01;05

Коэффициент диффузии броуновской частицы в быстро флуктуирующем периодическом потенциале

© *А.А. Дубков*

Нижегородский государственный университет
E-mail: dubkov@rf.unn.ru

Поступило в Редакцию 15 июля 2002 г.

Выведена точная формула для эффективного коэффициента диффузии броуновских частиц в быстро флуктуирующем периодическом потенциальном поле. Показано, что при любом потенциале имеет место ускорение диффузии по сравнению со случаем свободной диффузии. Вычислены значения коэффициента диффузии для ряда конкретных потенциальных профилей.

В статье А.Н. Малахова [1] было показано, что в быстро флуктуирующем периодическом поле процесс диффузии броуновских частиц может ускоряться по сравнению со случаем свободной диффузии. Однако точная формула для эффективного коэффициента диффузии D_{eff} была получена автором лишь для пилообразного потенциального профиля. Настоящая работа посвящена выводу точного соотношения для D_{eff} в случае произвольного периодического потенциала.

Рассмотрим, как и в [1], уравнение Ланжевена для координаты броуновской частицы, движущейся во флуктуирующем периодическом поле $U\ (x)$ в режиме передемпфирования:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{dU(x)}{dx}\zeta(t) + \xi(t). \tag{1}$$

Здесь $\xi(t)$ и $\zeta(t)$ — статистически независимые белые гауссовы шумы с нулевыми средними значениями $\langle\xi(t)\rangle = \langle\zeta(t)\rangle = 0$ и интенсивностями D и D_ζ соответственно: $\langle\xi(t)\xi(t+\tau)\rangle = D\delta(\tau)$, $\langle\zeta(t)\zeta(t+\tau)\rangle = D_\zeta\delta(\tau)$. Будем далее считать потенциал $U(x)$ четной функцией периода L, переместив начало координат в один из его минимумов.

Определим эффективный коэффициент диффузии, согласно [2–4], как предел

$$D_{eff} = \lim_{t\to\infty} \frac{\langle x^2(t)\rangle}{t} = \lim_{t\to\infty} \frac{d}{dt} \langle x^2(t)\rangle. \tag{2}$$

Нетрудно записать соответствующее (1) уравнение Фоккера–Планка для плотности вероятности $W(x, t)$ координаты броуновской частицы

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{D_\xi}{2} \frac{\partial}{\partial x} U'(x) \frac{\partial}{\partial x} U'(x)W + \frac{D}{2} \frac{\partial^2 W}{\partial x^2}. \tag{3}$$

Поскольку мы интересуемся асимптотическим поведением среднего квадрата координаты, начальное условие к уравнению (3) можно задать произвольным образом. Поместим в момент $t = 0$ все броуновские частицы в начало координат: $W(x, 0) = \delta(x)$. Тогда в силу четности потенциала $U(x)$ диффузия при $t > 0$ будет идти симметрично в обоих направлениях оси Ox, а поток вероятности в точке $x = 0$ и $\langle x(t)\rangle$ будет оставаться равным нулю. Это означает, что для вычисления D_{eff} в начало координат можно поместить отражающий экран и рассматривать диффузию только в сторону положительных x.

Далее удобно ввести в рассмотрение Лаплас-образ плотности вероятности

$$Y(x, s) = \int_0^\infty W(x, t)e^{-st}dt.$$

В результате уравнение (3) примет вид обыкновенного дифференциального уравнения 2-го порядка для функции $Y(x, s)$

$$\frac{D_\xi}{2} \frac{d}{dx}U'(x) \frac{d}{dx}U'(x)Y + \frac{D}{2} \frac{d^2Y}{dx^2} - sY = 0 \qquad (x > 0), \tag{4}$$

которое необходимо дополнить условием нормировки плотности вероятности

$$\int_0^\infty Y(x, s)dx = \frac{1}{s}. \tag{5}$$

Линейное однородное уравнение (4) с периодическими коэффициентами по теореме Флоке (см. [5], с. 110) имеет решение вида

$$Y(x,s) = e^{-\mu(s)x}\Phi(x,s), \tag{6}$$

где $\Phi(x,s)$ — периодическая функция координаты x с тем же периодом L, а $\mu(s)$ — характеристический показатель решения. В силу того что при $s = 0$ уравнение (4) имеет чисто периодическое решение, $\mu(s) \to 0$ при $s \to 0$. Заметим также, что, согласно (6):

$$Y(L,s) = e^{-\mu(s)L}Y(0,s). \tag{7}$$

В соответствии с (2) и предельными теоремами преобразования Лапласа

$$D_{eff} = \lim_{s\to 0} s^2 \cdot \overline{x_s^2}, \tag{8}$$

где

$$\overline{x_s^2} = \int\limits_0^\infty x^2 Y(x,s)dx = \int\limits_0^\infty x^2 e^{-\mu x}\Phi(x,s)dx = \frac{\partial^2}{\partial\mu^2}\int\limits_0^\infty e^{-\mu x}\Phi(x,s)dx. \tag{9}$$

Поскольку выражение (9) входит под предел (8), нам достаточно найти приближенное значение интеграла при $s \to 0$, т.е. при $\mu \to 0$. С учетом периодичности функции $\Phi(x,s)$ и условия нормировки (5) имеем

$$\frac{1}{s} = \int\limits_0^\infty e^{-\mu x}\Phi(x,s)dx = \sum_{n=0}^\infty \int\limits_{nL}^{(n+1)L} e^{-\mu x}\Phi(x,s)dx = \int\limits_0^L e^{-\mu x}\Phi(x,s)dx \sum_{n=0}^\infty e^{-\mu nL}$$

$$= \frac{1}{1-e^{-\mu L}}\int\limits_0^L e^{-\mu x}\Phi(x,s)dx \simeq \frac{1}{\mu L}\int\limits_0^L e^{-\mu x}\Phi(x,s)dx.$$

Таким образом,

$$\overline{x_s^2} \simeq \frac{2}{\mu^3 L}\int\limits_0^L e^{-\mu x}\Phi(x,s)dx \simeq \frac{2}{s\mu^2}. \tag{10}$$

Подстановка (10) в (8) приводит к новому выражению для эффективного коэффициента диффузии в форме предела

$$D_{eff} = 2 \lim_{s \to 0} \frac{s}{\mu^2(s)}. \tag{11}$$

Как видно из (11), задача свелась к вычислению характеристического показателя решения уравнения (4). Его расчет представляет, как правило, известные трудности, поскольку базируется на условии равенства нулю бесконечного детерминанта [5]. Однако в данном случае удается найти показатель $\mu(s)$ непосредственно из соотношения (7).

В самом деле, переходя к новой переменной

$$Z(x, s) = \sqrt{D + D_\xi [U'(x)]^2} \cdot Y(x, s), \tag{12}$$

перепишем уравнение (4) в самосопряженной форме

$$\frac{1}{2} \sqrt{D + D_\xi [U'(x)]^2} \, \frac{d}{dx} \sqrt{D + D_\xi [U'(x)]^2} \, \frac{dZ}{dx} - sZ = 0. \tag{13}$$

Полученное уравнение путем замены независимой переменной

$$u = \int\limits_0^x \frac{dy}{\sqrt{D + D_\xi [U'(y)]^2}}$$

сводится к линейному уравнению с постоянными коэффициентами и, как следствие, легко решается. Ограниченное решение уравнения (13) в области $x > 0$ имеет вид

$$Z(x, s) = C_0(s) \exp\left\{ -\sqrt{2s} \int\limits_0^x \frac{dy}{\sqrt{D + D_\xi [U'(y)]^2}} \right\}, \tag{14}$$

где $C_0(s)$ — некоторая постоянная, определяемая условием нормировки (5). В силу того что множитель перед $Y(x, s)$ в замене (12) является периодической функцией, характеристический показатель решения (14) должен совпадать с $\mu(s)$. Из соотношения для $Z(x, s)$, аналогичного (7), с учетом (14) находим

$$\mu(s) = \frac{\sqrt{2s}}{L} \int\limits_0^L \frac{dy}{\sqrt{D + D_\xi [U'(y)]^2}}.$$

Подставляя характеристический показатель $\mu(s)$ в (11), окончательно получаем точную формулу для эффективного коэффициента диффузии броуновских частиц в произвольном флуктуирующем потенциале $U(x)$:

$$D_{eff} = D\left[\frac{1}{L}\int\limits_0^L \frac{dx}{\sqrt{1 + D_\xi[U'(x)]^2/D}}\right]^{-2}. \tag{15}$$

Как видно из (15), при любом потенциальном профиле $U(x)$: $D_{eff} > D$, т. е. диффузия частиц ускоряется по сравнению со случаем $U(x) = 0$. Этот результат полностью подтверждает предположение, высказанное ранее в работе [1]. Заметим также, что в отличие от случая постоянного периодического поля [2–4] значение эффективного коэффициента диффузии определяется не высотой потенциального профиля, а его крутизной $U'(x)$.

Рассмотрим далее конкретные виды потенциала $U(x)$. Для пилообразного профиля $U(x) = 2E|x|/L$ при $|x| \leqslant L/2$ сразу же приходим к полученному А.Н. Малаховым точному результату

$$D_{eff} = D + D_\xi \frac{4E^2}{L^2}. \tag{16}$$

Для синусоидального потенциала $U(x) = E\sin^2(\pi x/L)$ формула (15) дает значение

$$D_{eff} = \frac{\pi^2 D(1+\gamma^2)}{4\mathbf{K}^2(\gamma/\sqrt{1+\gamma^2})}, \qquad \gamma = \frac{\pi E}{L}\sqrt{\frac{D_\xi}{D}}, \tag{17}$$

где $\mathbf{K}(k)$ — полный эллиптический интеграл первого рода $(0 < k < 1)$. При малых интенсивностях модулирующего шума D_ξ $(\gamma \ll 1)$ из соотношения (17) имеем

$$D_{eff} \simeq D + D_\xi \frac{\pi^2 E^2}{2L^2}. \tag{18}$$

Формула (18) совпадает с приближенным результатом работы [1], полученным в предположении гауссовости плотности вероятности $W(x,t)$. В противоположном случае $\gamma \gg 1$ можно воспользоваться асимптотической формулой для эллиптического интеграла [6]

$$\mathbf{K}(k) \simeq \ln\frac{4}{\sqrt{1-k^2}} \qquad (k \to 1),$$

и найти из (17)

$$D_{eff} \simeq \frac{D(\pi\gamma)^2}{4\ln^2\gamma} \sim \frac{D_\xi}{\ln^2 D_\xi}. \tag{19}$$

Согласно (19), эффективный коэффициент диффузии возрастает с ростом интенсивности модулирующего шума D_ξ, но медленнее линейного закона (16).

В заключение заметим, что точную формулу (15) можно записать в более физичной форме

$$D_{eff} = \frac{L^2}{\tau(0)}, \tag{20}$$

где $\tau(0)$ — среднее время первого достижения поглощающей границы $x = L$ броуновскими частицами, стартующими от отражающей границы $x = 0$. Соотношение (20) было выведено ранее в [3] для постоянного периодического поля.

Результаты работы, подтвердившие явление ускорения диффузии путем быстрой стохастической модуляции поля с заданным пространственным периодом, могут представлять интерес для современных диффузионных технологий изготовления материалов твердотельной электроники.

Данная работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 00–15–96620 и 02–02–17517), INTAS (грант 2001–0450) и НП „Университеты России“ (грант УР.01.01.008).

Список литературы

[1] *Малахов А.Н.* // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 21. С. 9–15.
[2] *Festa R., d'Agliano E.G.* // Physica A. 1978. V. 90. P. 229–244.
[3] *Weaver D.L.* // Physica A. 1979. V. 98. P. 359–362.
[4] *Медведев С.Ю., Саичев А.И.* // Радиотехника и электроника. 1979. Т. 24. В. 10. С. 2058–2061.
[5] *Камке Э.* Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1976. 576 с.
[6] *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1973. 831 с.