

PACS: 05.40.-a, 02.50.Ey, 68.43.Jk, 66.30.J-

TEMPERATURE-ABNORMAL DIFFUSIVITY IN TILTED SPATIALLY PERIODIC POTENTIALS

I.G. Marchenko^{1,2}, I.I. Marchenko³, V.I. Tkachenko^{1,2}

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

e-mail: march@kipt.kharkov.ua

Received January 25, 2017

The paper describes diffusion of particles in a tilted spatially periodic potential under the action of external forces in the case of a low friction. It is shown that in underdamped systems, a region of temperature-abnormal diffusivity (TAD) exists, in which the diffusion coefficient increases with decreasing temperature. The TAD width and its position depend on the friction coefficient and the system parameters. The analytical expression for diffusion coefficients in TAD area is derived. These results are important for experimental investigations of TAD and its application.

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

ТЕМПЕРАТУРНО-АНОМАЛЬНА ДИФУЗИЯ У ПОХИЛИХ ПРОСТОРОВО-ПЕРІОДИЧНИХ ПОТЕНЦІАЛАХ

I.G. Марченко^{1,2}, I.I. Марченко³, В.I. Ткаченко

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 досліджена дифузія частинок у похилих просторово-періодичних потенціалах під дією зовнішніх сил у системах з низьким коефіцієнтом тертя. Показано, що у всіх недодемпфованих системах існує обмежена область температурно-аномальні дифузії (ТАД). У цій області коефіцієнт дифузії зростає із зниженням температури. Визначені ширина та положення області ТАД в залежності від значення коефіцієнту тертя та параметрів системи. Знайдені аналітичні вирази для коефіцієнтів дифузії в межах низьких температур. Отримані залежності мають важливе значення для експериментального виявлення явища температурно-аномальної дифузії та подальшого його використання.

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

ТЕМПЕРАТУРНО-АНОМАЛЬНАЯ ДИФФУЗИЯ В НАКЛОННЫХ ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛАХ

I.G. Марченко^{1,2}, I.I. Марченко³, В.I. Ткаченко^{1,2}

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

В работе исследована диффузия частиц под действием внешних сил в пространственно-периодических потенциалах, характеризующихся малыми значениями коэффициента трения. Показано, что во всех недодемпфированных системах существует ограниченная область температурно-аномальной диффузии (ТАД). В этой области коэффициент диффузии возрастает с понижением температуры. Определены ширина и положение области ТАД в зависимости от значений коэффициента трения и параметров системы. Найдены аналитические выражения для коэффициентов диффузии в пределе низких температур. Полученные зависимости имеют важное значение для экспериментального обнаружения явления температурно-аномальной диффузии и дальнейшего его использования.

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

Диффузия в периодических структурах играет ключевую роль во многих физических, химических и биологических процессах [1,2]. Интерес к изучению процессов транспорта частиц в наклонных периодических потенциалах (washboard potentials) связан с широким кругом физических систем, которые ими описываются. К таким системам относятся контакты Джозефсона, суперионные проводники, волны зарядовой плотности,

системы фазовой автоподстройки частоты и пр. [3].

В последние годы наблюдается возрастающий интерес к экспериментальным исследованиям ускорения диффузии частиц путем приложения внешнего поля [4-7]. Изменяя характеристики поля можно эффективно управлять процессами диффузии. Это открывает новые технологические возможности управления диффузией без повышения температуры.

Первые подробные исследования движения Броуновских частиц в наклонных периодических потенциалах были выполнены Х. Рискемом [8-13], как для случая недодемпфированного, так и для передемпфированного движения. Было показано, что для недодемпфированного случая важным в поведении ансамбля частиц является возникновение “локализованных” и “бегущих” решений. При внешней силе F превышающей критическое значение F_{cr} возникает бифуркация и вместо одного решения, возникает два: так называемые “локализованное” и “бегущее” решения. Обобщение результатов работ [8-13] можно найти в монографии [3]. Х. Рискемом были получены функции распределения частиц и выражения для мобильности частиц. В то же время коэффициент диффузии не исследовался. По-видимому, впервые методами численного решения уравнения Ланжевена диффузия систематически исследовались Ф. Марчезони [14-15]. Им был установлен существенный рост пространственной диффузии частиц в системах с малой диссипацией вблизи критической силы, вызванный переходом частиц из “локализованного” в “бегущее” решение. Дальнейшее развитие работ по изучению диффузии под воздействием постоянной силы было связано с работами группы К. Линденберг [16-19]. В работе [16] изучалось поведение дисперсии ансамбля частиц во времени. Температурная зависимость диффузии была исследована в [19]. По-видимому, в этой работе авторами впервые было показано что в наклонных периодических потенциалах коэффициент диффузии ведет себя аномальным образом. При некотором значении силы он рос с понижением температуры. Однако, ограниченность численных данных не позволила авторам установить правильную температурную зависимость. Ими был сделан вывод о том, что коэффициент диффузии имеет степенную зависимость от обратной температуры: $D_{max} \sim T^{-3,5}$.

В работе [20] нами впервые было показано, что в определенном интервале сил диффузия возрастает с понижением температуры экспоненциальным образом: $D_{max} \sim \exp(\varepsilon/kT)$. Это явление авторы позднее назвали температурно-аномальной диффузией (ТАД) [21]. Также были установлены физические причины такого аномального явления. Показано, что диффузия растет с понижением температуры за счет экспоненциального роста корреляционного времени. В работе [22] была построена феноменологическая модель, объясняющая это поведение. Было показано, что существование эффективного двухямыного потенциала в пространстве скоростей в недодемпфированных системах приводит к экспоненциальному росту коэффициента диффузии. Однако, исследование области ТАД в работе [21] было проведено лишь для одного значения безразмерного коэффициента трения γ . Исследование ТАД было продолжено в работе [23]. И. Соколов и Б. Линднер подтвердили существование области ТАД в широком интервале γ . Они численно построили диаграмму существования ТАД для различных F и γ , используя результаты моделирования уравнений Ланжевена. В то же время, расчеты не были проведены для малых γ ($\gamma \leq 0,1$), т.к. в этом случае время компьютерных расчетов существенно возрастает ($\sim 1/\gamma$).

Целью данного исследования является установление области существования ТАД при малых γ на основе обширных компьютерных вычислений, а также получение аналитических выражений для коэффициента диффузии и ширины зоны ТАД на основе теоретической модели, предложенную в работе [22].

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

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

$$m \ddot{X} = -\frac{d}{dx}U(X) - \Gamma \dot{X} + F + \xi(t), \quad (1)$$

где t - время, X – координата частицы в одномерной решетке, m - ее масса, Γ - 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 одномерной периодической решетке 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 решетки F_{lat} :

$$F_{lat} = -\frac{dU}{dX} = F_0 \sin\left(\frac{2\pi}{a} X\right). \quad (4)$$

Величина $F_0 = \frac{\pi}{a} U_0$, называемая критической силой [16, 24], 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 [20-22]: $U_0 = 0,08$ эВ, $a = 2,0$ Å. Масса частиц соответствовала массе водорода и была равна 1 атомной единице массы.

Стохастические уравнения (1)-(2) для каждой частицы решались численно методом Эйлера [25] с шагом по времени составляющим менее 0,01 периода собственных малых колебаний. Статистическое усреднение проводилось по ансамблю с количеством частиц не менее $N = 10^5$. Начальные условия задавались следующим образом: частица помещалась в начале координат и ей случайным образом сообщалась скорость, имеющая Максвелловское распределение по температуре. Для достижения равновесной функции распределения частиц как по скоростям, так и по координатам проводилась термализация системы в течение 10^4 временных шагов. Как показали расчеты, после этого времени распределение, как по координатам, так и по скоростям ансамбля частиц не менялось. В процессе термализации частицы могли совершать скачок в соседние элементарные ячейки одномерной решетки. Для того чтобы диффузия частиц происходила из начала координат такие частицы перемещались в первую элементарную ячейку путем трансляции на целое количество постоянных решеток.

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

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} D_{ef}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}{2t} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{2t}, \quad (5)$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по ансамблю. При каждом расчете коэффициента диффузии определялось время t_{in} достижения линейной зависимости дисперсии от времени. Коэффициент диффузии определялся при времени $t > 100t_{in}$.

Для сопоставления данных полученных в данной работе с результатами других авторов, перейдем к безразмерным величинам времени τ и расстояния x [3]:

$$x = \frac{2\pi X}{a}, \quad \tau = t / \tau_0, \quad (6)$$

где $\tau_0 = a\sqrt{2m/U_0}$ - период собственных малых колебаний около положения равновесия в потенциальном поле $U(X)$. Далее мы также будем использовать безразмерные величины температуры T' и трения γ :

$$T' = \frac{Tk}{U_0}; \quad \gamma = \Gamma \frac{a}{\pi\sqrt{2mU_0}}; \quad (7)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Численное решение уравнений Ланжевена

Было проведено численное моделирование уравнений (1)-(2) для различных значений коэффициентов трения и температур. Зависимости коэффициентов диффузии $D(F/F_0)$ от силы для различных коэффициентов трения при температуре $T = 0,19$ приведены на рис. 1. Для двух значений γ ($\gamma = 0,03$ и $\gamma = 0,003$) были также построены такие зависимости при температурах $T = 0,13$ и $T = 0,39$. Из этих двух групп графиков видно, что независимо от величины γ в ограниченном интервале сил наблюдается область ТАД. На рис. 2 приведена температурная зависимость коэффициента диффузии от обратной температуры при $\gamma = 0,03$. При выбранном значении действующей силы $F/F_0 = 0,1$ наблюдается максимальное усиление диффузии для данного γ . Как следует из рис. 2, при $1/T > 1$ наблюдается рост коэффициента диффузии с падением температуры.

Как видно из рис. 1, ширина интервала действующих сил, в котором наблюдается ТАД ΔF_{TAD} , линейно уменьшается с уменьшением γ . Детальный анализ всех графиков приведенных на рис. 1 показывает, что ΔF_{TAD} линейно уменьшается с коэффициентом трения, а максимальное значение D с уменьшением γ линейно растет. Чтобы понять физические причины такого поведения, проанализируем изменение функции распределения частиц по скоростям $n(V)$, которые были построены для значений F , приведенных на рис. 1.

На рис. 3 в качестве примера построенных зависимостей приведен график функции распределения частиц по скоростям для двух различных значений γ , отличающихся на порядок ($\gamma = 0,003$ и $\gamma = 0,0003$). Температура была постоянной и равнялась $T = 0,19$. Величина $V_0 = \sqrt{U_0/m}$. Значение действующих на частицы сил F выбиралось таким образом, чтобы коэффициент диффузии был максимальным для данных значений γ и T . Как видно из рисунка, два приведенных графика совпадают. Однако, при этом оказалось, что и отношение действующих сил так же отличались на порядок.

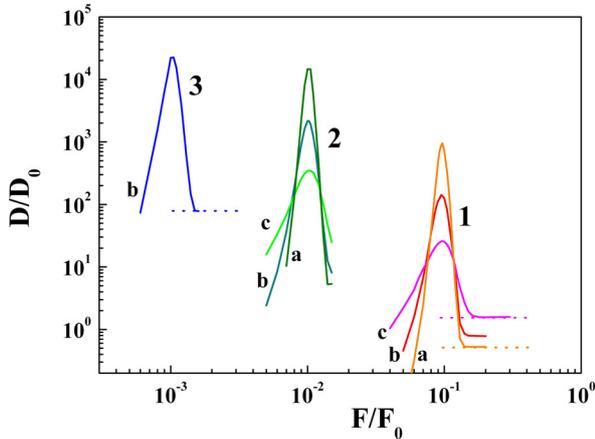


Рис. 1. Зависимости коэффициентов диффузии от действующей силы для различных γ

1- $\gamma = 3 \times 10^{-2}$, 2- $\gamma = 3 \times 10^{-3}$, 3- $\gamma = 3 \times 10^{-4}$.

$D_0 = \pi^2 / \tau_0$. Температуры равны: а - $T' = 0,13$,

б - $T' = 0,19$, с - $T' = 0,39$. Пунктирными линиями

показаны коэффициенты диффузии в вязкой среде:
 $D = kT / \gamma$.

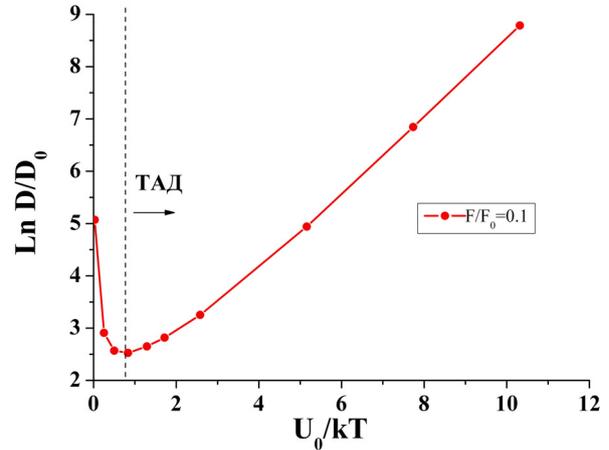


Рис. 2. Зависимость коэффициента диффузии от обратной температуры в зоне ТАД. $\gamma = 3 \times 10^{-2}$, $F / F_0 = 0,1$.

Стрелкой показан интервал температур, в котором коэффициент диффузии растет с понижением температуры.

Таким образом, из приведенных графиков и анализа аналогичных графиков для других значений F и γ следует, что при малых γ функция распределения по скоростям зависит только от отношения F / γ . Впервые это было отмечено у Рискена (рис. 11.22-11.22а в [3]). Из этого простого факта можно получить скейлинговые зависимости, как для подвижности, так и для диффузионных кривых. В стационарном случае если известна функция распределения частиц по скоростям $n(V)$ можно найти подвижность частиц.

Средняя скорость частиц для действующей силы F и коэффициента трения γ находится как

$$\langle V \rangle(F, \gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} V n(V) dV. \quad (8)$$

Функция $n(V)$ нормирована, так что $\int_{-\infty}^{\infty} n(V) dV = 1$.

Мобильность частиц по определению есть

$$\mu(F, \Gamma) = \frac{\langle V \rangle(F, \gamma)}{F}. \quad (9)$$

Поскольку $n(V, F, \gamma) = n(V, F / \Gamma)$, то для подвижностей должно выполняться соотношение:

$$\Gamma_1 \mu(\Gamma_1, F_1) = \gamma_2 \mu(\Gamma_2, F_1 \Gamma_2 / \Gamma_1). \quad (10)$$

Эту зависимость хорошо демонстрируют графики на рис. 4. Здесь приведены зависимости $\Gamma \mu$ от безразмерной величины $F / (\Gamma V_F)$ для различных значений Γ . Совпадающие графики на рисунке подтверждают сделанный вывод о том что, для фиксированной температуры зависимость $\Gamma \mu(\Gamma, F / (\Gamma V_F))$ является универсальной. Величина V_F вместо V_0 введена в связи с тем, что под действием силы изменяется

величина энергетического барьера U_0 , который частица должна преодолеть при прыжке в следующий минимум на решетке. При малых Γ величина силы вблизи области ТАД так же мала. И приближенно барьер равен $U(F) = U_0(1 - aF/2)$. Соответственно, $V_F = V_0 \left(1 - \frac{a}{4m}F\right)$. При $\gamma \rightarrow 0$ $U(F) \rightarrow U_0$ и $V_F \rightarrow V_0$.

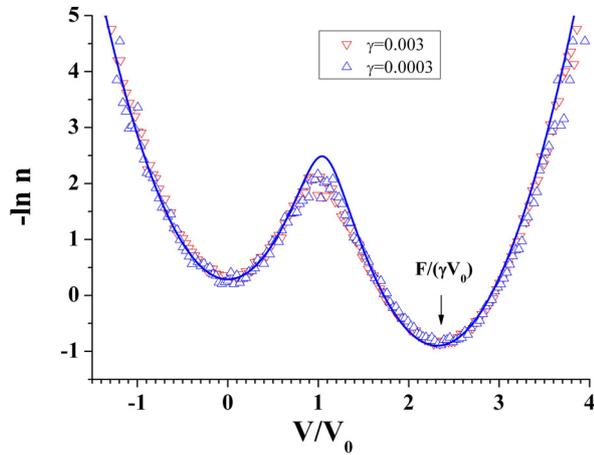


Рис. 3. Зависимость функции распределения частиц по скоростям для различных γ при значении силы с максимальным $D(F)$.

$T' = 0,19$, ∇ - $\gamma = 0,003$, Δ - $\gamma = 0,0003$. Сплошной линией нанесены расчетные значения исходя из модели двухямого потенциала $W(V)$. [22]. Функция имеет минимумы при $V = 0$ и $V = F/\gamma$.

Аналогично с подвижностью, скейлинговые зависимости могут быть получены и для коэффициента диффузии. В соответствии с соотношением Кубо коэффициент диффузии может быть получен из автокорреляционной функции

$$D = \int_0^{\infty} d\tau \langle v(t)v(t+\tau) \rangle = \langle \Delta v^2 \rangle \tau_{corl}. \quad (11)$$

В стационарном случае коэффициент диффузии может быть рассчитан следующим образом [26]:

$$D = \frac{1}{Q} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^V (u - \langle u \rangle) n(u) du \right]^2 / n(V) dV. \quad (12)$$

Из вида зависимости $n(V, F, \Gamma) = n(V, F/\Gamma)$, аналогично с мобильностью, для коэффициента диффузии получаем:

$$D_1(\Gamma_1, F_1)/\Gamma_1 = D_2(\Gamma_2, F_1\Gamma_2/\Gamma_1)/\Gamma_2. \quad (13)$$

На рис. 5 приведены графики зависимости диффузии от действующей силы для 3 различных коэффициентов трения. Моделирование было проведено для трех различных температур. На рисунке хорошо видна область ТАД в которой коэффициент диффузии растет с понижением температуры.

Из графиков видно, что соотношение (13) выполняется с хорошей точностью. Небольшое различие в данных для $\gamma = 0,03$ и $\gamma = 0,003$ связано с обсуждавшимся выше фактом изменения активационного барьера U_0 под действием силы. Величины сил ограничивающих зону ТАД, так же уменьшаются с γ . Поэтому различия в графиках должно нивелироваться с уменьшением γ . Графики на рис. 4, соответствующие температуре $T = 0,19$ показывают, что это действительно так. Кривые соответствующие $\gamma = 0,003$ и $\gamma = 0,0003$ практически совпадают.

Таким образом, из анализа данных компьютерного моделирования следует, что при любых малых γ существует область ТАД. Ее ширина $\Delta F_{TAD} \approx \gamma V_F$ и центр расположен вблизи силы $F \approx 2\gamma V_F$.

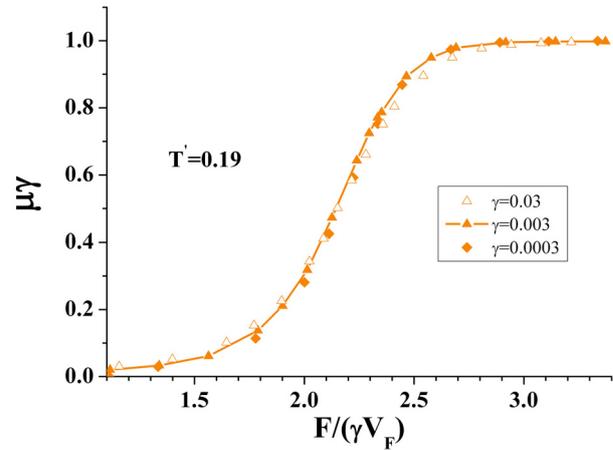


Рис. 4. Подвижность умноженная на коэффициент трения в зависимости от величины от $F/(\gamma V_F)$ для различных γ .

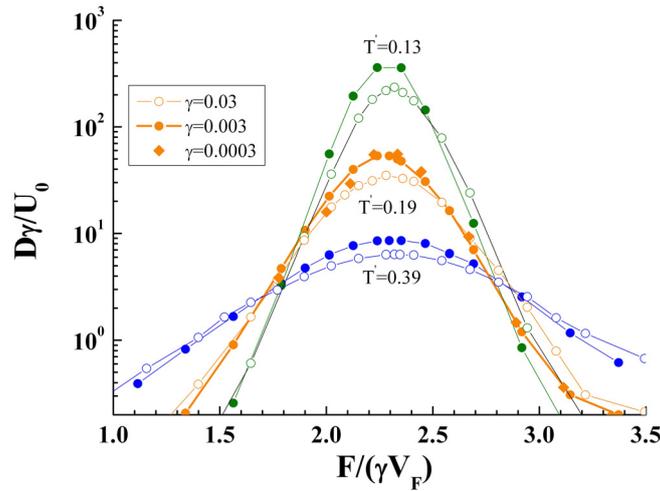


Рис. 5. Зависимость величины γD от безразмерной величины $F/(\gamma V_{cr}^F)$ для различных γ .

Аналитические уравнения для ТАД

Полученные данные компьютерных расчетов дают весомые аргументы в пользу гипотезы о скейлинговой зависимости. Ширина ΔF_{TAD} линейно уменьшается с коэффициентом трения, а максимальное значение D с уменьшением γ линейно растет. Для подтверждения этого вывода найдем аналитический вид зависимости D от температуры в области ТАД. Для этого обратимся к ранее используемой 2-ямной модели эффективного потенциала частиц в пространстве скоростей [22]. Согласно ей движение ансамбля частиц можно описать следующими уравнениями:

$$\begin{cases} \dot{x} = V \\ \dot{V} = -\frac{\partial W(V, F)}{\partial V} + \zeta(t) \end{cases}, \quad (14)$$

где белый шум удовлетворяет уравнению:

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2Q\delta(t-t') = 2\frac{\Gamma kT}{m^2}\delta(t-t') = 2QT. \quad (15)$$

Если известен эффективный потенциал W , то функция распределения по скоростям находится как $n(V) = e^{-W/Q}$. Типичный вид функции $n(V)$ в зоне ТАД, полученный численными расчетами, приведен маркерами на рис. 3. Тут же сплошной линией приведена функция распределения, полученная в соответствии с моделью эффективного потенциала предложенного в [22]. Видно, что поведение $n(V)$ хорошо согласуется с этой моделью. В [22] $n(V)$ при низких температурах полагался равным:

$$n(V) = A(F)e^{-\beta^2 V^2} + B(F)e^{-\beta^2 (V-F/\gamma)^2}, \quad (16)$$

где $\beta^2 = \frac{m}{2kT}$. При низких температурах ($T \ll U_0/k$) эффективный потенциал W имеет минимумы при $V = 0$

и $V = F/\Gamma$. Вблизи минимумов W имеет параболическую зависимость: $W(V) \sim \frac{\Gamma}{m}V^2$. Для однозначности задания потенциала необходимо также задать условие при значении $V = V_0$. В качестве такового выберем:

$A(F)e^{-\beta^2 V_0^2} = \alpha B(F)e^{-\beta^2 (V_0 - F/\Gamma)^2}$. Это условие при низких температурах эквивалентно условию введенному в [22], однако при этом функция при $V = V_0$ остается гладкой. Величина α может быть получена из данных компьютерного моделирования зависимостей $\Gamma\mu(F, T)$.

Для малых температур воспользуемся упрощенной 2-скоростной моделью Броека [27]. Мы будем считать, что ансамбль состоит из частиц которые двигаются только с двумя скоростями: $V = 0$ (V_-) и $V = F/\Gamma$ (V_+). Для перехода из одного состояния в другое частицам необходимо преодолеть барьеры W_- (из V_- в V_+) и обратно - W_+ . Скорость перехода из V_- в V_+ равна:

$$k_- = \frac{\omega_- \omega_{cr}}{2\pi} \exp\left(-\frac{\Delta W_-}{Q}\right), \quad (17)$$

а обратно:

$$k_+ = \frac{\omega_+ \omega_{cr}}{2\pi} \exp\left(-\frac{\Delta W_+}{Q}\right), \tag{18}$$

где ω_-^2 , ω_+^2 и ω_{cr}^2 - абсолютные величины кривизны потенциала в точках минимума и точке перевала. Как следует из работы [22], $\omega_-^2 = \omega_+^2 = \omega_0^2 = \frac{\Gamma}{2m}$. При низких температурах в точке перевала эффективный потенциал имеет форму пика. В этом случае скорости переходов записываются как [28]:

$$k_{\pm} = \frac{\omega_0^2}{2\pi} \left(\frac{\pi \Delta W_{\pm}}{Q}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\Delta W_{\pm}}{Q}\right). \tag{19}$$

Тогда, в соответствии с предложенной моделью, скорость прямого перехода равна:

$$k_- = \frac{\Gamma \beta V_{cr}}{4m\pi^{1/2}} \exp(-\beta^2 V_{cr}^2), \tag{20}$$

а обратно:

$$k_+ = \alpha \frac{\Gamma \beta V_{cr}}{4m\pi^{1/2}} \exp(-\beta^2 (V_{cr} - F/\Gamma)^2), \tag{21}$$

где α будем считать постоянной величиной. Согласно [27] средняя скорость равна: $\langle V \rangle = \frac{k_- V_- + k_+ V_+}{k_- + k_+}$.

Подставляя выражения и приводя подобные получим:

$$\langle V \rangle = \frac{F}{\Gamma} \frac{\alpha}{\alpha + \exp\left[-\beta^2 \left(\left(F/\Gamma - V_{cr}\right)^2 - V_{cr}^2\right)\right]} = \frac{F}{\Gamma} \frac{\alpha}{\alpha + \frac{V_{cr}}{F/\Gamma - V_{cr}} \exp\left[-\frac{\beta^2}{\Gamma} F \left(\frac{F}{2\Gamma} - V_{cr}\right)\right]}. \tag{22}$$

Данное рассмотрение справедливо при $F/\Gamma > V_{cr}$ (когда одновременно существуют “бегущее” и “локализованное” решения). В точке $(F/\Gamma - V_{cr})^2 = V_{cr}^2$ или $F = 2V_{cr}\gamma$ зависимость от температуры исчезает и $\langle V \rangle = \frac{\alpha}{\alpha + 1} \frac{F}{\Gamma}$. Подставляя значение для подвижности для этой точки получаем: $\mu\Gamma = \frac{\alpha}{\alpha + 1}$.

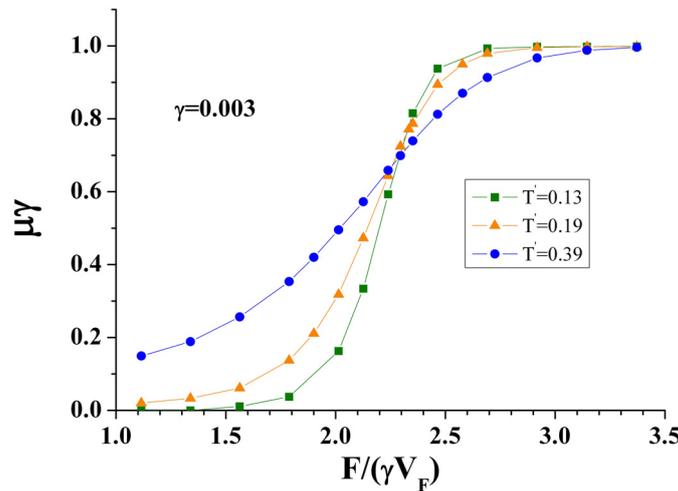


Рис. 6. Зависимость произведения подвижности на коэффициент трения от безразмерной величины $F / (\gamma V_{cr}^F)$ для различных температур. $\gamma = 0,003$.

На рис. 6 приведены температурные зависимости величины $\mu\Gamma$ от силы. Видно, что на графиках существует одна неподвижная точка. Значение $\mu\Gamma$ в этой точке приблизительно равно $\mu\Gamma = 2/3$. Таким образом, из данных моделирования следует, что $\alpha = 2$. Подставляя значение α в выражение (24) получаем для подвижности результат, совпадающий с выражением, полученным в работе [22]:

$$\langle V \rangle = \frac{F}{\Gamma} \frac{2}{2 + \exp\left[-\frac{m}{2\Gamma kT} F \left(\frac{F}{2\Gamma} - V_{cr}\right)\right]}. \tag{23}$$

Коэффициент диффузии в 2-уровневой модели [27] равен: $D = \frac{k_- k_+}{(k_- + k_+)^3} (V_+ - V_-)^2$.

Для простоты выкладок введем обозначение $f = \frac{F}{\Gamma V_{cr}}$. Тогда:

$$D = \frac{4mV_{cr}\pi^{1/2}}{\Gamma\beta} \frac{f^2 \exp\left(\beta^2 V_{cr}^2 [2 - (1-f)^2]\right)}{\left[1 + \alpha \exp\left(-\beta^2 V_{cr}^2 [(1-f)^2 - 1]\right)\right]^3}. \quad (24)$$

Рассмотрим случай $\beta \rightarrow \infty$ (или $T \rightarrow 0$). На температурных зависимостях $D(F)$ будут существовать две области, в которых коэффициент диффузии возрастает с температурой. При $f < 2$ (или $F < 2\gamma V_{cr}$) второе слагаемое в знаменателе много больше единицы и для коэффициента диффузии получаем:

$$D \approx \frac{4mV_{cr}\pi^{1/2}}{\Gamma\beta} \frac{f^2}{\alpha^3} \exp\left(\beta^2 V_{cr}^2 [2 - (1-f)^2]\right) \exp\left(3\beta^2 V_{cr}^2 [(1-f)^2 - 1]\right). \quad (25)$$

Видно, что при $f < f_l = 1 + 1/\sqrt{2}$ коэффициент диффузии с повышением температуры возрастает. При $f > f_l$ и постоянном Γ коэффициент диффузии растет с понижением температуры как $D \sim 1/\beta \exp\left(\beta^2 V_{cr}^2 [2(f-1)^2 - 1]\right)$. В максимуме скорость роста коэффициента диффузии максимальна и $D \sim 1/\beta \exp\left(\beta^2 V_{cr}^2\right)$ или $D \sim T^{1/2} \exp\left(\frac{U_0}{2kT}\right)$.

При $f > 2$ (или $F > 2\gamma V_{cr}$) второе слагаемое в знаменателе выражения (24) стремится к нулю. Коэффициент диффузии растет с понижением температуры до достижения точки $f_r = 1 + \sqrt{2}$. При $f_r > 1 + \sqrt{2}$ характер температурной зависимости изменяется и коэффициент диффузии снова начинает повышаться с повышением температуры.

Таким образом, зона ТАД заключена между значениями $f_r < f < f_l$ и имеет ширину $\Delta F_{TAD} = \Gamma V_{cr} \sqrt{2}/2$. При малых Γ , когда величина активационного барьера не изменяется, ширина области ТАД равна $\Delta F_{TAD} = \sqrt{2}/2\Gamma(U_0/m)^{1/2}$. Во всей этой области при низких температурах ($T \ll U_0/k$) коэффициент диффузии растет с понижением температуры $D \sim T^{1/2} \exp(\Delta U/kT)$. Максимальная величина ΔU равна U_0 в максимуме и стремится к нулю в точках f_l и f_r . Ширина зоны ТАД уменьшается линейно с уменьшением Γ . В пределе $\Gamma \rightarrow 0$ зона ТАД исчезает. Наблюдается скейлинг по Γ : с уменьшением Γ ширина области ТАД $\Delta F_{TAD}(\Gamma)$ пропорционально Γ :

$$\Delta F_{TAD}(\Gamma_2) = \Gamma_2 \frac{\Delta F_{TAD}(\Gamma_1)}{\Gamma_1}. \quad (26)$$

Максимальный коэффициент диффузии в зоне ТАД экспоненциально растет с понижением температуры $D \sim T^{1/2} \exp(U_0/kT)$.

ВЫВОДЫ

В работе исследована диффузия частиц под действием внешних сил в пространственно-периодических системах, характеризующихся малыми значениями коэффициента трения γ . Показано, что во всех недодемпфированных периодических системах существует ограниченная область температурно-аномальной диффузии (ТАД). В этой области действующих сил коэффициент диффузии возрастает с понижением температуры как $\sim T^{1/2} \exp(\Delta U/kT)$. В зависимости от значения силы, барьер ΔU находится в интервале $0 < \Delta U < U_0$. Найдены аналитические выражения для мобильности и коэффициентов диффузии в пределе низких температур. Определена ширина и положение области ТАД в зависимости от γ . Показано, что с уменьшением γ ширина зоны уменьшается $\sim \gamma$. При этом коэффициенты диффузии в этой области, наоборот возрастают $\sim \gamma$.

Полученные зависимости имеют важное значение для экспериментального обнаружения явления температурно-аномальной диффузии и дальнейшего его использования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Costantini G. and 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. Risken H. *The Fokker-Planck Equation and Methods of Solution and Applications.* – Springer, 1989. – 472 p.
4. Lee S.-H., Grier D.G. Giant Colloidal Diffusivity on Corrugated Optical Vortices // *Phys. Rev. Lett.* –2006. – Vol. 96. – P. 190601.
5. Tierno P., Reimann P., Johansen T.H., Sagués F. Giant transversal particle diffusion in a longitudinal magnetic ratchet // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol. 105. – P. 230602.
6. Eshuis P., van der Weele K., Lohse D., van der Meer D. Experimental Realization of a Rotational Ratchet in a Granular Gas // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol. 104. – P. 248001.
7. Pagliara S., Schwall C., Keyser U.F. Optimizing Diffusive Transport Through a Synthetic Membrane Channel // *Advanc. Mat.* – 2013. – Vol. 25. – P. 844.
8. Risken H., Vollmer H.D. Low friction nonlinear mobility for the diffusive motion in periodic potentials // *Phys. Lett.* - 1979. – Vol. 69A. – No.6. – P.387- 389.
9. Risken H., Vollmer H.D. Brownian Motion in Periodic Potentials; Nonlinear Response to an External Force // *Z. Physik.* - 1979. – Vol. B 33. – P.297.
10. Risken H., Vollmer H.D. Bistability Effects of the Brownian Motion in Periodic Potentials // *Z. Physik.*- 1980. – Vol. B 37. – P. 343-349.
11. Risken H., Vollmer H.D. Distribution Functions for the Brownian Motion of Particles in a Periodic Potential Driven by an External Force // *Z. Physik.* – 1979. – Vol. B34. – P. 313-322.
12. Risken H., Vollmer H.D. Nonlinear Response to an External Force // *Z. Physik.* – 1979. – Vol. B 35. – P. 177-184.
13. Jung P., Risken H., Eigenvalues for the Extremely Underdamped Brownian Motion in an Inclined Periodic Potential // *Z. Physik.* – 1984. – Vol. B 54. – P. 357-370.
14. Costantini G., Marchesoni F. Threshold diffusion in a tilted washboard potential // *Europhys. Lett.* – 1999. – Vol. 48. – P. 491-497.
15. Borromeo M., Costantini G., Marchesoni F. Critical Hysteresis in a Tilted Washboard Potential // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – Vol. 82. – P. 2820–2823.
16. 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.
17. Sancho J. M., Lacasta A.M., Lindenberg K., Sokolov I.M., Romero A. H. Diffusion on a Solid Surface: Anomalous is Normal // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 92. – P. 250601.
18. Khoury M., Gleeson J. P., Sancho J. M., Lacasta A. M., Lindenberg K. Diffusion coefficient in periodic and random potentials // *Phys. Rev.* – 2009. – Vol. E 80. – P. 021123.
19. Lindenberg K., Lacasta A.M., Sancho J.M., Romero A.H. Transport and diffusion on crystalline surfaces under external forces // *New Jour. of Phys.* – 2005. – Vol. 7. – P. 29.
20. 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.
21. Marchenko I.G., Marchenko I.I., Zhiglo A.V. Temperature-abnormal diffusivity in underdamped space-periodic systems driven by external time-periodic force, <http://arxiv.org/abs/1701.01424>.- 2017.
22. Marchenko I.G., Marchenko I.I., Zhiglo A.V. Particle transport in space-periodic potentials in underdamped systems // *Europ. Phys. Jour.* – 2014. – Vol. B87. – P. 10.
23. Lindner B., Sokolov I.M. Giant diffusion of underdamped particles in a biased periodic potential // *Phys. Rev.* – 2016. – Vol. E93. – P. 042106.
24. Reimann, P., Van den Broeck C., Linke H., Hänggi P., Rubi J. M., Pérez-Madrid A. Diffusion in tilted periodic potentials: Enhancement, universality, and scaling // *Phys. Rev.* – 2002. – Vol. E65. – P. 031104.
25. Kuznetsov D.F. *Stokhasticheskie differentsial'nye uravneniya: teoriya i praktika chislennogo resheniya* [Stochastic differential equations: theory and practice of numerical solution]. – SPb: Sankt-Peterburg, Iz-vo Politeh. un-ta, 2007. – 800p. (in Russian)
26. Lindner B., Nicola E.M. Critical Asymmetry for Giant Diffusion of Active Brownian Particles // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – Vol. 101. – P. 190603.
27. van den Broeck C. Taylor dispersion revisited // *Physica.* – 1990. – Vol. A168. – P. 677-696.
28. Hänggi P., Talkner P., Borkovec M. Reaction-rate theory: fifty years after Kramers // *Rev. Mod. Phys.* – 1990. – Vol. 62. – P. 251–341.