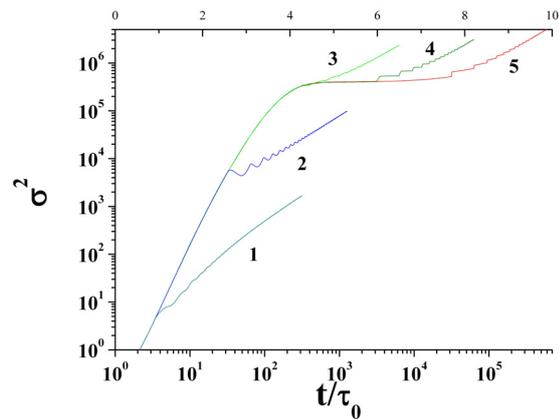


Рис. 10. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени. Амплитуда поля  $F_0 / F_{cr} = 0,25$  (область III), T=180 ( $T' = 0,194$ ).

1 -  $\omega = 10^{-1}$ , 2 -  $\omega = 10^{-2}$ , 3 -  $\omega = 10^{-3}$ , 4 -  $\omega = 10^{-4}$ , 5 -  $\omega = 0$  (постоянная сила).

при которой двухъямный потенциал трансформируется в одноямный, за счет исчезновения ветви с минимумом при  $V = 0$ . Значения соответствующих критических сил, при которых происходит трансформация потенциала, могут быть рассчитаны по алгоритмам предложенным в работе [14].

Исследуемые эффекты допускают простую экспериментальную проверку. Самым прямым методом проверки является исследование диффузии по поверхности твердого тела. Такие системы характеризуются низким уровнем диссипации [15,16]. Исследуя диффузию магнитных частиц на немагнитной подложке под воздействием электромагнитных полей можно установить аномальный характер температурной зависимости диффузии. Прямым подтверждением аномальной диффузии стал бы усиленный рост островковых зародышей новой фазы с понижением температуры.

Будучи экспериментально установленным, эффект аномального усиления диффузии может быть использован в целом ряде технологий связанных с физикой твердого тела.

### ВЫВОДЫ

В работе исследована аномальная диффузия частиц в пространственно-периодических структурах под воздействием периодических во времени полей. Изучено влияние ступенчатого периодического поля. Показано, что при низких частотах экспоненциальное усиление диффузии с уменьшением температуры возможно только в узком интервале амплитуд приложенного поля. Конкретное значение амплитуды и ширина того интервала зависит от диссипативных свойств системы. Физической причиной усиления диффузии является существование двух популяций частиц: “локализованных” и “бегущих”. При оптимальном выборе амплитуды осуществляются длинные усеченные прыжки Леви бегущих частиц относительно локализованных. Уменьшение температуры приводит к удлинению таких прыжков. Соответственно возрастает коэффициент диффузии.

В низкочастотной области весь возможный диапазон амплитуд разбивается на три области, различающиеся функциональным поведением коэффициента диффузии с температурой. Показано что, коэффициент диффузии может возрастать на многие порядки при приложении внешнего поля. Степень усиления диффузии существенным образом зависит от температуры, амплитуды и частоты внешнего поля.

Исследований эффект может найти практическое применение в широком круге физических систем.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Costantini G., Marchesoni F. Threshold diffusion in a tilted washboard potential // *Europhys. Lett.* – 1999. – Vol.48. – P.491.
2. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // *Rev. Mod. Phys.* – 2009. – Vol. 81. – P. 337–442.
3. 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.
4. Lacasta A.M., Sancho J.M., Romero A.H., Sokolov I.M., Lindenberg K. From subdiffusion to superdiffusion of particles on solid surfaces // *Phys. Rev.* – 2004. – Vol. E70. – P. 051104.
5. Risken H. *The Fokker-Planck Equation and Methods of Solution and Applications* (Springer) 1989.
6. 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.
7. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Anomalous temperature dependence of diffusion in crystals in time-periodic external fields // *JETP Letters.* – 2012. – Vol. 95, No. 3. – P. 137–142.
8. Lindenberg K., Sancho J.M., Lacasta A. M., Sokolov I.M. Dispersionless Transport in a Washboard Potential // *Phys. Rev. Let.* – 2007. – Vol. 98. – P. 020602. (4 pp.)
9. Кузнецов Д.Ф. Стохастические дифференциальные уравнения: теория и практика численного решения.– Санкт-Петербург: Из-во Политех. ун-та, 2007. – 800 с.
10. Sancho J.M., Lacasta A.M., Lindenberg K., Sokolov I.M., Romero A.H. Diffusion on a Solid Surface: Anomalous is Normal // *Phys. Rev. Let.* – 2004. – Vol. 92. – P. 250601. (4 pp.)
11. Siegle P., Goychuk I., Hanggi P. Origin of Hyperdiffusion in Generalized Brownian Motion // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol.105. – P.100602 (4 pp.)
12. Зеленый Л.М., Милованов А.В. Фрактальная топология и странная кинетика: от теории перколяции к проблемам космической электродинамики // *УФН.* – 2004. – Т. 174. – No.8. – С. 809–852.
13. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Abnormal surface diffusion of particles under the action of an external time-periodic force// *Journal of Physics: Conf. Ser.*– 2014.– Vol. 514. – P. 012045 (1–5).
14. Marchenko I.G., Marchenko I.I. Particle transport in space-periodic potentials in under-damped systems// *European Physical Journal B.* – 2014.– Vol. 87.– P. 10 (7 pp.).
15. Bruch L.W., Diehl R.D., Venables J.A. Progress in the measurement and modeling of physisorbed layers // *Rev. Mod. Phys.*– 2007.– Vol. 79.– P. 1381– 1454.
16. Krim J. Friction and energy dissipation mechanisms in adsorbed molecules and molecularly thin films // *Advances in Physics.*– 2012.– Vol. 61. – No. 3.– P. 155–323.