East Eur. J. Phys. Vol.4 No.1 (2017) 47-55

**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. Marchenko[3] ,V.I. Tkachenko[1,2]**
[1]*National Scientific Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology"*
*1, Akademicheskaia St., Kharkov, 61108, Ukraine*
[2]*V.N. Karazin Kharkov National University*
*4 Svobody Sq., Kharkov, 61077, Ukraine*
[3]*NTU „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 ДИФУЗІЯ У ПОХИЛИХ ПРОСТОРОВО-ПЕРІОДИЧНИХ ПОТЕНЦІАЛАХ**

**І.Г. Марченко[1,2], І.І. Марченко[3], В.І. Ткаченко**
[1]*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»*
*вул. Академична 1, м. Харків 61108, Україна*
[2]*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна*
*пл. Свободи 4, м. Харків, 61077, Україна*
[3]*НТУ «Харківський політехнічний інститут*
*вул. Фрунзе 21, м. Харків 61145 , Україна*
У роботі досліджена дифузія частинок у похилих просторово-периодичних потенціалах під дією зовнішніх сил у сисемах з низьким коефіцієнтом тертя. Показано, що у всіх недодемпфованих системах існує обмежена область температурно-аномальні дифузії (ТАД). У цій області коефіцієнт диффузії зростає із зниженням температури. Визначені ширина та положення області ТАД в залежності від значення коефіцієнту тертя та параметрів системи. Знайдені аналітичні вирази для коефіцієнтів диффузії 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**

**И.Г. Марченко[1,2], И.И. Марченко[3], В.И. Ткаченко[1,2]**
[1]*Национальний научный центр «Харьковский физико-технический институт»*
*ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина*
[2]*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина*
*пл. Свободы 4, г. Харьков, 61077, Украина*
[3]*НТУ «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. Рискеном [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. Рискеном были получены функции распределения частиц и выражения для мобильности частиц. В то же время коэффициент диффузии не исследовался. По-видимому, впервые методами численного решение 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: $D_{\max} \sim \exp(\varepsilon / kT)$. Этот 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 двухямного 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 $\gamma$. Исследование ТАД было продолжено в работе [23]. И. Соколов и Б. Линднер подтвердили существование области ТАД в широком интервале $\gamma$. Они численно построили диаграмму существования ТАД для различных $F$ и $\gamma$, используя результаты моделирования уравнений Ланжевена. В то же время, расчеты не были проведены для малых $\gamma$ ($\gamma \le 0,1$), т.к. в этом случае время компьютерных расчетов существенно возрастает ($\sim 1/\gamma$).

Целью данного исследования является установление области существования ТАД при малых $\gamma$ 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:

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

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:

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\Gamma kT\delta(t-t'), \tag{2}$$

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

В простейшем случае потенциальная энергия частицы $U$ в одномерной периодической решетке может быть записана следующим образом:

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

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

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

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

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 перемещалась в первую элементарную ячейку путем трансляции на целое количество постоянных решетки.

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

$$D = \lim_{t\to\infty} D_{ef}(t) = \lim_{t\to\infty} \frac{\left\langle \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \right\rangle}{2t} = \lim_{t\to\infty} \frac{\sigma^2}{2t}, \tag{5}$$

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

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

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

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 $\gamma$ :

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

**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 $\gamma$ ( $\gamma = 0,03$ 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 $\gamma$ 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 $\gamma$. 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 $\Delta F_{TAD}$, линейно уменьшается с уменьшением $\gamma$. Детальный анализ всех графиков приведенных на рис. 1 показывает, что $\Delta F_{TAD}$ линейно уменьшается с коэффициентом трения, а максимальное значение $D$ с уменьшением $\gamma$ 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.