МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Навчально-науковий інститут комп'ютерної фізики та енергетики

Кафедра фізики нетрадиційних енерготехнологій та екології

Пояснювальна записка

до дипломної роботи

за освітньо-кваліфікаційним рівнем

«магістр»

на тему: **«Когерентний транспорт частинок у просторово-періодичних потенціалах»**

Виконала: студентка 6 курсу
магістратури групи НФ-61
Полякова Анастасія Олегівна

Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Освітня програма: Прикладна фізика нетрадиційної енергетики

Керівник: к.ф.-м.н, доцент
Марущенко Ілля Миколайович

Рецензент: д.ф.-м.н., завідувач відділом ННЦ ХФТІ
Соколенко Володимир Іванович

Харків – 2022 року

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна

ННІ комп'ютерної фізики та енергетики
Кафедра фізики нетрадиційних енерготехнологій та екології
Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) магістр
Спеціальність 105–Прикладна фізика та наноматеріали

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____Олександр КУЛИК
підпис прізвище

"15" вересня 2022 року

З А В Д А Н Н Я
НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ (ПРОЕКТ)

Полякова Анастасія Олегівна
(прізвище, ім'я, по батькові студента)

1. Тема роботи: Когерентний транспорт частинок у просторово-періодичних потенціалах

керівник роботи: Марущенко І.М., кандидат ф.-м. наук
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від "03" жовтня 2022р. №4201-5/1669

2. Строк подання студентом роботи: 20.11.2022р.

3. Перелік питань, які потрібно розробити
Провести літературний аналіз робіт по транспорту частинок у просторово-періодичних потенціалах. Зробити розрахунки залежності середньої швидкості часток, кінетичної температури та дисперсії в залежності від часу для різних діючих сил. Провести аналіз отриманих чисельних результатів.

4. План роботи

№ з/п	**Назви етапів роботи**
1.	Проведення літературного аналізу робіт по транспорту частинок у просторово-періодичних потенціалах
2.	Вивчення методів вирішення стохастичних диференціальних рівнянь
3.	Проведення розрахунків зміни середньої швидкості та кінетичної температури в ансамблі частинок в залежності від часу для різних діючих сил
4.	Проведення розрахунків дисперсії в ансамблі частинок, які рухаються в періодичному потенціалі під дією зовнішньої сили
5.	Побудова отриманих залежностей та проведення аналізу чисельних результатів

5. Дата видачі завдання

_____

Студент _____ **Полякова А.О.**
підпис ініціали, прізвище

Керівник роботи _____ **Марущенко І.М.**
підпис ініціали, прізвище

РЕФЕРАТ

Полякова Анастасія Олегівна, тема дипломної роботи «Когерентний транспорт частинок у просторово-періодичних потенціалах» (випускна робота за освітнім рівнем – магістр). Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна. – 42 сторінок.

Дипломна робота складається зі вступу, трьох розділів, висновку та списку літератури. Використано літератури – 37 джерел.

Мета роботи: обчислити зміни середньої швидкості, кінетичної температури та дисперсії в ансамблі частинок в просторово-періодичних потенціалах в залежності від часу для різних діючих зовнішніх сил.

Об’єкт дослідження: броунівські частинки в просторово-періодичних потенціалах.

Мета дослідження: виявити причини виникнення «бездисперсійного» транспорту.

Наукова новизна одержаних результатів: запропоновано метод визначення коефіцієнта дифузії у «бездисперсійному» режимі, де залежність дисперсії від часу має вигляд плато і звичайні методи визначення коефіцієнта дифузії є неефективними.

SUMMARY

Polyakova Anastasia Olehivna, topic of the thesis "Coherent transport of particles in spatial-periodic potentials" (graduation thesis of master's educational level). V. N. Karazin Kharkiv National University - 42 pages.

The thesis consists of an introduction, three chapters, a conclusion, and a list of references. Used literature - 37 sources.

The purpose of the research work: to calculate the changes in the average velocity, kinetic temperature and dispersion in the ensemble of particles in space-periodic potentials as a function of time for different external forces.

Research object: Brownian particles in spatially periodic potentials.

The purpose of the research: to identify the causes of "dispersionless" transport.

The scientific novelty of the obtained results: a method for determining the diffusion coefficient in the "dispersionless" mode, where the dispersion dependence on time has a plateau and conventional methods for determining the diffusion coefficient are ineffective.

Зміст

Вступ..... 7

Розділ 1. Огляд літературних джерел..... 9

1.1 Актуальність теми..... 9

1.2 «Бездисперсійний» транспорт у похилому періодичному потенціалі.. 11

Розділ 2. Методи розв'язання стохастичних диференціальних рівнянь . 15

2.1 Стохастичні диференціальні рівняння..... 15

2.2 Числові методи розв'язання стохастичних диференціальних рівнянь 18

2.3 Порівняння ефективності числових схем інтегрування стохастичних диференціальних рівнянь..... 22

Розділ 3. Умови виникнення когерентного транспорту у просторово-періодичному потенціалі 24

3.1 Постановка задачі 24

3.2 Результати..... 27

3.3 Фізична модель 31

3.4 Новий метод обчислення коефіцієнту дифузії..... 35

Висновки..... 39

Список використаних джерел 40

Вступ

Актуальність теми. Явища броунівського транспорту та дифузії частинок у нахилених періодичних потенціалах реалізуються в багатьох різноманітних системах. Яскравими прикладами таких систем є суперіонні провідники, оптичні решітки, магнітні храповики, хвилі зарядової щільності, гранульовані гази, джозефсонівські переходи та системи фазового автопідстроювання частоти [1]. Ці явища в останні десятиліття прискіпливо вивчаються та дають багато цікавих відкриттів, включаючи гігантське підсилення дифузії [2], негативну рухливість [3-4], температурну аномальну дифузію [5], шумний транспорт [6] та інші. Перспектива розвитку нанофізики дуже тісно пов’язана з вивченням цих явищ і тому вони заслуговують на особливу увагу.

Протягом останніх років удосконалюється та розвивається безліч різноманітних методів маніпуляції об’єктами на нанорівні, зокрема сканувальний тунельний мікроскоп [7], силовий атомний мікроскоп [8], різноманітні оптичні пінцети [9-10], тощо. Ключовим питанням нанофізики є те, наскільки точно можна маніпулювати масивами таких об’єктів. Існує фундаментальне квантове обмеження на точність, що описується принципом невизначеності Гейзенберга. Для позиціювання достатньо масивних нанооб'єктів це обмеження є несуттєвим, але класичний термічний шум також призводить до дисперсії швидкостей та координат нанооб’єктів та обмежує точність маніпулювання ансамблем таких систем.

В даній роботі було детально розглянуто фізичні причини виникнення «бездисперсійного» транспорту у похилих просторово-періодичних потенціалах [11-12]. У такому режимі може здатися, що дифузія взагалі відсутня і транспорт стає когерентним, але розрахунки показують, що це не так. В даній роботі проведено дослідження стосовно основної причини

виникнення плато на графіках та запропонований числовий алгоритм для знаходження коефіцієнту дифузії в таких системах.

Розділ 1. Огляд літературних джерел

1.1Актуальність теми

Нанорозмірні системи мають дуже великий потенціал для практичного застосування. Можливості сучасних технологій дозволяють збирати просто із окремих атомів нові матеріали із бажаними властивостями, такі як тонкі плівки, нанодроти і квантові точки. Також, великий інтерес викликають ефективні маніпуляції з наночастинками або окремими молекулами. Але велика кількість проблем все ще залишаються невирішеними і потребують дослідження, або правильної інтерпретації отриманих раніше результатів.

Протягом останніх десятиліть великий інтерес викликають методи маніпуляцій об’єктів з розмірами, що вимірюються в мікрометрах та нанометрах. Прикладом першого є конфігурація двох видів індукованої світлом сили, що змушує золоту мікропластинку рухатися вперед-назад по звуженому волокну [13]. Також можна переносити позолочені порожнисті скляні мікросфери уздовж радіально або азимутально поляризованого променю на великі відстані [14]. Для цього був розроблений оптичний пінцет, що є широко поширеним інструментом для захоплення та маніпулювання об’єктами мікрометрового розміру [15]. Оптичні пінцети були використані для охолодження, захоплення бактерій, складання нанодротів або створення полів, які можуть спричиняти негативні оптичні сили. Але його застосування переважно обмежуються частинками в мікророзмірному масштабі. Оптичний пінцет залежить від температурного градієнта, створити який у нанометровому масштабі надзвичайно важко [16].

Оптична сила, що діє на наночастинку, є надзвичайно малою через границю дифракції. Через невелику площу поверхні, наночастинки зменшують силу опору, що призводить до більшої чутливості до термічного впливу коливання частинок. Для збільшення оптичної сили, яка діє на

наночастинку, застосовують взаємодію між металами та світлом для збудження поверхневих плазмонів [17], що зазвичай асоціюються з покращеними швидкоплинними компонентами ближнього поля для створення градієнтної сили та ефективного маневрування наночастинками.

За останні кілька років плазмонний пінцет дозволив вдосконалити технології і перейти від об’єктів мікрометрового діапазону до нанорозмірних об’єктів. Теоретичні дослідження показують ефективність механізмів захоплення частинок розміром до 10 нм [18]. Але наноманіпуляції в молекулярному та атомному масштабі залишаються досить проблематичними.

Для витягування потенційної наночастинки в область з максимальним потенціалом, яка працює як оптична пастка, використовують просторові градієнти електричної амплітуди. Також можна розширювати концепцію маніпуляцій частинок та навіть прискорювати наночастинки до електрично керованої амплітуди у напрямку оптичної сили, яка впливає на наночастинки. Така концепція відкриває новий вимір у маніпуляції з наночастинками та може призвести до багатьох застосувань у майбутніх нанотехнологічних лабораторіях.

У роботі [19] було теоретично запропоновано, що оптичною ямою можна керувати. Авторами було продемонстровано маніпулювання резонансом уздовж графенової нанострічки шляхом зміни ефективної довжини хвилі поверхневих плазмонів графену шляхом налаштування однієї напруги. Була запропонована конфігурація моношарового графенового конвеєра і, як показує динаміка Ланжевена, прототипна наночастинка розміром 1 нм може бути локалізована та транспортована уздовж пристрою відповідною зовнішньою напругою зсуву. Це відкриває перспективи у напрямку наноманіпуляцій зі зміною конфігурації суб-нанометрових частинок, що значно перевершує можливості маніпулювання наночастинками за допомогою оптичного та наноплазмонного пінцетів.

1.2 «Бездисперсійний» транспорт у похилому періодичному потенціалі

Особливу увагу та інтерес в останні роки викликає процес створення наноструктур на поверхні кристалів. Саме для кристалів характерна трансляційна інваріантність та просторова періодичність, тому можливе виникнення когерентних механізмів перенесення частинок або збуджень при взаємодії частинок з просторово-періодичними структурами. Прикладом цього може служити спрямування високоенергетичних частинок в монокристалах [20] або виникнення фокусонів вздовж щільно упакованих рядів атомів у кристалах [21]. При певних умовах входження високоенергетичних частинок в кристал виникає спрямування, що призводить до когерентного руху ансамблю частинок строго вздовж певного «каналу» у кристалі.

У випадку з фокусонами імпульс частинок з часом «притискається» до осі щільно упакованих атомів, вздовж яких рухається збудження. Через це, результати, отримані в роботі [11], були надзвичайно обнадійливими, тому що в принципі вони могли призвести до створення нових методів маніпулювання нанооб'єктами в періодичних структурах.

Автори [11] досліджували рух недодемпфованих частинок в періодично нахилених потенціалах і ними було виявлено, що при певних умовах залежність дисперсії швидкості від часу в подвійному логарифмічному масштабі виглядала як плато. Проте, розподіл частинок по координатах мав експоненційний вигляд і залишався практично незмінним за цей проміжок часу. Схожі режими раніше вже були зафіксовані у двовимірних системах [22]. Такий режим руху частинок назвали «бездисперсійним», тому що зі зменшенням температури горизонтальна ділянка дисперсійної кривої подовжується так, що в багатьох випадках не вдавалося визначити коефіцієнт дифузії частинок в таких системах, та припустили, що на цій ділянці спостерігався когерентний транспорт. Ними також було запропоновано

інтуїтивну модель, яка пояснює його фізичну природу особливостями взаємодії частинок з просторово-періодичним потенціальним полем.

Якщо частинка рухається у періодичному потенціалі $V(x)$ з амплітудою V_0 та періодом λ, з коефіцієнтом тертя η при температурі T та під дією постійної зовнішньої сили f, його рівняння руху буде мати вигляд:

$$\ddot{r} = -\mathcal{V}'(r) - \gamma\dot{r} + F + \zeta(\tau), \qquad (1.1)$$

де r, τ та $\mathcal{V}$ – це безрозмірні величини $r = x/\lambda$, $\tau = (V_0/m)^{1/2}t/\lambda$ та $\mathcal{V}(r) = V(x)/V_0$, відповідно, а крапки над літерою означають диференціювання за часом. Величина $\zeta(\tau)$ тут задає стохастичну силу, що описується как білий шум. Таке рівняння моделює рух частинки у нахиленому періодичному потенціалі, що має поступальний броунівський рух, а також обертальний броунівський рух маятника з тертям, рух якого підтримується постійним моментом сил. Як відомо, маятник є одною із найважливіших систем у фізиці – він дає математичне підґрунтя для багатьох різноманітних застосувань – від динаміки хвиль густини заряду і рухливості у суперіонних провідниках до кільцевих лазерних гіроскопів та фазових явищ у радіотехніці.

Якщо розглянути більш детально, то зовнішня сила буде «нахиляти» потенціал, і для малих сил нахилений потенціал матиме ями та бар'єри (завдяки своїй специфічній формі потенціали такого типу отримали назву «потенціала пральної дошки», або «washboard potential»). Рух частинок у таких системах суттєво обмежується потенціальними ямами – це так звані локалізовані стани. Дисперсію частинок та їх швидкість у цьому «замкненому стані» можна отримати з відомих аргументів Крамерса. Але завдяки тепловим флуктуаціям частинки можуть отримувати достатню енергію для подолання потенціального бар'єру та «вирінати» із потенційної ями. За законом дифузії Ейнштейна, періодична частина потенціалу стає несуттєвою і частинки починають рухатися вздовж напрямку зовнішньої сили із середньою

швидкістю, що при зростанні сили виходить на стаціонарне значення $v = F/\gamma$, а дисперсія визначається за формулою Ейнштейна. Про такі частинки кажуть, що вони переходять до стану, що біжить. Тобто, у цьому режимі частинки з легкістю переходять із локалізованого стану до стану, що біжить, внаслідок чого середня швидкість частинок швидко зростає зі збільшенням сили, а рухливість та дисперсія має пік, що пов'язаний зі швидким зростанням сили та відповідає бімодальному розподілу швидкостей.

Саме така поведінка недодемпфованих частинок спостерігалась у роботі [11]. Також, в отриманих авторами результатах добре видно асимптотичну середню швидкість та пов’язану з нею рухливість. За межами пікової сили рухливість виходить на постійне значення, а середня швидкість стрімко зростає, коли частинки виходять з потенційної ями та релаксують до свого стаціонарного значення за певний час. Але для сил, що перевищують пік рухливості та дифузії, але менші за критичну силу, поведінка частинок залишається недослідженою. Для такого широкого діапазону проміжних сил, що залишаються постійними протягом великих часових інтервалів, поведінка частинок на перший погляд виглядає «бездисперсійною». Недисперсійна поведінка примітна через те, що вона виникає при наявності теплових флуктуацій. На достатньо великих часових інтервалах дисперсія починає лінійно зростати.

Для моделювання розподілу частинок у стані, що біжить, в якості початкового стану була взята ситуація, коли всі частинки розміщуються у мінімумі однієї потенційної ями з максвеловським розподілом швидкостей при температурі T. Зростаюча дисперсія цього режиму обумовлена бімодальним розподілом. Розподіл позицій є односторонньою експонентою, яка рухається когерентно без дисперсії на великому проміжку часу, що особливо помітно через те, що протягом усього часу частинки постійно піддаються термічним коливанням. Через тривалий час дисперсія відновлюється та розподіл не тільки поширюється, але й наближається до

характеристики рівноважної форми Гауса. Така поведінка була встановлена також і для інших сил.

Автори дослідження дійшли до висновку, що ця надзвичайно узгоджена поведінка частинок вимагає наявності теплових коливань та можлива тільки у недодемпфованих системах (тобто, з недостатньо сильними затуханнями) у похилих просторово-періодичних потенціалах. Згодом знову повертається типовий дисперсний рух, але це потребує дуже багато часу і знаходиться за межами обчислювальних засобів.

Але чи дійсно там спостерігався саме когерентний, бездисперсійний рух? І якщо дисперсія в цьому режимі все ж присутня, то як визначити її величину і як обчислити відповідні коефіцієнти дифузії? Як ми бачимо, стандартні методи не дозволяють цього зробити.

Розділ 2. Методи розв'язання стохастичних диференціальних рівнянь

2.1 Стохастичні диференційні рівняння

Протягом останніх десятиліть найцікавіші досягнення в галузі чисельних методів розв'язання стохастичних диференціальних рівнянь другого порядку були пов'язані з розвитком симплектичних методів, які мають здатність зберігати енергоподібну величину протягом дуже великого проміжку часу [23]. Довготривала динаміка типової фізичної системи у стохастичній постановці визначається флуктуаційно-дисипативною теоремою, а кількість часу, проведеного у різних областях фазового простору, контролюється стаціонарною густиною.

Стаціонарна густина може мати відносно простий явний вираз навіть тоді, коли динаміка є сильно нелінійною. Чисельні методи замінюють неперервний час на дискретну динаміку, генеруючи значення в моменти часу $t_0, t_1 \ldots$ Як правило, $t_{n+1} - t_n$ є фіксованим числом Δt. Для хорошого чисельного методу критерієм є його дискретна часова динаміка в дискретному часі, яка має щільність стаціонарного режиму, що максимально наближена до щільності стаціонарного режиму неперервної системи.

Параметр демпфування містять диференціальні рівняння, які описують системи другого порядку. Щільність стаціонарного режиму не залежить від демпфування, проте, залежні від часу величини та корисність або непридатність чисельних алгоритмів сильно залежать від нього.

Система стає першого порядку, коли демпфування прямує до нескінченності. З іншого боку, межа нульового демпфування відповідає системам з гамільтоніаном, до яких можливе застосування симплектичних методів.

Для розробки методів, які будуть здатні точно відтворювати стаціонарну густину для всіх значень демпфування, застосовується рівняння наступного вигляду [24]:

$$\ddot{x} = f(x) - \eta\dot{x} + \epsilon\xi(t), \tag{2.1}$$

де η-параметр демпфування, а $\langle\xi(t)\xi(t')\rangle = \delta(t-t')$, де кутові дужки позначають середнє за реалізацією. Стохастичне диференціальне рівняння другого порядку описує положення частинки, на яку діє детермінована сила $f(x)$ та випадковий (стохастичний) вплив $\xi(t)$. Детермінована сила є потенціальною, і для відомої потенціальної енергії $V(x)$ вона може буде представлена як $f(x) = -V'(x)$.

Амплітуда випадкового впливу пов'язана з температурою T та затуханням коефіцієнтом η флуктуаційно-дисипаційним співвідношенням:

$$\epsilon^2 = 2\eta KT. \tag{2.2}$$

Представимо рівняння (2.1) як пару рівнянь першого порядку для X_t та V_t - положення та швидкості:

$$dX_t = V_t dt, \tag{2.3}$$

$$dV_t = -\eta V_t dt + f(X_t)dt + \epsilon dW_t, \tag{2.4}$$

де W_t задовольняє рівнянню Вінера $\langle W_t W_s\rangle = min(t,s)$. Густина в момент часу t дорівнює $P(x,v,t)$, де $P(x,v,t) = \frac{d^2}{dxdv}Prob(x_t < \text{x}, V_t < v)$. Стаціонарна густина $P_\infty(x,v)$ має аналітичний вигляд:

$$P_\infty(x,v) = N\ \exp\left(-\frac{V^2}{2KT} - \frac{v(x)}{KT}\right). \tag{2.5}$$

Таким чином, пізня статистика швидкості є гаусовою та некорельованою з положенням. Стаціонарна густина має замкнений траєкторний вигляд для багатьох нелінійних функцій $f(x)$, коли аналітичне дослідження повної еволюції неможливе.

У дослідженні [24] було проведено аналіз на лінійних рівняннях другого порядку, де статистика є гауссовою та повністю характеризується трьома величинами: середніми квадратами швидкості та змінних положення, а також кореляцією між положенням та швидкістю.

Розглядаючи методи Ейлера та Хеуна використовують їх особливу структуру, що була зумовлена їхнім походженням з одного диференційного рівняння другого порядку, що добре працюють при проміжних значеннях демпфування, але не спрацюють при великих демпфуваннях, коли важливо зберегти енергоподібні величини протягом тривалого часу. Такі методи є нестійкими для достатньо малих та достатньо великих демпфувань, у той час як стрибкоподібні методи є стійкими для довільно малих демпфувань.

Алгоритм Верле [25] дає чисельне розв’язання диференціальних рівнянь другого порядку шляхом оновлення змінної положення без прив’язки до змінної швидкості. Розширення цієї ідеї на рівняння Ланжевена [26] виявилося успішним. Властивості збіжності можуть бути проаналізовані з використанням різницевих рівнянь другого порядку. Залежні від часу властивості чисельних алгоритмів для класу лінійних рівнянь можна розглядати за допомогою модифікованої частоти або методу модифікованих рівнянь.

Аналіз стаціонарного розподілу, запропонований Маннелою [27], був отриманий в результаті використання чисельних методів дискретизації за часом, що засновані на розкладанні експоненти в (1.7), та привів до запропонованої модифікації методу стрибка.

Система Мелбо та Хайама [28] дещо інша - це система другого порядку, але без демпфуючого члена. Тобто, сума середньоквадратичної швидкості та положення зростає пропорційно часу, замість того, щоб наближатися до

стаціонарної густини. Розділені методи перевершують метод Ейлера для цієї системи.

Отже, методи стрибкоподібного типу є повністю явними навіть для нелінійних рівнянь. Застосований до лінійних рівнянь найпростіший метод дає точну стаціонарну дисперсію змінної положення та зберігає незалежність від швидкості та положення. Похибка, яка залишилася в дисперсії змінної швидкості, зменшується за допомогою модифікації стрибкоподібного методу.

2.2 Числові методи розв'язання стохастичних диференціальних рівнянь

Всі існуючі методи використовують одну реалізацію на кожному часовому кроці гаусівського розподілу із середнім значенням нуль та дисперсією Δt позначеною ΔW. Така система включає в себе багато методів з множиною проміжних кроків та неявних методів, що насправді є явними для лінійних рівнянь.

Стохастичні диференційні рівняння. Якщо система з детермінованою динамікою, на яку діє зовнішній шум, можна прибрати цей шум (вимкнути його, якщо це можливо, ізолювати систему тощо) то рівняння руху будуть суто детермінованими:

$$dX(t) = f(X(t), t)dt. \tag{2.6}$$

Тепер вважатимемо, що на систему діє гаусівський білий шум. Щоб врахувати його вплив, додаємо до рівняння руху доданок $g(X(t), t)dW(t)$:

$$dx(t) = f(X(t), t)dt + g(X(t), t)dW(t), \tag{2.7}$$

де функції g визначаються певними фізичними міркуваннями, а компоненти W - незалежні вінерівські процеси.

Вінерівським процесом називають гаусівський стохастичний процес, що є практично неперервним, де прирости, які не перетинаються, є незалежними.

$$\begin{aligned} W(0) &= 0, \\ \langle W(t) \rangle &= 0, \\ Var\big(W(t) - W(s)\big) &= t - s. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Інтерпретації Ітo та Стратоновича. Найпоширенішою інтерпретацією є схема Ітo, де функція оцінюється в лівій кінцевій точці кожного підінтервалу (λ = 0), та схема Стратоновича, в якій функція оцінюється в середині кожного підінтервалу (λ = 1/2).

Розв'язання стохастичних дифенціальних рівнянь відрізняються для обох інтерпретацій, оскільки стохастичні інтеграли мають різне значення для кожної з інтерпретації.

Наприклад, інтеграл нижче в обчисленні Ітo має вигляд:

$$\int_{t_0}^{t} W(s) dW(s) = \frac{1}{2}[W(t)^2 - W(t_o)^2] - \frac{1}{2}(t - t_0), \tag{2.9}$$

тоді як для обчислення Стратоновича:

$$\int_{t_0}^{t} W(s) \circ dW(s) = \frac{1}{2}[W(t)^2 - W(t_o)^2]. \tag{2.10}$$

Обравши, одну інтерпретацію, завжди можна виконати розрахунок в іншій інтерпретації, модифікувавши f за допомогою формули поправки на дрейф Ітo-Стратоновича:

$$dX(t) = f(X(t), t)dt + g(X(t), t)dW(t), \tag{2.11}$$

$$dX(t) = f(X(T), t)dt + g(x(t), t \circ DW(t).$$

Вони мають однаковий розв'язок, якщо їх дрейфи задовольняють співвідношенню та моделюють фізичну систему. "Білий шум" dW насправді є ідеалізацією шуму з малим часом кореляції: автокореляційна функція $dW(t)$ насправді є не дельта-функцією, а просто гостропіковою. Тобто, час її кореляції малий, але кінцевий. Через це, стохастична функція $dW(t)$ насправді не є сингулярною, а стохастичні диференціальні рівняння мають добре визначений розв'язок. В межі кореляційного часу $dW(t)$ наближається до нуля, такий розв'язок прямує до інтегрованості рівнянь з інтерпретацією Стратоновича.

Всі ці методи вимагають використання на кожному кроці інтегрування вибірки дискретизованого вінерівского процессу.

Метод Хеуна. Однією з найпростіших схем дискретизації, що приводить до інтерпретації Стратоновича, є метод Хеуна. Це метод предиктор-коректор. Тобто, маючи значення X на момент часу t_n дискретизації, ми спочатку отримуємо предиктори, або опорні значення предиктора, за допомогою схеми інтегрування Ейлера:

$$\overline{x_i}(t_{n+1}) = x_i(t_n) + f_i(x(t_n), t_n)h + g_{ij}(x(t_n), t_n)\xi_j(t_n), \qquad (2.12)$$

де $t_{n+1} = t_n + h$ та

$$x_i(t_{n+1}) = x_i(t_n) + \frac{1}{2}[f_i(x(t_n), t_n) + f_i(\overline{x}(t_{n+1}), t_{n+1})]h + \frac{1}{2}[g_{ij}(x(t_n), t_n) + g_{ij}(\overline{x}(t_{n+1}), t_{n+1})]\xi_j(t_n) \qquad (2.13)$$

Звернемо увагу, що тут використовується тензорна конвенція Ейнштейна щодо підсумовування за повторюваними індексами.

Схема та безпохідний метод Мільштейна. Схема Мільштейна вимагає використання похідних коефіцієнтів дифузії, у загальному випадку має вигляд:

$$\mathrm{x_i}(\mathrm{t_{n+1}}) = x_i(t_n) + f_i h + g_{ij}\xi_j + g_{lj}\frac{\partial g_{ik}}{\partial x_l}J_{(j,k)}. \quad (2.14)$$

Також, можна розглянути окремий випадок діагонального шуму, коли кожен компонент системи має свій власний та незалежний шум, тобто, існує стільки незалежних вінерівських процесів (число компонент W), скільки змінних в системі (число компонент X). На кожну компоненту x_i системи X впливає тільки відповідна компонента W_i вінерівського процесу, а коефіцієнт діагональної дифузії g_{ii} залежить тільки від x_i та, можливо, від часу (але не від інших компонентів X).

Метод Мільштейна вимагає аналітичного визначення першої похідної від дифузійного члена, що може бути іноді неефективним, або іноді аналітичний вираз похідної є дуже складним, або багато різних функцій для g, тощо.

У таких випадках можна використовувати чисельне наближення для похідної g для використання в схемі Мільштейна. Тоді для інтерпретації Стратоновича отримаємо:

$$x_i(t_{n+1}) = x_i(t_n) + f_i h + g_{ii}\xi_i + \frac{1}{2\sqrt{h}}[g_{ii}(\overline{x}, t_n) - g_{ii}]\xi_i^2. \quad (2.15)$$

Перевірка сильної збіжності. У кожному методі ми зацікавлені ступенем його сильної збіжності або збіжності на шляху, тобто для будь-якої окремої реалізації $W(t)$ вінерівського процесу на заданому часовому інтервалі $[t_0, T]$, що повинен бути обраний як найбільший часовий інтервал, який буде використаний серед усіх симуляцій, і починаючи із заданих початкових умов $X(t_0)$ для системи, отримуємо кінцеву точку $X(T)$. При хорошій схемі

інтегрування, з використанням досить великих часових кроків, вона має бути близькою до дійсного розв'язку диференціального рівняння в момент часу T.

Кінцева точка в момент часу T, отримана методом інтегрування, має бути близькою до точки реального розвязку при виборі будь-якої іншої реалізації вінерівського процесу $W(t)$ і будь-якої іншої початкової умови.

Знати значення $X(T)$ ми не можемо, але можна перевірити, чи дає метод інтегрування щось достатньо близьке до реального розв’язку, досліджуючи самоузгодженність. При виборі малої кількості кроків інтегрування отримана $X(T)$ не буде достовірним і при повторенні інтегрування з більшим кроком за часом (але тим же вінерівським процесом і тими ж початковими умовами), отримаємо новий $X(T)$, що суттєво відрізнятиметься від попереднього. Кількість часових кроків, які є прийнятні для того чи іншого методу інтегрування (Мільштейна, Хеуна та інших) звичайно буде в загальному випадку або більшим, ніж потрібно, або навпаки, недостатнім для того чи іншого методу інтегрування.

3.3 Порівняння ефективності числових схем інтегрування стохастичних диференціальних рівнянь

Для чисельного інтегрування системи стохастичних рівнянь можна обрати одну із трьох схем, вирази яких є не надто складними в інтерпретації Стратоновича: це методи інтегрування Хеуна, Мільштейна та безпохідний Мільштейна. Для кожного з цих методів у роботі [29] досліджено сильну збіжність та час, що витрачає комп’ютер на інтегрування за кожною схемою. Проаналізувавши результати, автори дійшли до висновку, що метод Хеуна на сьогодні є найефективнішим.

Рівень сильної конвергенції для трьох інтеграційних методів. Враховуючи, що найбільш трудомісткою задачею програми є чисельні

інтегрування, з наведених у роботі [29] розрахунків можна зробити висновок, що для однакової кількості часових кроків схема Мільштейна є найшвидшим методом; наступним буде безпохідний Мільштейна, який займає приблизно в 1.13 разів більше часу, ніж перший, а найповільнішою є схема Хеуна, яка займає приблизно в 1.22 рази більше часу, ніж схема Мільштейна. Схема Мільштейна (зауважте, однак, що ці співвідношення можуть змінитися, якщо використовувати інше обчислювальне середовище). Враховуючи, що ці співвідношення близькі до одиниці (тобто, часові витрати на інтегрування приблизно однакові для всіх трьох схем), більш вагомим є вибір найточнішої із цих схем інтегрування.

Вибір методу чисельного інтегрування. Для схеми Хеуна середній та центральний момент завжди менші за абсолютною величиною порівняно з показниками для двох інших схем. Можна стверджувати, що метод Хеуна є найбільш ефективним, так як при його використанні ми отримуємо набагато кращу точність при такому ж часі обчислень, в порівнянні з методами Мільштейна.

Краща продуктивність методу Хеуна була очікуваною, враховуючи, що у випадку адитивного шуму схема Мільштейна зводиться до базової схеми Ейлера, тоді як схема Хеуна завжди буде методом предиктора-коректора другого порядку. Окрім цього, ідея методу Хеуна проста для програмування та розуміння, та не використовує жодної похідної, що робить схему Хеуна дуже привабливим методом.

Розділ 3. Умови виникнення когерентного транспорту в похилому періодичному потенціалі

3.1 Постановка задачі

На відміну від звичайної дифузії, в процесах перенесення з шумом в системах з похилим періодичним потенціалом (відомим як потенціал «стиральної дошки», або «washboard potential») спостерігаються особливі режими дифузії [30], такі як субдифузія та супердифузія. Така дифузія називається аномальною.

Звичайна дифузія характеризується лінійною залежністю дисперсії від часу: $\sigma^2 \propto \Theta$, де дифузія $\sigma^2(\Theta) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$, де x – координата частинки, Θ – час, а дужки $\langle \cdots \rangle$ позначають усереднення по ансамблю.

При аномальній дифузії залежність від часу змінюється:

$$\sigma^2 \propto \Theta^{\alpha}. \tag{3.1}$$

При $\alpha < 1$ ми маємо субдифузію, а при $\alpha > 1$ – супердифузію [3.1].

У роботі [11] автори дійшли до висновку, що у визначеному інтервалі сил в недодемпфованих системах ансамбль частинок може рухатися бездисперсно ($\alpha = 0$) протягом тривалого часу. Замість постійного нахилу автори застосовували зовнішній привід з нульовим середнім значенням прямокутної хвилі відповідного періоду та амплітуди і спостерігали «бездисперсійний» рух. Існування такого когерентного руху відкриває нові можливості прецизійного маніпулювання частинками на мікрорівні, що

становить величезний інтерес для розвитку нанотехнологій. Але які умови мають бути виконані для виникнення когерентного транспорту?

Для вивчення руху броунівських частинок в періодично похилому потенціалі нами було використано рівняння Ланжевена:

$$M\ddot{X} = -\frac{d}{dX}U(X) - G\dot{X} + F + \sqrt{2GkT}\xi(\Theta), \tag{3.2}$$

де t – час, X – координата частинки, M – маса частинки, G – коефіцієнт тертя, F – постійна зовнішня сила, $\xi(\Theta)$ – гаусівський білий шум з інтенсивністю рівній одиниці, крапка зверху означає диференціювання за часом, k_B - стала Больцмана, T – температура, і Θ - час.

Періодичний потенціал частинки в полі решітки U дорівнює:

$$U(x) = -\frac{U_0}{2}\cos\left(\frac{2\pi}{a}X\right), \tag{3.3}$$

де U_0 - висота потенційного бар'єра, і a - період одновимірної решітки. Потенційний бар'єр між будь-якими двома послідовними локальними мінімумами потенціалу $U(x)$ зникає в критичному полі $F_0 = (\pi/a)U_0$. Частота власних малих коливань біля дна потенційної ями становить $\omega_0 = 2\pi/\tau_0$, де $\tau_0 = a\sqrt{2M/U_0}$ – період цих коливань.

Рівняння (3.2) чисельно розв'язувалось із використанням алгоритму типу Стермера - Верле. Методика числового розрахунку описана у роботі [31]. Крок за часом обирався таким чином, щоб максимальна відстань, яку проходить частинка за один крок, не перевищувала 10^{-3} періоду решітки. Статистичне усереднення проводилося по ансамблю з кількістю частинок не

менше $N = 5 \cdot 10^4$. Для отримання функцій розподілу частинок за швидкістю та координатами був використаний ансамбль із $N = 10^6$ частинок. Для чисельного розв'язання рівняння зручно перейти до безрозмірних величин. Для цього ми використаємо нові змінні:

$$x = \frac{2\pi}{a} X, \qquad t = \frac{\Theta}{\tau_0}. \tag{3.4}$$

Дорівнюючи безрозмірну масу одиниці, $m = 1$, отримаємо максимально простий вигляд рівняння (3.2):

$$\ddot{x} = -\sin x - \gamma \dot{x} + f + \sqrt{2\gamma Q}\zeta(t). \tag{3.5}$$

Безрозмірні одиниці пов'язані з силою, коефіцієнтом тертя та температурою наступним чином:

$$\gamma = G\frac{\tau_0}{2\pi m}, \qquad f = \frac{F}{F_0}, \quad Q = \frac{2kT}{U_0}, \tag{3.6}$$

де Q – теплова енергія. В таких одиницях постійна одновимірної решітки дорівнює 2π, а критична сила $f_0 = 1$. При моделюванні використовувалось значення коефіцієнта тертя $\gamma = 0.03$, що близьке до значень γ, використаних у роботах [11-12].

У даному дослідженні нас цікавила залежність від часу середньої швидкості частинок $\langle v \rangle$ і дисперсії розподілу частинок по координатам $\sigma^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$. Ефективний коефіцієнт дифузії обчислювався за допомогою

дисперсії σ^2 у розподілі ансамблю частинок, що рухаються, на великих часових інтервалах (при $t \to \infty$):

$$D = \lim_{t \longrightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{2t} \tag{3.7}$$

В роботі було досліджено саме той діапазон сил, в якому раніше спостерігався бездисперсійний транспорт [11], і який перевищує верхню границю температурно-аномальної дифузії [32].

3.2 Результати

На рис. 1 показані типові залежності дисперсії броунівських частинок від часу для різних значень зовнішньої сили f. Подібні графіки були продемонстровані в роботі [11]. На малих часових інтервалах на графіках бачимо залежність $\sigma^2 \propto t^\alpha$ з $\alpha > 1$. Відповідно до цього, на першому етапі дифузії виникає обмежена в часі фаза супердифузії. На великих часових інтервалах криві на графіку будуть паралельні осі $\sigma^2 = t$ і ми спостерігаємо звичайну дифузію. Втім, на кривих 1-3 при певних значеннях t також спостерігаються горизонтальні ділянки, що паралельні лінії $\sigma^2 = const$.

Такі ділянки раніше інтерпретувались як фази когерентного руху. Але чи дійсно ці ділянки пов’язані з когерентним транспортом?

Традиційно ступінь когерентності транспорту визначається по числу Пекле: $Pe = l\langle v \rangle / D$, де l – характерна відстань [33]. У данному випадку $l = 2\pi$ та дорівнює періоду одновимірної решітки.

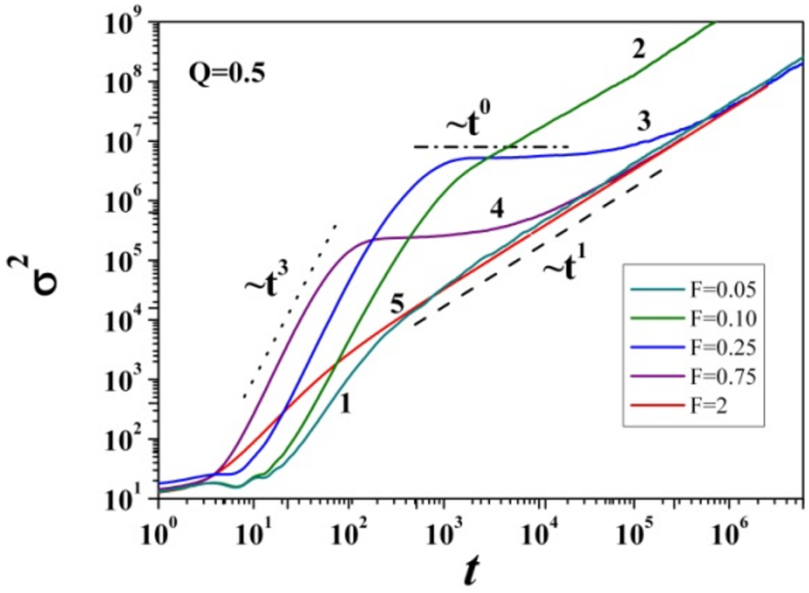


Рисунок 1. Залежності дисперсії від часу для різних значень зовнішньої сили при Q=0.5. Залежності $\sigma^2 \sim t, \sigma^2 \sim t^2$ та $\sigma^2 \sim const$ *наведено, відповідно, штриховою, пунктирною і штрих-пунктирною лініями.*

Визначимо залежний від часу коефіцієнт дифузії як $D(t) = \sigma^2(t)/2t$, а число Пекле як $Pe(t) = l\langle v\rangle(t)/D(t)$. Слід зазначити, що чим вище значення $Pe(t)$, тим меншою є дисперсія при перенесенні. Умовою когерентного транспорту є $Pe = \infty$. Як показано на рис. 1, для $f = 0.25$ горизонтальна ділянка спостерігається на часових інтервалах в діапазоні значень $2 \cdot 10^3 < t < 3 \cdot 10^4$. Але на даному часовому інтервалі $Pe \ll 1$, що свідчить про відсутність бездисперсійного транспорту.

При когерентному транспорті дисперсія повинна залишатися постійною, тобто має виконуватися умова $d\sigma^2(t)/dt = 0$. Використовуючи дані моделювання, ми побудували графік залежності $Pe(t)$, що представлений на рис. 2. На вкладці приведені зміни у похідній за часом від дисперсії при русі ансамблю частинок у нахиленому періодичному потенціалі.

На рис. 2 можна побачити, що при $2 \cdot 10^3 < t < 3 \cdot 10^4$ похідна $d\sigma^2(t)/dt \neq 0$. Це означає, що бездисперсійний транспорт відсутній. Більш того, величина $d\sigma^2(t)/dt$ має флуктуації навколо постійної величини, що дорівнює $2D$, де D – коефіцієнт дифузії у відповідності до визначення (3.7),

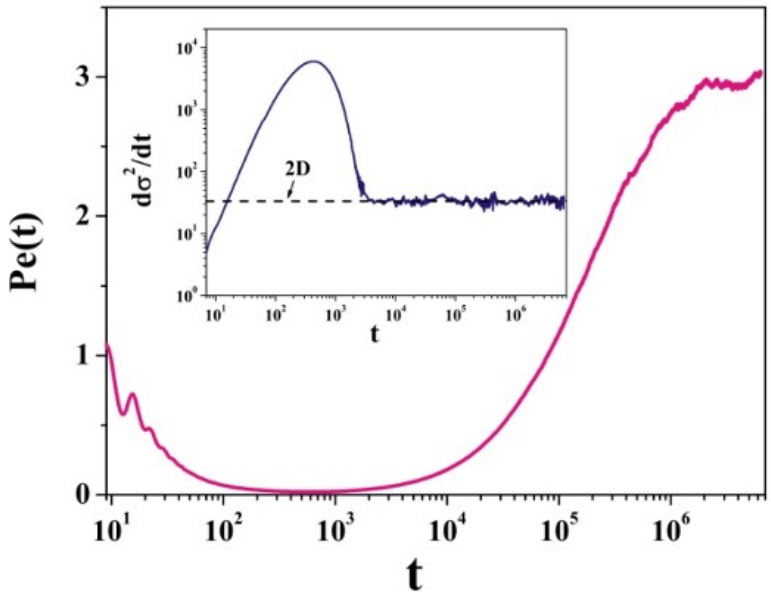


Рисунок 2. Зміна в часі числа Пекле (угорі) і похідної за часом від дисперсії.

тобто при $t > 2 \cdot 10^3$ відбувається звичайна дифузія з коефіцієнтом дифузії D.

Для усунення удаваної суперечності між рис. 1 та рис. 2, подивимось на рис. 3, на якому графік $\sigma^2(x,t)$ представлений як у подвійному логарифмічному, так і у лінійному масштабі.

При швидкому погляді на рис. 3(а), можна зробити такий висновок: на часовому інтервалі від $t \approx 10.0$ до $t \approx t_1$ дисперсія $\sigma^2(t)$ різко зростає, на інтервалі $t_1 < t < t_2$ дисперсія не змінюється, а при великих значеннях часу t спостерігається звичайна дифузія з $\alpha = 1$. Проте, більш детальніший розгляд свідчить, що насправді це не так.

На рис. 3 пунктирною лінією показана апроксимація даних моделювання лінійною функцією $\sigma^2(t) = \sigma_1^2 + 2Dt$, де σ_1^2 – значення дисперсії ансамблю частинок, досягнуте в момент часу $t \approx t_1$ після закінчення фази супердифузії.

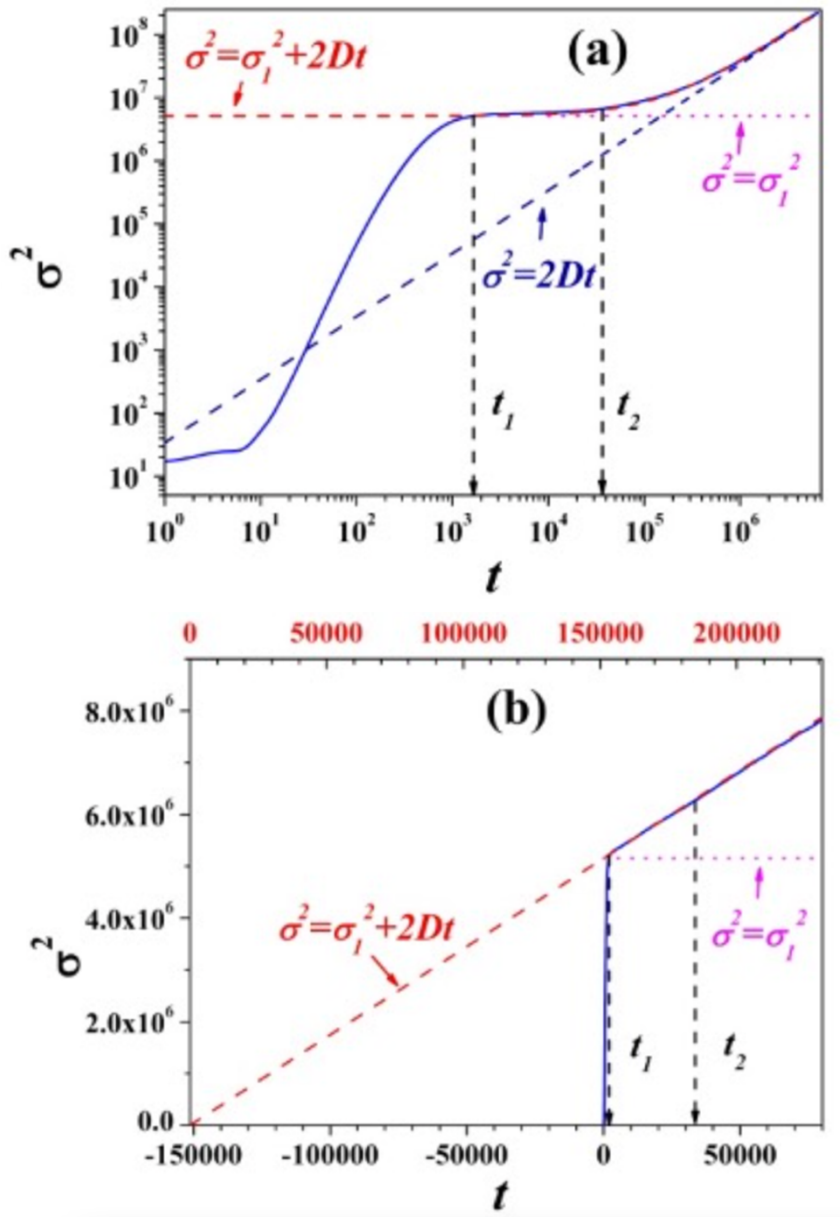


Рисунок 3. Залежності дисперсії від часу. (a) - у подвійному логарифмічному масштабі, (b) - у лінійному масштабі. Суцільна лінія - дані моделювання. Штрихова лінія - залежність $\sigma^2 = 2Dt$, пунктирна лінія апроксимація $\sigma^2 = 2Dt + \sigma_1^2$, штрих-пунктирна лінія показує рівень $\sigma^2 = \sigma_1^2$. Стрілками позначено час початку і кінця "бездисперсійної" фази: t_1 - час початку, t_2 - час кінця "бездисперсійної" фази.

Спостерігаємо, що після $t \approx t_1$ лінійна апроксимація збігається з даними моделювання, тобто фази «когерентного» руху не спостерігається, а є лише звичайна дифузія з $\alpha = 1$. Більше детально це показано на рис. 3(b), де залежність $\sigma^2(t)$ представлена у лінійному масштабі.

На часовому проміжку $t < t_1$ спостерігається супердифузія з $\sigma^2(t) \propto t^3$. У момент $t \approx t_1$ маємо такий рівень дисперсії, для досягнення якого при звичайній дифузії знадобилось би у 100 разів більше часу. Відповідно, при звичайній дифузії потрібно дуже довго чекати, щоб зміни у логарифмічному масштабі стали помітні.

З аналізу отриманих графіків можна зробити підсумок, що інтервал $t_1 < t < t_2$ на рис. 3 з фізичної точки зору є нічим не примітним. Для розуміння причини того, чому когерентний транспорт у цьому випадку відсутній, потрібно чітке уявлення про фізичні процеси, які відбуваються на різних інтервалах часу.

3.3 Фізична модель дифузії у похилому потенціалі

Використовуючи теорію двох-ямного потенціалу [31], опишемо фізичні процеси на різних проміжках часу. У теорії двох-ямного потенціалу середня величина $\langle v(t) \rangle$ та дисперсія $\sigma^2(t)$ пов'язані з переходами частинок із локалізованого стану в стан, що біжить, і зворотно шляхом подолання енергетичного бар'єру у просторі швидкостей. Ефективний потенціал $W(v)$ має мінімуми при $v_1 = 0$ і $v_r = f/\gamma$, а також локальний максимум при $v = v_{cr}$ [31-32]. У цьому потенціалі частинки здійснюють перехід із локалізованого стану до стану, що біжить, з частотою w_{lr}, а зворотний перехід – з частотою w_{rl}.

На рис. 4 приведені графіки розподілу частинок по швидкостям $n(v)$ у різні моменти часу. У початковий момент всі частинки знаходяться у локалізованому стані, потім протягом певного часу частинки поступово переходять з локалізованого стану у стан, що біжить, і у момент часу $t \approx t_1$ цей перехід завершується.

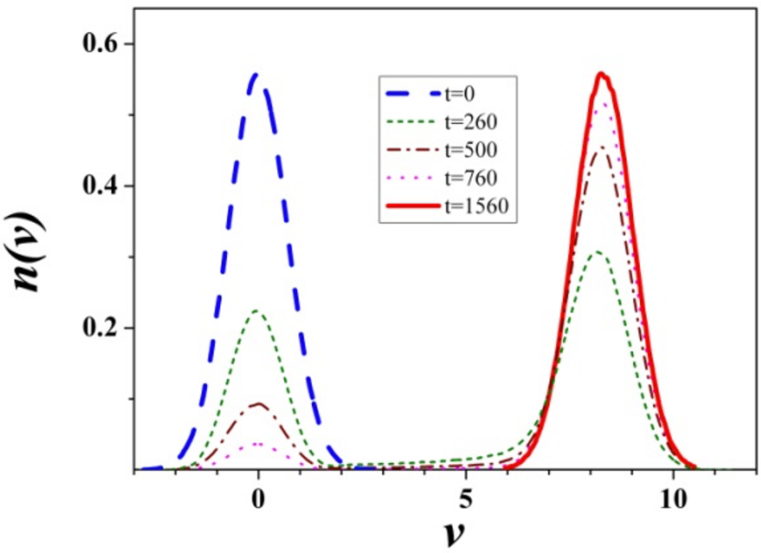


Рисунок 4. Зміна функції розподілу за швидкостями з часом при f=0.25, Q=0.5.

При $t > t_1$ функція $n(v)$ не змінюється, так як практично всі частинки вже перейшли у стан, що біжить. Така поведінка відповідає виконанню умови $w_{rl} \gg w_{lr}$ для ефективного потенціалу $W(v)$. У такому випадку переходами частинок зі стану, що біжить, до локалізованого стану можна знехтувати. Саме в цьому випадку припущення про перетворення часового розподілу частинок у просторовий розподіл, запропоноване в [11], буде справедливим.

Отже, задача про рух ансамбля частинок зводиться до розрахунку вивільнення частинок, що знаходяться в контакті з тепловим резервуаром, із потенціальної ями.

Така поведінка, як відомо, описується процесом Пуассона. У цьому випадку спостерігається експоненціальне за часом зменшення кількості частинок, що подолали бар'єр, оскільки немає зворотного переходу зі стану, що біжить, до локалізованих станів. Усі частинки, що подолали потенціальний бар'єр, в подальшому будуть рухатися із середньою швидкістю $v_r = f/\gamma$, що призводить до формування екпоненціального розподілу частинок у стані, що біжить, за координатами.

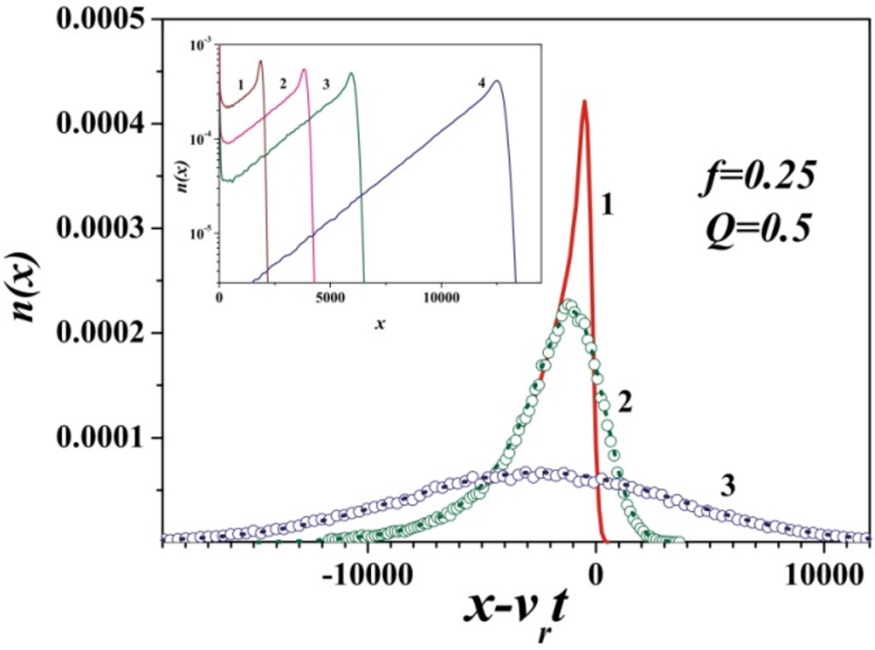


Рисунок 5. Залежності функції розподілу частинок за координатами від часу.

На вкладці до рис. 5 представлені графіки функції розподілу частинок по координатам у різні моменти часу. Можна побачити формування нерівноважного розподілу $n(x)$, що зміщується з часом на $v_r t$. Проте, до моменту $t \approx t_1$ майже всі частинки вже перейшли у стан, що біжить, що зрозуміло з рис. 4. Таким чином, формування експоненціального розподілу частинок за координатами до цього моменту часу завершується та починаються процеси звичайної дифузії, що можна побачити на рис. 5.

Нерівноважний розподіл, що сформувався в момент часу $t \approx t_1$, показано суцільною лінією на рис. 5. Маркерами позначені дані в моменти часу $t \approx t_2$, що відповідає завершенню дисперсійної фази, та $t \approx 10^6$, що відповідає фазі звичайної дифузії.

Дані розрахунків диффузійного уширення профілю частинок, який сформувався при $t \approx t_1$, $t \approx t_2$ та $t \approx 10^6$, показано на рис. 5 пунктирними лініями. Для цього було використане стандартне рівняння дифузії з коефіцієнтом дифузії D, що визначається виразом (7). Бачимо, що данні

моделювання співпадають з дифузійними розрхунками як при $t \approx t_2$, так і при $t \approx 10^6$. Відповідно, при $t \geq t_2$ відбувається звичайна дифузія з коефіцієнтом дифузії D. На більших проміжках часу, розподіл частинок у просторі описується стандартним виразом для дифузійного розмиття точкового джерела [34], що можна побачити з виду кривої 3 на рис. 5.

Для того, щоб графік $\sigma^2(t)$ у подвійному логарифмічному масштабі візуально відрізнявся від горизонтального, потрібно щоб $2Dt \approx \sigma^2(t_1)$, і відповідно, час «горизонтальної» ділянки $\Delta t = t_2 - t_1$ дорівнює $t \approx \sigma^2(t_1)/2D$.

Чим меншою є величина коефіцієнта дифузії D, тим більшою є довжина «горизонтальної» ділянки. Оскільки переважна доля частинок знаходиться в стані, що біжить, то D з хорошою точністю дорівнює коефіцієнту дифузії частинок у в'язкому середовищі: $D = Q/\gamma$. Згідно цього, довжина «горизонтальної» ділянки буде збільшуватися зі зменшенням температури як $1/Q$, що відповідає отриманим раніше даним моделювання [35-36].

Як вже було сказано вище, необхідною умовою виникнення «горизонтальних» ділянок на кривих $\sigma^2(t)$ є умова $w_{rl} \gg w_{lr}$. Така умова накладає обмеження на вигляд стаціонарного розподілу частинок за швидкостями. Оскільки коефіцієнт дифузії може бути отриманий з $n(v)$, то можна визначити інтервал сил, при якому виникає візуальний ефект «когерентності».

Як показано в [31-32], при температурно-аномальній дифузії розподіл по швидкостям буде «двогорбим». При силі, що переважає верхню границю температурно-аномальної дифузії f_r, майже всі частинки в стаціонарному рішенні знаходяться у стані, що біжить, що відповідає умові $w_{rl} \gg w_{lr}$.

Як було виявлено в роботі [32], в низькотемпературній границі $f_r = \gamma \cdot \gamma_{cr}(1 + \sqrt{2})$. Для параметрів $f \approx 0.1$ при $1 > f > f_r$, що були використані в цій роботі, має спостерігатися візуальний ефект «когерентності», що дійсно відповідає данним рис. 1.

Таким чином, в роботі було показано, що когерентний транспорт у похилих періодичних потенціалах відсутній. «Горизонтальні» ділянки у дисперсії $\sigma^2(t)$, які раніше інтерпретували як «бездисперсійний» транспорт [11-12], насправді є звичайною дифузією з $\sigma^2(t) \propto$ t, а тривалість цих ділянок пропорційна $\propto 1/Q$.

3.4 Метод обчислення коефіцієнту дифузії

У багатьох роботах, де зустрічається фаза «бездисперсійного» транспорту, не вдається визначити коефіцієнт дифузії. Так в роботі [22] авторам не вдалося визначити значення D в інтервалі сил $F = 0.2 - 0.9$. Це було пов'язано з тривалим періодом «бездисперсійного» транспорту.

Зазвичай, у роботах по чисельному моделюванню для визначення коефіцієнту дифузії використовують визначення:

$$D = \lim_{t\to\infty} D_{ef}(t) = \lim_{t\to\infty} \frac{\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle}{2t} = \lim_{t\to\infty} \frac{\sigma^2}{2t}. \qquad (3.8)$$

При цьому, головним питанням залишається розрахунковий час. Зазвичай, його обирають так, щоб у подвійному логарифмічному масштабі спостерігалась добре спостережувана лінійна залежність $\sigma^2(t) = 2$Dt, наприклад, як для $t > 10^6$ на рис. 3. Тривалість «бездисперсійного плато» експоненціально наростає зі зменшенням температури, що у багатьох випадках робить неможливим визначення D по формулі (3.8) за обраний розрахунковий час. Але якщо розуміти суть того, що відбувається, коефіцієнт дифузії може бути легко вирахуваний ще на часі «бездисперсійного» транспорту.

Із наведеного вище розгляду зрозуміло, що після досягнення стаціонарного розподілу по швидкостям, залежність дисперсії від часу буде мати вигляд:

$$\sigma^2(t) = \sigma_{max}^2 + 2Dt. \tag{3.9}$$

Відповідно, коефіцієнт дифузії:

$$D_{ef}(t) = D + \sigma_{max}^2/2t. \tag{3.10}$$

Оскільки з падінням температури σ_{max}^2 експоненціально зростає, то другий член в (3.10) буде переважати над першим протягом достатньо тривалого часу. Але, якщо виконати підгонку $\sigma^2(t)$ методом найменших квадратів, використовуючи залежність (3.10) з вільними параметрами σ_{max}^2 та D, то можливо отримати коефіцієнт дифузії з хорошою точністю ще на малих проміжках часу.

Використовуючи дані, отримані для кривої на рис. 3а, за допомогою рівняння (3.8) за час $t = 6.4 \cdot 10^6$ ми отримаємо коефіцієнт дифузії $D = 17.30$. Якщо збільшити час на порядок, то при $t = 6.4 \cdot 10^7$ ми отримаємо $D = 17.06$, тобто для розрахунку коефіцієнта дифузії потрібно брати вже дуже великі інтервали часу. Враховуючи залежність (3.8), отримання коефіцієнта дифузії D для більш низьких температур стає нереальним за прийнятний розрахунковий час.

Втім, за допомогою рівняння (3.10) можна апроксимувати $\sigma^2(t)$ на значно більш короткому інтервалі часу: $t = 1.0 \cdot 10^4 \div 5 \cdot 10^4$. Якщо для підгонки використовувати метод найменших квадратів, то дисперсія в цьому випадку описується лінійною залежністю з точністю 0.999. Підгонка на інтервалі $t = 1.0 \cdot 10^4 \div 6.4 \cdot 10^6$ дає майже ідентичний результат. Використовуючи дані на обмеженому інтервалі часу, було отримано значення $D = 17.03$, тобто для отримання такого ж значення D, на яке раніше було

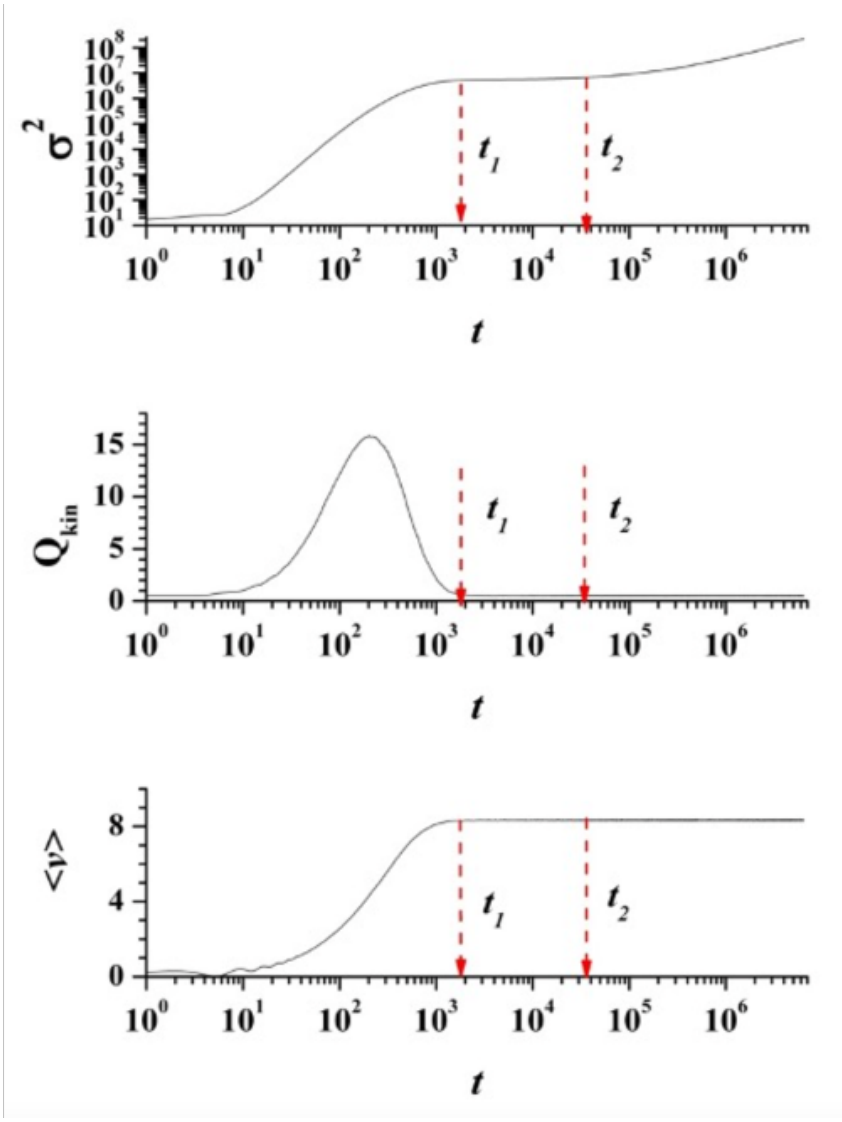


Рисунок 7. Часові залежності, відповідно, дисперсії, кінетичної температури та середньої швидкості.

потрібно $t = 6.4 \cdot 10^7$, тепер необхідно у 6000 разів менше розрахункового часу. При зменшенні температури, розрив між двома методами у величині розрахункового часу буде тільки експоненційно збільшуватися.

В принципі, даний метод можна також застосовувати і для інших систем, у яких спостерігається значний ріст дисперсії у початковій фазі. Але тут потрібно проявляти обережність і бути впевненим, що всі перехідні процеси вже завершились. Одним із таких параметрів, що свідчить про зупинення перехідних процесів, може слугувати кінетична температура $Q_{\text{кін.}}$ [37], що пропорційна дисперсії швидкостей.

На рис. 7 показані часові залежності дисперсії, середньої швидкості та кінетичної температури, що відповідають даним на рис. 3. Можна побачити, що $Q_{\text{кін.}}$ виходить на стаціонарне значення за час t_1, після чого середня швидкість ансамбля перестає змінюватися. Незважаючи на те, що на верхньому малюнку присутня «бездисперсійна» фаза, це не заважає розрахувати коефіцієнт дифузії, як було показано вище.

Висновки

Підсумовуючі результати роботи, для броунівської частинки у похилому просторово-періодичному потенціалі було знайдено «бездисперсійний» режим і проведено дослідження стосовно основної причини виникнення плато на графіках. Виявилося, що причиною є обмежена в часі фаза супердифузії, що викликана зміною функції розподілу частинок по швидкостях. Через це, мінімальна дисперсія ансамблю частинок при русі в періодичній решітці обмежується величиною коефіцієнта дифузії частинок у в'язкому середовищі. На основі моделі двох-ямного потенціалу було визначено тривалість горизонтальної ділянки у подвійному логарифмічному масштабі.

Через тривалість режиму «плато», визначити коефіцієнт дифузії в такому режимі стандартними методами дуже непросто, особливо за достатньо низьких температур. Для подолання цієї проблеми було запропоновано метод, що дозволяє визначати коефіцієнт дифузії у «бездисперсійному» режимі з хорошою точністю на значно менших інтервалах часу, ніж при використанні стандартних методів.

Перелік використаних джерел

1. H. Risken, The Fokker-Planck Equation and Methods of Solution and Applications, Springer (1989), 485 p.
2. G. Costantini and F. Marchesoni, Threshold diffusion in a tilted washboard potential // Europhys. Lett. 48, 491 (1999).
3. R. Eichhorn, P. Reimann, Paradoxical motion of a single Brownian particle: Absolute negative mobility // Phys. Rev., E 66, 066132, 2002.
4. L. Machura, M. Kostur, P. Talkner, J. Łuczka, P. Hänggi, Absolute Negative Mobility Induced by Thermal Equilibrium Fluctuations // Phys. Rev. Lett. 98, 040601 (2007).
5. I. G. Marchenko and I. I. Marchenko, // Europhys. Lett. 100, 5005 (2012).
6. P. Hanggi and F. Marchesoni, Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // Rev. Mod. Phys. 81, 337 (2009).
7. D.M. Eigler, E. K. Schweizer, Positioning single atoms with a scanning tunnelling microscope // Nature, 344, 524–526 (1990).
8. S. Kawai, A. S. Foster, F. F. Canova, H. Onodera, S. Kitamura, E. Meyer, Atom manipulation on an insulating surface at room temperature // Nature Communications volume 5, 4403 (2014).
9. P. J. Pauzauskie, A. Radenovic, E. Trepagnier, H. Shroff, P. Yang, J. Liphardt, Optical trapping and integration of semiconductor nanowire assemblies in water // Nat. Mater., 5, 97 (2006).
10. V. Shvedov, A. R. Davoyan, C. Hnatovsky, N. Engheta, W. Krolikowski // Nat. Photonics, 8, 846 (2014).
11. K. Lindenberg, J. M. Sancho, A. M. Lacasta, I. M. Sokolov, Dispersionless Transport in a Washboard Potential // Phys. Rev. Lett. 98, 020602 (2007).
12. S. Saikia, Mangal C. Mahato, Dispersionless motion in a periodically rocked periodic potential // Phys. Rev. E 80, 062102 (2009).
13. J. Lu, H. Yang, L. Zhou, Y. Yang, S. Luo, Q. Li, M. Qiu // Phys. Rev. Lett., 118, 043601 (2017).
14. V. Shvedov, A. R. Davoyan, C. Hnatovsky, N. Engheta, W. Krolikowski //

Nat. Photonics, 8, 846 (2014).

15. A. Ashkin, Phys. Rev. Lett., 24, 156 (1970).
16. M. L. Juan, M. Righini, R. Quidant // Nat. Photonics, 5, 349 (2011).
17. H. Raether // Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and On Gratings, Springer, Berlin, p. 91 (1988).
18. J. Zhang, W. Liu, Z. Zhu, X. Yuan, S. Qin // Sci. Rep., 6, 38086 (2016).
19. M. Danesh, M.J. Zadeh, T. Zhang et. al., Monolayer Conveyor for Stably Trapping and Transporting Sub-1 nm Particles // Laser Photonics Rev., 2000030 (2020).
20. Yoshi-Hiko Ohtsuki, Charged Beam Interaction with Solids, Taylor & Francis, London, 1983.
21. C. Lehmann Interaction of radiation with solids and elementary defect production (Defects in crystalline solids), 341 pp. North-Holland, Amsterdam, 1977.
22. J.M. Sancho, A.M. Lacasta, The rich phenomenology of Brownian particles in nonlinear potential landscapes // Eur. Phys. J. Special Topics 187, 49–62 (2010).
23. Ernst Hairer, Christian Lubich and Gerhard Wanner. Geometric numerical integration : structure-preserving algorithms for ordinary differential equations Springer, Berlin, 2002.
24. K. Burrage, I. Lenane, G. Lythe, Numerical Methods for Second-Order Stochastic Equations, SIAM Journal on Scientific Computing, Vol.29, Iss.1, 050646032 (2007).
25. Loup Verlet, Computer experiments on Classical Fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Physical Review, Vol.159, 98 (1967).
26. W.F. van Gunsteren and H.J.C. Berendsen, Algorithms for Brownian dynamics // Mol. Phys., Vol.45, 637 (1982).
27. Riccardo Mannella, Quasisymplectic integrators for stochastic differential equations // Physical Review E, Vol.69, 041107-1 (2004).

28. Aslaug H. Strommen Melbo and Desmond J. Higham, Numerical simulation of a linear oscillator with additive noise // Applied Numerical Mathematics, vol.51, 89 (2004).
29. David Garcia-Alvarez. A comparison of a few numerical schemes for the integration of stochastic differential equations in the Stratonovich interpretation. Source: arXiv
30. N. Kumar, U. Harbola, K. Lindenberg, Memory-induced anomalous dynamics: Emergence of diffusion, subdiffusion, and superdiffusion from a single random walk model // Phys. Rev. E 82, 021101, (2010).
31. I.G. Marchenko, I.I. Marchenko, and A.V. Zhiglo, Europ. Phys. J. B, Vol.87, 10 (2014).
32. I.G. Marchenko, I.I. Marchenko, V.I. Tkachenko, Temperature-Abnormal Diffusivity in Underdamped Spatially Periodic Systems // JETP Letters, Vol. 106, No. 4, p.242 (2017).
33. B. Lindner, M. Kostur, L. Schimansky-Geier, Optimal diffusive transport in a tilted periodic potential // Fluctuation and Noise Letters, Vol.01, No. 01, pp. R25-R39 (2001).
34. J.P. Stark, Solid state diffusion, Wiley, (1976).
35. I.G. Marchenko, I.I. Marchenko, Anomalous Temperature Dependence of Diffusion in Crystals in Time-Periodic External Fields // JETP Letters, Vol.95, No.3, pp. 137 (2012).
36. J. Spiechowicz, J. Łuczka, Diffusion anomalies in ac-driven Brownian ratchets // Phys. Rev. E, Vol.91, 062104 (2015).
37. P. Siegle, I. Goychuk and P. Hanggi, // Phys. Rev. Lett., Vol.105, 100602 (2010).