

И. И. МАРЧЕНКО, А. В. ЖИГЛО, И. Г. МАРЧЕНКО

## ТЕМПЕРАТУРНО-АНОМАЛЬНАЯ ДИФФУЗИЯ В НЕДОДЕМПФИРОВАННЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

В роботі досліджено посилення дифузії частинок в просторово-періодичних структурах під впливом періодичних в часі полів. Показано, що дифузія може бути довільним чином посилена (на багато порядків) при виборі відповідних температур, амплітуд і частот зовнішнього поля. Встановлено, що при амплітудах перевищують критичний рівень, в температурній залежності виникає область температурно-аномальної дифузії (ТАД) при якій коефіцієнт дифузії зростає з пониженням температури.

**Ключові слова:** дифузія, комп'ютерне моделювання, періодичні структури, рівняння Ланжевена, періодичні поля.

В работе исследовано усиление диффузии частиц в пространственно-периодических структурах под воздействием периодических во времени полей. Показано, что диффузия может быть произвольным образом усилена (на многие порядки) при выборе соответствующих температур, амплитуд и частот внешнего поля. Установлено, что при амплитудах превышающих критический уровень, в температурной зависимости возникает область температурно-аномальной диффузии (ТАД) при которой коэффициент диффузии возрастает с понижением температуры.

**Ключевые слова:** диффузия, компьютерное моделирование, периодические структуры, уравнения Ланжевена, периодические поля.

We have investigated the strengthening of the diffusion of particles in a spatially periodic structures under the influence of periodic in time fields. It is shown that diffusion can be arbitrarily enhanced (many orders of magnitude) in the selection of appropriate temperatures, amplitudes and frequencies of the external field. The physical reason behind the strong diffusivity enhancement is emergence of two populations of particles under the action of external force, locked and running ones. At optimal forces and temperature the number of particles in the two populations is comparable, long flights of the running particles relative to the locked population take place with significant probability, resulting in giant enhancement of diffusion. It was found that the amplitudes exceeding the critical level, the temperature dependence in a region temperature abnormal diffusion (TAD) in which the diffusion coefficient increases with decreasing temperature.

**Keywords:** diffusion, computer simulation, periodic structures, Langevin equation, time-periodic fields.

**Введение.** Диффузия и транспорт 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. Изменяя характеристики поля можно эффективно управлять процессами диффузии. Так при изучении диффузии частиц в коллоидном растворе с оптическими ловушками (так называемые оптические вихри) наблюдалось гигантское увеличение диффузии в сотни раз превышающее равновесное [4]. Так же сильное возрастание коэффициента диффузии отмечалось при изучении диффузии парамагнитных частиц по поверхности феррогранатов под воздействием внешнего периодического во времени магнитного поля [5]. Возрастание коэффициента диффузии было так же замечено в экспериментах с гранулярным газом [6]. Помимо непосредственного увеличения скорости физических процессов, лимитированных скоростью диффузии, изменяя коэффициенты диффузии в различных направлениях можно эффективно сепарировать нано- и микро-частицы различной природы [7].

Однако до настоящего времени не установлены основные закономерности такой ускоренной диффузии под воздействием сил различной

амплитуды в системах с различным уровнем диссипации энергии.

В зависимости от степени диссипации энергии в системе, описываемой коэффициентом трения  $\gamma$ , различают недодемпфированные ( $\gamma/m \ll \omega_0$ ) и передемпфированные системы ( $\gamma/m \gg \omega_0$ ), где  $\omega_0$  – период собственных малых колебаний,  $m$  – масса частиц. В недодемпфированных системах трение мало и затухание колебаний происходит за время большее, чем период собственных колебаний. Для передемпфированных систем можно не учитывать инерционные эффекты, и соответственно математическое рассмотрение в этом случае существенно упрощается.

Диффузия под воздействием постоянной силы изучалась в работах К. Линденберг с соавторами [16–19]. В [16] исследовалось поведение дисперсии ансамбля частиц во времени. Было впервые показано, что в недодемпфированных системах возникает ограниченный во времени режим «dispersionless» транспорта, когда дисперсия не изменяется. Авторами были объяснены причины этого явления и показано, что возникает сильно неравновесное (экспоненциальное в пространстве) распределение частиц которое слабо изменяется вплоть до времени, когда устанавливается гауссово распределение. Ими была так же исследована температурная зависимость диффузии [19]. Было показано, что максимальное значение коэффициента диффузии достигается вблизи некоторой критической силы. Исследования температурной зависимости диффузии показало, что коэффициент диффузии ведет себя аномальным образом: растет с понижением температуры. Подгонка данных компьютерного моделирования дала следующую

шую степенную зависимость от обратной температуры:  $D_{\max} \sim T^{-3.5}$

Существование аномальной температурной зависимости отличает недодемпфированные системы от передемпфированных. Для передемпфированных систем Reimann с соавторами [20–21] аналитически показали, что для синусоидального пространственного потенциала в критической точке отношение  $D_{\max}$  к диффузии частиц в вязкой среде возрастает с уменьшением температуры как  $D_{\max} \sim T^{-2/3}$ . Однако при этом абсолютное значение диффузии с температурой увеличивается как  $D_{\max} \sim T^{1/3}$ .

Возникновение аномальной температурной зависимости диффузии частиц в системах с малой диссипацией связана с увеличением длины скачков «бегущих» частиц с понижением температуры. Диффузия в недодемпфированных системах интересна тем, что в отличие от передемпфированных систем, для ее увеличения можно прикладывать силы, существенно меньшие, чем для прямого «силового» перетаскивания частиц через потенциальный барьер.

Более детальное рассмотрение диффузии в недодемпфированных системах было проведено в работе [22]. Было установлено, что temperature abnormal diffusion (TAD) наблюдается только в узком интервале приложенных внешних сил. Исследования в широком диапазоне температур показали, что коэффициент диффузии возрастает с понижением температуры экспоненциальным образом:  $D_{\max} \sim \exp(1/kT)$ . Показано, что физической причиной такой зависимости является экспоненциальный рост корреляционного времени с падением температуры. Дальнейшее развитие эти исследования получили в работе [23], где была построена феноменологическая модель, обобщающая модель Рискена, и выведена аппроксимационная формула для подвижности частиц. Эта формула находится в отличном соответствии с данными компьютерного моделирования для широкого интервала, как коэффициентов трения, так и действующих сил. В этой же работе было показано, что наблюдаемое экспоненциальное возрастание коэффициента диффузии определяется двухямыным видом эффективного потенциала  $W(V)$  в пространстве скоростей.

Поведение коэффициента диффузии при воздействии постоянной силы имеет большой академический интерес. В то же время технически значительно проще реализуются различные периодические во времени поля (электромагнитные, акустические и пр.). Поэтому вопрос о влиянии периодических полей на диффузионные процессы представляет собой не только научный, но и практический интерес. Изменяя должным образом, коэффициент диффузии с помощью внешних периодических полей можно создавать поверхностные структуры с заданными свойствами, влиять на динамику точечных дефектов, в том числе и под облучением, изменять динамику движения

дислокаций, ускорять скорость химических реакций в выбранных направлениях, влиять на скорость протекания процессов в биологических объектах и пр.

Вопрос о влиянии параметров внешнего периодического поля на диффузионную подвижность впервые изучался в работе [24,25]. Исследуя передемпфированные системы П. Риман показал, что в двухмерных системах с потенциалом Юкавы возможно существенное усиление подвижности частиц под действием периодического поля. При этом при определенных параметрах потенциала наблюдался TAD [25]. В работе [24] исследовались недодемпфированные системы. Было установлено, что в таких системах, воздействуя периодическим полем, можно на многие порядки изменять коэффициент диффузии частиц, находящихся в синусоидальном потенциале. В недодемпфированных системах так же наблюдаться TAD при периодическом воздействии. Однако, в отличие от передемпфированных систем, в недодемпфированных системах TAD наблюдалась и под воздействием постоянного поля. Однако, этот эффект проявлялся только в определенном интервале частот [26].

Исследования в работе [26] проводились лишь для одного значения амплитуды внешнего поля. До настоящего времени остается открытым вопрос о том, как связаны результаты этого исследования со случаем постоянного поля и какова функциональная зависимость аномального роста диффузии при падении температуры? Для экспериментального исследования TAD и усиления диффузии внешними периодическими полями важно знать качественный вид частотных и амплитудных зависимостей усиления диффузии.

**Целью данной работы** являлось установление качественного вида температурной зависимости диффузии для периодических полей различной амплитуды.

**Методика моделирования.** Движение частицы на одномерной решетке под действием внешней силы  $F_t$  описывалось уравнением Ланжевена:

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

где  $t$  – время,  $x$  – координата частицы в одномерной решетке,  $m$  – ее масса,  $\gamma$  – коэффициент трения; точка сверху означает дифференцирование по времени; член  $\xi(t)$  описывает термические флуктуации; точка сверху означает дифференцирование по времени.

Предполагается, что шум является гауссовым белым и соответственно для термических флуктуаций выполняется соотношение:

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

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  $F_{\text{lat}}$ :

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

Величина  $F_{\text{cr}} = \frac{\pi}{a}U_0$ , называемая критической силой [16, 21], 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 [22, 23]. Величина  $U_0$  составляла 80 мэВ – величину характерную для диффузии по плотноупакованным поверхностям металлов. Постоянная одномерной решетки была выбрана равной 2 Å.

В работе исследовалось прямоугольное периодическое поле:

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

где  $\omega$  – угловая частота внешней силы, а  $F_0$  – ее амплитуда.

Стохастические уравнения (1)–(2) для каждой частицы решались численно методом Эйлера [27] с шагом по времени составляющим менее 0.01 периода собственных малых колебаний. Статистическое усреднение проводилось по ансамблю с количеством частиц не менее  $N = 5 \cdot 10^4$ . Для проверки полученных результатов отдельные вычисления проводились с  $N = 5 \cdot 10^6$ . Начальные условия задавались следующим образом. Частица помещалась в начале координат и ей случайным образом сообщалась скорость, имеющая Максвелловское распределение по температуре. Для достижения равновесной функции распределения частиц, как по скоростям, так и по координатам проводилась термолизация 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 термолизации 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 решетки.

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

$$t' = t \frac{1}{a} \sqrt{\frac{U_0}{m}}, \quad x' = \frac{x}{a}. \quad (7)$$

Для сопоставления данных полученных в данной работе с данными других авторов использовались безразмерные величины температуры  $T'$  и трения  $\gamma'$  [9].

$$T' = \frac{Tk}{U_0}; \quad \gamma' = \frac{\gamma a}{(mU_0)^{1/2}}, \quad (8)$$

В работе изучалось недодемпфированное движение частиц. Значение коэффициента трения  $\gamma' = 0.14$  соответствовало использованному ранее [7].

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

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} D_{\text{ef}}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}{2t} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{2t}, \quad (9)$$

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

Известно, что в системах, характеризующихся низким уровнем диссипации энергии, возможно возникновение особых, ограниченные во времени, режимов диффузии: так называемой субдиффузии и супердиффузии [16, 28, 29]. Обычная диффузия характеризуется линейной зависимостью дисперсии координаты частиц  $x$  от времени  $t$ :

$$\sigma^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \propto t, \quad (10)$$

В случае реализации особых режимов диффузии эта зависимость изменяется:

$$\sigma^2 \propto t^\alpha. \quad (11)$$

При показателе степени  $\alpha < 1$  говорят о субдиффузии, а при  $\alpha > 1$  – о супердиффузии.

Показатели  $\alpha$  в работе определялись подгонкой по методу наименьших квадратов линейной зависимости  $\ln(\sigma^2)$  от  $\ln(t)$  на ограниченном интервале времени.

**Результаты и обсуждение.** Ранее в работе [22] было показано, что при воздействии постоянной внешней силы, в зависимости от ее величины, могут реализовываться функционально различные температурные зависимости коэффициента диффузии. Результаты этих исследований приведены на рис. 1. Из рисунка видно, что существует три области (I–III) различающихся поведением коэффициента диффузии  $D$  с температурой. В первой области диффузия усиливается с ростом приложенной силы, а в области III – падает. Однако в то время как в областях I и III коэффициент диффузии возрастает с ростом

температуры, в области **II** (на рисунке выделена штриховкой) он с понижением температуры растет. Это область температурно-аномальной диффузии (ТАД). Диффузия является «нормальной», т. е.  $\sigma^2 \propto t$ , однако в отличие от обычной температурной зависимости, коэффициент диффузии в области **II**, экспоненциально растет понижением температуры [22]. В работе [24], было установлено, что ТАД также наблюдается при воздействии на частицу периодической во времени силы. Однако режим ТАД реализовывался только в определенном интервале частот. В работе [24] исследования проводились лишь при одном значении амплитуды внешней силы:  $F_0 = 0.15F_{cr}$ . То есть амплитуда  $F_0$  лежала в области **III**, в которой при воздействии постоянной силы ТАД не наблюдалась.

Для выяснения физических причин аномальной температурной зависимости диффузии в случае постоянной и периодической силы рассмотрим движение частиц под воздействием прямоугольного периодического поля (5). Такой вид внешнего поля имеет преимущество перед синусоидальным с точки зрения простоты интерпретации физических результатов. Как было показано ранее [22], каждому значению постоянной силы соответствует эффективный потенциал  $W(V)$ . При воздействии прямоугольного периодического поля на каждом полупериоде частица движется в фиксированном потенциале. В случае же синусоидальной зависимости, в силу изменения величины действующей силы, эффективный потенциал  $W(V)$  непрерывно изменяется по периоду. Это значительно усложняет анализ и без того непростой задачи.

При прямоугольной форме внешнего поля, при малых частотах на интервале, соответствующем полупериоду колебаний, можно использовать полученные ранее данные по особенностям диффузии в постоянном силовом поле. Для исследования амплитудной зависимости усиления диффузии под воздействием внешнего поля разобьем весь интервал амплитуд внешнего поля на три области (**I–III**) в соответствии с диаграммой рис. 1. Интуитивно понятно, что при  $\omega \rightarrow 0$  решение для периодического поля должно совпадать со случаем постоянного во времени поля. В дальнейшем мы исследуем, как будут изменяться зависимости диффузии от температуры с частотой при различных амплитудах.

Ранее нами было показано, что движение ансамбля недомпфированных частиц на одномерной решетке под воздействием постоянной силы [23] может быть сведено к задаче о движении ансамбля передомпфированных частиц в эффективном потенциале  $W(V)$  в пространстве скоростей  $V$ . По своему существу задача оказалась очень схожей с задачей, рассматриваемой в статье [28] о движении активных частиц в двухъямном потенциале. Однако в отличие от рассмотрения Линднера и Николя где возможные минимумы потенциала симметричны относительно нулевого значения скорости, минимумы

$W(V)$  при движении на одномерной решетке могут реализоваться при  $V = 0$  и (или)  $V = F/\gamma$ . Как было показано ранее [12], одновременное существование двух минимумов возможно только в узком интервале приложенных сил, определяемом диссипативными свойствами системы. В этом интервале возможны два различных детерминированных решения для движущихся частиц. Это локализованное решение ( $V = 0$ ) и бегущее ( $V = F/\gamma$ ). Реализация того или иного решения зависит от начальной скорости частицы. Как было показано ранее [23], необходимым условием возникновения ТАД является возможность одновременного сосуществования бегущих и локализованных решений.

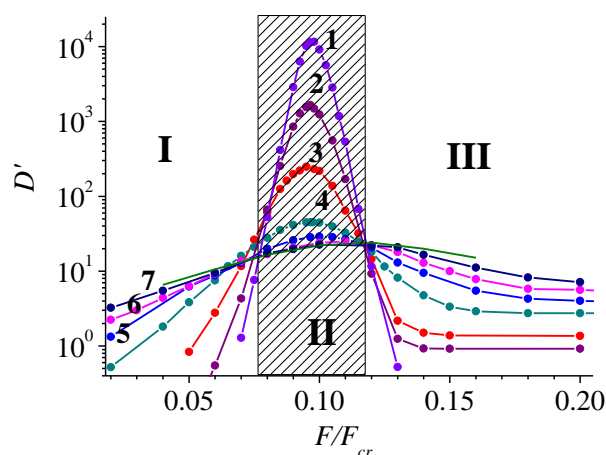


Рис. 1 – Зависимость безразмерного коэффициента диффузии от величины действующей силы для различных температур. Область аномальной температурной зависимости (**II**) заштрихована. Коэффициент трения  $\gamma' = 0.141$ ,  $1 - T' = 0.097$ ,  $2 - T' = 0.129$ ,  $3 - T' = 0.194$ ,  $4 - T' = 0.388$ ,  $5 - T' = 0.582$ ,  $6 - T' = 0.776$ ,  $7 - T' = 0.969$

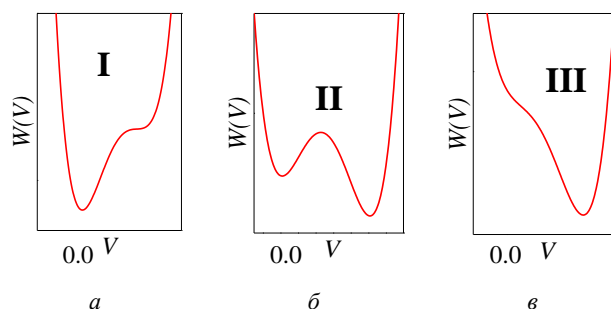


Рис. 2 Схематический вид эффективного потенциала частиц в пространстве скоростей для выбранных значений амплитуды в различных областях диаграммы, приведенной на рис. 1:  $a - F_0/F_{cr} = 0.06$ ,  $b - F_0/F_{cr} = 0.095$ ,  $v - F_0/F_{cr} = 0.25$

Выберем исследуемые значения амплитуд внешнего поля в различных участках диаграммы рис. 1. Качественный вид эффективного потенциала  $W(V)$  для выбранных значений приведен на рис. 2.

Значение  $F/F_{cr} = 0.06$  находится в первой области диаграммы. Под воздействием постоянной силы здесь в отсутствии шума возможно только стационарное локализованное решение. Второе выбранное значение силы  $F/F_{cr} = 0.095$  относится к области II. В этой области возможны 2 вида стационарных решений. При значении  $F/F_{cr} = 0.10$  наблюдался максимальный коэффициент диффузии. И третье значение амплитуды  $F/F_{cr} = 0.25$  относится к области III, когда существует только стационарное бегущее решение. Местоположение различных областей (I–III) зависит от коэффициента трения  $\gamma$  и массы частиц и может быть определено из формализма, предложенного в работе [23]. Качественно картина выглядит следующим образом: с уменьшением  $\gamma$  область II сдвигается в сторону меньших значений действующей силы, а ее ширина уменьшается.

Рассмотрим, как изменяется с частотой дисперсия для различных выбранных амплитуд. В качестве примера исследуемых зависимостей, на рис. 3 в двойном логарифмическом масштабе показано изменение дисперсии частиц во времени при воздействии поля различной частоты имеющего амплитуду  $F_0/F_{cr} = 0.06$ . Как видно из рис. 1, при постоянно действующей силе это значение относится к области I. Время на рисунке приведено в единицах периода  $\tau_0$  собственных малых колебаний в потенциале (4):

$$\tau_0 = a \sqrt{\frac{2m}{U_0}}. \quad (10)$$

Кривая 4 на рис. 3 соответствует постоянной силе. Величина  $\tau_1$  соответствует среднему времени выхода ансамбля частиц из потенциальной ямы. Как следует из этого графика, в интервале времени от  $\tau \approx \tau_1$  до  $\tau \approx \tau_2$  дисперсия растет как  $\sigma^2 \propto t^\alpha$  где  $\alpha = 2.3$ . То есть на этом временном интервале наблюдается режим супердиффузии. Однако в дальнейшем дисперсия изменяется пропорционально времени, и соответственно реализуется обычная диффузия с  $\alpha = 1$ . Кривые 1–3 на рисунке отвечают различным частотам воздействия внешнего поля. Кривая 1 соответствует самой высокой представленной на рисунке частоте. И, как видно из рисунка, соответствующий коэффициент диффузии – самый низкий. Понижение частоты приводит к возрастанию коэффициента диффузии.

Наличие ограниченной во времени фазы супердиффузии во всех исследованных областях амплитуд приводит к возникновению аномальных температурных зависимостей диффузии.

На рис. 4 приведено изменение коэффициента диффузии от обратной температуры для полей различной амплитуды при фиксированной частоте. Незаполненными маркерами на рисунке приведена зависимость коэффициента диффузии в отсутствие

внешнего поля. Как видно из рис. 4 при малой амплитуде поля коэффициент диффузии  $D$  растет с повышением температуры во всем рассмотренном температурном интервале. В области низких температур коэффициент  $D$  хорошо аппроксимируется зависимостью  $D \sim \exp(-|\varepsilon|/kT)$ . В отсутствие поля  $\varepsilon = U_0$ , а с повышением амплитуды поля  $\varepsilon$  уменьшается.

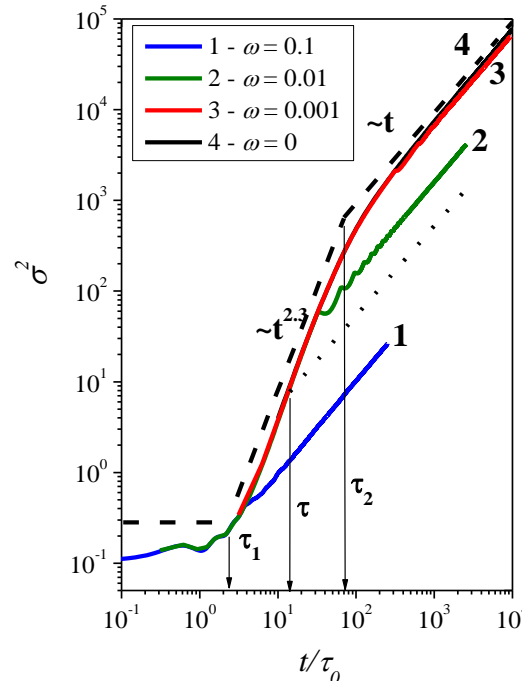


Рис. 3. Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени в области I для различных частот при внешнем воздействии периодической ступенчатой функции. Амплитуда поля  $F_0/F_{cr} = 0.06$ ,  $T = 0.194$ .  $\tau_2$  – время супердиффузии,  $\tau$  – период колебаний внешнего поля. 1 –  $\omega = 10^{-1}$ , 2 –  $\omega = 10^{-2}$ , 3 –  $\omega = 10^{-3}$ , 4 –  $\omega = 0$  (постоянная сила). Штриховыми линиями показано функциональное поведение дисперсии

При амплитудах поля лежащих в областях II и III коэффициент диффузии, в отличие от области I, с понижением температуры возрастает до  $D_{mx}(T_{mx})$ . В температурном интервале  $T > T_{mx}$ , так же, как и для постоянной силы [22–23], кривые соответствующие периодическому полю можно аппроксимировать зависимостью  $D \sim \exp(|\varepsilon_1|/kT)$ , где  $\varepsilon_1$  зависит от амплитуды поля. При  $T < T_{mx}$  понижение температуры приводит к ослаблению диффузии. В области низких температур, кривые можно аппроксимировать зависимостью  $D \sim \exp(-|\varepsilon_2|/kT)$ , где  $\varepsilon_2$  так же зависит от амплитуды поля. При этом максимум диффузии с ростом амплитуды смещается в область низких температур.

На рис. 5 приведено изменение коэффициента диффузии от обратной температуры для полей различной частоты при фиксированной амплитуде поля. Как видно из рисунка режим ТАД, в отличие от

случая постоянного поля, реализуется только в определенном интервале температур. Причем, чем ниже частота, тем шире температурный интервал. При любой конечной частоте существует температура,

ниже которой реализуется обычная температурная зависимость диффузии.

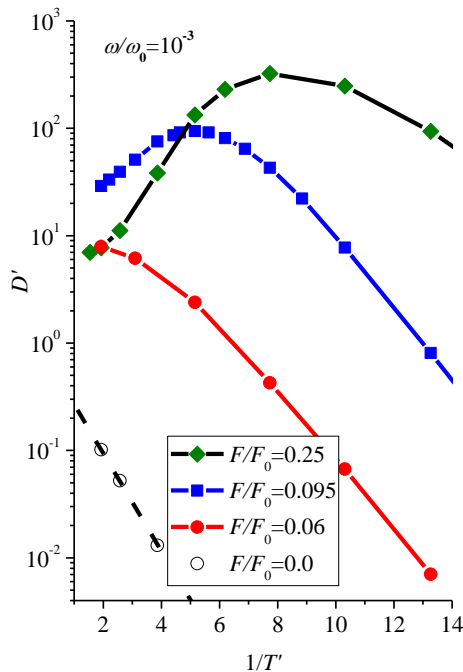


Рис. 4 – Зависимость коэффициента диффузии  $D$  от обратной температуры для различных амплитуд при фиксированной частоте внешнего поля  $\omega = 10^{-3}$

Для качественного объяснения поведения диффузии с температурой при фиксированной частоте обратимся к графикам на рис. 6. Из рисунка видно, что в области **I** с повышением температуры время  $\tau_1$  уменьшается. При этом увеличивается длительность фазы супердиффузии  $\tau_{spd} = \tau_2 - \tau_1$ . То есть с повышением температуры коэффициент диффузии монотонно растет, что хорошо видно из рис. 4.

В области **II**, как следует из рис. 6, с повышением температуры время  $\tau_1$  так же уменьшается, как и в области **I**. Однако, в отличие от области **II**,  $\tau_{spd}$  возрастает с понижением температуры. И соответственно время  $\tau_2$  (кривые 5–3) растет с понижением температуры. При температуре  $T_{нк}(F, \omega)$  (равной 180 на данном рисунке) время  $\tau_2$  сравнивается с периодом внешних колебаний  $\tau$ . При этом наблюдается максимальный коэффициент диффузии  $D_{нк}$ , соответствующий максимальной длительности фазы супердиффузии  $\tau_{spd}$ . Область TAD заканчивается при достижении периода колебаний времени  $\tau_2$ . Дальнейшее уменьшение температуры (кривые 2–1) не приводит к возрастанию длительности  $\tau_{spd}$ , так как оно ограничено периодом колебаний. С другой стороны, при уменьшении температуры по-прежнему возрастает  $\tau_1$ , уменьшая

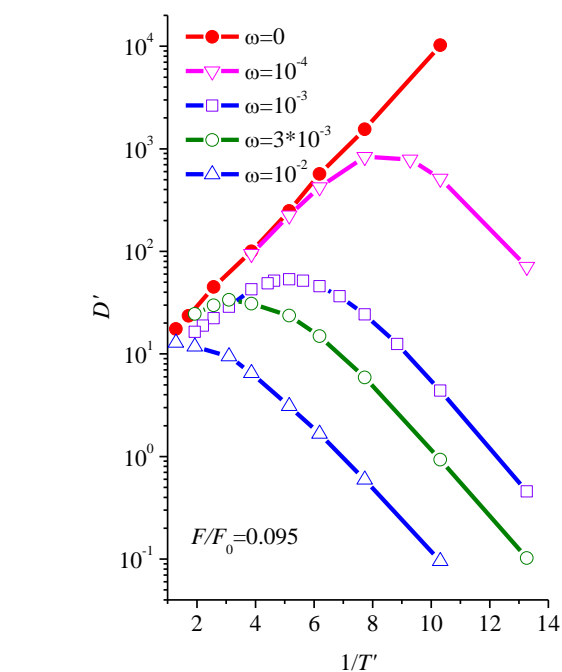


Рис. 5 – Зависимость коэффициента диффузии  $D$  от обратной температуры для различных частот внешнего поля при фиксированной амплитуде  $F_0 / F_{cr} = 0.095$

время  $\tau_{spd}$ . Таким образом, коэффициент диффузии начинает уменьшаться в соответствии с уменьшением  $\tau_{spd}$ . Поскольку для постоянной силы  $D \sim \exp(|\varepsilon|/kT)$  [22–23], то соответственно для температур  $T > T_{нк}$  должна выполняться такая же зависимость. При  $T < T_{нк}(F, \omega)$  диффузия ослабевает в соответствии с ростом  $\tau_1$ .

Как следует из рис. 6, для области **III** ситуация схожа с областью **II**. Максимальный коэффициент диффузии наблюдается при температуре  $T_{нк}(F, \omega)$  соответствующей максимальной длительности фазы супердиффузии. В отличие от области **II**, переходная область от возрастания к падению диффузии будет более широкой за счет существования «бездисперсионной» (dispersionless) фазы. Это хорошо видно на кривой 4 на рис. 6.

Область TAD заканчивается при достижении времени  $\tau_2$  периода колебаний. С этой точки зрения для усиления диффузии предпочтительно использование внешних полей большой амплитуды, при которых за период колебаний максимально используется фаза супердиффузии до начала «бездисперсионной» фазы.

Исследование диффузии под воздействием внешнего ступенчатого периодического поля можно подытожить следующим образом.



Весь интервал амплитуд можно качественно разбить на три области: **I–III**. В области **I** диффузия монотонно усиливается с повышением температуры. Диффузия в областях **II– III** ведет себя иным образом: графики коэффициента диффузии представляют собой кривую с максимумом. При  $T > T_{\text{max}}(F, \omega)$  реализуется

TAD: коэффициент диффузии растет с понижением температуры. При  $T < T_{\text{max}}(F, \omega)$   $D$  падает с уменьшением температуры. Существование TAD вызвано увеличением длительности фазы супердиффузии с понижением температуры.

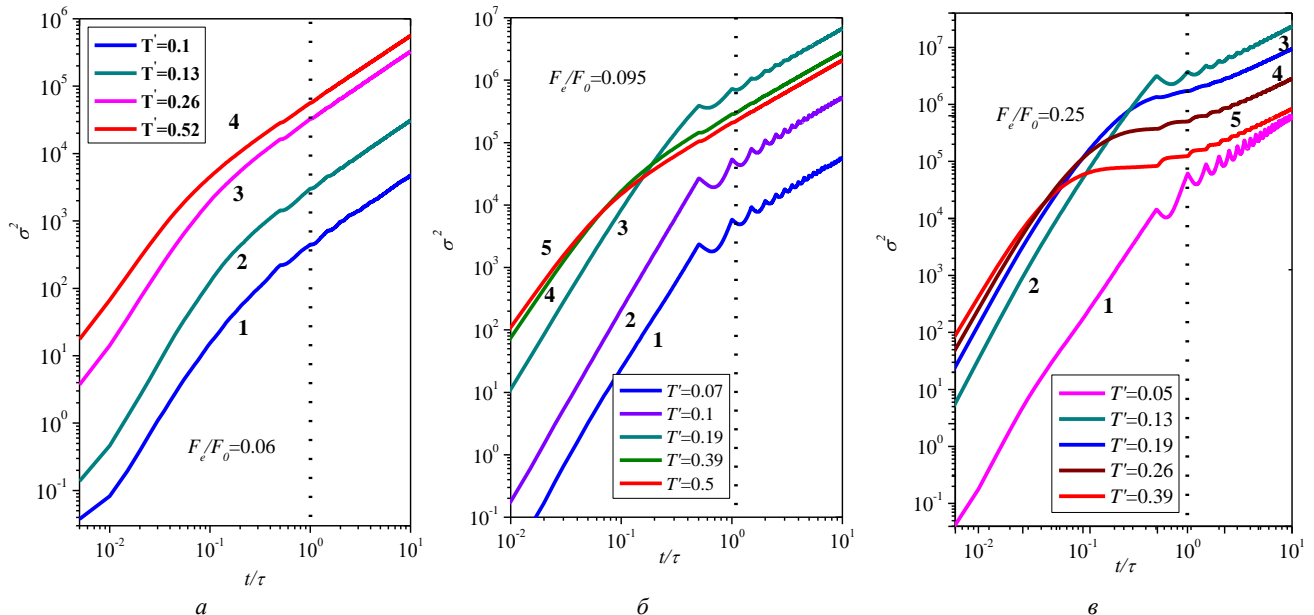


Рис. 6 – Зависимость безразмерной дисперсии частиц от времени для различных температур. Частота внешнего поля  $\omega = 10^{-3}$ . а –  $F_0/F_{cr} = 0.06$ , б –  $F_0/F_{cr} = 0.095$ , в –  $F_0/F_{cr} = 0.25$

**Выводы.** В работе исследовано усиление диффузии в пространственно–периодических недодемпфированных системах внешними периодическими во времени полями. Показано, что диффузия может быть произвольным образом усилена (на многие порядки) при выборе соответствующих температур, амплитуд и частот внешнего поля.

Исследованы температурные зависимости усиления диффузии для различных амплитуд поля при фиксированной частоте внешнего поля. Показано, что при амплитудах превышающих критический уровень (области **II** и **III**), в температурной зависимости возникает TAD : обычная диффузия ( $\sigma^2 \sim t$ ), но с коэффициентом диффузии, возрастающим с понижением температуры.

Физической причиной усиления диффузии под воздействием внешнего периодического поля является возникновение и существование на протяжении периода колебаний двух популяций частиц: локализованных и бегущих. При оптимальном выборе амплитуды осуществляются длинные прыжки бегущих частиц относительно локализованных, и происходит существенное увеличение коэффициента диффузии.

Будучи экспериментально установленным, эффект аномального усиления диффузии может быть использован в целом ряде новых технологий. Иссле-

дованное явление может использоваться для широкого круга систем, включающих сортировку частиц, создание поверхностных структур с заданными свойствами, проникновение частиц через искусственные и биологические мембраны, приборов с волнами зарядовой плотности, мемристоров и пр.

#### Список литературы

1. Costantini G. Threshold diffusion in a tilted washboard potential / G. Costantini, F. Marchesoni // Europhys. Lett. – 1999. – Vol. 48. – P. 491.
2. Hänggi P. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale / P. Hänggi, F. Marchesoni // Rev. Mod. Phys. – 2009. – Vol. 81. – P. 337–442.
3. Risken H. The Fokker–Planck Equation and Methods of Solution and Applications / H. Risken. – Springer, 1989. – 413 p.
4. Sang–Hyuk L. // Giant Colloidal Diffusivity on Corrugated Optical Vortices / Sang–Hyuk L., Grier D. G. // Phys. Rev. Lett. – 2006. – Vol. 96. – P. 190601.
5. Tierno P. Giant Transversal Particle Diffusion in a Longitudinal Magnetic Ratchet / P. Tierno, P. Reimann, T. H. Johansen, F. Sagués // Phys. Rev. Lett. – 2010. – Vol. 105. – P. 230602.
6. Eshuis P. Experimental Realization of a Rotational Ratchet in a Granular Gas / P. Eshuis, K. van der Weele, D. Lohse, D. J. van der Meer // Phys. Rev. Lett. – 2010. – Vol. 104. – P. 248001–248005.
7. Sajeesh P. Particle separation and sorting in microfluidic devices: a review / P. Sajeesh, A. K. Sen // Microfluidics and Nanofluidics. – 2014. – Vol. 17 (1). – P. 1–52.
8. Risken H. Low friction nonlinear mobility for the diffusive motion in periodic potentials / H. Risken, H. D. Vollmer // Physics Letters. – 1979. – Vol. 69A (6). – P. 387–389.

9. Risken H. Brownian Motion in Periodic Potentials; Nonlinear Response to an External Force / H. Risken, H. D. Vollmer // *Z. Physik.* – 1979. – Vol. B 33. – P. 297–305.
10. Risken H. Bistability Effects of the Brownian Motion in Periodic Potentials / H. Risken, H. D. Vollmer // *Z. Physik.* – 1980. – Vol. B 37. – P. 343–349.
11. Risken H. Distribution Functions for the Brownian Motion of Particles in a Periodic Potential Driven by an External Force / H. Risken, H. D. Vollmer // *Z. Physik.* – 1979. – Vol. B 34. – P. 313–322.
12. Risken H. Nonlinear Response to an External Force / H. Risken, H. D. Vollmer // *Z. Physik.* – 1979. – Vol. B 35. – P. 177–184.
13. Jung P. Eigenvalues for the Extremely Underdamped Brownian Motion in an Inclined Periodic Potential / P. Jung, H. Risken // *Z. Physik.* – 1984. – Vol. B 54. – P. 357–370.
14. Costantini G. Threshold diffusion in a tilted washboard potential / G. Costantini, F. Marchesoni // *Europhys. Lett.* – 1999. – Vol. 48. – P. 491–497.
15. Borromeo M. Critical Hysteresis in a Tilted Washboard Potential / M. Borromeo, G. Costantini, F. Marchesoni // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – Vol. 82. – P. 2820–2823.
16. Lindenberg K. Dispersionless Transport in a Washboard Potential / K. Lindenberg, J. M. Sancho, A. M. Lacasta, I. M. Sokolov // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 98. – P. 020602-020606.
17. Sancho J. M. Diffusion on a Solid Surface: Anomalous is Normal / J. M. Sancho, A. M. Lacasta, K. Lindenberg, I. M. Sokolov, A. H. Romero // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 92. – P. 250601–250605.
18. Khoury M. Diffusion coefficient in periodic and random potentials / M. Khoury, J. P. Gleeson, J. M. Sancho, A. M. Lacasta, K. Lindenberg // *Phys. Rev.* – 2009. – Vol. E 80. – P. 021123–021131.
19. Lindenberg K. Transport and diffusion on crystalline surfaces under external forces / K. Lindenberg, A. M. Lacasta, J. M. Sancho, A. H. Romero // *New Journal of Physics.* – 2005. – Vol. 7. – P. 29–48.
20. Reimann P. Giant acceleration of free diffusion by use of tilted periodic potentials / P. Reimann, C. van den Broeck, H. Linke, P. Hänggi, J. M. Rubi, A. Pérez-Madrid // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – Vol. 87. – P. 010602–010608.
21. Reimann P. Diffusion in tilted periodic potentials: Enhancement, universality, and scaling / P. Reimann, C. van den Broeck, H. Linke, P. Hänggi, J. M. Rubi, A. Pérez-Madrid // *Phys. Rev.* – 2002. – Vol. E65. – P. 031104-031120.
22. Marchenko I. G. Diffusion in the systems with low dissipation: Exponential growth with temperature drop / I. G. Marchenko, I. I. Marchenko // *Europhys. Lett.* – 2012. – Vol. 100. – P. 5005.
23. Marchenko I. G. Particle transport in space-periodic potentials in underdamped systems / I. G. Marchenko, I. I. Marchenko, A. V. Zhiglo // *European Physical Journal B.* – 2014. – Vol. 87. – P. 10–17.
24. Marchenko I. G. Anomalous temperature dependence of diffusion in crystals in time-periodic external fields / I. G. Marchenko, I. I. Marchenko // *JETP Letters.* – 2012. – Vol. 95 (3). – P. 137–142.
25. Speer D. Anisotropic diffusion in square lattice potentials: Giant enhancement and control / D. Speer, R. Eichhorn, P. Reimann // *Europhys. Lett.* – 2012. – Vol. 97. – P. 60004–60010.
26. Marchenko I. G. Abnormal surface diffusion of particles under the action of an external time-periodic force / I. G. Marchenko, I. I. Marchenko // *Journal of Physics: Conference Series.* – 2014. – Vol. 514. – P. 012045–012050.
27. Кузнецов Д. Ф. Стохастические дифференциальные уравнения: теория и практика численного решения / Д. Ф. Кузнецов. – СПб: Санкт-Петербург, Из-во политех. ун-та. – 2007. – 800 с.
28. Lindner B. Critical Asymmetry for Giant Diffusion of Active Brownian Particles / B. Lindner, E. M. Nicola // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – Vol. 101. – P. 190603.
29. Siegle P. Origin of Hyperdiffusion in Generalized Brownian Motion / P. Siegle, I. Goychuk, P. Hänggi // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol. 105. – P. 100602–100606.
30. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale. *Rev. Mod. Phys.*, 2009, vol. 81, pp. 337–442.
31. Risken H. *The Fokker–Planck Equation and Methods of Solution and Applications.* London, Springer Publ., 1989. 413 p.
32. Sang-Hyuk L., Grier D. G. Giant Colloidal Diffusivity on Corrugated Optical Vortices. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, vol. 96, pp. 190601.
33. Tierno P., Reimann P., Johansen T. H., Sagués F. Giant Transversal Particle Diffusion in a Longitudinal Magnetic Ratchet. *Phys. Rev. Lett.* 2010, vol. 105, pp. 230602.
34. Eshuis P., Van der Weele K., Lohse D., Van der Meer D. j Experimental Realization of a Rotational Ratchet in a Granular Gas. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, vol. 104, pp. 248001–248005.
35. Sajeesh P., Sen A. K. Particle separation and sorting in microfluidic devices: a review. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2014, vol. 17, no. 1, pp. 1–52.
36. Risken H., Vollmer H. D. Low friction nonlinear mobility for the diffusive motion in periodic potentials. *Phys. Lett.*, 1979, vol. 69A, no. 6, pp. 387–389.
37. Risken H., Vollmer H. D. Brownian Motion in Periodic Potentials; Nonlinear Response to an External Force. *Z. Physik.*, 1979, vol. B 33, pp. 297–305.
38. Risken H., Vollmer H. D. Bistability Effects of the Brownian Motion in Periodic Potentials. *Z. Physik.*, 1980, vol. B 37, pp. 343–349.
39. 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. B 34, pp. 313–322.
40. Risken H., Vollmer H. D. Nonlinear Response to an External Force. *Z. Physik.*, 1979, vol. B 35, pp. 177–184.
41. Jung P., Risken H., Eigenvalues for the Extremely Underdamped Brownian Motion in an Inclined Periodic Potential. *Z. Physik.*, 1984, vol. B 54, pp. 357–370.
42. Costantini G., Marchesoni F. Threshold diffusion in a tilted washboard potential. *Europhys. Lett.*, 1999, vol. 48, pp. 491–497.
43. Borromeo M., Costantini G., Marchesoni F. Critical Hysteresis in a Tilted Washboard Potential. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, vol. 82, pp. 2820–2823.
44. Lindenberg K., Sancho J. M., Lacasta A. M., Sokolov I. M. Dispersionless Transport in a Washboard Potential. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, vol. 98, pp. 020602-020606.
45. 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, pp. 250601–250605.
46. 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, pp. 021123–021131.
47. Lindenberg K., Lacasta A. M., Sancho J. M., Romero A. H. Transport and diffusion on crystalline surfaces under external forces. *New Journal of Physics*, 2005, vol. 7, pp. 29–48.
48. Reimann P., Van den Broeck C., Linke H., Hänggi P., Rubi J. M., Pérez-Madrid A. Giant acceleration of free diffusion by use of tilted periodic potentials. *Phys. Rev. Lett.*, 2001, vol. 87, pp. 010602–010606.
49. 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, pp. 031104–031120.
50. Marchenko I. G., Marchenko I. I. Diffusion in the systems with low dissipation: Exponential growth with temperature drop. *Europhys. Lett.*, 2012, vol. 100. – P. 5005.
51. Marchenko I. G., Marchenko I. I., Zhiglo A. V. Particle transport in space-periodic potentials in underdamped systems. *European Physical Journal B*, 2014, vol. 87, pp. 10–17.
52. Marchenko I. G., Marchenko I. I. Anomalous temperature dependence of diffusion in crystals in time-periodic external fields. *JETP Letters*, 2012, vol. 95, no. 3, pp. 137–142.
53. Speer D., Eichhorn R., Reimann P. Anisotropic diffusion in square lattice potentials: Giant enhancement and control. *Europhys. Lett.*, 2012, vol. 97, pp. 60004–60010.
54. Marchenko I. G., Marchenko I. I. Abnormal surface diffusion of particles under the action of an external time-periodic force. *Journal of Physics: Conference Series*, 2014, vol. 514, pp. 012045–012050.
55. Kuznetsov D. F. *Stokhasticheskiye differentsyalnye uravneniya: teoriya y praktika chyslennoho resheniya* [Stochastic differential

## References (transliterated)

1. Costantini G., Marchesoni F. Threshold diffusion in a tilted washboard potential. *Europhys. Lett.*, 1999, no. 48, pp. 491.



- equations: theory and practice of numerical solution]. Sankt-Petersburg, Polytech. Univer. Publ., 2007. 800 p.
28. Lindner B., Nicola E. M. Critical Asymmetry for Giant Diffusion of Active Brownian Particles. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, vol. 101, pp. 190603.
29. Siegle P., Goychuk I., Hanggi P. Origin of Hyperdiffusion in Generalized Brownian Motion. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, vol. 105, pp. 100602–100606.

Поступила (received) 09.12.2016

*Бібліографічні описи / Библиографические описания / Bibliographic descriptions*

**Температурно-аномальна дифузія у недодемпфованих періодичних системах / І. І. Марченко, А. В. Жигло, І. Г. Марченко** // Вісник НТУ «ХПІ». Серія: Системний аналіз, управління та інформаційні технології. – Х. : НТУ «ХПІ», 2016. – № 45 (1217). – С. 9–17. – Бібліогр.: 29 назв. – ISSN 2079–0023.

**Температурно-аномальная диффузия в недодемпфированных периодических системах / И. И. Марченко, А. В. Жигло, И. Г. Марченко** // Вісник НТУ «ХПІ». Серія: Системний аналіз, управління та інформаційні технології. – Харків : НТУ «ХПІ», 2016. – № 45 (1217). – С. 9–17. – Библиогр.: 29 назв. – ISSN 2079–0023.

**Temperature-abnormal diffusion in underdamped systems / I. I. Marchenko, A. V. Zhiglo, I. G. Marchenko** // Bulletin of NTU "KhPI". Series: System analysis, control and information technology. – Kharkov : NTU "KhPI", 2016. – No. 45 (1217). – P. 9–17. – Bibliogr.: 29. – ISSN 2079–0023.

*Відомості про авторів / Сведения об авторах / About the Authors*

**Марченко Ігор Іванович** – кандидат технічних наук, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», доцент кафедри Системного аналізу і управління, тел.: +380 (57) 707–60–38; e-mail: igor.marchenko@hotmail.com.

**Марченко Игорь Иванович** – кандидат технических наук, Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт», доцент кафедры Системного анализа и управления, тел.: +380 (57) 707–60–38; e-mail: igor.marchenko@hotmail.com.

**Marchenko Igor Ivanovych** – Candidate of Engineering Science (Ph. D.), National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", Associate Professor at the System Analysis and Control Department; tel.: +380 (57) 707–60–38; e-mail: igor.marchenko@hotmail.com.

**Жигло Андрій Валентинович** – кандидат фізико-математичних наук, ННЦ «Харківський фізико-технічний інститут», науковий співробітник, тел.: +380(57) 335 65 36; e-mail: azhiglo@gmail.com.

**Жигло Андрей Валентинович** – кандидат физико-математических наук, ННЦ «Харьковский физико-технический институт», научный сотрудник, тел.: +380(57) 335 65 36; e-mail: azhiglo@gmail.com.

**Zhiglo Andrii Valentynovych** – Candidate of Physical and Mathematical Sciences (Ph. D.), NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology", researcher, tel.: +380(57) 335 65 36; e-mail: azhiglo@gmail.com.

**Марченко Іван Григорович** – доктор фізико-математичних наук, професор, ННЦ «Харківський фізико-технічний інститут», провідний науковий співробітник, тел.: +380(57) 335–64–71; e-mail: march@kipt.kharkov.ua.

**Марченко Иван Григорьевич** – доктор физико-математических наук, профессор, ННЦ «Харьковский физико-технический институт», ведущий научный сотрудник, тел.: +380(57) 335–64–71; e-mail: march@kipt.kharkov.ua.

**Marchenko Ivan Grigorovich** – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, NSC "Kharkov Institute of Physics and Technology", leading scientist; tel.: +380(57) 335–64–71; e-mail: march@kipt.kharkov.ua.