

УДК 538.913

БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ В УЕДИНЕННОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ  
В ОГРАНИЧЕННОЙ ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЕ

© 2010 г. С. А. Гуз, М. Г. Никулин, М. В. Свиридов

*Московский физико-технический институт**141700 Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер. 9**E-mail: svirmv@online.ru*

Поступила в редакцию 26.08.08 г.

Рассматривается движение тяжелой броуновской частицы в низкоразмерной ограниченной твердотельной структуре под действием флуктуаций фононных возбуждений. Вследствие конечности системы спектр флуктуаций имеет нулевую спектральную плотность на нулевой частоте. Действие такого шума, условно названного “зеленым”, исследуется аналитически в рамках метода усреднения и численно на основе предиктор–корректорных алгоритмов. Введен эффективный потенциал и показано, что его вид предопределяет динамику частицы. На примере гауссовской потенциальной ямы (ловушки) найдено, что зеленый шум приводит к резким фазовым переходам в системе при незначительном изменении параметров (эффект типа катастрофы). Результаты сравниваются со случаем белого шума в неограниченной структуре. Из численных расчетов видно, что ограниченность структуры, изменяющая спектр шума, способствует существенному увеличению времени жизни частицы в ловушке.

*Ключевые слова:* броуновское движение, потенциальная яма, низкоразмерная система, фононы.

PACS: 43.35.Gk, 05.40.-a

## ВВЕДЕНИЕ

Модель броуновского движения частицы в потенциальной яме широко используется еще со времени выхода известной статьи Крамерса [1], в которой исследовалась кинетика химической реакции. Вначале соответствующие задачи решали, как и Крамерс, для белого шума [2–4], а затем включили в рассмотрение “окрашенный” шум [5]. В последнем случае в теоретических работах в качестве источника флуктуаций наиболее часто рассматривается случайный процесс Орнштейна–Уленбека [5] или дихотомический шум (случайный телеграфный сигнал) [5–7]. Оба процесса имеют экспоненциальную корреляционную функцию и, соответственно, лоренцевскую форму спектральной плотности. Как известно, риманов интеграл от этих и других подобных процессов описывает классическую диффузию, если, конечно, их спектральная плотность достаточно быстро уменьшается с ростом частоты. Соответственно, в пределе больших времен дисперсия координаты броуновской частицы начинает возрастать пропорционально времени согласно теореме Винера–Хинчина [6], коэффициент пропорциональности (коэффициент диффузии) с точностью до множителя  $2\pi$  равен значению спектральной плотности шума на нулевой частоте. Отсюда следует, что если взять процесс, для которого это значение равно нулю, то коэффициент диффузии об-

ратится в нуль. Это усложняет решение задачи и оно не всегда может быть получено в рамках теории случайных диффузионных процессов. В частности, редко удается найти решение уравнения Фоккера–Планка в квадратурах [8, 9].

Может быть поэтому в литературе подобным источникам шума уделяется довольно мало внимания. Но это не означает, что эти источники являются чем-то уникальным. Достаточно, например, взять равновесное излучение черного тела (его корреляционная функция описана в [6]) или прошедшее через ограниченную апертуру широкополосное излучение [10], процесс Мельникова [11], а также процессы, рассмотренные в [12]. В связи с этим в [12, 13] представилось удобным выделить подобные шумы в отдельный класс — класс “зеленых” шумов и определить его как множество шумов, имеющих нулевую спектральную плотность на нулевой частоте<sup>1</sup>. В настоящей работе рассматривается еще один важный пример системы с зеленым шумом: движение броуновской частицы вдоль одномерной твердотельной структуры конечной длины  $L$  в окрестности уеди-

<sup>1</sup> Вообще говоря, зеленый шум является также окрашенным шумом. Однако в литературе под окрашенным шумом принято понимать шум, спектральная плотность которого убывает с ростом частоты. Далее мы будем придерживаться традиционной терминологии.



ненной потенциальной ямы (ловушки, дефекта и т.п.).

Сразу отметим, что именно конечность такой низкоразмерной системы приводит к появлению зеленого шума в спектре фононных возбуждений. Как и в случае с ограниченной апертурой в оптике и радиофизике, здесь также возникает ограничение на частоты осцилляторов звукового поля, которые являются собственными функциями данной распределенной системы. Рассмотрим длинноволновые продольные звуковые волны, распространяющиеся со скоростью  $s$ , и воспользуемся периодическими граничными условиями Борна–Кармана [14]. Тогда находим, что минимальная частота  $\omega'_0 = 2\pi s/L$  такой волны соответствует случаю, когда на длине  $L$  укладывается одна длина волны. В общем случае фононный спектр является дискретным, и только при больших значениях  $L$  возможен приближенный переход к непрерывному спектру посредством введения бесконечно малого приращения числа состояний на единицу длины. Последнее является привычным подходом в общей теории твердого макротела (см. теорию Дебая). Однако в реальной ситуации спектр дискретен и в равновесном состоянии для каждого квантового осциллятора поля на частоте  $\omega'_k = k\omega'_0$ , где  $k$  – положительное целое число, среднее число фононов (возбуждений)  $\langle n \rangle_k$  определяется статистикой Бозе–Эйнштейна:

$$\langle n \rangle_k = \begin{cases} 0 & \text{при } k = 0, \\ \frac{1}{\exp(\hbar\omega'_k/k_B T) - 1} & \text{при } k \geq 1. \end{cases}$$

Здесь  $\hbar$  – постоянная Планка,  $k_B$  – постоянная Больцмана и  $T$  – температура. Условие

$$\langle n \rangle_0 = 0 \tag{1}$$

означает, что случай  $k = 0$  соответствует постоянной составляющей, которая описывает движение центра масс системы как целого, и его следует исключить из распределения (см. [15]). Таким образом, в общем случае спектр фононных возбуждений оказывается обрезанным в области низких частот, и шум, определяемый этими возбуждениями, является *зеленым* по определению, данному в [12]. Ниже (см. Дополнение) будет дана оценка, при каких условиях следует учитывать соотношение (1) отходя от традиционной теории непрерывного спектра.

Исследование стохастических систем с дискретным спектром представляется сложной задачей, и далее для аналитических и численных расчетов используется аппроксимация зеленого шума, имеющая вид производной по времени от процесса Орнштейна–Уленбека. Сила, действующая на броуновскую частицу, примерно пропор-

циональна числу фононов на единицу длины, что позволяет применить подобную аппроксимацию и для описания внешнего шума, действующего на броуновскую частицу. Ее адекватность при решении конкретных задач оценивается в Дополнении.

### УРАВНЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ

Запишем исходное стохастическое уравнение движения броуновской частицы в виде

$$m \frac{d^2 x'}{dt'^2} + \kappa \frac{dx'}{dt'} = -\frac{\partial u(x')}{\partial x'} + \eta(t'). \tag{2}$$

Здесь  $t'$  – реальное время,  $m$  – эффективная масса частицы,  $x'(t')$  – ее координата,  $\kappa$  – коэффициент вязкого трения,  $u(x')$  – функция, описывающая потенциальную яму,  $\eta(t')$  – внешний случайный зеленый шум. Преобразуем это уравнение к безразмерному виду. Введем характерные ширину  $l$  и глубину  $A$  (размерность  $\dim A = \text{кг м}^2/\text{с}^2$ ) потенциальной ямы и запишем ее в виде  $u(lx) = AU(x)$ , где  $U(x)$  является безразмерным потенциалом с единичной глубиной. Соответственно,  $x = x'/l$  – безразмерная координата частицы. Удобно также ввести характерный интервал времени  $t_s$ , значение которого зависит от конкретной задачи [4]. В безразмерных переменных  $x = x'/l$  и  $t = t'/t_s$  из уравнения (2) получаем:

$$\vartheta \ddot{x} + \dot{x} = \varepsilon f(x) + \zeta(t), \tag{3}$$

где точкой обозначено дифференцирование по безразмерному времени  $t$ , сила  $f(x)$  определяется потенциальной функцией  $U(x)$  по обычному правилу

$$f(x) = -\frac{\partial}{\partial x} U(x), \tag{4}$$

а внешний шум приобретает вид

$$\zeta(t) = \frac{l}{\kappa t_s} \eta(t_s t). \tag{5}$$

Постоянные в уравнении (3) равны

$$\vartheta = \frac{m}{\kappa t_s}, \quad \varepsilon = \frac{A t_s}{\kappa l^2}. \tag{6}$$

Как уже отмечалось, далее предполагается, что  $\zeta(t) = d\xi(t)/dt$ , где  $\xi(t)$  – процесс Орнштейна–Уленбека. Соответственно, шум  $\zeta(t)$  является зеленым. В целях дальнейшего использования стохастическое уравнение для этого процесса в безразмерных переменных удобно записать в виде [4]

$$\dot{\xi} = -\gamma \xi + a n(t), \tag{7}$$

где  $\gamma = 1/\tau_0$ ,  $\tau_0$  – время корреляции процесса  $\xi(t)$ ,  $a = \sqrt{D}$ ,  $D$  – коэффициент диффузии (интенсивность [5]) белого шума,  $n(t)$  – белый шум с еди-



ничным коэффициентом диффузии и функцией корреляции  $\langle n(t)n(t+\tau) \rangle = \delta(\tau)$ . Из уравнения (7) нетрудно получить, что спектральная плотность процесса  $\xi(t)$  и его дисперсия даются выражениями

$$S_{\xi}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{D}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad \sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} S_{\xi}(\omega) d\omega = \frac{D}{2\gamma}. \quad (8)$$

где  $\omega = \omega' t_s$  — безразмерная круговая частота.

### МЕТОД УСРЕДНЕНИЯ

В соответствии с общей теоремой о сведении системы уравнений Ланжевена первого порядка с гауссовскими белыми шумами к уравнению Фоккера—Планка [16], последнее можно записать и для системы (3), (7). Однако в результате появляется необходимость решения параболического уравнения в частных производных для трех переменных  $x$ ,  $\dot{x}$  и  $\xi$ . Ввиду сложности аналитического подхода для такой задачи далее используется вариант метода усреднения, развитый для случая зеленого шума в [17, 18]. Вообще говоря, применение этой теории требует малости потенциальной силы (4). Для получения нулевого приближения ее следует приравнять к нулю или, что то же самое, положить  $\varepsilon = 0$ . Это означает, что  $\varepsilon$  является малым параметром теории (сравни с [19]).

Но более важным представляется требование, чтобы общую динамику системы можно было бы разделить на “быструю” и “медленную” составляющие. Это очевидное условие физического усреднения в реальных системах [6]. Например, в детерминированных колебательных системах в качестве быстрой составляющей часто используется обычное гармоническое колебание, а медленной — медленное изменение амплитуды и фазы этого колебания [6]. Чтобы учесть эти условия, в данной работе предполагается, что шум  $\zeta(t)$  имеет достаточно малое время корреляции по сравнению с характерными временами системы в отсутствие шума. Значения этих времен в сильной мере зависят от того, насколько мала потенциальная сила.

С учетом этих замечаний запишем стохастическое уравнение для нулевого приближения  $x^{(0)}(t)$  теории в пределе  $\varepsilon \rightarrow 0$ :

$$\vartheta \ddot{x}^{(0)} + \dot{x}^{(0)} = \zeta(t) = \dot{\xi}(t). \quad (9)$$

Отсюда и из соотношений (8) следует, что после завершения переходных процессов, связанных с

начальными условиями, спектральная плотность случайного процесса  $x^{(0)}(t)$  будет равной

$$S^{(0)}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{a^2}{(\vartheta^2 \omega^2 + 1)(\omega^2 + \gamma^2)}$$

т.е. этот процесс является стационарным окрашенным шумом с дисперсией

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \frac{a^2}{2\pi\vartheta^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(\omega^2 + \beta^2)(\omega^2 + \gamma^2)} = \\ &= \frac{a^2}{2\pi\vartheta^2} \frac{1}{\gamma\beta(\beta + \gamma)} \Big|_{\beta = 1/\vartheta} = \frac{a^2}{2\gamma(1 + \vartheta\gamma)}. \end{aligned}$$

Именно эта стационарность сближает развитую здесь теорию с классическим методом Боголюбова—Крылова, где, как уже отмечалось, нулевое приближение описывается элементарным гармоническим колебанием [6]. Соответственно, интенсивность источника белого шума в уравнении (7) определяется выражением

$$D = a^2 = 2\gamma(1 + \vartheta\gamma)\sigma^2. \quad (10)$$

Выполним замену переменных:  $x = x^{(0)} + y$  [17, 18]. Из уравнения (3) с учетом (4) получаем

$$\vartheta \ddot{y} + \dot{y} = -\varepsilon \frac{\partial}{\partial y} U(x^{(0)} + y). \quad (11)$$

Именно при рассмотрении этого уравнения возникает уникальная ситуация, которая, в частности, рассмотрена в работе [19]. Будем считать, что функция  $U(x)$  является достаточно гладкой, чтобы процесс  $U(x^{(0)} + C)$ , где  $C = \text{const}$ , можно было рассматривать как эргодический по математическому ожиданию в среднем квадратичном. Тогда, заменяя усреднение правой части соотношения (11) по времени при фиксированном значении  $y = \bar{y} = \text{const}$  на статистическое усреднение, получим следующее детерминированное уравнение для “медленной” переменной  $\bar{y}(t)$ :

$$\vartheta \ddot{\bar{y}} + \dot{\bar{y}} = -\varepsilon \frac{\partial U_{\text{eff}}(\bar{y})}{\partial \bar{y}} \quad (12)$$

(иногда это уравнение называется уравнением “сравнения”). Функцию

$$U_{\text{eff}}(\bar{y}) = \langle U(\bar{y} + x^{(0)}) \rangle \quad (13)$$

будем называть *эффективным потенциалом*. Как следует из дальнейшего, этот потенциал играет решающую роль в развитии динамики рассматриваемой стохастической системы.

Полученные соотношения и принятые допущения позволяют представить искомое решение исходного уравнения (3) в виде суммы трех слагаемых:

$$x(t) = x^{(0)}(t) + \bar{y}(t) + \varepsilon v(t),$$



первое из которых описывает “быстрое” движение, второе – “медленное” детерминированное движение, а третье является малой по сравнению с единицей случайной поправочной функцией  $u(t) = \varepsilon v(t)$ , которая, вообще говоря, содержит как быструю, так и медленную составляющие. Именно условие, что эта функция в каком-то смысле мала, позволяет использовать рассмотренный вариант метода усреднения. Задача теории сводится к поиску каких-либо асимптотических представлений функции  $v(t)$  [17, 18].

Однако в данной работе для исследования поправочной функции используется численное решение исходного уравнения (3). Это делается для того, чтобы подчеркнуть роль эффективного потенциала в развитии динамики системы и оценить применимость метода усреднения.

Возьмем конкретный пример потенциальной ямы гауссовой формы [20]

$$U(x) = -Fx - \exp(-x^2/2), \quad (14)$$

где  $F$  – некоторая постоянная внешняя сила, действующая на броуновскую частицу. Тогда, учитывая, что процесс Орнштейна–Уленбека является нормальным шумом, из соотношения (13) находим, что

$$U_{eff}(\bar{y}) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ F(\bar{y} + x) + \exp\left[-\frac{(\bar{y} + x)^2}{2}\right] \right\} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx = \quad (15)$$

$$= -F\bar{y} - \frac{1}{\sqrt{1+\sigma^2}} \exp\left[-\frac{\bar{y}^2}{2(1+\sigma^2)}\right].$$

Соответственно, уравнение (12) принимает вид

$$\vartheta \ddot{\bar{y}} + \dot{\bar{y}} = \varepsilon \left\{ F - \frac{\bar{y}}{\sqrt{(1+\sigma^2)^3}} \exp\left[-\frac{\bar{y}^2}{2(1+\sigma^2)}\right] \right\}. \quad (16)$$

Что касается оценки параметра, учитывающего малость времени корреляции внешнего шума по сравнению с временами переходных процессов, то ее можно выполнить, например, посредством линеаризации уравнения (16) в какой-либо точке  $\bar{y} = \bar{y}_0$ .

Очевидно, что в рассматриваемой системе существуют два состояния: частица остается в яме (состояние захвата, “locking state”) или частица ускользает из ямы (состояние направленного движения, “running state” [4]). В последнем случае происходит необратимый фазовый переход, поскольку возвращающая сила

$$F_{in}(\bar{y}) = -\varepsilon \frac{\bar{y}}{\sqrt{(1+\sigma^2)^3}} \exp\left[-\frac{\bar{y}^2}{2(1+\sigma^2)}\right]$$

в уравнении (16) начинает быстро падать с ростом отклонения величины  $\bar{y}$  от барьера эффективного потенциала (15). В состоянии направленного движения метод усреднения неприменим, поскольку поправочная функция  $u(t)$  не является малой. Если же частица находится в состоянии захвата, то можно положить  $\bar{y} = \bar{y}_{min}$ , где  $\bar{y}_{min}$  – минимум эффективного потенциала (15). Эти качественные рассуждения далее проверяются посредством численного моделирования при заданных параметрах системы.

Важно отметить, что использованный здесь вариант метода усреднения снимает ограничения на интенсивность внешнего зеленого шума. Если же шум белый или окрашенный, то, как уже отмечалось во введении, нулевое приближение будет описывать диффузионный процесс, который уже содержит “медленную” составляющую, что резко усложняет решение задачи при больших интенсивностях этих шумов.

### АЛГОРИТМЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В данной работе численное моделирование выполняется на основе предиктор–корректорных алгоритмов, описанных в [21]. Далее используются алгоритмы порядка  $O(h^{3/2})$ , где  $h$  – шаг интегрирования – число, которое предполагается равным  $N$ .

Введем переменные  $x_1 = x$ ,  $x_2 = \dot{x} = \dot{x}_1$ ,  $x_3 = \xi$ . Из соотношений (3), (7) и (14) следует, что

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2, \\ \dot{x}_2 &= \frac{1}{\vartheta} \left\{ -x_2 + \varepsilon \left[ F - x_1 \exp\left(-\frac{x_1^2}{2}\right) \right] - \gamma x_3 \right\} + \frac{a}{\vartheta} n(t), \\ \dot{x}_3 &= -\gamma x_3 + an(t). \end{aligned}$$

Тогда искомые алгоритмы приобретают вид

$$\begin{aligned} \Delta x_1(i) &= x_2 h + \frac{a}{\vartheta} Z_2, \\ \Delta x_2(i) &= \frac{a}{\vartheta} Z_1 + \frac{1}{\vartheta} \left\{ -x_2 + \varepsilon \left[ F - x_1 \exp\left(-\frac{x_1^2}{2}\right) \right] - \gamma x_3 \right\} h - \frac{a}{\vartheta} \left( \frac{1}{\vartheta} + \gamma \right) Z_2, \\ \Delta x_3(i) &= a Z_1 - \gamma x_3 h - \gamma a Z_2, \end{aligned}$$

где  $i$  – номер шага интегрирования,  $\Delta x(i)$  – приращение величины  $x$  на шаге интегрирования,  $Z_1(i)$  и  $Z_2(i)$  – случайные числа, образующие наборы независимых гауссовских чисел с нулевым



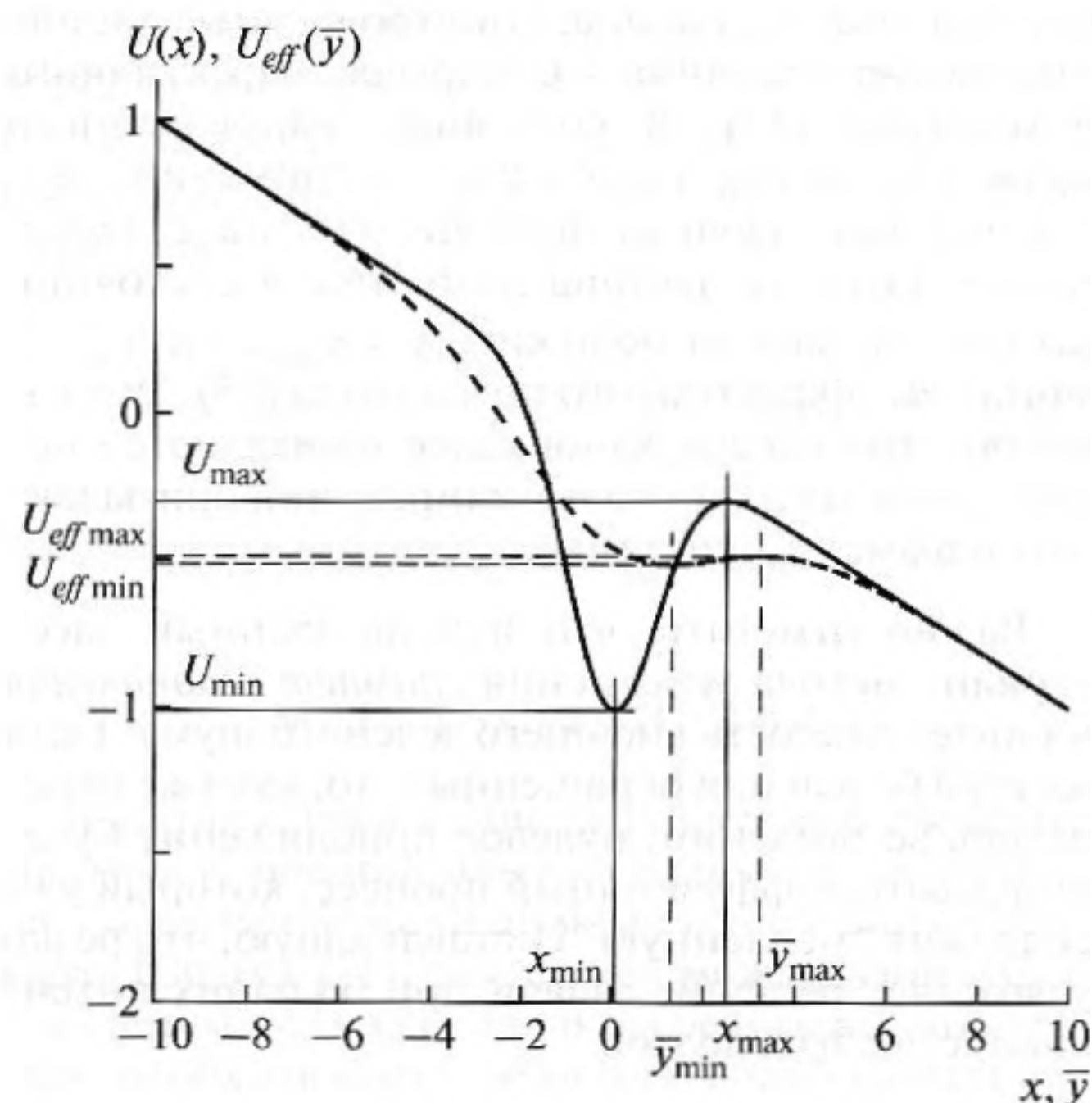


Рис. 1. Потенциальные функции. Здесь  $x_{\max} \approx 2.54$ ,  $x_{\min} \approx 0.10$ ,  $\bar{y}_{\max} \approx 3.28$  и  $\bar{y}_{\min} \approx 1.34$ .

средним и единичной дисперсией, и  $Z_2(i)$  — числа, определяемые формулой

$$Z_2(i) = h \left[ \frac{Z_1(i)}{2} + \frac{Y_1(i)}{2\sqrt{3}} \right].$$

Важно учесть, что случайный процесс нулевого приближения  $x^{(0)}(t)$ , удовлетворяющий уравнению (9), следует рассчитывать синхронно с пошаговым численным решением основного уравнения движения. Для этого вводим новые переменные  $q_1 = x^{(0)}$ ,  $q_2 = \dot{x}^{(0)}$ ,  $q_3 = \xi$ . Из уравнений (7) и (9) получаем

$$\begin{aligned} \dot{q}_1 &= q_2, \\ \dot{q}_2 &= \frac{1}{\vartheta}(-q_2 - q_3) + \frac{a}{\vartheta}n(t), \\ \dot{q}_3 &= -\gamma q_3 + an(t) \end{aligned}$$

и алгоритмы приобретают вид

$$\begin{aligned} \Delta q_1(i) &= q_2 h + \frac{a}{\vartheta} Z_2, \\ \Delta q_2(i) &= \frac{a}{\vartheta} Z_1 - \frac{1}{\vartheta}(q_2 + \gamma q_3)h - \frac{a}{\vartheta} \left( \frac{1}{\vartheta} + \gamma \right) Z_2, \\ \Delta q_3(i) &= a Z_1 - \gamma q_3 h - \gamma a Z_2. \end{aligned}$$

Для сравнения добавим аналогичные алгоритмы для случая белого шума, когда  $\zeta(t)$  в уравнении (3) заменяется просто на случайный процесс  $a_w n(t)$ , где  $a_w = \sqrt{D_w}$  и  $D_w$  — коэффициент диффу-

зии источника белого шума. Положив  $x_1 = x$ ,  $x_2 = \dot{x} = \dot{x}_1$ , получаем

$$\begin{aligned} \Delta x_1(i) &= x_2 h + \frac{a_w}{\vartheta} Z_2, \\ \Delta x_2(i) &= \frac{a}{\vartheta} Z_1 + \\ &+ \frac{1}{\vartheta} \left\{ -x_2 + \varepsilon \left[ F - x_1 \exp\left(-\frac{x_1^2}{2}\right) \right] \right\} h - \frac{a_w}{\vartheta^2} Z_2. \end{aligned}$$

Заметим, что случай белого шума не может соответствовать какой-либо ограниченной структуре.

## РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Перейдем теперь к обзору некоторых результатов численных вычислений. На рис. 1 показаны используемые в расчетах модельный потенциал (14) (непрерывная кривая) и эффективный потенциал (15) (пунктирная кривая). Предполагается, что  $F = 0.1$  и  $\sigma = 2$ . Результаты численного моделирования даются для следующих значений параметров:  $\gamma = 10$ ,  $h = 10^{-4}$ ,  $N = 10^9$ .

А. Положим  $\varepsilon = 0.3$ . На рис. 2 показано несколько траекторий движения броуновской частицы для этого случая. Линия 1 соответствует  $\vartheta = 0.504$ . Из-за плохого разрешения она выглядит как прямая, параллельная оси абсцисс. Все расчетное время частица локализована в яме. Однако при малом изменении параметра от этого значения  $\vartheta$  до  $\vartheta = 0.505$  происходит резкое изменение в динамике частицы: до момента  $t_2$  частица остается локализованной, а затем под действием силы  $F$  непрерывно удаляется с постоянной скоростью в сторону правой границы структуры (состояние направленного движения). В работе [22] такие резкие изменения топологии решения названы *катастрофами*. Этот эффект связан с переходами между предельными циклами фазовой траектории. Между линиями 2 и 3 малое изменение параметра  $\vartheta$  приводит к малым изменениям траектории. По аналогии с молекулярными спектрами такую область существования траекторий можно назвать "полосой". Полоса кончается на линии 3 ( $\vartheta = 0.739$ ) и опять происходит катастрофа при переходе к  $\vartheta = 0.740$  (линия 4). Далее между линиями 4 и 5 опять существует полоса и катастрофа возникает уже при переходе между  $\vartheta = 0.886$  и  $\vartheta = 0.887$  (линии 5 и 6 соответственно). Подобная ситуация продолжается и при дальнейшем увеличении параметра  $\vartheta$ , причем она усложняется, поскольку полосы могут пересекаться и возвращаться назад. Наконец отметим, что зашумленная кривая 7 соответствует белому шуму с  $a_w = 0.03a$  ( $\vartheta = 0.505$ ), т.е. шуму с очень малой интенсивностью. Однако, как видно из



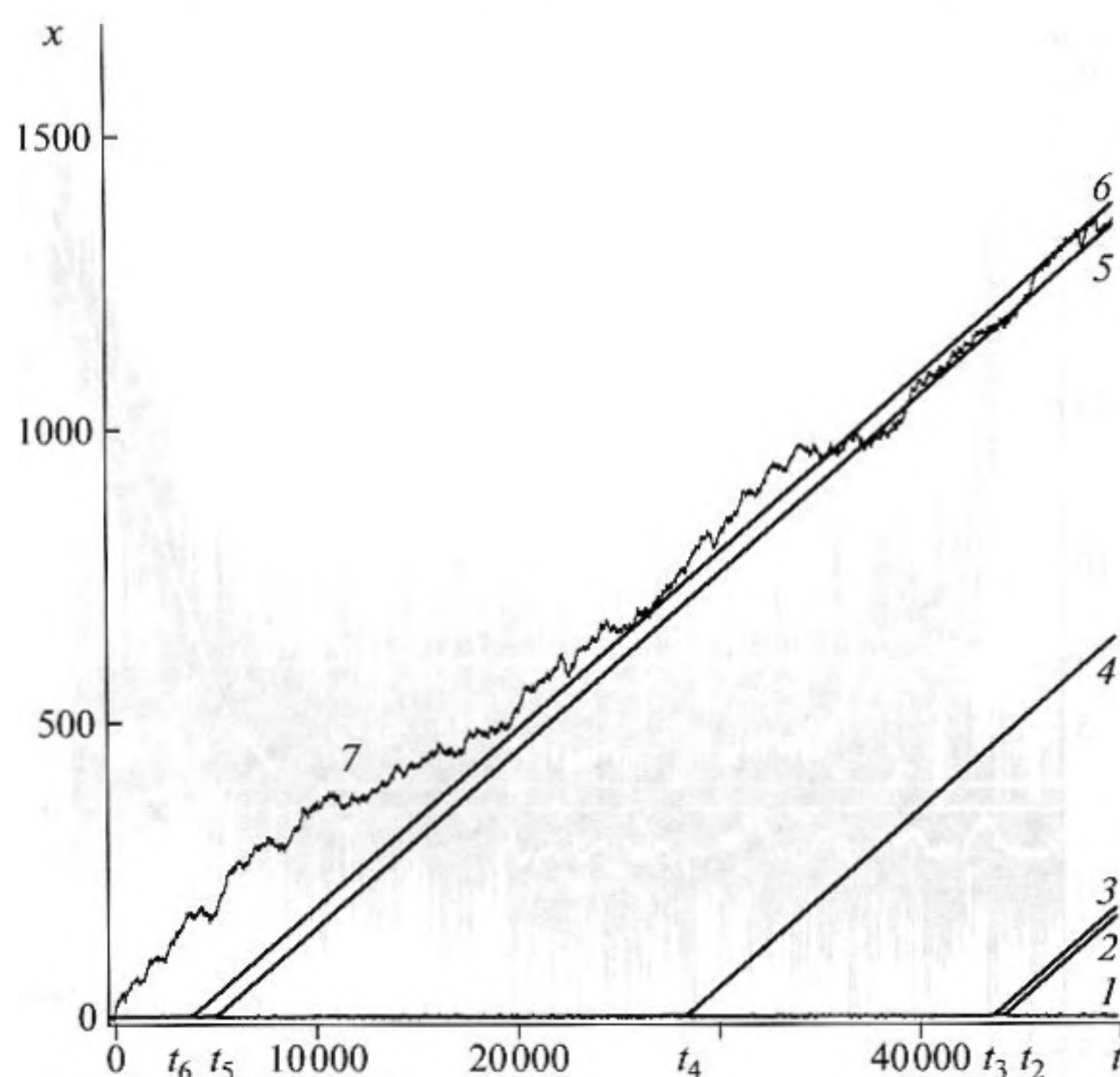


Рис. 2. Траектории процесса  $x(t)$  при  $\epsilon = 0.3$ .

рис. 2, даже при такой интенсивности ни о какой локализации частицы в яме говорить не приходится.

Интересно рассмотреть более детально необратимый процесс выхода частицы из ямы. Эта ситуация показана на рис. 3. Черная зашумленная кривая — траектория частицы  $x(t)$ . На ее фоне построена белая кривая 1, которая представляет собой поправочную функцию  $u(t)$ . Если представить себе, что на интервале  $0 \leq t \leq 4000$  процесс  $u(t)$  представляет собой часть реализации некоторого стационарного процесса, то численный расчет дает для среднеквадратичного отклонения этого процесса величину  $\sigma_u \approx 0.43$ . Можно ли ее считать достаточно малой, чтобы использовать последовательные приближения метода усреднения, развитого в [17, 18] для расчета статистических характеристик локализованного состояния? В каком-то смысле на этот вопрос можно ответить положительно, хотя следует ожидать, что число этих приближений должно быть достаточно большим, поскольку сам метод основан на разложении функции  $U(x^{(0)} + \bar{y} + u)$  в ряд Тейлора по  $u$ .

Как показал расчет, на интервале времени до фазового перехода частица находится вблизи временного среднего  $\langle x \rangle_t \approx 1.43$ , т.е. вблизи минимума  $\bar{y}_{\min}$  эффективного потенциала, а не минимума  $x_{\min}$  его реального значения. Из рис. 3 также хорошо видно, что необратимый уход частицы из по-

тенциальной ямы происходит лишь тогда, когда именно поправочная функция  $u(t)$  пересекает барьер  $\bar{y}_{\max}$  эффективного потенциала. При этом сама траектория частицы может сколько угодно раз пересекать барьер  $x_{\max}$  реального потенциала. Это сильно отличает ситуацию от случая белого шума [5].

Б. В теории возникает вопрос, является ли условие малого значения параметра  $\epsilon$  достаточным или необходимым для адекватного использования метода усреднения? Рассмотрим случай  $\epsilon = 1$ . Результаты численного расчета показаны на рис. 4. Непрерывные линии 1–7 относятся к случаю зеленого шума в ограниченной структуре, прерывистая линия 8 — к случаю белого шума в неограниченной среде. Линии 1–5 в силу низкого разрешения рисунка представляют совокупности траекторий процесса  $x(t)$  с параметром  $\vartheta$  из интервалов: 1 —  $0 \leq \vartheta \leq 0.0181$ , 2 —  $0.0182 \leq \vartheta \leq 0.0413$ , 3 —  $0.0414 \leq \vartheta \leq 0.109$ , 4 —  $0.110 \leq \vartheta \leq 0.140$ , 5 —  $0.141 \leq \vartheta \leq 0.212$ . Линии 6 и 7 относятся к случаям  $\vartheta = 0.273$  и  $\vartheta = 7$  соответственно. По-видимому, низкое разрешение не позволило для этого примера обнаружить существование полос.

Как видно из рис. 4, при  $0 \leq \vartheta \leq 0.0181$  (линия 1) в пределах расчетного времени броуновская частица остается в связанном состоянии. С увеличением параметра  $\vartheta$  (линии 2–7) появляются об-

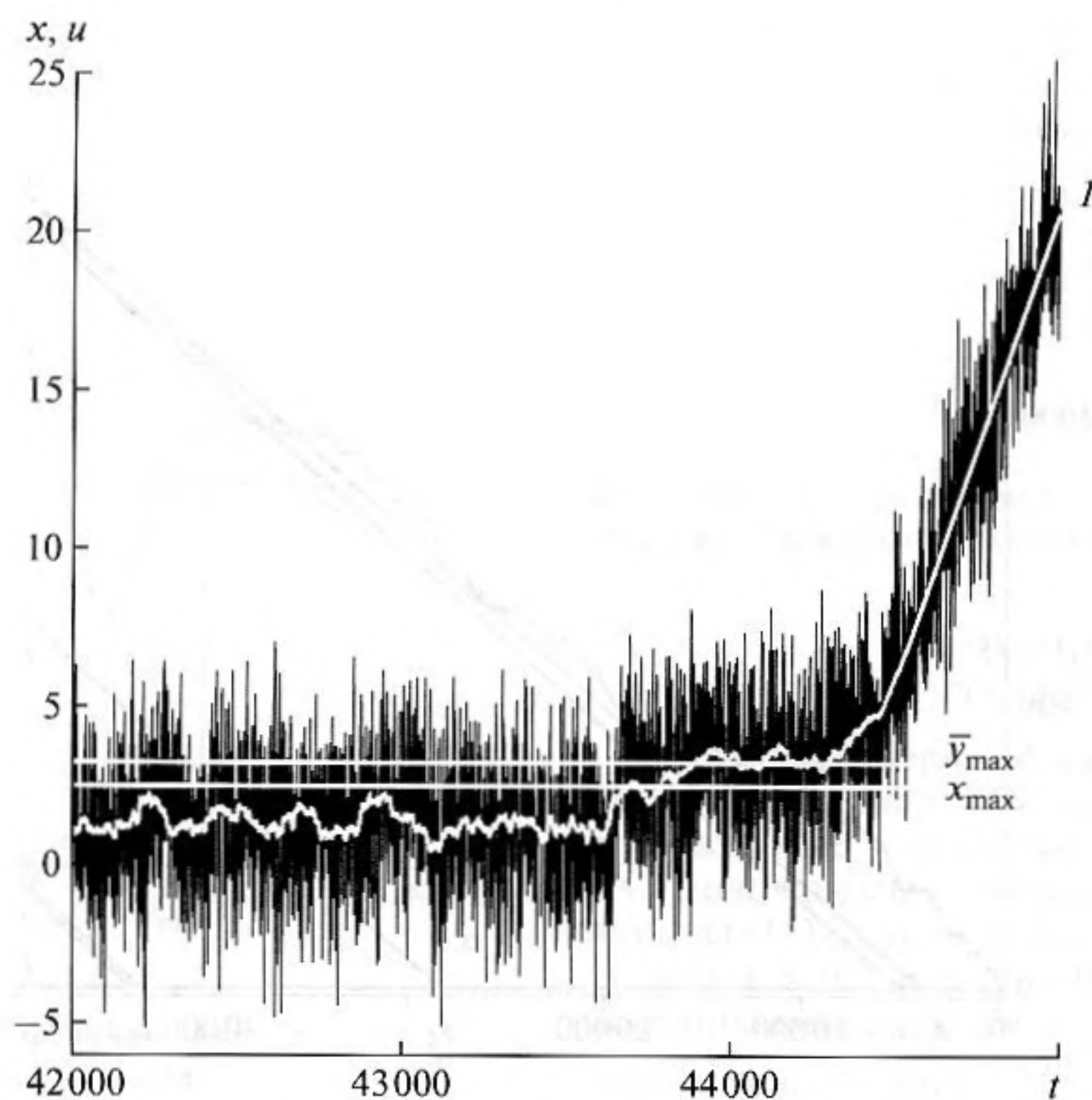


Рис. 3. Развитие катастрофы при зеленом шуме ( $\epsilon = 0.3$ ).

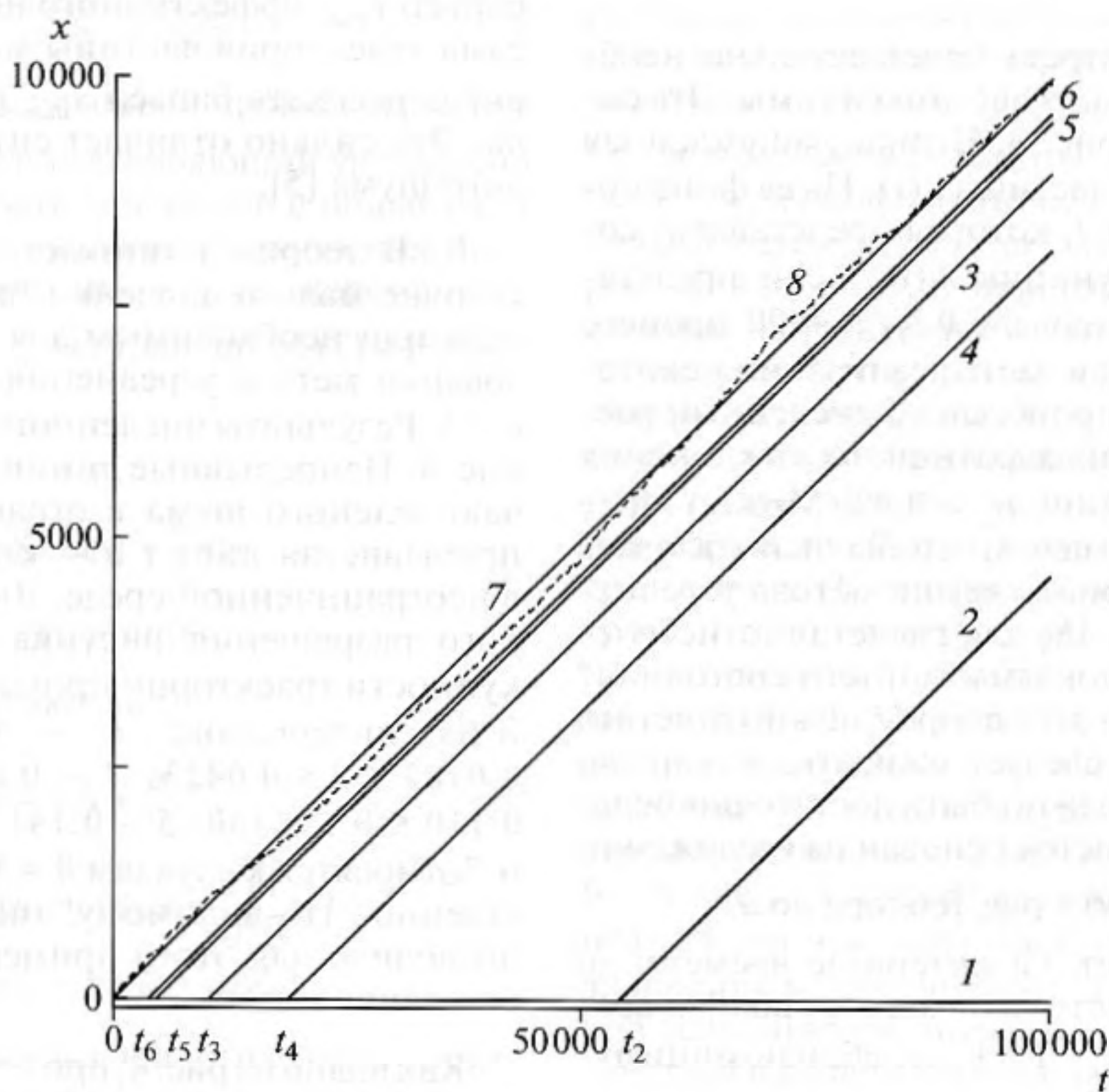


Рис. 4. Траектории процесса  $x(t)$  при  $\epsilon = 1$ .



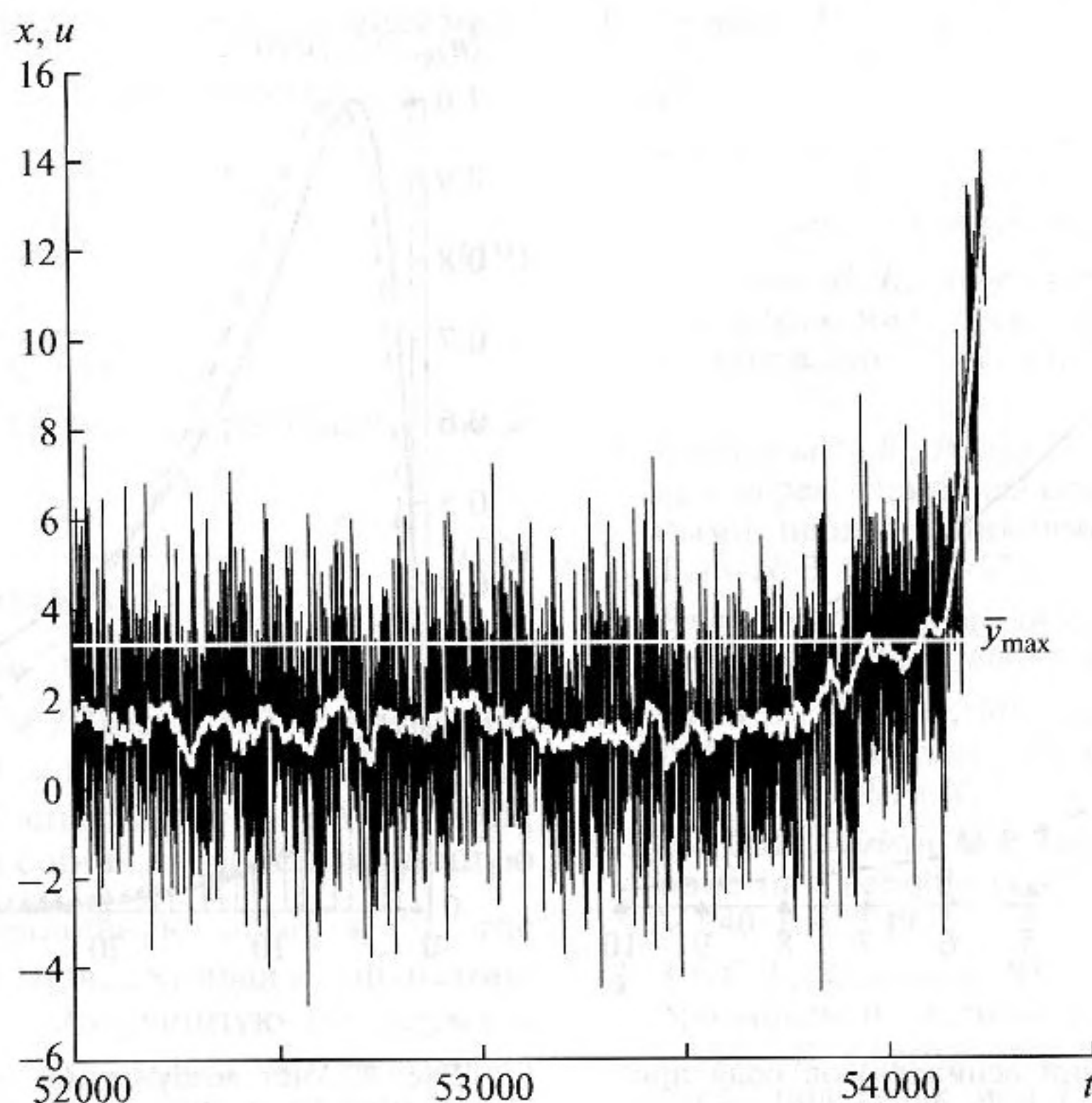


Рис. 5. Развитие катастрофы при зеленом шуме ( $\varepsilon = 1$ ).

ласти значений  $\vartheta$ , при которых малые изменения этого параметра в моменты времени  $t_2, t_3, \dots$  приводят к необратимым переходам системы из состояния захвата в состояние направленного движения (катастрофы). “Времена жизни”  $t_2, t_3, \dots$  частицы в связанном состоянии в основном убывают с ростом параметра  $\vartheta$  (массы частицы), однако наблюдается и обратный случай:  $t_3 \leq t_4$ , когда параметр  $\vartheta$  на линии 3 имеет меньшее значение, чем на линии 4. В области между линиями 6 и 7, где  $0.273 < \vartheta < 7$ , также существуют катастрофы, но они не разрешаются в масштабе рисунка.

Пример движения частицы под влиянием внешнего белого шума в неограниченной среде представлен на рис. 4 прерывистой линией 8 для интенсивности  $D_w = 0.01D$ , которая в 100 раз меньше, чем интенсивность зеленого шума, если брать структуру конечной длины. Очевидно, что полученное состояние частицы является состоянием направленного движения. Все это ясно указывает на резкое повышение стабильности связанного состояния броуновской частицы в ограниченной структуре при внешнем зеленом шуме по сравнению со случаем белого шума в неограниченной среде.

На рис. 5 с высоким разрешением показано развитие катастрофы при изменении значения параметра  $\vartheta$  от 0.0181 до 0.0182. Согласно фор-

муле (10), этим значениям соответствуют интенсивности  $D = 94.48$  и  $D = 94.56$ . Зашумленная линия представляет траекторию процесса  $x(t)$  для  $\vartheta = 0.0182$ . Белая линия — поправочный случайный процесс  $u(t)$ . Хорошо видно, что, как и в предыдущем примере, необратимый фазовый переход из состояния захвата в состояние направленного движения происходит только тогда, когда поправочная функция  $u(t)$  пересекает барьер эффективного потенциала в точке  $\bar{y}_{\max}$ . Как и в первом примере А, вплоть до некоторого момента времени процессы  $x(t)$  и  $u(t)$  ведут себя как стационарные случайные функции. Если взять этот момент равным 53000, то  $\sigma_u \approx 0.351$ , что даже меньше, чем в примере А, когда  $\varepsilon = 0.3$ . Таким образом, и теперь шум  $u(t)$  можно считать малым по сравнению с единицей, что и служит обоснованием выбора значений параметров расчета, необходимых при использовании метода усреднения. Таким образом, развитый вариант метода усреднения не очень критичен к выбору значения параметра  $\varepsilon$ . Заметим также, что, как и в первом примере А, основное время до фазового перехода частица находится в области минимума эффективного потенциала, а не минимума реального потенциала. Этот результат еще раз подтверждает важность использования эффективного потенциала при исследовании систем с зеленым внешним шумом.



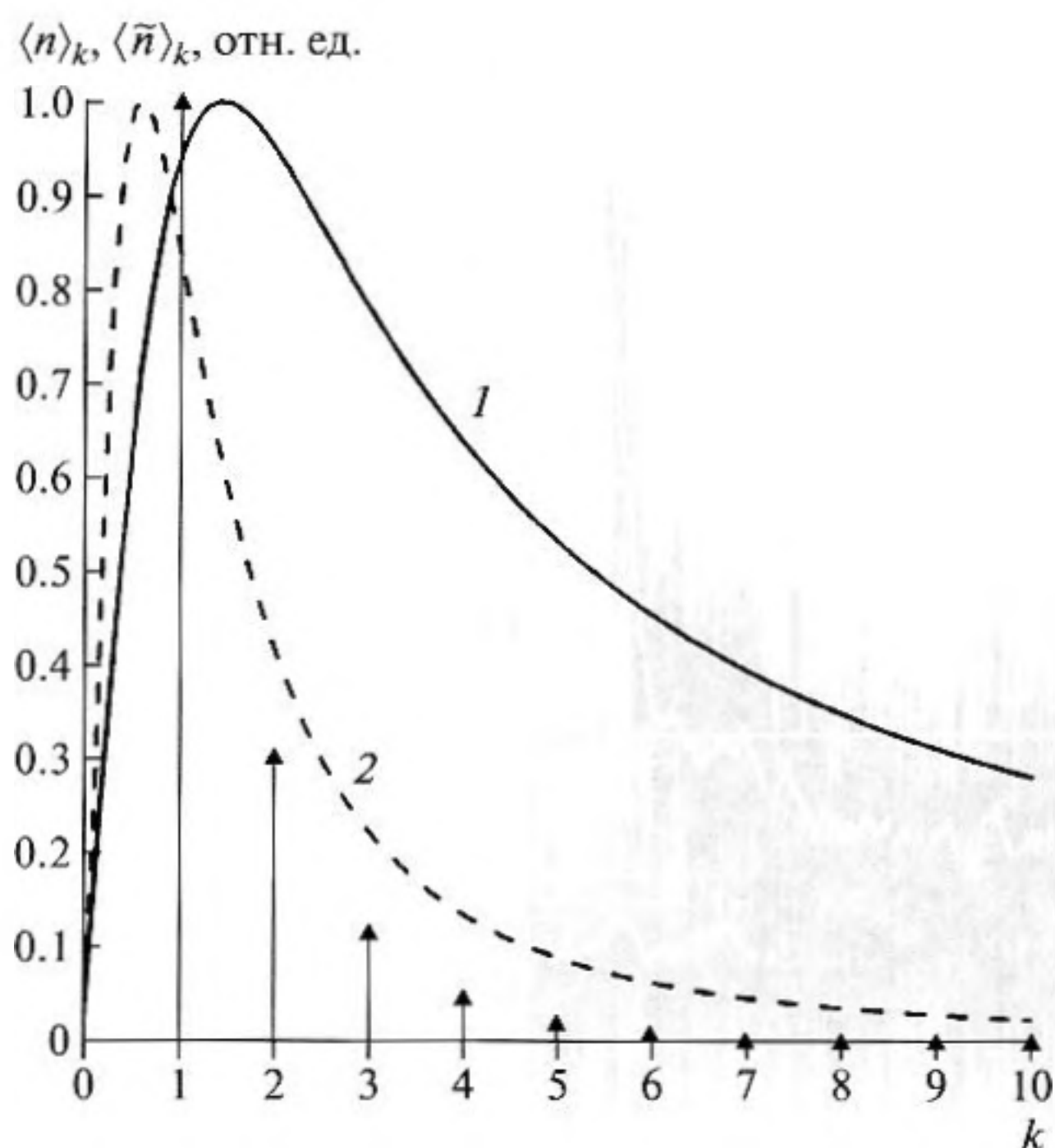


Рис. 6. Учет возбуждений осцилляторов поля при  $L = 10$  нм. Необходимо принимать во внимание по крайней мере 5 осцилляторов.

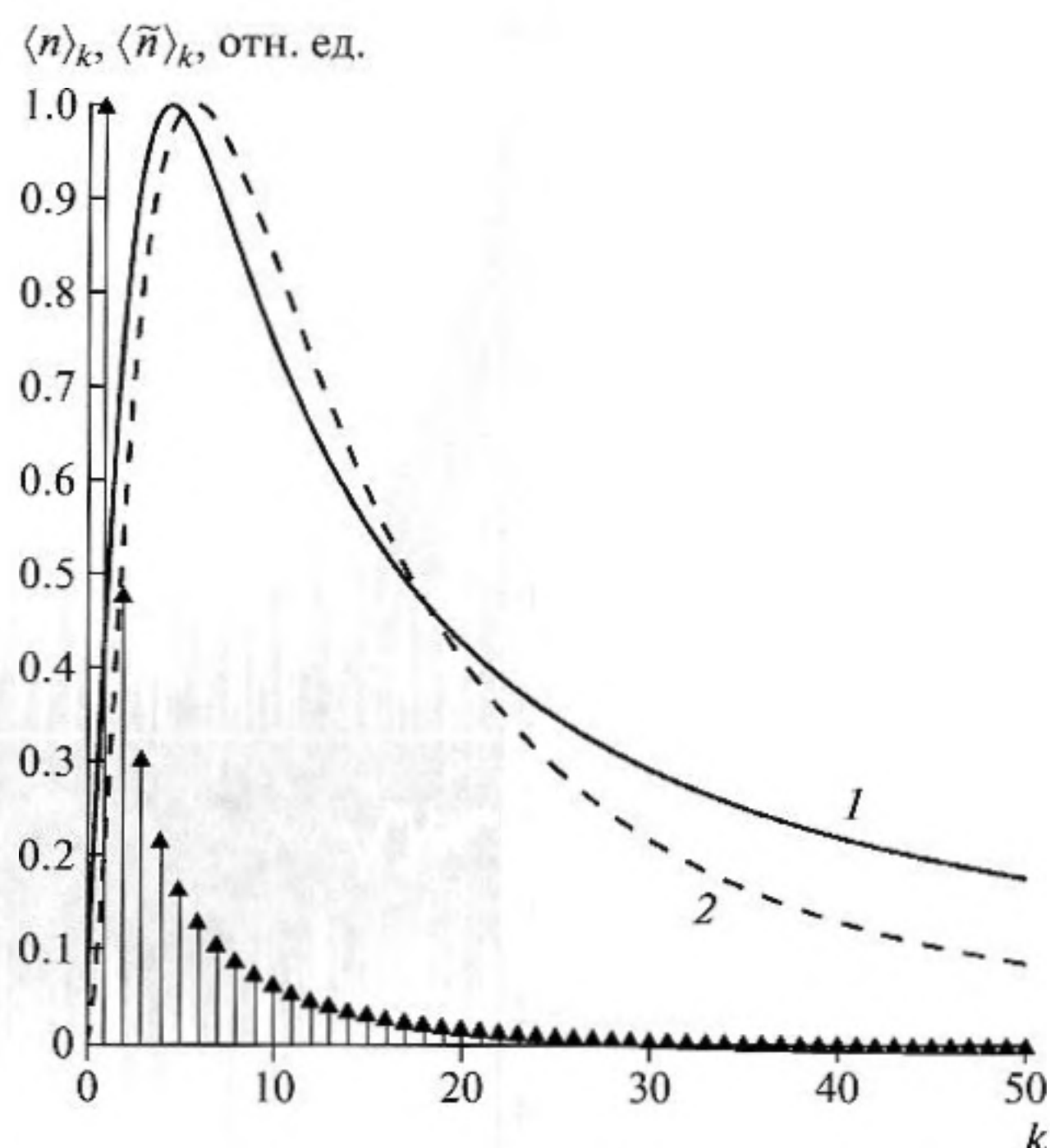


Рис. 7. Учет возбуждений осцилляторов поля при  $L = 100$  нм. Необходимо принимать во внимание по крайней мере 20 осцилляторов.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе с использованием аналитических и численных методов решена модельная задача о движении броуновской частицы в потенциальной яме (ловушке) в ограниченной низкоразмерной твердотельной структуре. Показано, что зеленый фононный шум, характерный для ограниченной системы, оказывает значительно менее сильное дестабилизирующее воздействие на движение броуновской частицы, чем белый шум в неограниченной среде. В реальных системах подобного типа это должно приводить к увеличению времени жизни захваченных частиц, повышению стабильности локализованных состояний. Кроме того, получено, что решающую роль в развитии стохастической динамики в присутствии зеленого шума играет эффективный потенциал, как основной инструмент метода усреднения.

Авторы выражают благодарность РФФИ за поддержку этой работы (тема № 08-02-00138) и В.М. Свиридовой за помощь в оформлении статьи.

### ДОПОЛНЕНИЕ

Во Введении в эту статью уже указывалось, что на практике важно уметь оценивать, когда условие зеленого внешнего шума играет существенную роль, а когда можно пользоваться традиционной теорией твердого тела в приближении не-

прерывного спектра собственных состояний [14]. Для этого рассмотрим уравнение (2) без учета потенциальной функции:

$$m \frac{dV'}{dt'} + \kappa V' = \eta(t'). \quad (17)$$

Здесь  $V' = dx'/dt'$  — скорость частицы. Если учесть обозначения (6), ее кинетическую энергию на размерной частоте  $\omega'$  можно представить к виду

$$E(\omega') = \frac{m\omega'}{2} S_V(\omega') = \frac{m\omega'}{2} \frac{S_\eta(\omega')}{\omega'^2 m^2 + \kappa^2} = \frac{m\omega'}{2\kappa^2} \frac{S_\eta(\omega')}{\vartheta t_s^2 \omega'^2 + 1}. \quad (18)$$

Принимая во внимание соотношение (5), получим  $S_\eta(\omega') = (\kappa^2 l^2 / t_s) S_\zeta(\omega)$ , где  $\omega = \omega' t_s$  — безразмерная круговая частота. Соответственно, из (18) следует

$$E(\omega') = \omega' \frac{e\vartheta l^2}{2\mu} \frac{S_\zeta(\omega)}{\vartheta \omega^2 + 1},$$



где  $\mu$  — подвижность частицы. Тогда среднее число фононов на частоте  $\omega'_k = k\omega_0$  равно

$$\begin{aligned} \langle n \rangle_k &= \frac{E(\omega'_k)}{\hbar\omega'_k} = \frac{e\vartheta l^2 S_\zeta(\omega_k)}{2\hbar\mu \vartheta^2 \omega_k^2 + 1} = \\ &= \frac{e\vartheta l^2 D}{4\pi\hbar\mu} \frac{1}{\vartheta^2 \omega_k^2 + 1} \frac{\omega_k^2}{\omega_k^2 + \gamma'^2}. \end{aligned} \quad (19)$$

Эту величину следует сравнить с распределением Бозе—Эйнштейна

$$\langle n \rangle_k = \frac{1}{\exp(\hbar\omega'_k/k_B T) - 1} \quad (20)$$

( $k > 0$ ). Для примеров положим:  $T = 300$  К,  $s = 8430$  м/с,  $\mu = 0.13$  м<sup>2</sup>/Вс и  $\vartheta = 0.5$ . Рис. 6 иллюстрирует случай  $L = 10$  нм. Здесь стрелками показан дискретный спектр Бозе—Эйнштейна, кривая 1 представляет собой аппроксимирующую функцию, пропорциональную  $\omega'_k(\omega_k'^2 + \gamma'^2)$ , где  $\gamma'$  — размерная постоянная, а кривая 2 — функцию отклика системы (17), полученную по формуле (19). Сразу отметим, что существует некоторая неточность аппроксимации, связанная со сдвигом максимума этой функции влево. Тем не менее, в данном случае реально возбуждается всего лишь около 5 осцилляторов поля и модель зеленого шума становится необходимой для описания динамики системы. Рис. 7 соответствует  $L = 100$  нм. Хорошо видно, что в этом случае используемая в статье аппроксимация недостаточно точно описывает реальную ситуацию. Однако число возбуждаемых осцилляторов превышает 20, что позволяет использовать традиционную теорию бесконечно длинного образца структуры.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kramers H.A.* Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions // *Physica*. 1940. V. 7. P. 284–305.
2. *Hänggi P., Talkner P.B., Borcovec M.* Reaction rate theory: fifty years after V. Kramers // *Rev. Mod. Phys.* 1990. V. 62. P. 251–342.
3. *Mel'nikov V.I.* The Kramers problem: Fifty years of development // *Phys. Rep.* 1991. V. 209. P. 1–71.
4. *Risken H.* The Fokker–Planck Equation. Berlin, Heidelberg: Springer, 1996. 472 p.
5. *Hänggi P., Jung P.* Colored noise in dynamical systems // *Adv in Chem. Phys.* 1995. T. 89. C. 239–325.
6. *Рытов С.М.* Введение в статистическую радиофизику. Случайные процессы. М.: Наука, 1976. Ч. 1. 496 с.
7. *Хорстхемке В., Лефевр Р.* Индуцированные шумом переходы. М.: Мир, 1987. W. Horsthemke, P. Lefever. Noise-Induced Transitions. Heidelberg, 1984. 399 p.
8. *Чередник В.И., Двоешерстов М.Ю.* Дифракционные искажения поверхностных акустических волн в кристаллах // *Акуст. журн.* 2005. Т. 51. № 4. С. 550–558.
9. *Курбатов М.В., Рыбак С.А.* О структуре поля в среде с нерегулярно расположенными сосредоточенными неоднородностями // *Акуст. журн.* 1999. Т. 45. № 3. С. 370–375.
10. *Bethe H.A.T.* Theory of diffraction by small holes // *Phys. Rev.* 1944. V. 66. P. 163–182.
11. *Simiu E., Frey M., Melnikov R.* Processes and Noise-Induced Exits from a Well // *Journal of Engineering mechanics*. 1996. V. 122. P. 263–270.
12. *Guz S.A., Sviridov M.V.* Brownian motion with “green” noise in a periodic potential // *Phys. Lett. A*. 1998. V. 240. P. 43–49.
13. *Гуз С.А., Красников Ю.Г., Свиридов М.В.* Движение броуновской частицы под действием “зеленого” шума. В ежегоднике “Акустика неоднородных сред” под редакцией Рыбака С. А. М.: МФТИ, 2001. С. 157–166.
14. *Павлов П.В., Хохлов А.В.* Физика твердого тела. М.: Высшая школа, 1985. 384 с.
15. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1964. Т. 5. Ч. 2. 568 с.
16. *Рытов С.М., Кравцов Ю.А., Татарский В.И.* Введение в статистическую радиофизику. Случайные поля. М.: Наука, 1978. Ч. 2. 464 с.
17. *Guz S.A., Sviridov M.V.* “Green” noise in quasistationary stochastic systems // *Chaos*. 2001. V. 11. P. 605–610.
18. *Гуз С.А.* Движение броуновской частицы во флуктуирующем периодическом потенциале // *ЖЭТФ*. 2002. Т. 122. С. 188–197.
19. *Вентцель А.Д., Фрейдлин М.И.* Флуктуации в динамических системах под действием малых случайных возмущений. М.: Наука, 1979. 424 с.
20. *Guz S.A., Ruzavin I.G., Sviridov M.V.* Brownian particle in a solitary potential well under the influence of “green” noise // *Phys. Lett. A*. 2000. V. 274. P. 104–110.
21. *Mannella R., Palleschi V.* Fast and precise algorithm for computer simulation of stochastic differential equation // *Phys. Rev. A*. 1989. V. 40. P. 3381–3386.
22. *Guz S.A., Mannella R., Sviridov M.V.* Catastrophes in Brownian motion // *Phys. Lett. A*. 2003. V. 317. P. 233–241.