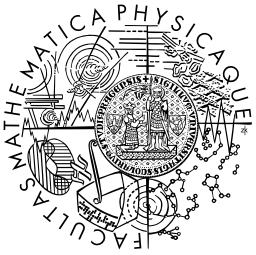


MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ FAKULTA
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Jaroslav Paidar

Nerovnovážná Brownovská dynamika v periodických potenciálech

Katedra makromolekulární fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Artem Ryabov, Ph.D.
Studijní program: Fyzika
Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2023

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V ..... dne ....

Podpis autora

Především bych rád poděkoval RNDr. Artemu Ryabovovi, Ph.D. za jeho velkou trpělivost, za uvedení do tohoto tématu, a jeho pomoc při otázkách této práce. Za trpělivost bych rád také poděkoval rodině.

Výpočetní zdroje byly poskytnuty v rámci projekt e-INFRA CZ (ID:90254), podpořený Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

Název práce: Nerovnovážná Brownovská dynamika v periodických potenciálech

Autor: Jaroslav Paidar

Katedra: Katedra makromolekulární fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Artem Ryabov, Ph.D., KMF MFF UK

Abstrakt: Kolektivní dynamika Brownovských částic v pórovitých strukturách představuje důležité téma jak pro teorii, tak pro experiment. V několika modelech bylo nedávno dosaženo dobrého porozumění Brownovské dynamice interagujících částic pohybujících se v jedné dimenzi. Teoretický popis těchto modelů se soustředí na nekonečně velké systémy, ačkoli reálné systémy jsou ve skutečnosti malé. Tato práce se zaměřuje na studium vlivu velikosti systému interagujících částic řízených silou na jejich transportní chování v periodickém potenciálu. Jako referenční data jsme využili simulace jedno-částicového modelu s analyticky řešitelnými výsledky. Pro tento model byly provedeny simulace Euler–Maruyamaovou metodou. Více-částicové simulace byly provedeny pro dva různé typy interakcí částic. Interakce typu tuhých koulí posloužila jako základ analýzy chování částic s interakčním potenciálem typu vyhlazené bariéry, který umožnil předbíhání částic. Byla studována rychlost částic a koeficient difuze v závislosti na různých parametrech systému, jako je měkkost a velikost částic, hustota nebo velikost systému.

Klíčová slova: Brownovská dynamika Nerovnovážné procesy Lokální interakce Omezený systém Potenciálová energetická bariéra

Title: Nonequilibrium Brownian dynamics in periodic energy landscapes

Author: Jaroslav Paidar

Department: The Department of Macromolecular Physics

Supervisor: RNDr. Artem Ryabov, Ph.D., KMF MFF UK

Abstract: The collective dynamics of Brownian particles in porous structures is an important topic for both theory and experiment. A good understanding of Brownian dynamics of interacting particles moving in one dimension has recently been achieved in several models. The theoretical description of these models focuses on infinitely large systems, although real systems are in usually small. This thesis studies the effect of the size of a system of interacting particles driven by a force on their transport behavior in a periodic potential. We have used simulations of a single-particle model with analytically solvable results as reference data. For this model, simulations were performed using the Euler–Maruyama method. Multi-particle simulations were performed for two different types of particle interactions. The rigid-ball type interaction served as the basis for the analysis of behavior of a smoothed-barrier type interaction potential case that allowed for the particles to pass through each other. The particle velocity and diffusion coefficient were studied as a function of various system parameters such as particle softness, size, and density or system size.

Keywords: Brownian motion Non-equilibrium processes Local interaction Several particle system Potential energy barrier

Obsah

Úvod **2**

1 Jedno-částicový případ **3**
1.1 Specifikace modelu 3
1.2 Analytické řešení 4
1.2.1 Stacionární rychlost částice 6
1.2.2 Deterministický případ 7
1.2.3 Difuzní koeficient v periodickém potenciálu 7
1.3 Simulace: Euler–Maruyamaova metoda 8
1.4 Diskuze 8

2 Systém více částic **13**
2.1 Model 13
2.2 Simulace 15
2.3 Diskuze výsledků 18
2.3.1 Částice s interakcí typu tuhých koulí 22
2.3.2 Částice s interakcí vyhlazené obdélníkové bariéry 23

Závěr **45**

Seznam použité literatury **47**

Úvod

Nerovnovážná stochastická dynamika popisuje situace, kdy se systém nebo proces nenachází ve stavu termodynamické rovnováhy. Uplatňuje se zejména při studiu transportních jevů na mikroskopické úrovni, které mají klíčový význam k pochopení mnoha fyzikálních procesů v různých podmínkách. Zejména se využívá k modelování biologických procesů [1] a popisování jevů v biofyzice a buněčné biologii [2], jako jsou například transportní jevy motorických proteinů podél mikrotubulů nebo aktinových vláken [3, 4]. Dále také biochemických procesů s aplikacemi pro uhlíkové nano-trubice [5] v biomedicíně, nebo pohybu částic v nano-fluidních zařízeních [6]. V konkrétní realizaci takových systémů pak transport částic často probíhá v geometricky omezeném prostředí s periodickou strukturou, kterou lze dobře popsat periodickým potenciálem. Dobře prozkoumanou oblastí jsou jevy v pórech zeolitů [7]. Ačkoli většina teoretických přístupů [8, 9] se zabývá nekonečně velkými systémy v termodynamické limitě, v reálných procesech a experimentálních realizacích se může jednat i o případ několika málo částic [10, 11].

Teoretické výsledky dynamiky částic a jejich transportu přes pórovité struktury [8, 9, 12, 10] přináší zajímavé zjištění zejména v závislosti na podmínkách a faktorech ovlivňujících dynamiku systému. Mezi ně patří charakteristiky interagujících částic jako je například relativní šířka vzhledem ke struktuře, hustota a vzájemná interakce. Realizace těchto experimentů bývá nákladná a přináší několik úskalí, se kterými je třeba se vyrovnat. V porovnání s tím nabízí simulace relativně rychlé odpovědi na teoretické modely.

V této práci se zaměříme na počítačové simulace dynamiky systémů, které budou obsahovat několik, řádově jednotky až desítky, částic. V první fázi popíšeme systém s Brownovskou dynamikou jedné částice v periodickém potenciále, kde shrneme známé výsledky a analytická řešení. Poté připravíme a provedeme řadu simulací pro systém s více interagujícími částicemi. Nakonec tyto výsledky porovnáme s výsledky systému neinteragujících částic a poukážeme na odlišnosti s již zjištěnými vlastnostmi pro nekonečně velké systémy.

1. Jedno-částicový případ

1.1 Specifikace modelu

Teoretické modely, diskutované v této práci, jsou zaměřeny na popis přetlumené dynamiky v mikrosvětě, při níž dochází k rychlé relaxaci rychlosti Brownovské částice. V příslušné pohybové rovnici lze pak zanedbat inerciální členy [13]. Takovou dynamiku částice v jednodimenzionálním případě popisuje Langevinova rovnice [14]

$$\dot{x} = \mu F(x) + \sqrt{2D}\eta(t), \tag{1.1}$$

kde x značí polohu Brownovské částice, a $\dot{x}$ její časovou derivaci. $F(x)$ značí sílu působící na částici. Dále je zavedena pohyblivost μ (nazývaná též mobilita). Druhý člen rovnice (1.1) představuje stochastickou Langevinovu sílu s difuzním koeficientem D, jehož tvar je určen fluktuačně-disipačním teorémem [15], známým též jako Einsteinův vztah [15],

$$D = \mu k_{\mathrm{B}} T, \tag{1.2}$$

s termální energií $k_{\mathrm{B}}T$. Náhodná veličina, respektive proces $\eta(t)$ je odborně nazýván Gaussovský bílý šum [8] a představuje náhodné (termální) fluktuace okolního prostředí. Má nulovou střední hodnotou a dvoučasovou korelační funkci:

$$\begin{aligned} \langle \eta(t) \rangle &= 0, \\ \langle \eta(t)\eta(t') \rangle &= \delta(t - t'). \end{aligned} \tag{1.3}$$

Kromě přetlumené dynamiky je model koncipován na periodickou strukturu reprezentovanou periodickým potenciálem $U(x)$. S konstantní tažnou (driftovou) silou f, která pohání Brownovské částice, udávají tvar vnější síly $F(x)$ v Langevinově rovnici (1.1) jako

$$F(x) = f - \frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x}. \tag{1.4}$$

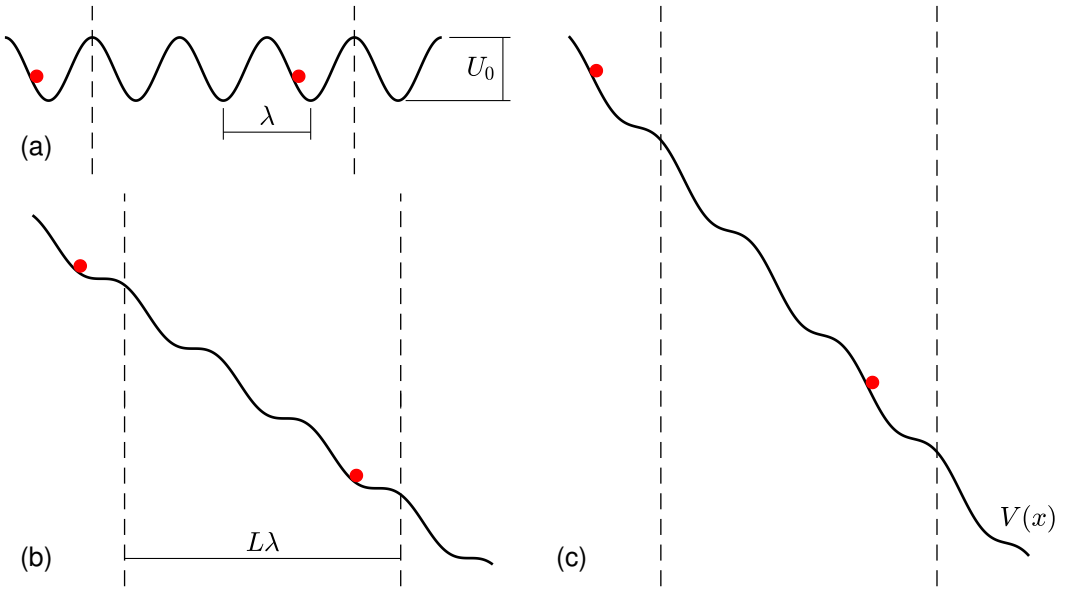
Zde konkrétně bude uvažován kosinový potenciál, což je často studovaná funkce, s počátkem soustavy souřadnic v potenciálové jámě:

$$U(x) = -\frac{U_0}{2}\cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right), \tag{1.5}$$

s výškou potenciálové bariéry U_0 a délkou periody λ, viz obrázek 1.1 (a).

Dále model opatříme vhodnými okrajovými podmínkami. Konkrétně budeme uvažovat periodické okrajové podmínky, znázorněno čárkovaně v ilustračním obrázku 1.1, s celým číslem L[1], které bude představovat počet period. S těmito podmínkami se částice nepohybuje po přímce, nýbrž po uzavřeném intervalu $x \in [\,0, L\lambda\,]$. Poloha částice x má na tomto intervalu v limitě $t \to \infty$ stacionární

[1] V citovaných článcích má proměnná L význam celé periody včetně rozměru λ.



Obrázek 1.1: Brownovská částice (červená) v periodickém potenciálu (černá) s výškou bariéry U_0, délkou periody λ, vzdáleností okrajových podmínek $L\lambda$ (čárkovaná) a zobecněným potenciálem $V(x)$ definovaným v (1.11). Panel (a): bez vnější driftové síly. Panel (b): s tažnou silou f rovnající se kritické síle f_c definované v (1.23). Panel (c) s tažnou silou, která má větší hodnotu, než kritická síla f_c.

pravděpodobnostní rozdělení. V limitě $t \to \infty$ pro $f = 0$ se jedná o Boltzmannovo rovnovážné rozdělení. Stav v limitě $t \to \infty$ pro $f > 0$ vede k ustálenému, stacionárnímu rozdělení, jehož vlastnosti budou diskutovány dále v sekci 1.2.

Lze si všimnout, že rovnice (1.1) umožňuje zavést přirozené jednotky. I když následující odvození bude prováděno v SI jednotkách, grafické výsledky simulací budou kresleny v těchto redukovaných jednotkách. Konkrétně délka bude měřena v jednotkách λ, čas v jednotkách $\lambda^2/\mu k_B T$ a energie v jednotkách $k_B T$. Vztahy, které budou použity v simulacích s použitím relativních jednotek jsou ekvivalentní s volbou jednotkových proměnných, tedy s použitím hodnot $\lambda = \mu = k_B T = 1$.

Řešení jedno-částicového případu je známo [14]. Pro úplnost, ve zbývající části této kapitoly, zrekapitulujeme tyto výsledky, které poslouží při interpretaci výsledků simulace více-částicového problému v kapitole 2.

1.2 Analytické řešení

Evoluční rovnicí, odpovídající pohybové rovnici (1.1), udávající vývoj hustoty pravděpodobnostního rozdělení $W(x,t)$ v čase t je Smoluchowského rovnice [14]

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(-\mu f + \mu \frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x} + D\frac{\partial}{\partial x}\right) W(x,t), \tag{1.6}$$

což je speciální typ Fokker-Planckovy rovnice [14]. Jedná se vlatně o přetlumenou limitu obecnější Klein-Kramersovy rovnice [16]. Rovnici (1.6) lze upravit do podoby rovnice kontinuity

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial j(x,t)}{\partial x}, \tag{1.7}$$

kde $j(x,t)$ je hustota pravděpodobnostního toku, dále zkráceně pravděpodobnostní proud. Touto úpravou dostáváme vztah pro proud

$$j(x,t) = \mu \left[f - \frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x} \right] W(x,t) - D\frac{\partial W(x,t)}{\partial x}. \tag{1.8}$$

S periodickými okrajovými podmínkami ve stacionárním stavu hustota pravděpodobnostního rozdělení, a tedy i proud, nezávisející na čase. Stacionární rozdělení v limitě $t \to \infty$ označíme jako $W_{\mathrm{st}}(x)$, a proud jako j_{st}. Proud j_{st} je pak díky rovnici kontinuity (1.7) konstantou, nezávisící na souřadnici x,

$$j_{\mathrm{st}} = \mu \left[f - \frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x} \right] W_{\mathrm{st}}(x) - D\frac{\partial W_{\mathrm{st}}(x)}{\partial x}. \tag{1.9}$$

V tomto případě lze nalézt řešení rovnice (1.9) s použitím metody integračního faktoru vyřešit ve tvaru

$$W_{\mathrm{st}}(x) = \mathrm{e}^{-\beta V(x)} \left[C - \frac{\beta j_{\mathrm{st}}}{\mu} \int_0^x \mathrm{e}^{\beta V(x')} \mathrm{d}x' \right], \tag{1.10}$$

s neznámou integrační konstantou C, a kde je zavedený zobecněný potenciál $V(x)$, znázorněn na obrázku 1.1, jako

$$V(x) = -fx + U(x)\,. \tag{1.11}$$

Pro pohodlný zápis se zavádí hodnota převrácené tepelné energie $\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$.

Aplikací okrajové podmínky $W_{\mathrm{st}}(x) = W_{\mathrm{st}}(x + L\lambda)$ na obecné řešení rovnice (1.10), včetně rovnosti $V(x+\lambda) = -f\lambda + V(x)$ dostáváme

$$\begin{aligned} &\mathrm{e}^{-\beta V(x)} \left[C - \frac{\beta j_{\mathrm{st}}}{\mu} \int_0^x \mathrm{e}^{\beta V(x')} \mathrm{d}x' \right] = \\ &\qquad \mathrm{e}^{\beta f L\lambda - \beta V(x)} \left[C - \frac{\beta j_{\mathrm{st}}}{\mu} \mathrm{e}^{-\beta f L\lambda} \int_0^x \mathrm{e}^{\beta V(x')} \mathrm{d}x' - \frac{\beta j_{\mathrm{st}}}{\mu} \int_0^{L\lambda} \mathrm{e}^{\beta V(x')} \mathrm{d}x' \right]. \end{aligned} \tag{1.12}$$

Kde pokrácením stejných hodnot z obou stran rovnice (1.12) a úpravou posledního integrálu vyvodíme nakonec vztah mezi konstantou C a hodnotu proudu v ustáleném stavu j_{st}

$$C = \frac{\beta j_{\mathrm{st}}}{\mu} \frac{\int_0^{\lambda} e^{\beta V(x)} \mathrm{d}x}{1 - e^{-\beta f \lambda}}. \tag{1.13}$$

Konstanta C nezávisí na počtu period L, a při podrobnější analýze si lze všimnout, že $W_{\mathrm{st}}(x) = W_{\mathrm{st}}(x + \lambda)$, což koreluje se skutečností, že částice nepreferuje konkrétní jámu periodického potenciálu a v ustáleném stavu vymizí efekt počátečního stavu.

Normalizační podmínkou dospějeme k neznámé hodnotě j_{st}

$$j_{\mathrm{st}} = \frac{\mu}{\beta L} \frac{1 - \mathrm{e}^{-\beta f \lambda}}{\int_0^\lambda e^{-\beta V(x)} \int_x^{\lambda+x} e^{\beta V(x')} \mathrm{d}x' \mathrm{d}x}. \tag{1.14}$$

Kombinací rovnic (1.10), (1.13) a (1.14) navíc dospějeme k přesnému pravděpodobnostnímu rozdělení ve stacionárním stavu

$$W_{\mathrm{st}}(x) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta V(x)} \int_x^{\lambda+x} \mathrm{e}^{\beta V(x')} \mathrm{d}x'}{L \int_0^\lambda e^{-\beta V(x')} \int_{x'}^{\lambda+x'} e^{\beta V(x'')} \mathrm{d}x'' \mathrm{d}x'}. \tag{1.15}$$

Jak lze vidět v rovnici (1.14), v případě $f = 0$, je hodnota proudu nulová. V rovnici (1.15) je pak výsledkem jednoho integrálu ve jmenovateli a čitateli Besselova funkce, po jejímž vykrácení nabývá $W_{\mathrm{st}}(x)$ známého Boltzmannovského tvaru.

1.2.1 Stacionární rychlost částice

S relaxací do stacionárního stavu hodnota průměrné rychlosti částice konverguje ke své stacionární hodnotě v. To lze vyjádřit například podle definice [15] limitou

$$v \equiv \lim_{t\to\infty} \frac{\langle x(t) \rangle}{t}. \tag{1.16}$$

Její výpočet s použitím vlastnosti (1.3), Langevinovy rovnice (1.1), rovnice (1.9) v případě stacionárního stavu a s aplikací periodických okrajových podmínek vypadá následovně [14]

$$\begin{gathered} v = \langle \dot{x} \rangle_{\mathrm{st}} = \left\langle \mu f - \mu \frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x} \right\rangle_{\mathrm{st}} = \\ \int_0^{L\lambda} \left(\mu f - \mu \frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x} \right) W_{\mathrm{st}}(x)\, \mathrm{d}x = \int_0^{L\lambda} \left(D \frac{\mathrm{d}W_{\mathrm{st}}(x)}{\mathrm{d}x} + j_{\mathrm{st}} \right) \mathrm{d}x = L\lambda j_{\mathrm{st}}. \end{gathered} \tag{1.17}$$

Dosazením hodnoty j_{st} z rovnice (1.14) dostáváme výraz pro ustálenou rychlost

$$v = \lambda \mu\, k_{\mathrm{B}} T \frac{1 - \mathrm{e}^{-\beta f \lambda}}{\int_0^\lambda e^{-\beta V(x)} \int_x^{\lambda+x} e^{\beta V(x')} \mathrm{d}x' \mathrm{d}x}. \tag{1.18}$$

Za podmínek malé driftové síly, obecně jako

$$\frac{f\lambda}{k_{\mathrm{B}} T} < 1, \tag{1.19}$$

lze ustálenou rychlost aproximovat lineární závislostí

$$v = \mu_0 f \tag{1.20}$$

s mobilitou označenou μ_0. Ta je dána limitou

$$\mu_0 \equiv \lim_{f\to 0} \frac{v}{f} = \frac{\mu \lambda^2}{\int_0^\lambda \mathrm{e}^{\beta V(x)} \mathrm{d}x \int_0^\lambda \mathrm{e}^{-\beta V(x)} \mathrm{d}x|_{f=0}} = \frac{\mu}{I_0^2(\frac{U_0}{2}\beta)}, \tag{1.21}$$

kde I_0 značí modifikovanou Besselovu funkci prvního druhu. Jak bude v simulaci ověřeno, za přítomnosti velké driftové síly $f \gg U_0/\lambda$ se vytrácí vliv periodického potenciálu $U(x)$. Lineární koeficient mezi ustálenou rychlostí a silou pak nabývá velikosti pohyblivosti μ.

1.2.2 Deterministický případ

Pro názornost bude ještě ukázáno, jaká by byla rychlost částice v_d v případě deterministického pohybu, tedy při zanedbatelné tepelné energii $k_\mathrm{B}T/U_0 \simeq 0$. K řešení lze dospět dvěma cestami. Buď můžeme provést limitu rovnice (1.18) pro $\beta \to \infty$, nebo vyřešením diferenciální rovnice

$$\dot{x} = \mu f - \mu \frac{U_0 \pi}{\lambda} \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right). \tag{1.22}$$

K tomu aby částice překonala výšku potenciálové bariéry U_0 je třeba, aby částice byla poháněna silou f, jejíž hodnota je vyšší, než je kritická síla f_c vyvozena z rovnice (1.22)

$$f_\mathrm{c} = \frac{U_0 \pi}{\lambda}. \tag{1.23}$$

Při překročení kritické síly $f > f_\mathrm{c}$ (nadkritická síla), viz obrázek 1.1 (c), je deterministická rychlost v_d nenulová. Separací proměnných z upravené rovnice (1.22) následuje vztah

$$\frac{\pi x}{\lambda} + C_1 = \arctan\left[\frac{U_0\pi}{f\lambda} - \sqrt{1 - \left(\frac{U_0\pi}{f\lambda}\right)^2} \tan\left(\frac{\mu f \pi}{\lambda}\sqrt{1 - \left(\frac{U_0\pi}{f\lambda}\right)^2}\, t\right)\right] \tag{1.24}$$

s konstantou C_1. Průměrná rychlost oproti tvaru (1.16) je následně středována přes frekvenci, s jakou se mění, což dává ve výsledku průměrnou rychlost

$$v_\mathrm{d} = \mu\sqrt{f^2 - f_\mathrm{c}^2}. \tag{1.25}$$

Podkritickou silou budeme mít na mysli tažné síly, jejichž velikost je nižší, než kritická síla f_c.

1.2.3 Difuzní koeficient v periodickém potenciálu

Difuzní koeficient D z rovnice (1.2) představuje velikost rozptylu polohy Brownovské částice způsobený termálním šumem v případě konstantní vnější síly $F(x) = \text{konst}$. Efektivní difuzní koeficient $\mathcal{D}$ jedné částice definován limitou [15]

$$\mathcal{D} \equiv \lim_{t\to\infty} \frac{\langle x^2(t)\rangle - \langle x(t)\rangle^2}{2t}, \tag{1.26}$$

je ovlivněn přítomností periodického potenciálu. Jednoduché řešení efektivního difuzního koeficientu $\mathcal{D}$ je v případě nulové výšky potenciálu $U_0 = 0$, kdy je roven D, nebo pro případ nulového vnějšího driftu $f = 0$, jenž označíme jako D_0, kde lze vidět jeho vztah s mobilitou μ_0 z rovnice (1.21) [15]

$$D_0 = \frac{D}{I_0^2(\frac{U_0}{2}\beta)} = \mu_0 k_\mathrm{B} T. \tag{1.27}$$

Pro obecnou hodnotu difuzního koeficientu lze použít tvar určený z metody času prvního dosažení z článku [15]

$$\mathcal{D} = D\lambda^2 \frac{\int_0^\lambda \mathrm{e}^{-\beta V(x)} \int_x^{x+\lambda} \mathrm{e}^{\beta V(y)} \mathrm{d}y \int_x^{x+\lambda} \mathrm{e}^{\beta V(y')} \mathrm{d}y' \int_{x-\lambda}^{x} \mathrm{e}^{-\beta V(z)} \mathrm{d}z \mathrm{d}x}{\left[\int_0^\lambda \mathrm{e}^{-\beta V(x)} \int_x^{x+\lambda} \mathrm{e}^{\beta V(y)} \mathrm{d}y \mathrm{d}x\right]^3}. \tag{1.28}$$

V limitě dlouhého času lze obálku pravděpodobnostního rozdělení šíří jako Gaussovo rozdělení:

$$W'(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t}} \exp\left(-\frac{(x-vt)^2}{4\mathcal{D}t}\right). \tag{1.29}$$

1.3 Simulace: Euler–Maruyamaova metoda

Euler–Maruyamaova metoda je rozšířením numerického řešení diferenciálních rovnic Eulerovou metodou na numerické řešení stochastických diferenciálních rovnic [17]. Máme tedy upravenou Langevinovu diferenční rovnici

$$\mathrm{d}x = \mu f \mathrm{d}t - \mu \frac{\partial U(x)}{\partial x} \mathrm{d}t + \sqrt{2D\mathrm{d}t}\mathcal{N}_t(0,1), \tag{1.30}$$

kde $\mathcal{N}_t(0,1)$ je náhodná proměnná s Gaussovským pravděpodobnostním rozdělením, se střední hodnotou $\langle \mathcal{N}_t(0,1) \rangle = 0$ a jednotkovou směrodatnou odchylkou. Indexované náhodné proměnné $\langle \mathcal{N}_t(0,1) \rangle$ a $\langle \mathcal{N}_{t+\mathrm{d}t}(0,1) \rangle$ jsou nezávislé pro libovolnou hodnotu t [18].

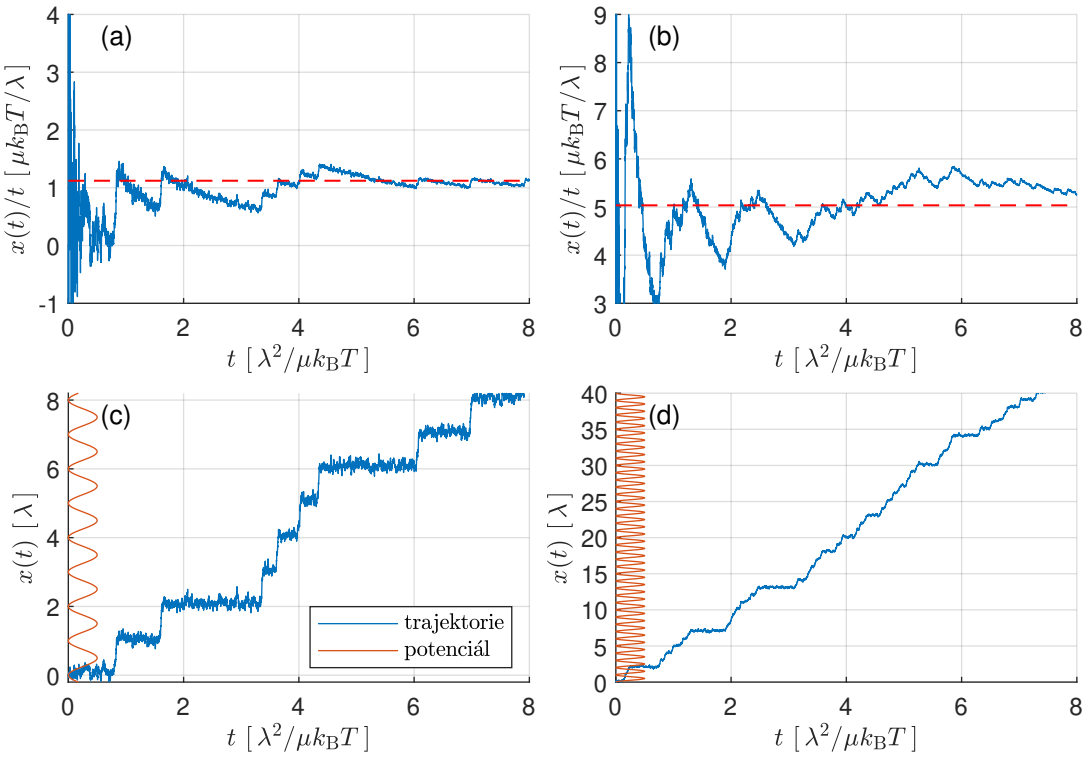
Simulace byly prováděny v prostředí MATLAB R2021b. Konkrétní vývoj souřadnice x lze napsat jako přičtení hodnoty v každém kroku s použitím přirozených jednotek, s počáteční podmínkou $x_0 = 0$ a malým, ale konečným časovým krokem $\mathrm{d}t$ přes rekurzivní vztah

```
x = x +f*dt -fc*sin(2*pi*x)*dt +sqrt(2*dt)*randn.
```

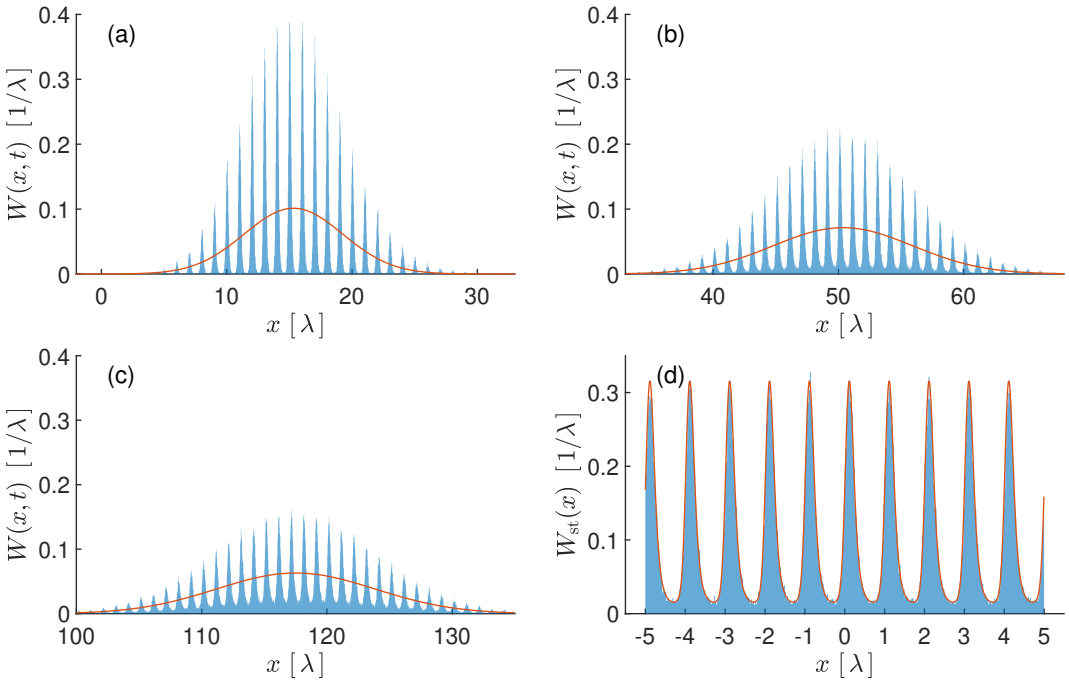
Simulace následujících výsledků, nebude-li uvedeno jinak, byly provedeny s časovým krokem $\mathrm{d}t = 10^{-3}\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$, včetně ověření, že tento krok je dostatečný pro přesné výsledky. Střední hodnoty jsou určovány z 10^4 opakovaní a doba simulace Brownovské dynamiky odpovídá času $t = 10\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$.

1.4 Diskuze

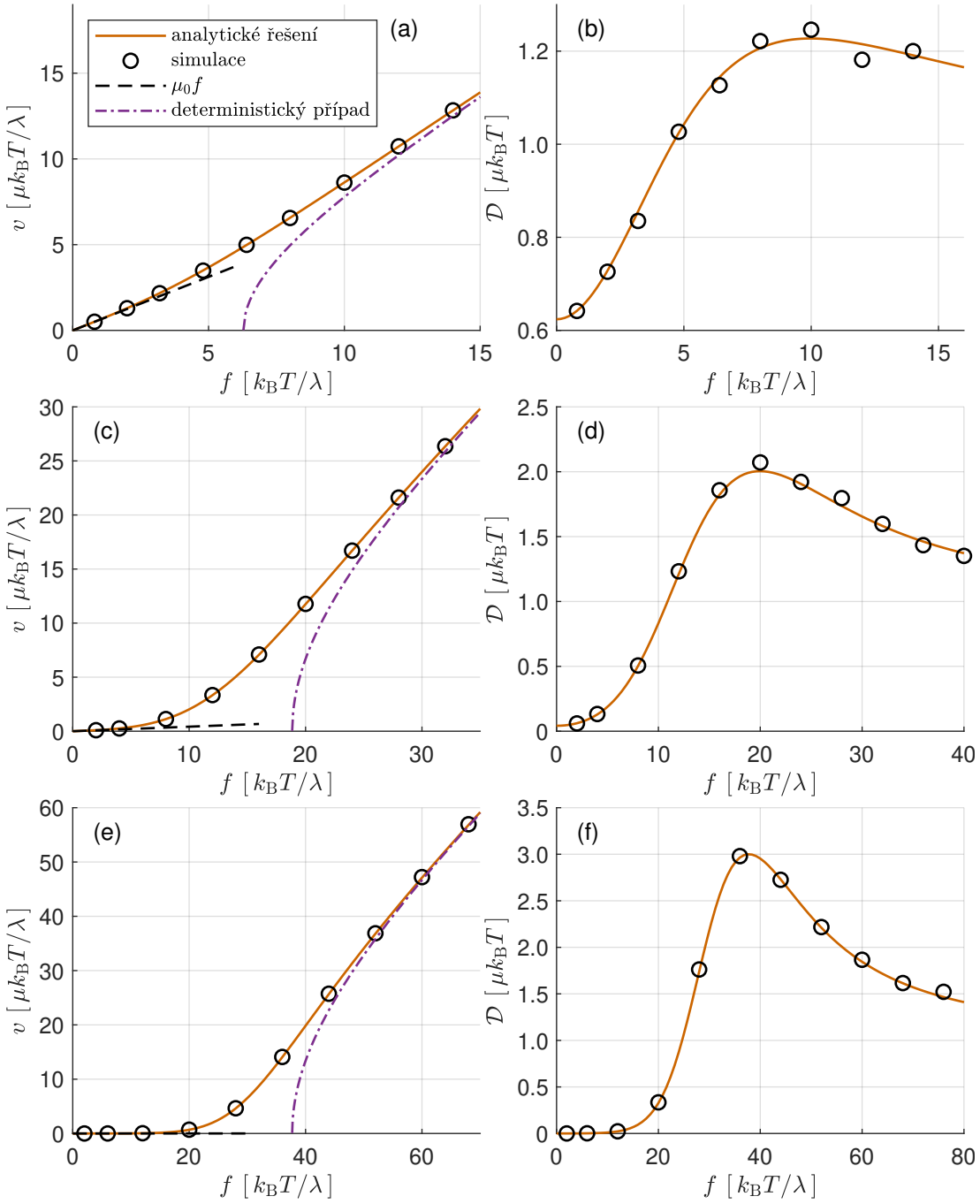
Jak ukazuje obrázek 1.2, trajektorie částice vykazuje přeskoky mezi potenciálovými minimy, které korelují s výkyvy průměrné rychlosti. Výkyvy jsou s rostoucím časem t tlumeny, což je důsledkem užité přetlumené dynamiky, kde rozptyl polohy v dlouhých časech roste úměrně s časem a průměrná rychlost pak konverguje ke své stacionární hodnotě. Případ vyšší podkritické síly $f = 14\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ [panely (b) a (d)] má za následek nižší bariéru v zobecněném potenciálu, což způsobuje častější přeskoky mezi minimy a tedy téměř pětkrát vyšší hodnotu ustálené rychlosti, oproti situaci se silou $f = 8\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ [panely (a) a (c)]. Na některých úsecích, jako například v čase $t \approx 2\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$ [panel (d)], lze pak pozorovat několikanásobný přeskok bez záchytu částice v potenciálové jámě.



Obrázek 1.2: Panely (a) a (b): konvergence průměrné rychlosti jedné trajektorie Brownovské částice k její ustálené hodnotě (čárkovaná červená) (1.16). Panely (c) a (d): odpovídající trajektorie částic (modrá křivka), periodický potenciál (oranžová křivka) o výšce $U_0 = 6\ k_{\mathrm{B}}T$. Panely (a), (c): s driftovou silou $f = 8\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$ odpovídající stacionární rychlosti $v = 1{,}12$. Panely (b), (d): s driftovou silou $f = 14\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$ odpovídající stacionární rychlosti $v = 5{,}04$.



Obrázek 1.3: Hustota pravděpodobnostního rozdělení polohy x. Panely (a)-(c): histogram polohy na nekonečné přímce (modrý histogram) s obálkou pravděpodobnostního rozdělení $W'(x,t)$ podle (1.29) (oranžová křivka). Panel (a) se silou $f = 4\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$ v čase $t = 60\ \lambda^2/\mu k_{\mathrm{B}}T$, panel (b) se silou $f = 14\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$ v čase $t = 10\ \lambda^2/\mu k_{\mathrm{B}}T$ a panel (c) s nadkritickou silou $f = 20\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$ v čase $t = 10\ \lambda^2/\mu k_{\mathrm{B}}T$. Panel (d): histogram polohy x s periodickou okrajovou podmínkou o velikosti $L = 10$ (modrý histogram) a pravděpodobnostní rozdělení ve stacionárním stavu $W_{\mathrm{st}}(x)$ podle (1.15) (oranžová křivka). S výškou potenciálu $U_0 = 6\ k_{\mathrm{B}}T$ z $2{\cdot}10^5$ simulací.



Obrázek 1.4: Panely (a), (c) a (e): ustálená rychlost Brownovské částice v závislosti na velikosti driftové síly f ze simulací podle Euler–Maruyamaova schématu (diskrétní body). Analytické řešení (1.18) (oranžová křivka), s lineární aproximací pro malé hodnoty sil (1.20) (černá čárkovaná) a deterministickým případem (1.25) (fialová čerchovaná). Panely (b), (d) a (f): difuzní koeficient Brownovské částice v závislosti na velikosti driftové síly f ze stejných simulací, a analytického řešení (1.28), jako v (a), (c) respektive (e). Panely (a) a (b): s malou výškou potenciálu $U_0 = 2\ k_\mathrm{B}T$. Panely (c) a (d): s výškou potenciálu $U_0 = 6\ k_\mathrm{B}T$. Panely (e) a (f): s vyšší výškou bariéry potenciálu $U_0 = 12\ k_\mathrm{B}T$. Data byla vyhodnocena ze simulací s časem $t = 20\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$.

Na obrázku 1.3 jsou hustoty pravděpodobností $W(x,t)$ pro polohu x částice v čase t. Panely (a)-(c) ilustrují vývoj hustoty v čase pro případ difuze na přímce (okrajové podmínky v $x = \pm\infty$). Zatímco panel (d) ilustruje případ difuze s periodickými podmínkami $L = 10$ s vnější silou $f = 14\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ v čase $t = 10\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$. Pro tuto dobu se histogram dostatečně shoduje s analytickým řešením stacionárního rozdělení podle (1.15). Doba $t = 10\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$ je v tomto případě dostatečná k nastolení stacionárního stavu. Tato doba stačí i pro případy difuze na přímce s působící silou $f = 14\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ v panelu (b), a silou $f = 20\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ v panelu (c), jejichž obal se dá popsat pravděpodobnostním rozdělením $W'(x,t)$ podle (1.29), až na Boltzmannovská maxima v potenciálových jámách. Pro případ malé působící síly $f = 4\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ v panelu (a) je tato doba daleko větší $t = 60\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$. Tvar Boltzmannovských maxim lze vidět ve stacionárním případě [panel (d)], kde vliv vnější síly f způsobuje antisymetrii a posunutí maxim ve směru síly oproti minimům potenciálu.

Vliv výšky potenciálové bariéry U_0 na dynamiku částic lze vidět na obrázku 1.4. S menší výškou se vliv potenciální bariéry snižuje, oproti termální energii $k_\mathrm{B}T$. Ustálená rychlost Brownovské částice se, v závislosti na velikosti driftové síly, chová spíše lineárně s pohyblivostí μ, jak ilustruje obrázek 1.4 [panel (a)]. Difuzní koeficient má méně zřetelné maximum, viz obrázek 1.4 [panel (b)], a v limitě $U_0 \to 0$ se jedná o konstantu D. S rostoucí výškou potenciálové bariéry roste i vliv potenciálu a menší síla znamená menší pravděpodobnost na překonání bariéry a tedy menší rychlost částice, jak je vidět na obrázku 1.4 [panel (c)] a u lineární aproximace malých sil. Závislost s výškou potenciálu $U_0 = 12\ k_\mathrm{B}T$, což by se vzdáleně dalo považovat za případ s $U_0 \gg k_\mathrm{B}T$, je v panelech (e)-(f). V panelu (e) se tvar křivky více připodobňuje deterministickému chování. Všechny hodnoty silmulací Euler–Maruyamaovou metodou korespondují s analytickým řešením, ačkoli difuzní koeficient by pro jisté parametry vyžadovala více simulací ke lepšímu statistickému vyhodnocení. Vliv potenciálu na proud v závislosti na síle dobře ilustruje i příklad z jiného směru o Josephsonově efektu, jenž řeší stejná rovnice [19].

2. Systém více částic

2.1 Model

Zatímco v jedno-částicovém modelu měly na pohyblivost a difuzní koeficient vliv faktory, jako je velikost driftové síly a výška potenciálové bariéry, v případě více částic je jejich dynamika ovlivněna vzájemnými interakcemi. Předchozí model lze považovat za případ vzájemně neinteragujících částic a tedy nezávislý na velikosti systému L.

Zde budeme uvažovat interakční potenciál ve tvaru vyhlazené obdélníkové bariéry s konečnou výškou, která může reprezentovat například vzájemně se odpuzující a prostupující se makromolekuly [9], definován vztahem:

$$V^{\mathrm{int}}(r) = \frac{V_0}{\varepsilon\left[1+\mathrm{erf}\left(\sigma/\sqrt{2}\varepsilon\lambda\right)\right]}\left[1-\mathrm{erf}\left(\frac{r-\sigma}{\sqrt{2}\varepsilon\lambda}\right)\right], \tag{2.1}$$

s relativním parametrem měkkosti ε udávajícím sílu interakce, a s normovanou výškou interakčního potenciálu V_0. Proměnná r je vzdáleností mezi dvěma částicemi a σ udává velikost (šířku) částice. Funkce $\mathrm{erf}(x)$ je tzv. error funkce definovaná jako $\mathrm{erf}(x) = (2/\sqrt{\pi})\int_0^x e^{-t^2}\mathrm{d}t$. Tento potenciál částic je znázorněn na obrázku 2.1 intenzitou červené barvy s parametrem $\varepsilon = 0.25$. V limitě $\varepsilon \to 0$ přechází interakční potenciál k modelu tuhých koulí.

Párová interakční odpudivá síla mezi dvěma částicemi i a j v pozicích x_i a x_j je způsobena interakčním potenciálem 2.1. Částice j pak působí na částici i silou

$$\begin{aligned} f_{i,j} &= -\frac{\partial V^{\mathrm{int}}(|x_i - x_j|)}{\partial x_i} \\ &= \frac{\sqrt{2}V_0\,\mathrm{sign}(x_i - x_j)}{\sqrt{\pi}\lambda\varepsilon^2\left[1+\mathrm{erf}\left(\sigma/\sqrt{2}\varepsilon\lambda\right)\right]}\exp\left(-\frac{\left(|x_i - x_j| - \sigma\right)^2}{2\lambda^2\varepsilon^2}\right). \end{aligned} \tag{2.2}$$

Celková interakční síla působící na částici i v komplexu o N částicích má tvar

$$f_i(x_1, x_2, ...) = \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} \frac{\sqrt{2}V_0\,\mathrm{sign}(x_i - x_j)}{\sqrt{\pi}\lambda\varepsilon^2\left[1+\mathrm{erf}\left(\sigma/\sqrt{2}\varepsilon\lambda\right)\right]}\exp\left(-\frac{\left(|x_i - x_j| - \sigma\right)^2}{2\lambda^2\varepsilon^2}\right). \tag{2.3}$$

Jako tomu bylo v první kapitole, budeme studovat systém, kterému jsou přiřazeny periodické okrajové podmínky. Tyto podmínky implikují existenci fiktivních, tzv. „zrcadlových“ částic, jejichž interakční vlivy jsou částicemi vnímány. Na částici i tedy působí i síly fiktivních částic duplikovaných periodickou okrajovou podmínkou o velikosti periody $L\lambda$. Interakční síla (2.2) nemá dlouhý dosah, proto vzájemné interakce částic v absolutní vzdálenosti větší, než v definované vzdálenosti označené jako r_{cut} lze zanedbat Heavisideovou funkcí $\Theta(x)$, a interakční sílu upravit na rovnici

$$f_i^{\mathrm{int}}(x_1, x_2, ...) = \sum_{k\in\mathbb{Z}}\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} f_{i,j}(x_i, x_j + kL\lambda)\Theta(r_{\mathrm{cut}} - |x_i - x_j - kL\lambda|), \tag{2.4}$$

která obohacuje Langevinovu rovnici pro každou částici i na rovnici

$$\dot{x}_i = \mu f + \mu f_i^{\text{int}}(x_1, x_2, ...) - \mu \frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x}\Big|_{x=x_i} + \sqrt{2D}\eta(t). \tag{2.5}$$

Pravděpodobnostní proud částice lze definovat obdobně jako ve vztahu (1.8) z rovnice kontinuity s hustotou pravděpodobnostního rozdělení $W(x_1, x_2, ..., t)$. Její definiční obor se skládá z poloh všech částic, které jsou do jisté míry korelované. Tvar pravděpodobnostního rozdělení $W(x_1, x_2, ...)$ není obecně znám. Pokud hoříme o celkovém proudu částic s užitím periodických okrajových podmínek, pak bereme v úvahu lokální hustotu částic [8]:

$$\rho_{\text{loc}}(x,t) = \sum_{i=1}^{N} \int_{\mathbb{R}^{N-1}} W(x_1, x_2, ..., t)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2...\mathrm{d}x_{i-1}\mathrm{d}x_{i+1}...\mathrm{d}x_N. \tag{2.6}$$

S lokální hustotou částic je vztah pro proud částic vyjádřen jako

$$j(x,t) = \mu \left[f + \left\langle f^{\text{int}}(x_1, x_2, ...) \right\rangle - \frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x} \right] \rho_{\text{loc}}(x,t) - D\frac{\partial \rho_{\text{loc}}(x,t)}{\partial x}, \tag{2.7}$$

kde střední hodnota interakční síly vychází z rovnosti

$$\begin{aligned} &\left\langle f^{\text{int}}(x_1, x_2, ...) \right\rangle \rho_{\text{loc}}(x,t) = \\ &\sum_{i=1}^{N} \int_{\mathbb{R}^{N-1}} f_i^{\text{int}}(x_1, x_2, ...) W(x_1, x_2, ..., t)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2...\mathrm{d}x_{i-1}\mathrm{d}x_{i+1}...\mathrm{d}x_N. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Proud je množství částic, které projdou daným místem za určitý časový úsek. Ve stacionární limitě jej můžeme určit ze vztahu

$$j_{\text{st}} = \frac{1}{L\lambda} \lim_{t\to\infty} \sum_{i=1}^{N} \frac{\langle x_i(t) \rangle}{t}, \tag{2.9}$$

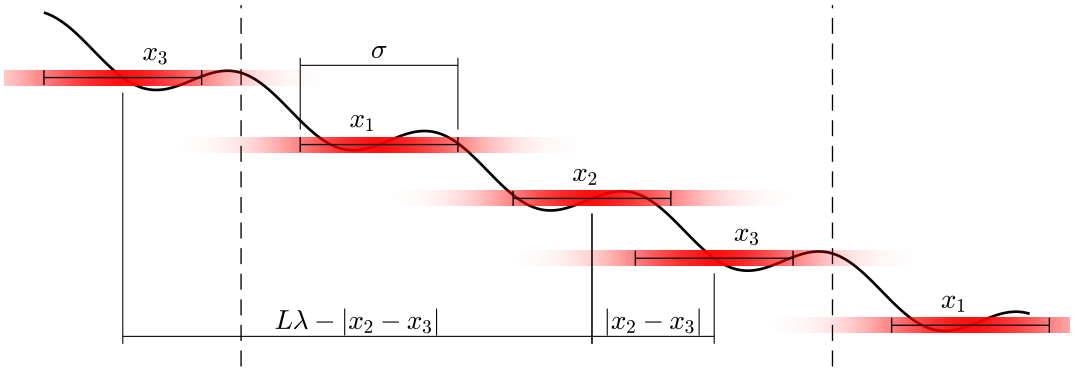
který je v souladu s výsledkem rovnice (1.17) a definicí 1.16 ustálené rychlosti v. Vztah mezi proudem $j(t)$ a průměrnou rychlostí $x(t)/t$

$$j(t) = \frac{1}{L\lambda} \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i(t)}{t} = \rho \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i(t)}{t} \tag{2.10}$$

nám umožní snadno analyzovat časový vývoj proudu bez ohledu na souřadnicové složce. Hustota ρ (faktor zaplnění) vyjadřuje míru obsazenosti potenciálových minim L systému se vzdáleností periodických okrajových podmínek $L\lambda$ počtem N částic.

$$\rho = \frac{N}{L\lambda}. \tag{2.11}$$

Soustředíme se především na komplexní struktury, které obsahují přibližně desítky částic, pro které nelze měnit hustotu ρ na libovolné hodnoty. Naším primárním



Obrázek 2.1: Interagující Brownovské částice (červené) o velikosti $\sigma = 0.8\ \lambda$ v periodickém potenciálu $U(x)$ z rovnice 1.5 s délkou periody λ a sklonem f (černá). Sytost červené barvy odpovídá velikosti interakční energii $V^{\mathrm{int}}(r)$ z rovnice 2.1 o síle interakce $\varepsilon = 0.25$. Systém s periodickými okrajovými podmínkami o vzdálenosti $L\lambda$ s $L = 3$ a počtem částic $N = 3$.

zájmem bude dále zkoumaní situace, kde počet částic odpovídá počtu potenciálových minim, tedy plný systém s hustotou $\rho = 1\ \lambda^{-1}$, ve kterém vzájemná interakce Brownovských částic silně ovlivňuje jejich dynamiku.

Pro pohyb celého souboru o N částicích zavedeme difuzní koeficient $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$, který je charakterizován rozptylem polohy těžiště Brownovských částic tohoto souboru. Zavedeme jej pomocí proudu $j(t)$ definovaného výše.

$$\mathcal{D}_{\mathrm{N}} = \frac{1}{\rho^2} \lim_{t\to\infty} \mathcal{D}_{\mathrm{j}}(t) = \frac{1}{2\rho^2} \lim_{t\to\infty} t \left(\left\langle j(t)^2 \right\rangle - \left\langle j(t) \right\rangle^2 \right). \tag{2.12}$$

O veličině $\mathcal{D}_{\mathrm{j}}(t)$ budeme hovořit jako o fluktuacích proudu. Ve stacionárním stavu se jedná o stacionární fluktuace proudu, jejichž hodnota je v plně obsazené systémů rovna difuznímu koeficientu $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$.

2.2 Simulace

K určení rychlosti a proudu Brownovských částic byly provedeny simulace podle Euler–Maruyamaovou schématu. V těchto simulacích je původní Langevinova diferenční rovnice (1.30) rozšířena o interakční člen (2.4)

$$\mathrm{d}x_i = \mu f \mathrm{d}t + \mu f_i^{\mathrm{int}}(x_1, x_2, ...)\mathrm{d}t - \mu \frac{\partial U(x)}{\partial x}\bigg|_{x=x_i} \mathrm{d}t + \sqrt{2D\mathrm{d}t}\mathcal{N}_t(0,1), \tag{2.13}$$

s maximální interakční vzdáleností volenou s ohledem na velikost systému jako

$$r_{\mathrm{cut}} = L\lambda. \tag{2.14}$$

Tato volba zajistí, že nebude zanedbána žádná interakce dvou částic, které se mohou k sobě přiblížit na malou vzdálenost a které se mohou vzájemně předběhnout. Nicméně pro systémy s příliž velkým počtem částic N není tato volba praktická z důvodu časové náročnosti.

MATLAB R2021b je optimalizováno pro operace s maticemi a vektory. Tyto operace jsou automaticky paralelizovány na více jádrech. Souřadnice částic zapíšeme ve formě vektoru. Periodickými okrajovými podmínkami se omezíme na situace, které nám pomohou určit relativní vzdálenosti všech částic v intervalu $[\,0, L\lambda\,]$. Z matice relativních vzdáleností částic vytvoříme matici, ve které každý člen „i, j“ obsahuje hodnotu rozdílu párových sil částice i s částicí j a částice i s nejbližším fiktivním obrazem částice j. Diagonální část součinu obou matic obsahuje celkové interakční síly podle (2.4). Při využití Euler-Maruyamaovy metody lze časový vývoj vektoru souřadnic s malým, ale konečným časovým krokem dt, zapsat následujícím způsobem:

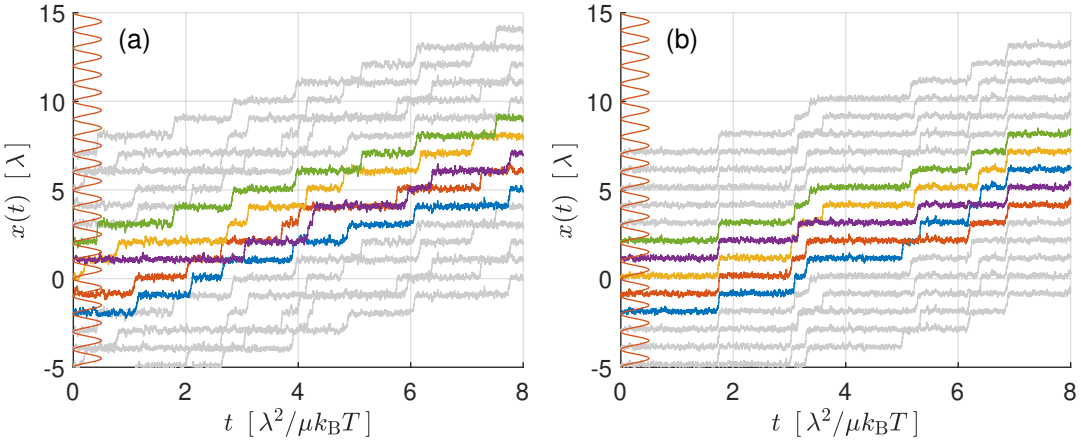
```
nvek = nvek+floor(xvek/L);
xvek = mod(xvek, L);
ten = (transpose(xvek)-xvek);
fiten = inter*(exp(-(((abs(ten)-sigma)/epsi).^2)/2) ...
-exp(-(((L-abs(ten)-sigma)/epsi).^2)/2));
fivek = transpose(diag(sign(ten)*(fiten)));
rnvek = randn(1, ncastic)*sqrt(2*dt);
xvek = xvek +f*dt -fc*sin((2*pi*xvek))*dt +fivek*dt +rnvek;
```

Pro interpretaci některých vlivů byly provedeny simulace pro Brownovské částice s interakcí typu tuhých koulí. Tato interakce vyžaduje specifický přístup, protože její interakční energie je popsána funkcí, která nemá všude definovanou první derivaci. Původní Langevinova diferenční rovnici (1.30) zachováme, ale přidáme podmínku, aby nedocházelo k překrývání ani předbíhání částic. Jejich pohyb je doprovázen srážkami, během jejichž okamžiku dochází k výměně hybnosti a energie. Při zákonu zachování celkové energie a hybnosti to lze v přetlumené Brownovské dynamice identických částic a v časovém intervalu $[t, t + \mathrm{d}t]$ interpretovat jako výměnu okamžitých rychlostí dvou částic v okamžiku jejich srážky. Okamžitá rychlost částice v tomto časovém intervalu je přímo úměrná jejímu posunutí. Srážku částice můžeme interpretovat jako posunutí dvou překrývajících se částic o vzdálenosti rovné jejich překrytí v opačném směru [20], což splňuje námi přidanou podmínku k diferenční rovnici (1.30). Tyto korekce posunutí částic lze zjednodušit jejich relativními vzdálenostmi. Vzhledem k linearitě problému není během časového kroku dt podstatné, v jakém pořadí se budou korekce posunutí částic provádět do doby splnění podmínky. Pro tento typ interakcí lze časový vývoj zapsat následujícím postupem:

```
rvek = [xvek(2:end), L+xvek(1)]-xvek-sigma;
rnvek = randn(1, ncastic)*sqrt(2*dt);
dvek = f*dt -fc*sin((2*pi*xvek))*dt +rnvek;
drvek = dvek-[dvek(2:end), dvek(1)];
while any(rvek < drvek)
    for i = 1:(ncastic-1)
        if rvek(i) < drvek(i)
            j = i+1;
            dvek([i,j]) = [1, -1]*rvek(i)+dvek([j,i]);
```

```
        end
    end
    if rvek(end) < drvek(end)
        dvek([ncastic,1]) = [1, -1]*rvek(ncastic)+dvek([1,ncastic]);
    end
    drvek = dvek-[dvek(2:end), dvek(1)];
end
xvek = xvek +dvek;
```

Simulace následujících výsledků, nebude-li uvedeno jinak, byly provedeny v sytému s hustotou $\rho = 1\ \lambda^{-1}$, s výškou interakčního potenciálu $V_0 = 1\ k_\mathrm{B}T$ a výškou periodického potenciálu $U_0 = 6\ k_\mathrm{B}T$ s časovým krokem d$t = 10^{-3}\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$ a ověřením, že tento krok je dostatečný pro přesné výsledky. Střední hodnoty jsou určovány z 2.10^4 opakovaní a doba simulace Brownovské dynamiky odpovídá času $t = 20\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$.

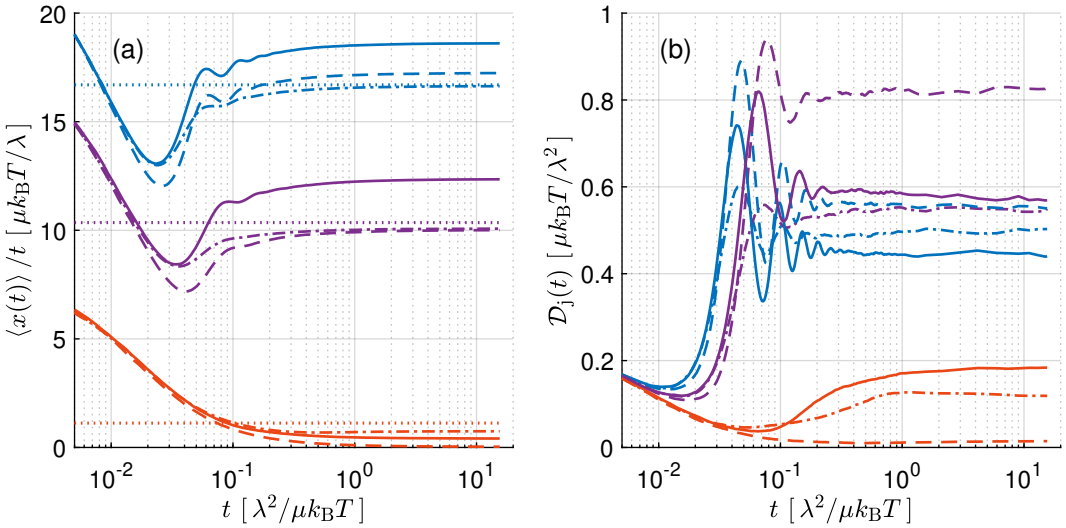


Obrázek 2.2: Trajektorie Brownovských částic se znázorněnými fiktivními částicemi (šedé trajektorie). Panel (a): částice s interakčním parametrem $\varepsilon = 0.25$ a driftovou silou $f = 8\ k_\mathrm{B}T/\lambda$. Panel (b): částice s interakčním parametrem $\varepsilon = 0.1$ a driftovou silou $f = 14\ k_\mathrm{B}T/\lambda$. Periodický potenciál (oranžová křivka). Šířka částic je $\sigma = 0.8\ \lambda$. Velikost tohoto systému je $N = 5$, $L = 5$.

2.3 Diskuze výsledků

Narozdíl od Brownovských částic s interakcí typu tuhých koulí [21] je dynamika systému Brownovských částic s interakčním potenciálem $V^{\mathrm{int}}(r)$ ovlivněna schopností se předbíhat, kterou ilustruje obrázek 2.2. Interakce s parametrem měkkosti $\varepsilon = 0.1$ [panel (b)] (o Brownovské částici s tímto parametrem budeme hovořit jako o tvrdé částici) má podobný vliv na jejich dynamiku, jako interakce typu tuhých koulí, což je zapříčiněno nejen strmostí, ale také výškou skutečného interakčního potenciálu. Pohyb těchto Brownovských částic pak na některých časových úsecích, jako v časech $t \approx 1.7\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$ a $t \approx 6.8\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$ v panelu (b), připomíná pohyb jediného souboru [22] , který je typický pro model tuhých koulí. Interakční potenciál s parametrem měkkosti $\varepsilon = 0.25$ (o Brownovské částici s tímto parametrem budeme hovořit jako o měkké částici) a se šířkou částice $\sigma = 0.8\ \lambda$ se výrazně neprojevuje. Jak znázorňuje obrázek 2.2 [panel (a)], částice se bez problémů předbíhají, vykazují přeskoky nezávisle na sobě a některé po jistou dobu setrvávají ve společné jámě. Trajektorie individuální částice tohoto souboru připomíná trajektorii neinteragující částice v obrázku 1.2 [panel (c)] z podkapitoly 1.4. Za stejných podmínek o tažné síle $f = 8\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ můžeme vidět podobný časový vývoj. Naproti tomu tvrdé částice s průměrem $\sigma = 0.8\ \lambda$ [panel (b)] dosahují obdobné rychlosti při vnější síle $f = 14\ k_\mathrm{B}T/\lambda$. To je výrazný rozdíl oproti situaci v podkapitole 1.4, kde ustálená rychlost dosahovala téměř pětinásobné hodnoty. To je příčinou blokovacího efektu, který se projevuje u takto velkých částic, což bude přesněji diskutováno níže.

Během relaxace do stacionárního stavu prochází dynamika částic několika režimy. Tyto režimy závisí jak na počáteční podmínce, tak na velikosti systému a velikosti poháněcí síly. V této přetlumené Brownovské dynamice se počáteční podmínka vztahuje na polohy částic. Obrázek 2.3 ukazuje časový vývoj průměrné střední hodnoty rychlosti částice, respektive proudu, [panel (a)] a fluktuací proudu $\mathcal{D}_\mathrm{j}(t)$ [panel (b)]. Jedná se o situaci s počtem částic $N = 4$, jejichž počáteční

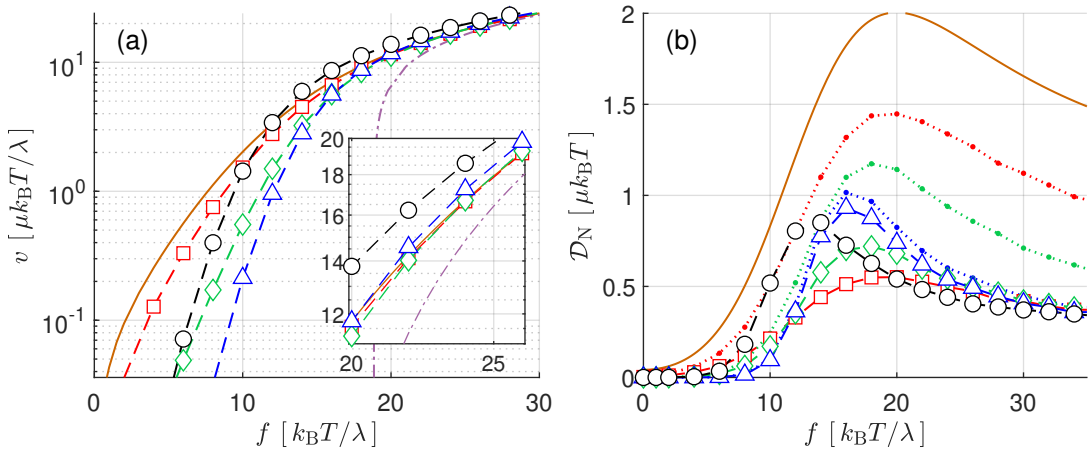


Obrázek 2.3: Panel (a): časový vývoj střední hodnoty průměrné rychlosti Brownovských částic. Velikost systému s počtem potenciálových minim $L = 4$ a s počtem částic $N = 4$ o šířce $\sigma = 0.7\ \lambda$ s počáteční polohou v potenciálové jámě. Částice mají interakční potenciál $V^{\mathrm{int}}(r)$ definován v rovnici 2.1 s parametry $\varepsilon = 0.25$ (čerchovaná), $\varepsilon = 0.10$ (čárkovaná), interakci typu tuhých koulí (plná) a neinteragující částice (tečkovaná). Vnější síla o velikosti $f = 8\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ (červená), $f = f_\mathrm{c}$ (fialová), $f = 24\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ (modrá). Panel (b): časový vývoj fluktuace proudu relaxující ke stacionárním hodnotám ze stejných simulací.

polohy jsou umístěny do potenciálových minim vnějšího periodického potenciálu $U(x)$. Jak jsme mohli vidět v hustotě pravděpodobnostního rozdělení jedné částice na obrázku 1.3 [panel (d)], je nejpravděpodobnější konfigurace neinteragující částice vychýlena od minima $U(x)$ ve směru síly, kde v případě $f < f_\mathrm{c}$ je tato nejpravděpodobnější konfigurace v minimu zobecněného potenciálu $V(x)$. Předchozí počáteční podmínka zaručuje, že vliv periodického potenciálu se projeví až po „několika krocích“. To má za následek, že počáteční rychlost je způsobena výhradně vnějším driftem f kterému se rovnají i rychlosti s $t \to 0$. V krátkém časovém úseku pak tato rychlost náhlé klesá vlivem vnějšího potenciálu, s následující relaxaci do ustálených hodnot. Tento pokles je zaznamenán i pro fluktuaci proudu, jehož hodnoty s $t \to 0$ odpovídají D/N.

Jak bylo nastíněno v podkapitole 1.4, tak v případě malé vnější síly $f = 4\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ je doba relaxace pravděpodobnostního rozdělení do stavu, kdy obálku lze charakterizovat Gaussovským rozdělením, podstatně delší než v případech, kdy má tato síla vyšší hodnotu $f = 14\ k_\mathrm{B}T/\lambda$. Podobná situace je vidět na obrázku 2.3 [panel (b)]. Doba relaxace fluktuací proudu v případě podkritické síly ($f = 8\ k_\mathrm{B}T/\lambda$) $t \approx 1\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$ je větší, než v případech kritické a nadkritické síly ($f = 24\ k_\mathrm{B}T/\lambda$) $t \approx 0.2\ \lambda^2/\mu k_\mathrm{B}T$. S vyšší hodnotou síly f se objevují tlumené výkyvy fluktuací proudu [panel (b)]. Tyto výkyvy jsou viditelné i pro průměrné rychlosti v panelu (a). Je pozoruhodné, že tyto výkyvy, které jsou spojeny s periodickým potenciálem se více projevují pro větší tažnou sílu f. I přesto, že výkyvy s rostoucí silou f se vyskytují dříve, bylo pozorováno, že doba, kdy lze systém považovat za stacionární, se nemění.

Obrázek 2.4 [panel (a)] ilustruje závislost ustálené rychlosti Brownovských

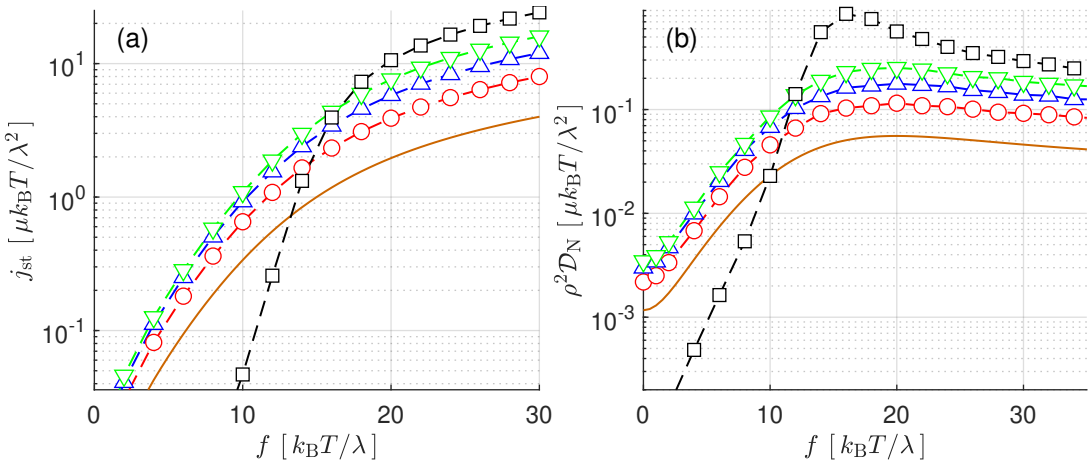


Obrázek 2.4: Panel (a): závislost ustálené rychlosti v Brownovských částic na velikosti tažné síly f pro různé parametry tvrdosti. Velikost systému $L = 4$ s počtem částic $N = 4$ o šířce $\sigma = 0.7\ \lambda$. Analytické řešení neinteragujících částic (1.18) (oranžová křivka) a deterministický případ (1.25) (fialová čerchovaná). Částice s interakčním potenciálem $V^{\mathrm{int}}(r)$ s parametry $\varepsilon = 0.25$ (červená čárkovaná), $\varepsilon = 0.15$ (zelená), $\varepsilon = 0.25$ (modrá). Částice s interakcí typu tuhých koulí (černá čárkovaná). Panel (b): závislost difuzního koeficientu souboru $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$ na velikosti tažné síly f ze stejných simulací a analytického řešení neinteragujících částic (1.28) (oranžová křivka). Závislost difuzního koeficientu $\mathcal{D}$ jedné vybrané částice na velikosti tažné síly f pro stejné parametry interakce (tečkovaná).

částic o šířce $\sigma = 0.7\ \lambda$ na velikosti tažné síly f. Velikost systému v tomto případě je $N = 4$ částicích s $L = 4$. Na obrázku můžeme vidět specifické rozdíly této závislosti pro částice s různou „tvrdostí“. Pozorujeme, že rychlost pro Brownovské částice s interakcí typu tuhých koulí (černá) roste hodnota rychlosti v závislosti na síle mnohem rychleji, než pro částice s interakcí 2.1 s nenulovým parametrem ε a pro neinteragující částice. Stejné rozdíly jsou vidět i mezi tvrdými a měkkými částicemi, kde rychlosti částic s menším parametrem měkkosti ε rostou od určité hodnoty síly rychleji. Pro velice malé síly toto nemůže platit, protože střední hodnota rychlosti pro nulovou sílu je nulová.

Vysoká pohyblivost má za následek, že pro sílu $f = 8\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$ jsou částice s interakcí typu tuhých koulí rychlejší, než tvrdé částice (modrá) a částice s parametrem $\varepsilon = 0.15$ (zelená), ale pomalejší, než měkké částice (červená). To lze vidět i na obrázku časového vývoje průměrné rychlosti 2.3 [panel (a)]. Pro tažnou sílu větší než $f \simeq 12 k_{\mathrm{B}}T/\lambda$ dosahuje rychlost částic s interakcí tuhých koulí vyšší hodnoty, než pro neinteragující částice. Totéž lze pozorovat i u částic s parametrem $\varepsilon = 0.1$ pro hodnoty sil větší než $f = 20\, k_{\mathrm{B}}T/\lambda$, což opět koreluje s ilustrací na obrázku 2.3 [panel (a)], a u částic s parametrem $\varepsilon = 0.15$ pro hodnoty sil větší, než $f \simeq 24 k_{\mathrm{B}}T/\lambda$ [vložka v panelu (a)]. Dalo by se říci, že pro každou hodnotu velikosti síly f existuje hodnota parametru ε, pro nějž je rychlost částic minimální a který roste s rostoucí silou.

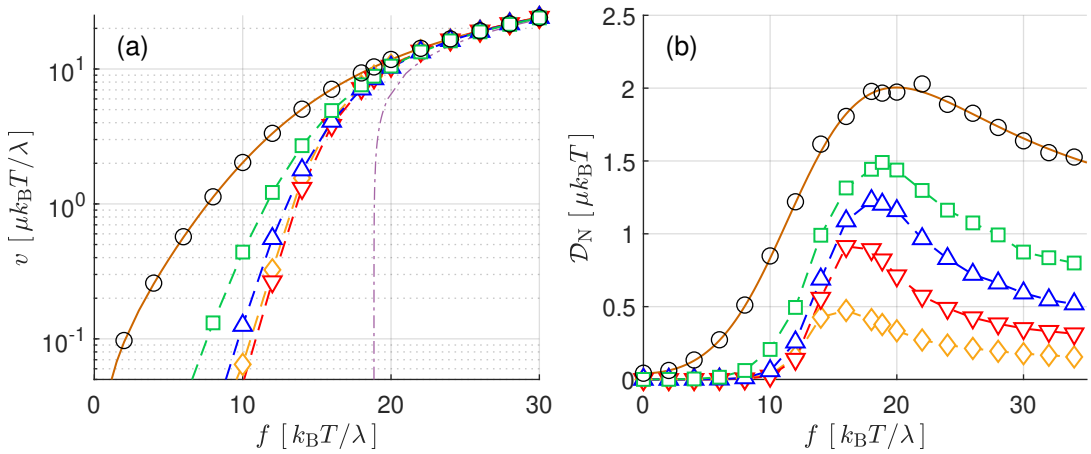
Difuzní koeficient souboru $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$ je nižší než pro neintegrující částice, obrázek 2.3 [panel (b)], což je způsobeno počtem částic, jejichž dynamika je vzájemně omezena. Velká pohyblivost tvrdých částic má souvislost s velkým difuzním koeficientem souboru $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$ [Panel (b)]. Pro hodnoty sil f, kde dochází ke klesající



Obrázek 2.5: Panel (a): stacionární proud $j_{\rm st}$ Brownovských částic v závislosti na velikosti tažné síly f pro různé hodnoty faktoru zaplnění ρ. Velikost systému s počtem potenciálových minim $L = 6$. Analytické řešení jedné částice (oranžová křivka) odpovídá hustotě $\rho = 1/6\ \lambda^{-1}$. Simulace pro $N = 2$ (červená), $N = 3$ (modrá), $N = 4$ (zelená) a $N = 6$ (černá) částic, které mají šířku $\sigma = 0.8\ \lambda$. Interakční potenciál částic má tvar $V^{\rm int}(r)$ s parametrem $\varepsilon = 0.1$. Panel (b) stacionární fluktuace proudu v závislosti na velikosti tažné síly f ze stejných simulací a analytického řešenípro jednu částici (oranžová křivka).

závislosti difuzního koeficientu $\mathcal{D}_{\rm N}$ s rostoucí silou f, tato závislost pro „tvrdší“ částice klesá rychleji. Dynamika pak dosahuje stavu, kde například tvrdé částice méně fluktuují, než částice s parametrem $\varepsilon = 0.15$, a více než měkké částice. Brownovské částice s interakcí typu tuhých koulí jsou charakteristická korelacemi mezi polohami částic, s vlivem na kolektivní dynamiku. To má za následek, že difuzní koeficient celého souboru $\mathcal{D}_{\rm N}$ je totožný s difuzním koeficientem jedné částice $\mathcal{D}$. Částice s vyšším parametrem měkkosti vykazují vetší nezávislost mezi konečnými polohami. Difuzní koeficient jedné částice pak odpovídá vyšším hodnotám [panel (b)].

Jako příklad uvádíme ještě závislost stacionárního proudu a jeho stacionární fluktuace na velikosti tažné síly pro různé faktory zaplnění ρ. Tento příklad je znázorněn na obrázku 2.5 a týká se systému o velikosti $L = 6$. Tyto výsledky jsou pro částice s parametrem měkkosti $\varepsilon = 0.1$ se šířkou $\sigma = 0.8\ \lambda$. Jak můžeme vidět v panelu (a), tak proud roste s počtem částic pro $N = 2$, $N = 3$ a $N = 4$ částice pro takřka libovolnou hodnotu síly f. Tento růst je pro menší hodnoty sil méně výrazný. Při přepočtu na rychlost vztahy (1.16) a (2.9) tato rychlost s počtem částic marginálně klesala. Důvodem je, že je jejich dynamika s počtem částic omezena. To má při těchto hustotách $\rho < 5/6\,\lambda^{-1}$ jen malý význam. Přibližně lineární vztah pro $\rho < 5/6\,\lambda^{-1}$ platí mezi počtem částic N a stacionární fluktuací proudu [panel (b)]. Vydělením stacionární fluktuací proudu počtem částic N se hodnoty téměř shodovaly. Stojí za zmínku, že v takovém případě by difuzní koeficient souboru $\mathcal{D}_{\rm N}$ klesal jako $1/N$. Pro situaci s $N = 6$ (černá křivka) je vidět rapidní pokles proudu $j_{\rm st}$ [panel (a)]. Tento pokles nastává pro velikosti sil f menší, než přibližná velikost kritické síly $f_{\rm c}$. Při této hustotě ρ dochází k posílení vzájemnému blokování částic v potenciálových jámách. V oblasti sil na obrázku 2.11 [panel (a)], jejíchž hodnota je větší než $f_{\rm c}$, odpovídá hodnota



Obrázek 2.6: Panel (a): závislost ustálené rychlosti v Brownovských částic na velikosti tažné síly f pro různé velikosti systému L a počtu Brownovských částic $N = L$. Analytické řešení neinteragujících částic (1.18) (oranžová křivka), deterministický případ (1.25) (fialová čerchovaná). Velikosti systému $L = 1$ (černé kruhy). Částice o šířce $\sigma = 0.6\ \lambda$ s interakcí vyhlazené obdélníkové bariéry $V^{\mathrm{int}}(r)$ s parametrem $\varepsilon = 0.1$ v systému $L = 2$ (zelená čárkovaná), $L = 3$ (modrá čárkovaná), $L = 5$ (červená čárkovaná), $L = 10$ (žlutá čárkovaná). Panel (b): závislost difuzního koeficientu souboru $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$ na velikosti tažné síly f ze stejných simulací a analytického řešení neinteragujících částic (1.28) (oranžová křivka).

proudu podobnému zvýšení, jako pro $\rho < 5/6\,\lambda^{-1}$. Pro tyto hodnoty neobsahuje zobecněný potenciál $V(x)$ potenciálové jámy, ve kterých by se částice zdržovaly a vzájemně se tím blokovaly. Stejná příčina bude zodpovědná i za pokles fluktuací proudu pro $f \ll f_{\mathrm{c}}$ v panelu (b). V oblasti kritické síly $f \approx f_{\mathrm{c}}$ dochází k zjevnému růstu fluktuací, a tedy i difuznímu koeficientu. Ve skutečnosti je difuzní koeficient souboru $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$ menší, než difuzní koeficient neinteragujících částic $\mathcal{D}$. Tato změna chování je také důvodem, proč nás budou zajímat systémy s $\rho = 1\ \lambda^{-1}$

Vliv velikosti systému na závislost rychlosti částic na síle f ilustruje obrázek 2.6 [panel (a)]. Zatímco s rostoucím počtem částic pro $N = 1$, $N = 2$, $N = 3$ a $N = 5$ klesá rychlost, tak pro systém o velikosti $N = 10$ vzrostla oproti systému s $N = 5$. Podrobněji je to zkoumáno dále pro tři charakteristické velikosti sil (podkritická, kritická a nadkritická), se dvěma parametry měkkosti ε a interakcí typu tuhých koulí. Obrázek 2.6 [panel (b)] zobrazuje závislost difuzního koeficientu souboru $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$ na síle. S rostoucím počtem částic tato závislost klesá.

2.3.1 Částice s interakcí typu tuhých koulí

Obrázek 2.7 ilustruje ustálené rychlosti v v závislosti na počtu částic N a jejich šířce σ. Tažná síla má v tomto případě podkritickou hodnotu $f = 8\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$. Panely (b) a (c) ukazují dva dominantní efekty. Pro malé částice, malé hodnoty σ, dominuje efekt snížení bariéry [8]. To způsobuje zvýšení rychlostí oproti referenční hodnotě pro neinteragující částice (červená). Pro $N = 2$ [panel (b)] je tento efekt slabší než pro $N = 5$ [panel (c)]. S rostoucí šířkou σ se, od určité hodnoty této šířky [$\sigma \simeq 0.3\ \lambda$ pro panel (b) a $\sigma \simeq 0.4\ \lambda$ pro panel (c)], rychlost částic snižuje. Pro velké hodnoty σ začíná převládat blokování částic, což se projevuje

snížením rychlosti oproti referenční hodnotě. V souvislosti s obrázkem 2.7 [panel (a)] můžeme vidět, že pro systémy s větším počtem částic N mají oba zmíněné efekty větší vliv na změnu rychlosti. Současně se ale blokování uplatňuje v menší míře a převládá tak pro částice s větší šířkou σ. Panel (a) ukazuje, že pak vznikají zajímavé závislosti ve vztahu v—N, kde pro jisté šířky částic σ má rychlost nejprve klesající charakter (blokování pro malý počet částic převládá) s následným růstem. Fitováním závislostí na počtu částic přineslo zjištění, že rychlost konverguje s jistou přesností exponenciálně rychle, i pro menší počet částic, než se kterým nastává transport zprostředkovaný defektem [12]. Exponenciální charakter měla každá křivka od jistého počtu částic [panel (b)] s $0 < \sigma < 1$. Pro hodnoty $\sigma = 0.3\ \lambda$ a $\sigma = 0.4\ \lambda$ můžeme vidět rozdílnou konvergenci.

Pro případ kritické síly $f = f_\mathrm{c}$, viz obrázek 2.9, je tato rychlost konvergence k hodnotám v termodynamické limitě mnohem rychlejší. Fitováním závislosti v panelu (a) se v tomto systému nedařil potvrdit exponenciální charakter. Rychlost konvergence způsobuje, že kolem $N = 12$ [panel (c)] naznačuje velikost hodnot v termodynamické limitě. Na rozdíl od $f = 8\ k_\mathrm{B}T/\lambda$, se v tomto zobecněném potenciálu nenachází minima, blokování částic začíná mít trochu jiný význam a transport zprostředkovaný defektem ztrácí význam. Jak je znázorněno v tomto obrázku v panelu (a), nastává viditelný rozdíl mezi částicemi o šířce $\sigma = 0.95\ \lambda$ a teoretickou limitou $\sigma \to 1$. Stejně tak maximální rychlosti odpovídají vyšší šířce částic $\sigma = 0.5\ \lambda$.

Třetí případ v situaci nakritické síly $f = 24\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ se chová podobným způsobem, viz obrázek 2.11. Maximální rychlosti odpovídají parametru šířky částic $\sigma = 0.5\ \lambda$ a rychlost konvergence způsobuje, že kolem $N = 12$ můžeme odhadnout některé hodnoty v termodynamické limitě.

Difuzní koeficient má pro podkritickou sílu $f = 8\ k_\mathrm{B}T/\lambda$ zajímavé závislosti vzhledem k velikosti systému. Jak ukazuje obrázek 2.8 [panel (a)], tak difuzní koeficient $\mathcal{D}_\mathrm{N}$ má tendenci klesat s rostoucím počtem částic. Přesto vidíme, že například pro $N = 2$ a o šířce těchto částic $\sigma = 0.4\ \lambda$ [panel (b)] dosahuje difuzní koeficient $\mathcal{D}_\mathrm{N}$ vyšší hodnoty, než difuzní koeficient neinteragujících částic. Závislost difuzního koeficientu na šířce σ vykazuje analogický růst a následný pokles [panely (b) a (c)], jako v případě rychlosti v. Závislost $\mathcal{D}_\mathrm{N}$ na velikosti systému, tj. počtu částic N [panel (a)] má také analogické chování s přidanou tendencí klesat. Například pro $\sigma = 0.7\ \lambda$ difuzní koeficient nejprve klesá, poté roste a následně opět klesá.

V případě kritické síly f_c nemá závislost difuzního koeficientu na šířce σ tento typ chování, viz obrázek 2.10 [panely (b) a (c)]. Difuzní koeficient $\mathcal{D}_\mathrm{N}$ pro částice se šířkou $\sigma \to 1$ má pomalejší pokles s velikostí systému, než pro částice s $\sigma = 0.8\ \lambda \to 0$ [panel (a)]. Totéž chování lze vidět i pro nadkritickou sílu $f = 24\ k_\mathrm{B}T/\lambda$

2.3.2 Částice s interakcí vyhlazené obdélníkové bariéry

V této části podíváme na částice s interakcí vyhlazené obdélníkové bariéry a shrneme rozdíly. Na všech obrázcích v panelech (b) lze vidět vývoj pro dvě částice. V případě velikosti $\sigma = 1\ \lambda$ dochází k vyrušení interakčního potenciálu způsobenému periodickými okrajovými podmínkami a částice se chovají jako neinteragující.

Efekty způsobené schopností částic se předbíhat se na ustálené rychlosti v

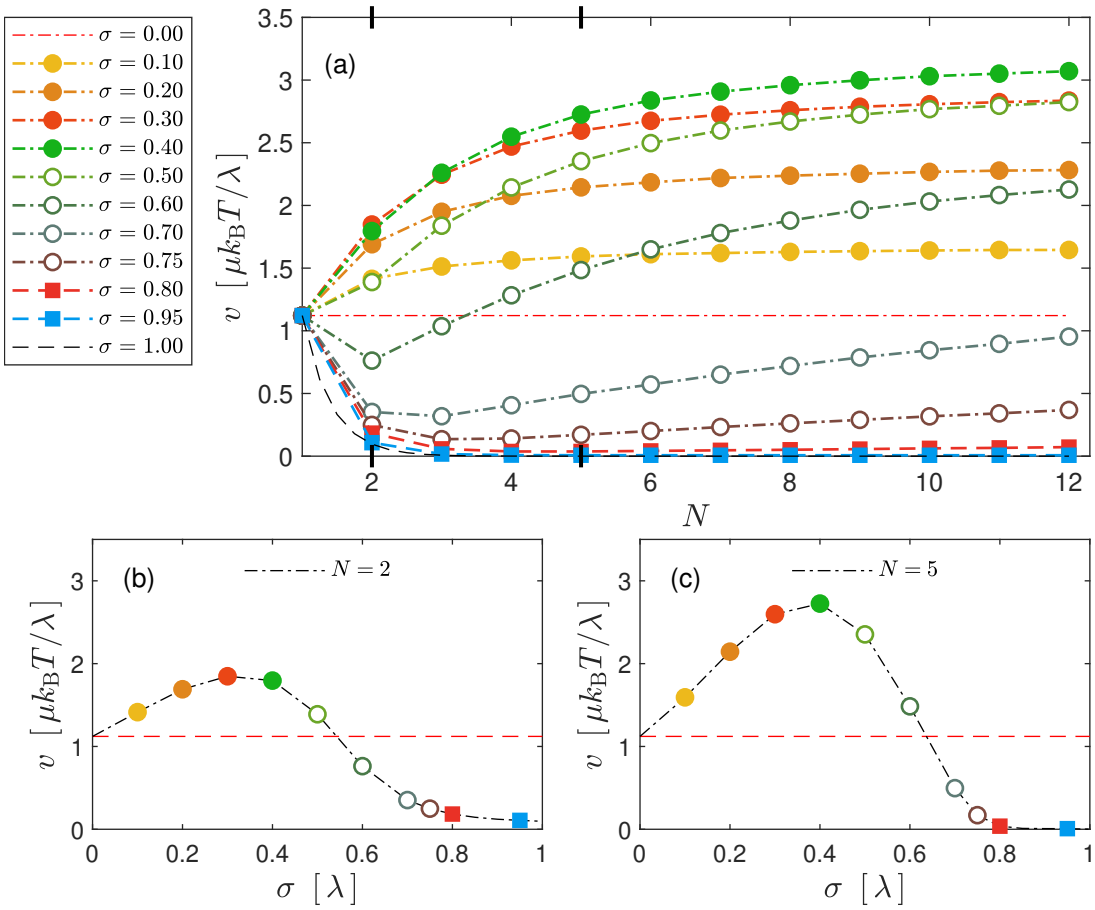
projevují zejména pro velké částice. Jak ilustruje obrázek 2.13 pro situaci s podkritickou tažnou silu $f = 8\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$ a interakčním parametrem $\varepsilon = 0.1$, tak pro částice se šířkou $\sigma < 0.85\,\lambda$ je chování podobné případu tuhých koulí. Vidíme pomalou konvergenci rychlostí v k hodnotám v termodynamické limitě, efekt snížení potenciálové bariéry i blokování. Tvar interakčního potenciálu 2.1 má slabé působení i na delší vzdálenosti, než je šířka částic σ. To má za následek, že závislost rychlosti v na této šířce [panely (b) i (c)] se zdá být „posunuta“ oproti případu částic s interakcí typu tuhých koulí. To se projevuje i v termodynamické limitě[9]. Pro případ $\sigma > 0.85\,\lambda$ dochází k výraznému zvýšení rychlosti. Závislost rychlosti v na velikosti systému má atypické chování, které se projevuje výkyvy pro specifické počty částic N. V porovnání se situací s kritickou silou f_{c}, obrázek 2.16, a nadkritickou silou $f = 24\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$, obrázek 2.19, se stejným interakčním parametrem, je vidět, že tyto výkyvy se vyskytují pro takřka stejné hodnoty N. To znamená, že například maximální rychlost pro částice o velikosti $\sigma = 0.95\ \lambda$ se odehrává při $N = 6$. Pro vyšší hodnotu tažné síly, tedy například pro $f = 24\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$, obrázek 2.19, se zvýšení rychlosti v viditelně projevuje i pro částice se šířkou $\sigma = 0.85\ \lambda$.

Obrázek 2.14 ilustruje závislost difuzního koeficientu souboru $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$ na počtu částic N [panel (a)], v případě podkritické síly $f = 8\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$. Zde vidíme, že chování většiny křivek je podobné částicím s interakcí typu tuhých koulí. Výjimku tvoří opět částice se šířkou $\sigma > 0.85\,\lambda$.

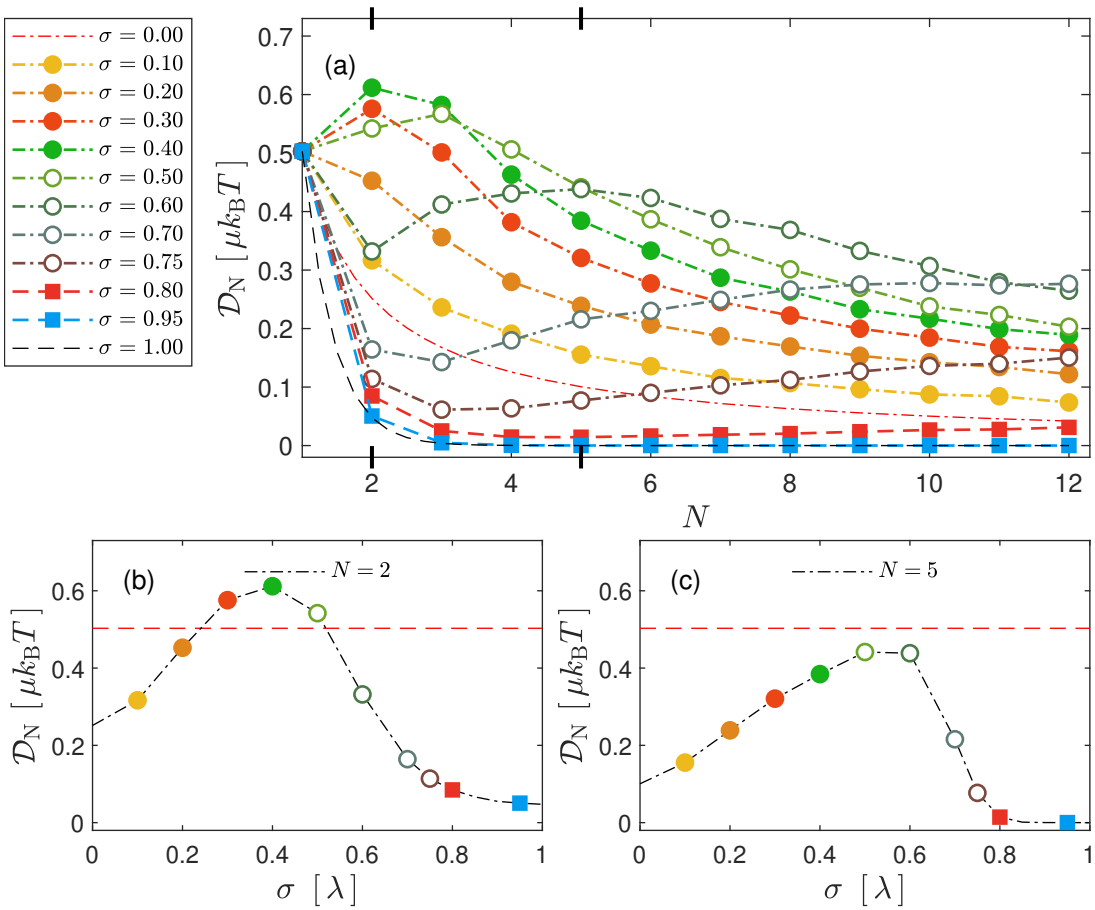
Nezávislé předbíhání způsobuje téměř nulovou vzájemnou korelaci mezi polohami částic, což má za následek viditelný rozdíl mezi difuzní konstantou souboru a difuzní konstantou samostatně pozorované částice. Tento rozdíl můžeme vidět například mezi obrázky 2.14 a 2.15 pro částici s rozměrem $\sigma = 0.95\ \lambda$ pro hodnoty $N = 3$ a $N = 4$, a mezi obrázky 2.17 a 2.18 pro případ kritické síly f_{c}.

Rozdíly závislosti rychlosti v na velikosti systému v případě měkkých částic s parametrem $\varepsilon = 0.25$ a částic s interakcí tuhých koulí, viz obrázek 2.21 pro podkritickou sílu $f = 8\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$, obrázek 2.24 pro kritickou sílu f_{c} a obrázek 2.27 s nadkritickou silou $f = 24\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$ se liší opět zvýšením rychlosti v, pro částice o šířce $\sigma > 0.70\,\lambda$. Rychlost v má pro $N = 3$ anomálně vysokou hodnotu. Příčina bude stejná jako v případě tvrdých částic pro $N = 6$. Tato anomálie nezávisí na velikosti tažné síly a projevuje se i případě difuzní konstanty souboru $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$, obrázek 2.22 respektive difuzní konstanty $\mathcal{D}$, obrázek 2.23. U těchto měkkých částic je vidět rozdíl, který jsme viděli dříve například v obrázku 2.4 [panel (b)], kde jsme porovnávali vliv parametru ε na obě difuzní konstanty. Volnost částic způsobena jejich „měkkostí“ má za následek, že difuzní konstanta jedné částice je dokonce pro šířku částic $\sigma < 0.40\,\lambda$ vyšší, než pro neinteragující částice.

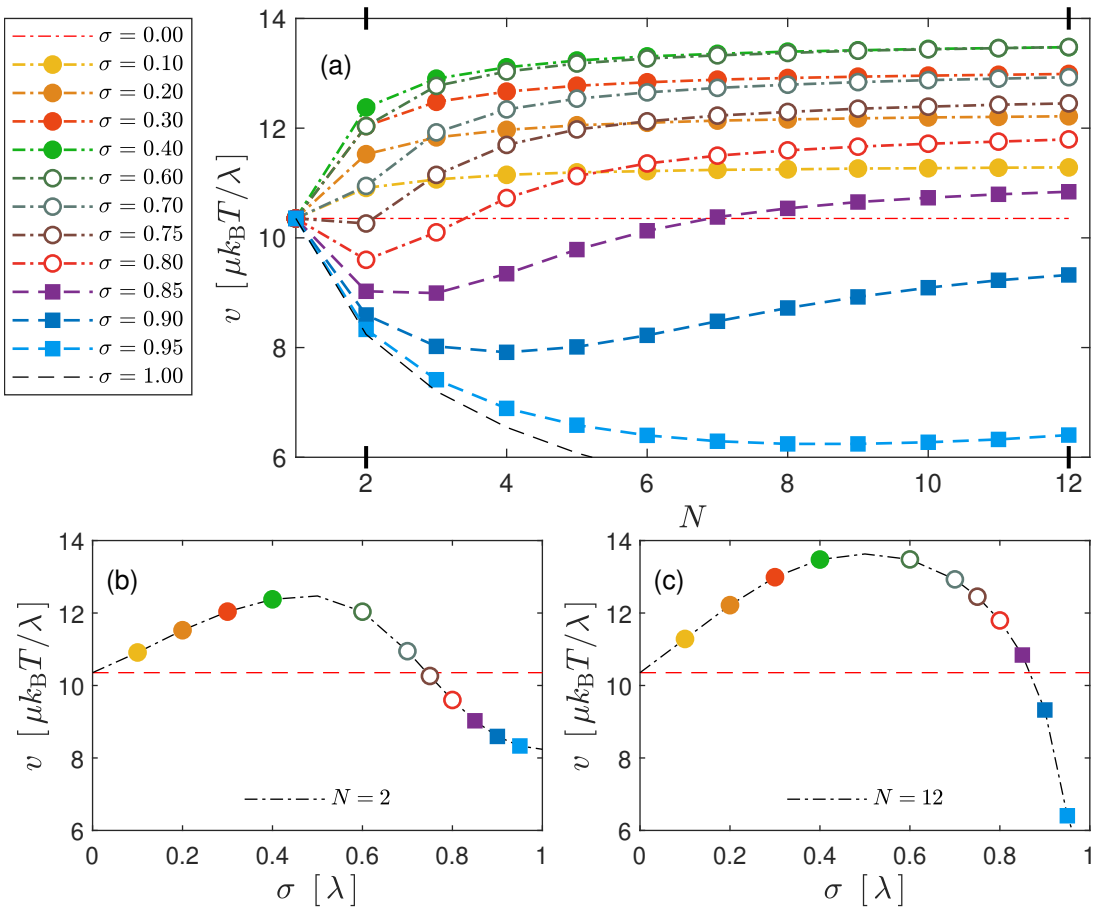
Obrázkem 2.28 poukazujeme na vliv skutečné výšky interakčního potenciálu. V tomto případě na částice s parametrem $\varepsilon = 0.25$ a výškou potenciálu $V_0 = 2\ k_{\mathrm{B}}T$ působí kritická síla f_{c}. Anomální výkyvy pro velké částice se zvýšili speciálně pro $N = 4$. Obdobně Obrázkem 2.29 poukazujeme na vliv interakčního parametru, kde v tomto případě má hodnotu $\varepsilon = 0.15$. Na částici působí kritická síla f_{c}. Rozdíl je patrný v tom, jak velké částice ovlivňuje. Částice s vyšším parametrem ε jsou rychlejší při nižších velikostech, tedy při $\varepsilon = 0.25$ je rychlost částic o šířce $\sigma = 0.8\ \lambda$ vyšší, než pro $\sigma = 0.70\ \lambda$. To by mohlo souviset s větším přesahem interakční energie měkkých částic do sousedních potenciálových jam, jak lze vidět na obrázku 2.1, a podpořit tím jejich vzájemnou pohyblivost, která pro $N = 3$ vykazuje „skok“ v chování jak lze vidět na obrázcích 2.21, 2.22 a 2.23.



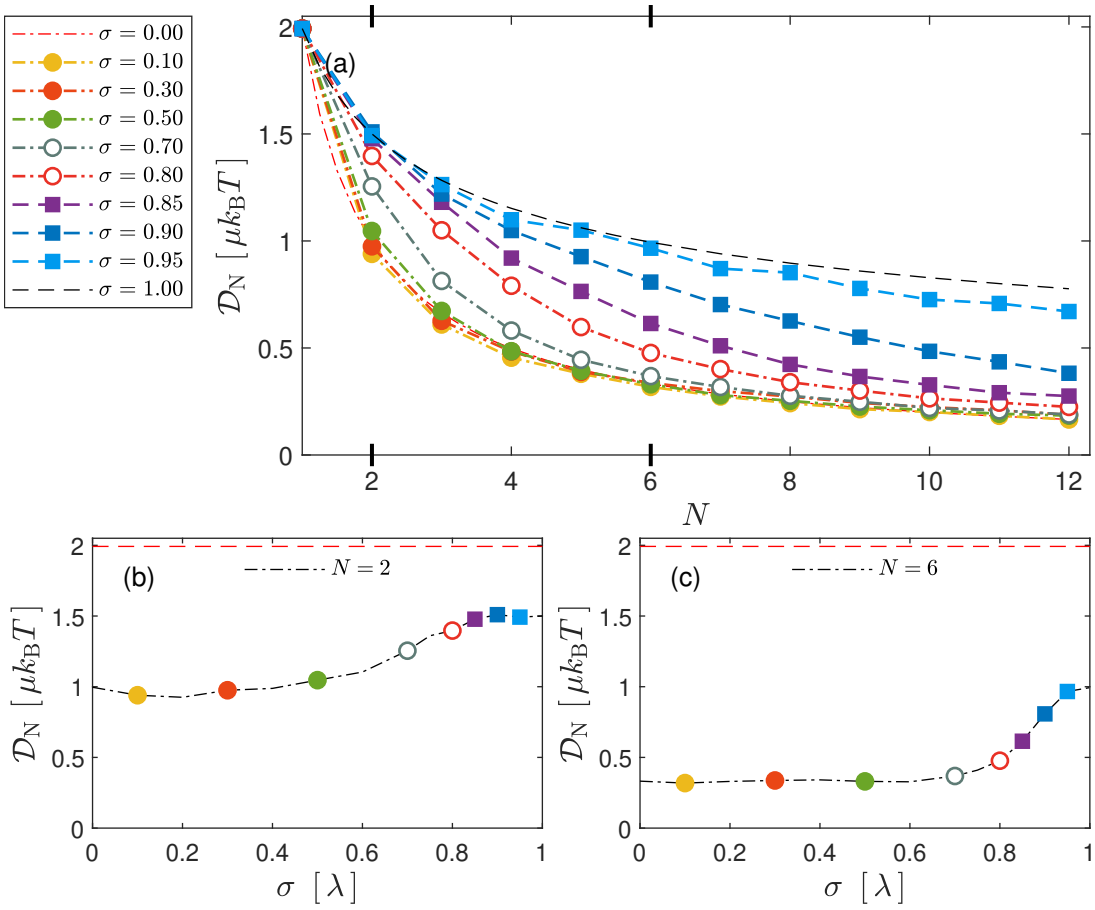
Obrázek 2.7: Panel (a): ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakci typu tuhých koulí. Velikost vnější síly je $f = 8\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$. Panely (b) a (c): ustálená rychlost v (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragující částic.



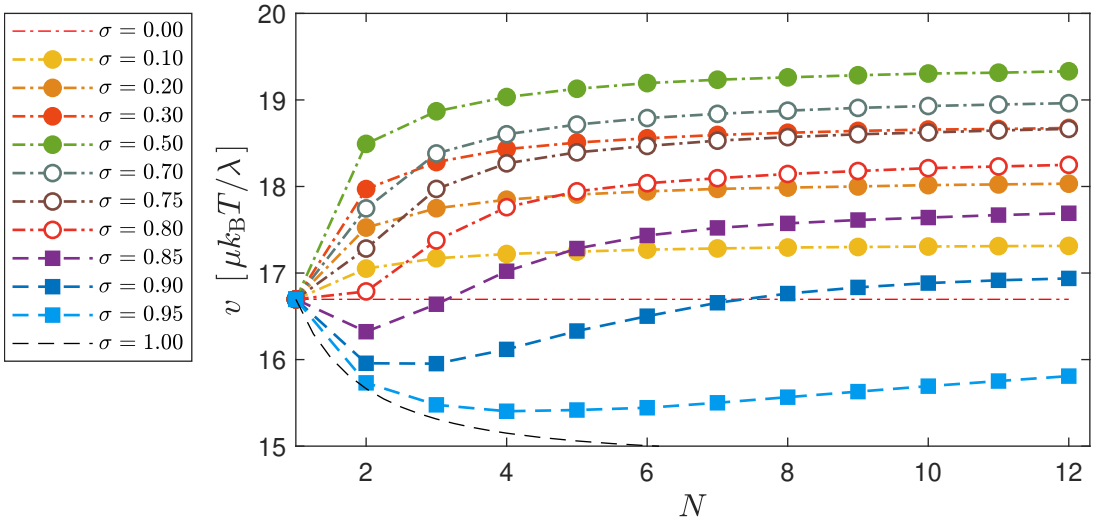
Obrázek 2.8: Panel (a): difuzní koeficient $\mathcal{D}_N$ souboru Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakci typu tuhých koulí. Velikost vnější síly je $f = 8\ k_B T/\lambda$. Panely (b) a (c): difuzní koeficient $\mathcal{D}_N$ (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragující částic.



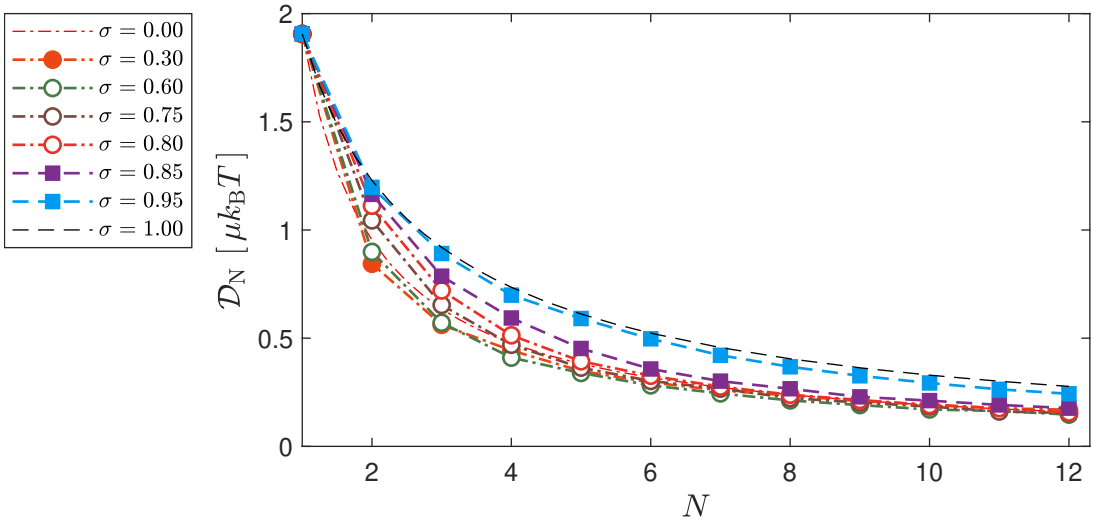
Obrázek 2.9: Panel (a): ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakci typu tuhých koulí. Velikost vnější síly odpovídá hodnotě kritické síly $f = f_c$. Panely (b) a (c): ustálená rychlost v (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragující částic.



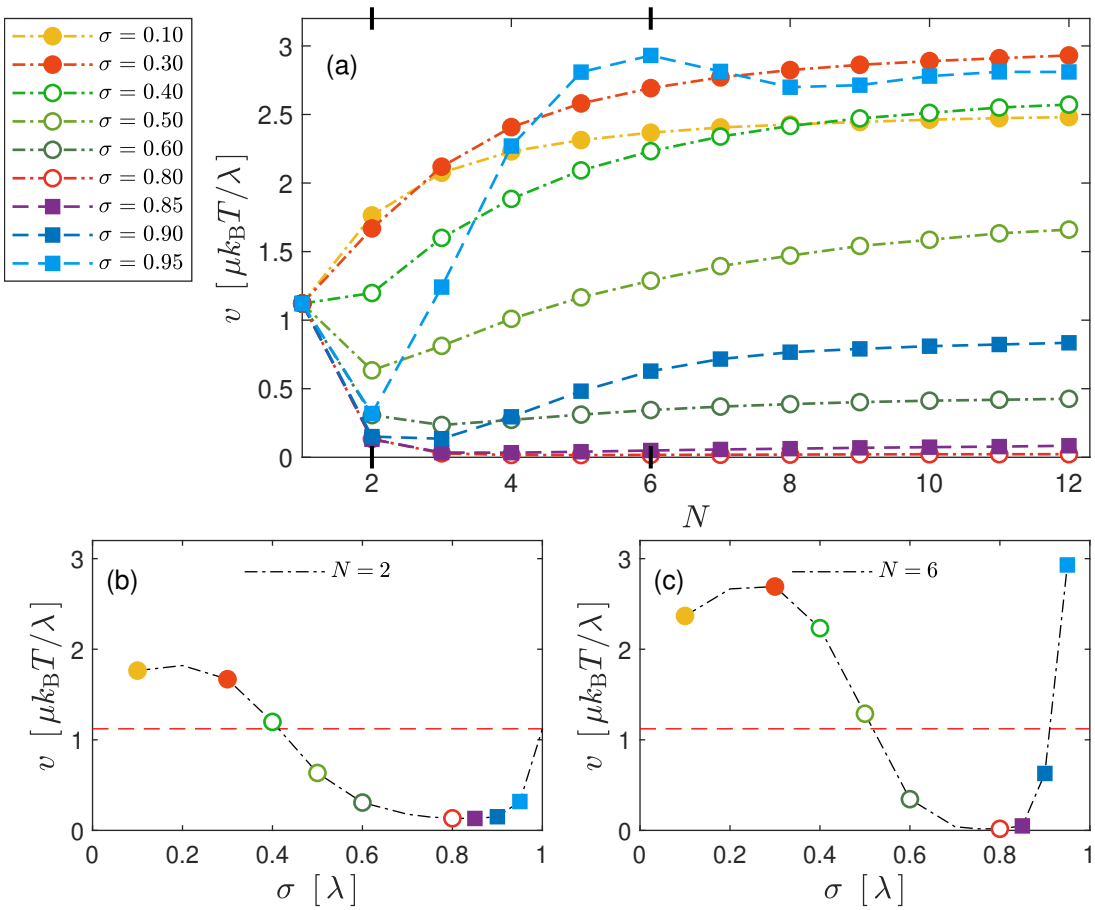
Obrázek 2.10: Panel (a): difuzní koeficient $\mathcal{D}_N$ souboru Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakci typu tuhých koulí. Velikost vnější síly odpovídá hodnotě kritické síly $f = f_c$. Panely (b) a (c): difuzní koeficient $\mathcal{D}_N$ (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragující částic.



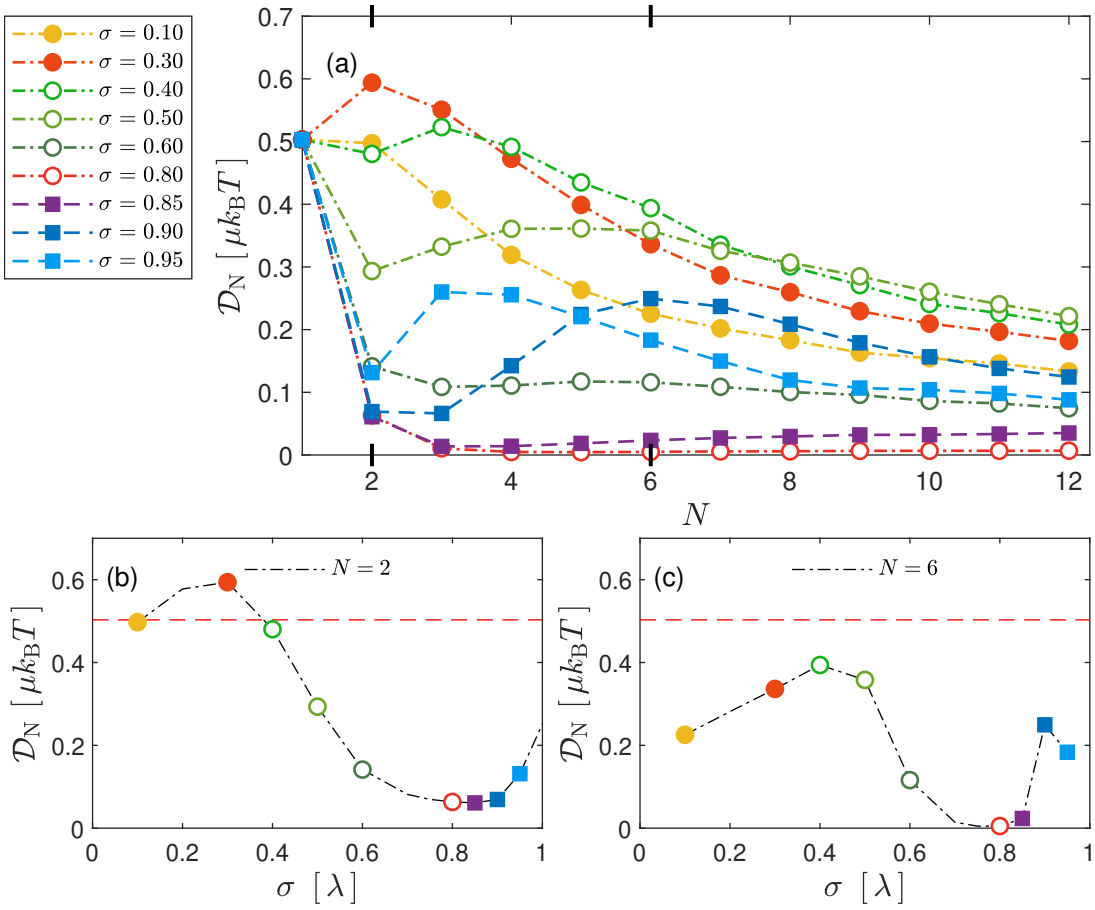
Obrázek 2.11: Ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakci typu tuhých koulí. Velikost vnější síly je $f = 24\ k_\mathrm{B}T/\lambda$.



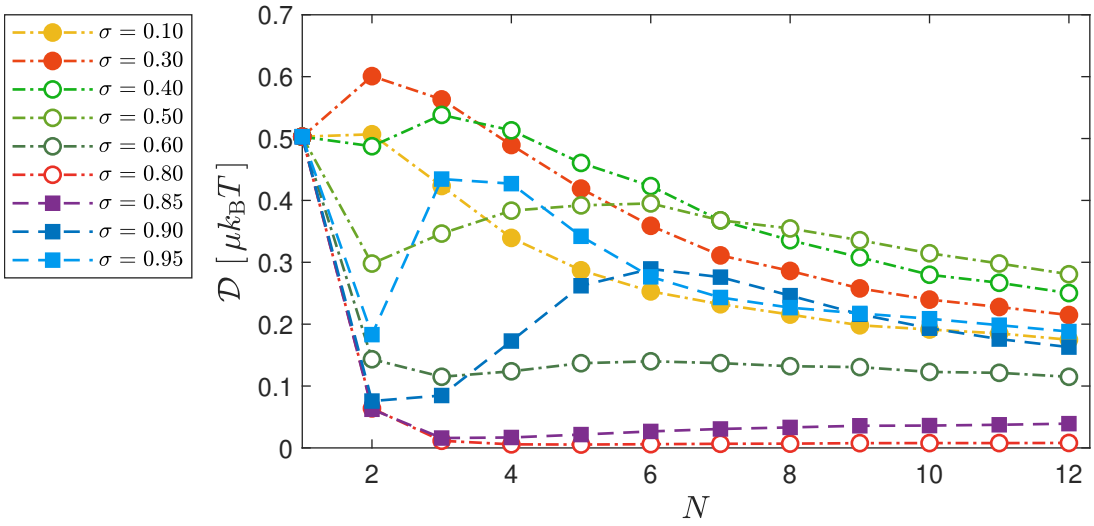
Obrázek 2.12: Difuzní koeficient $\mathcal{D}_\mathrm{N}$ souboru Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakci typu tuhých koulí. Velikost vnější síly je $f = 24\ k_\mathrm{B}T/\lambda$.



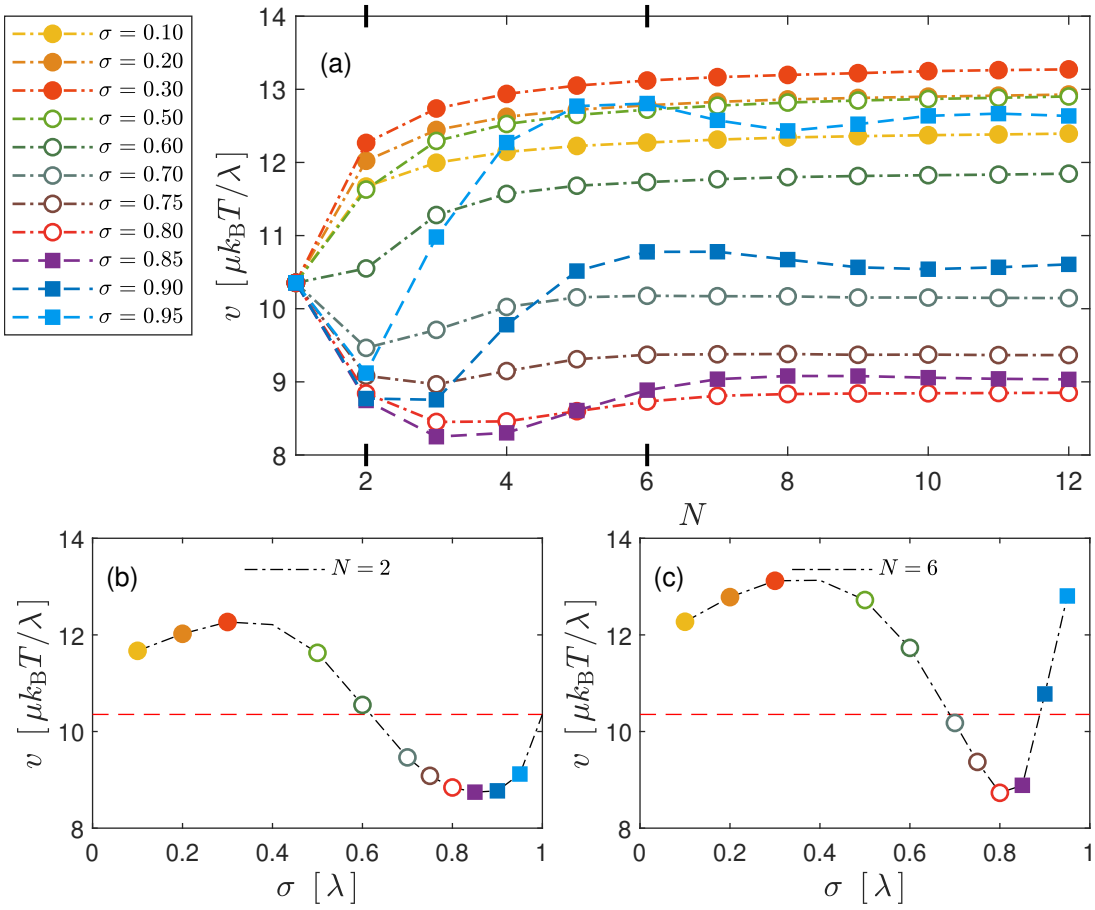
Obrázek 2.13: Panel (a): ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.1$. Velikost vnější síly je $f = 8\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$. Panely (b) a (c): ustálená rychlost v (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragujících částic.



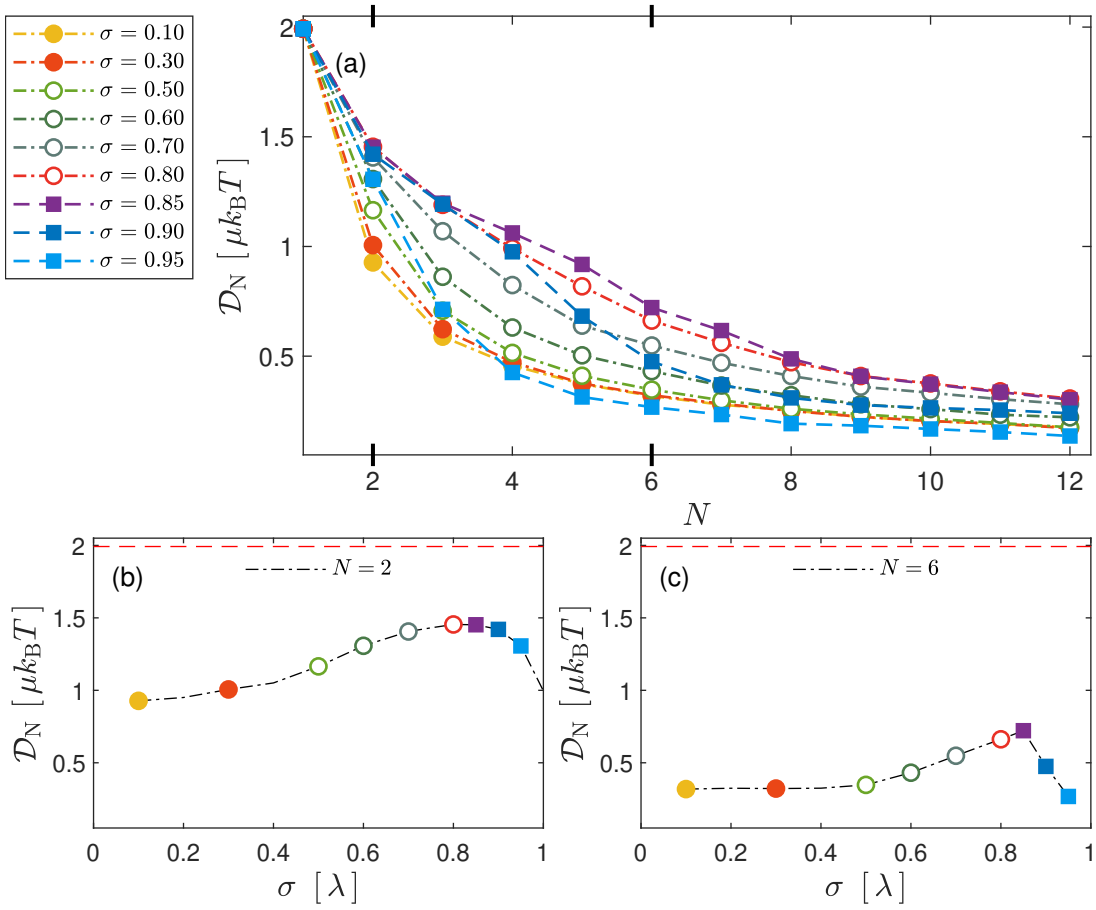
Obrázek 2.14: Panel (a): difuzní koeficient $\mathcal{D}_N$ souboru Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.1$. Velikost vnější síly je $f = 8\ k_B T/\lambda$. Panely (b) a (c): difuzní koeficient $\mathcal{D}_N$ (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragujících částic.



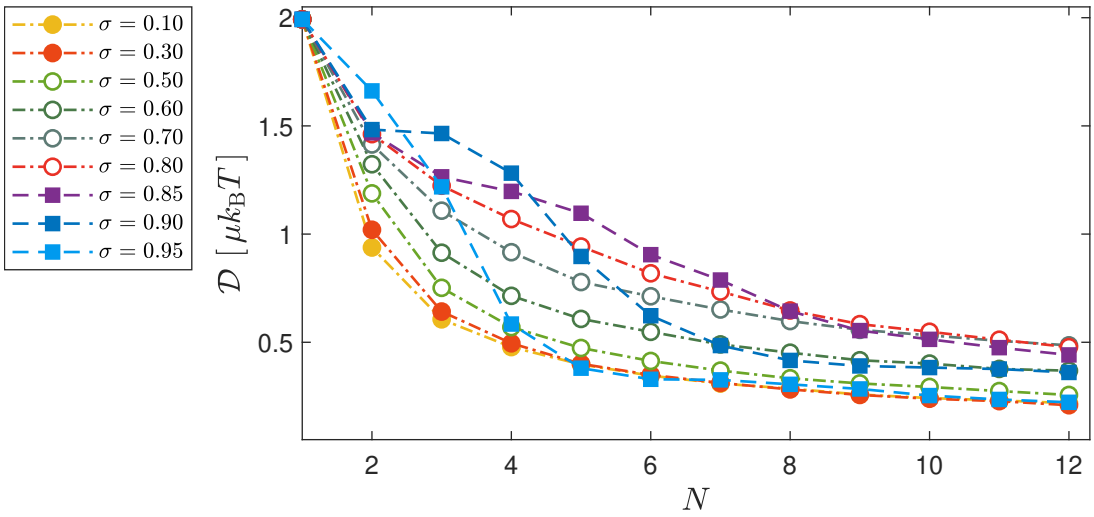
Obrázek 2.15: Difuzní koeficient $\mathcal{D}$ jedné částice v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.1$. Velikost vnější síly je $f = 8\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$.



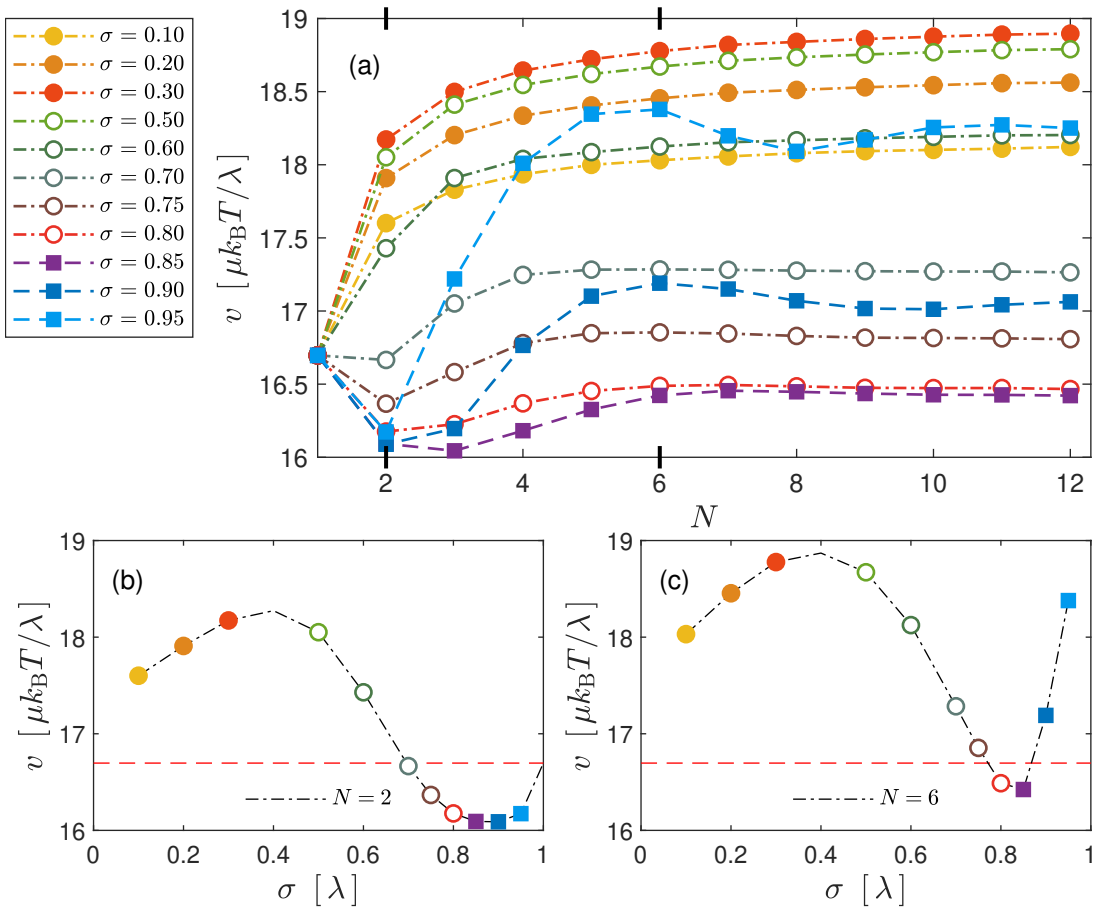
Obrázek 2.16: Panel (a): ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.1$. Velikost vnější síly odpovídá hodnotě kritické síly $f = f_c$. Panely (b) a (c): ustálená rychlost v (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragujících částic.



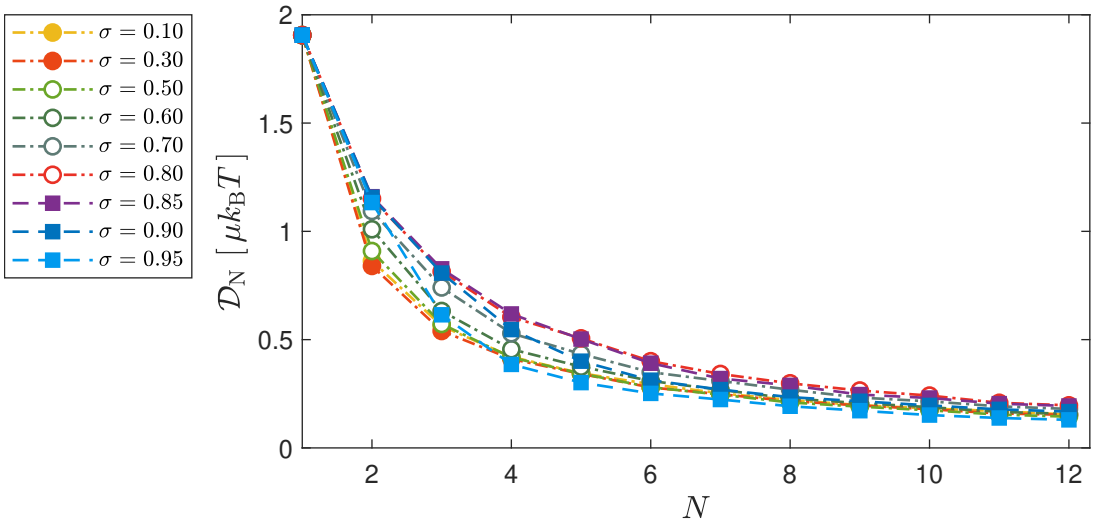
Obrázek 2.17: Panel (a): difuzní koeficient $\mathcal{D}_N$ souboru Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.1$. Velikost vnější síly odpovídá hodnotě kritické síly $f = f_c$. Panely (b) a (c): difuzní koeficient $\mathcal{D}_N$ (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragujících částic.



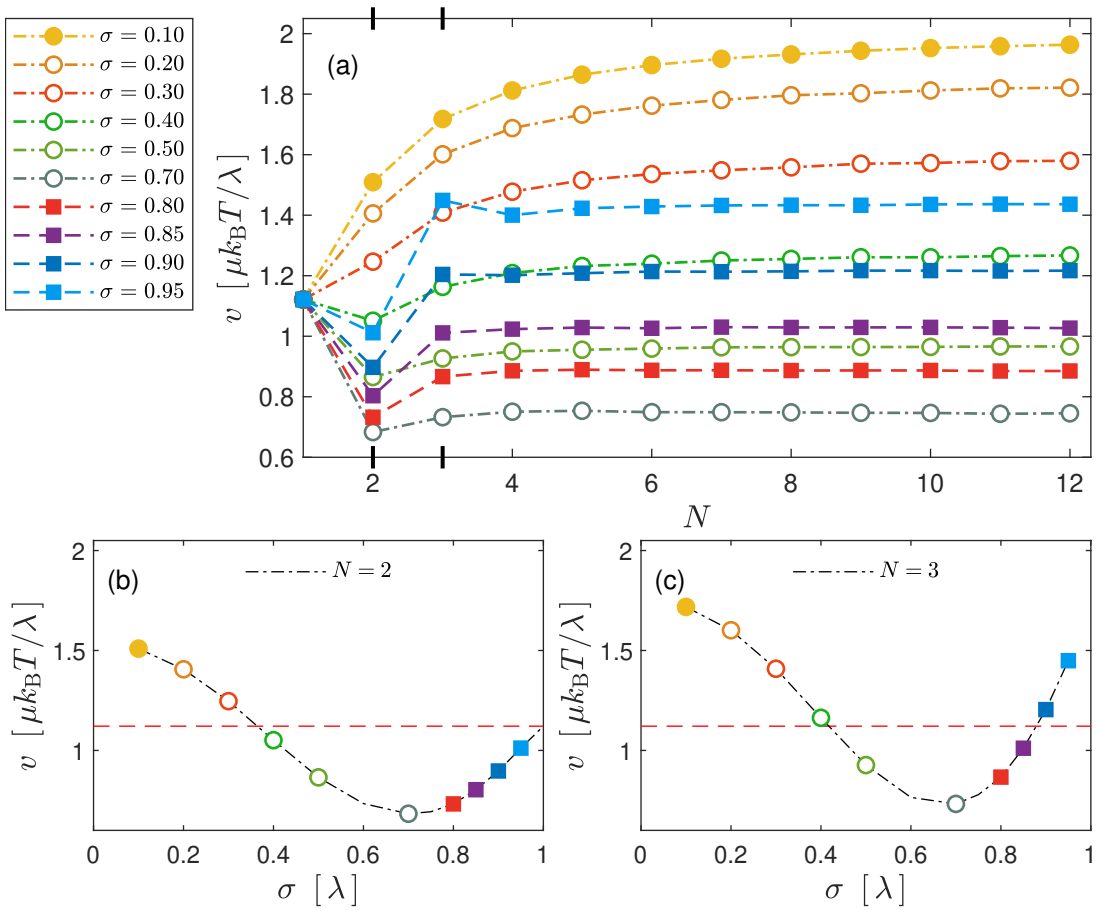
Obrázek 2.18: Difuzní koeficient $\mathcal{D}$ jedné částice v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.1$. Velikost vnější síly odpovídá hodnotě kritické síly $f = f_{\mathrm{c}}$.



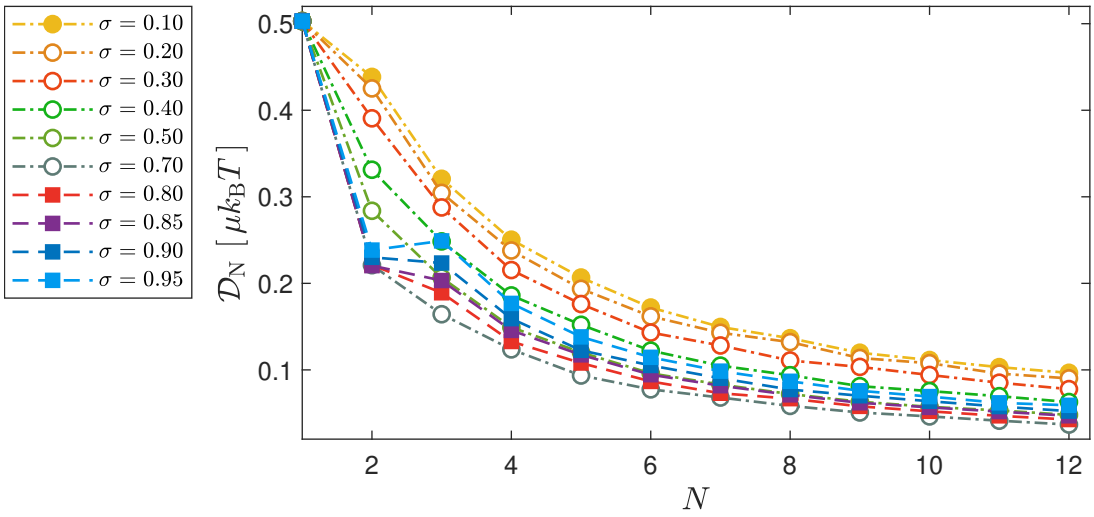
Obrázek 2.19: Panel (a): ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.1$. Velikost vnější síly je $f = 24\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$. Panely (b) a (c): ustálená rychlost v (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragujících částic.



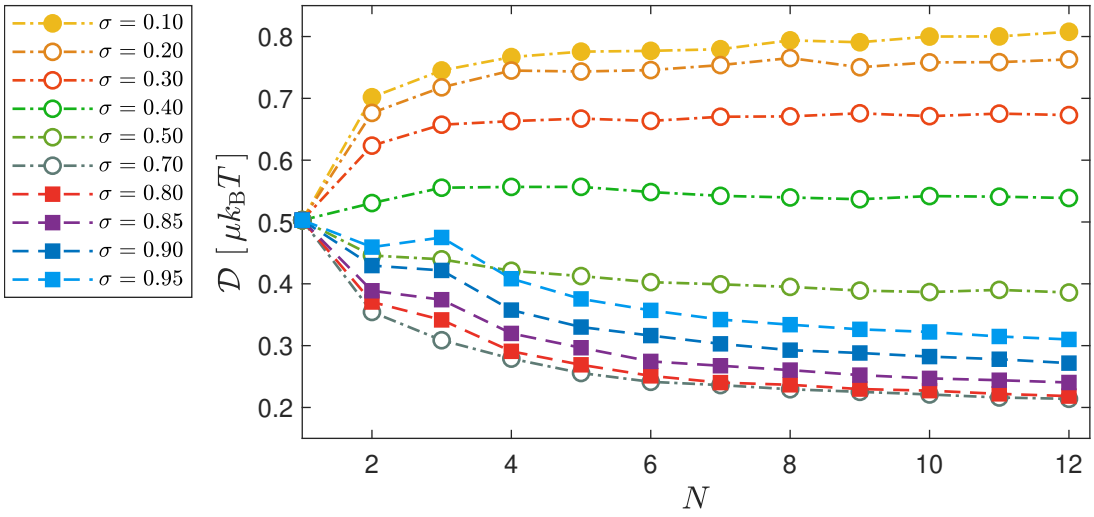
Obrázek 2.20: Difuzní koeficient $\mathcal{D}_{\mathrm{N}}$ souboru Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.1$. Velikost vnější síly je $f = 24\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$.



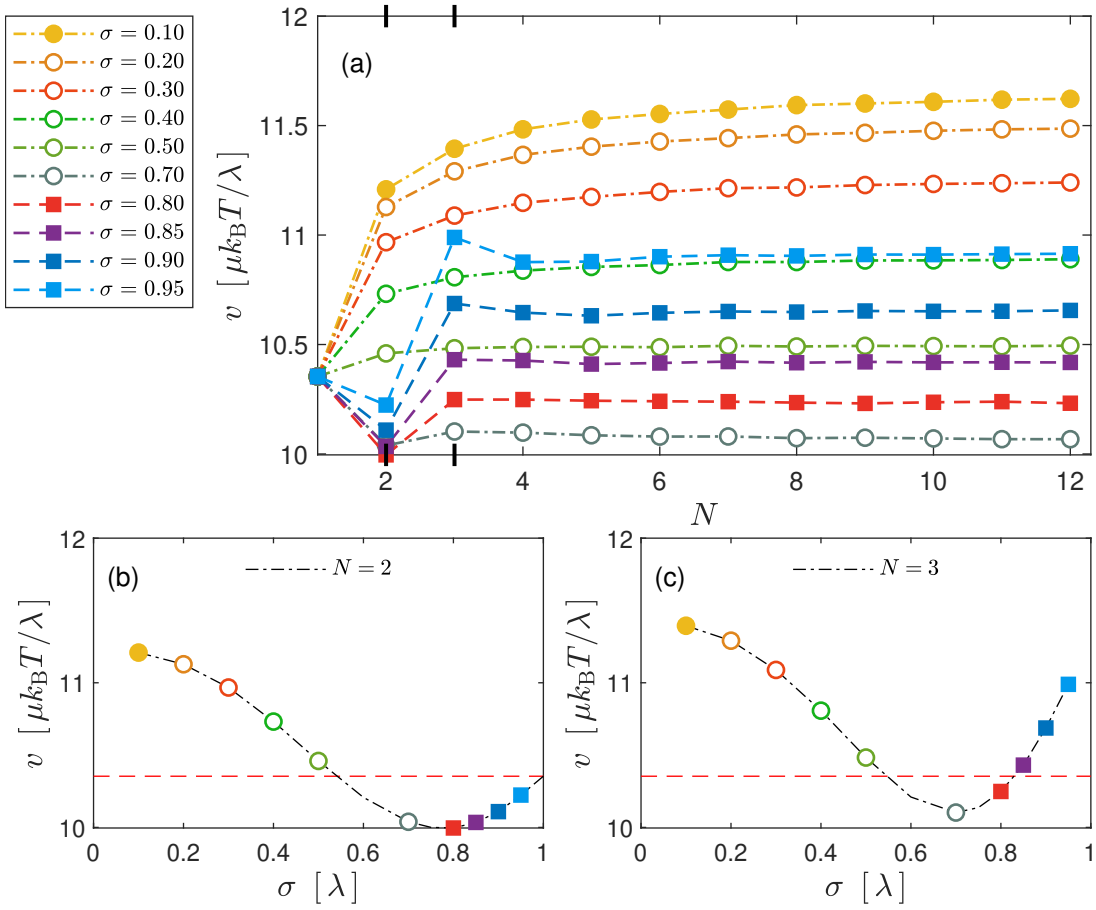
Obrázek 2.21: Panel (a): ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.25$. Velikost vnější síly je $f = 8\ k_{\mathrm{B}}T/\lambda$. Panely (b) a (c): ustálená rychlost v (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragujících částic.



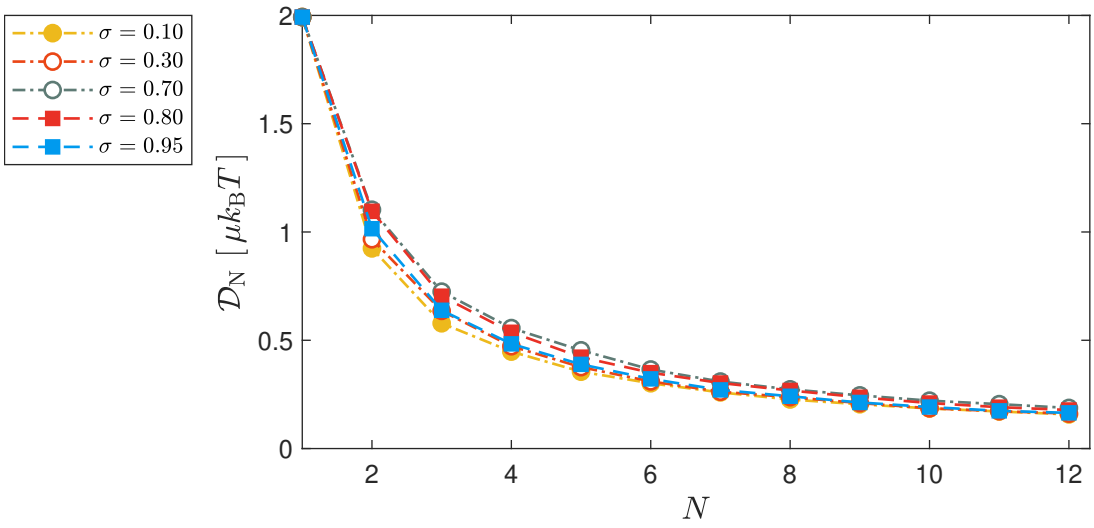
Obrázek 2.22: Difuzní koeficient $\mathcal{D}_\mathrm{N}$ souboru Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.25$. Velikost vnější síly je $f = 8\ k_\mathrm{B}T/\lambda$.



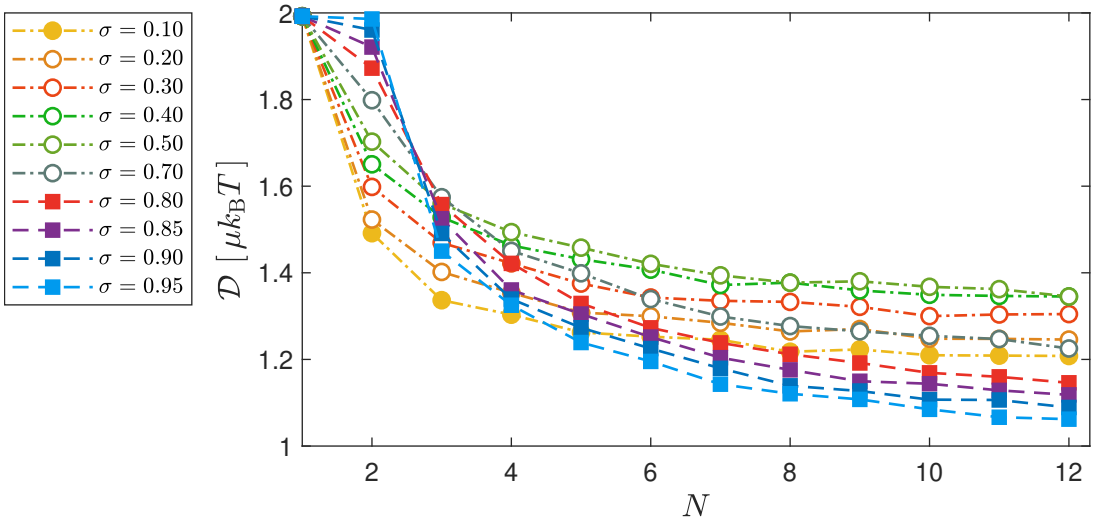
Obrázek 2.23: Difuzní koeficient $\mathcal{D}$ jedné částice v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.25$. Velikost vnější síly je $f = 8\ k_\mathrm{B}T/\lambda$.



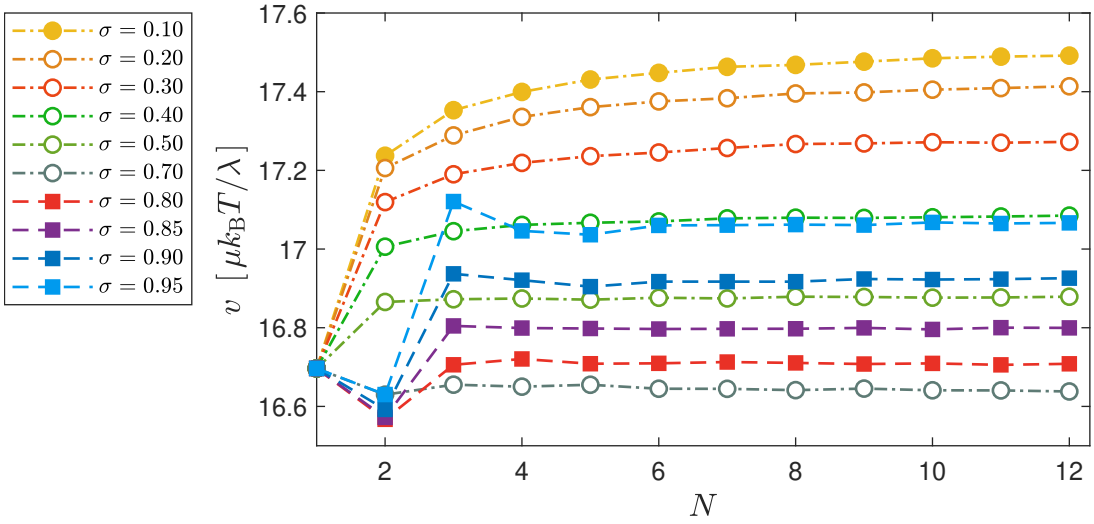
Obrázek 2.24: Panel (a): ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.25$. Velikost vnější síly odpovídá hodnotě kritické síly $f = f_c$. Panely (b) a (c): ustálená rychlost v (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragujících částic.



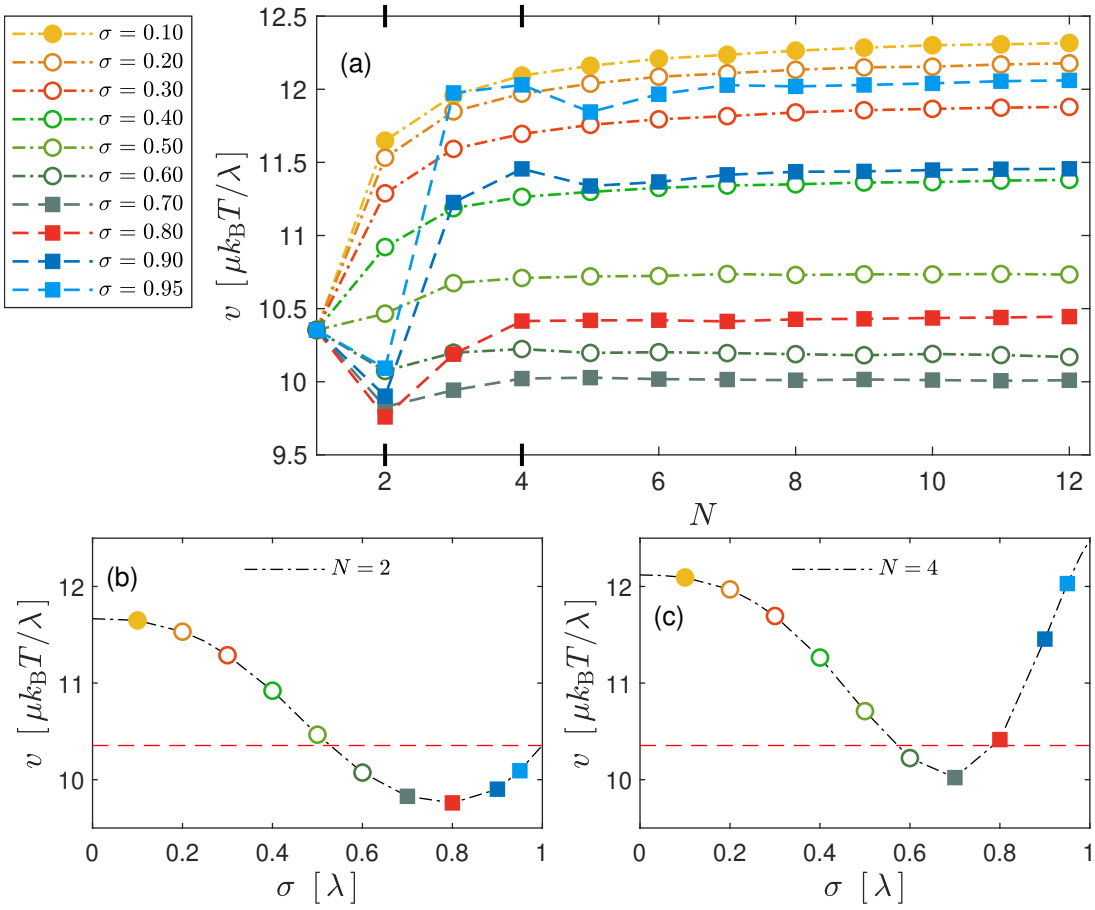
Obrázek 2.25: Difuzní koeficient $\mathcal{D}_\mathrm{N}$ souboru Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.25$. Velikost vnější síly odpovídá hodnotě kritické síly $f = f_\mathrm{c}$.



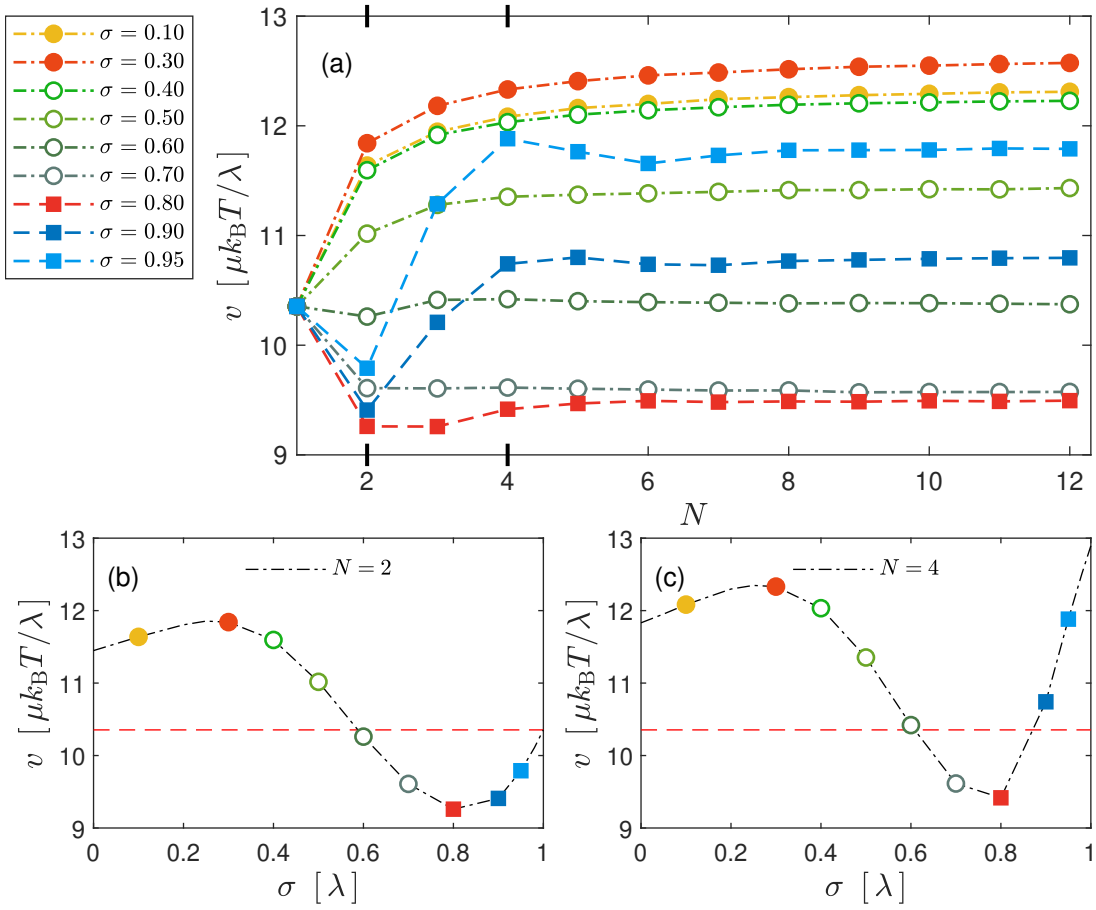
Obrázek 2.26: Difuzní koeficient $\mathcal{D}$ jedné částice v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.25$. Velikost vnější síly odpovídá hodnotě kritické síly $f = f_\mathrm{c}$.



Obrázek 2.27: Ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.25$. Velikost vnější síly je $f = 24\ k_\mathrm{B}T/\lambda$.



Obrázek 2.28: Panel (a): ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.25$ a výškou $V_0 = 2\ k_{\mathrm{B}}T$. Velikost vnější síly odpovídá hodnotě kritické síly $f = f_{\mathrm{c}}$. Panely (b) a (c): ustálená rychlost v (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragujících částic.



Obrázek 2.29: Panel (a): ustálená rychlost v Brownovských částic v závislosti na velikosti systému s počtem potenciálových minim L, pro různé šířky částic σ. Počet částic je roven počtu potenciálových minim $N = L$. Částice mají interakční potenciál 2.1 s parametrem $\varepsilon = 0.15$. Velikost vnější síly odpovídá hodnotě kritické síly $f = f_c$. Panely (b) a (c): ustálená rychlost v (černá čerchovaná) s přidruženými daty z panelu (a) v závislosti na šířce částic σ pro konkretní velikost systému. Referenční křivka (červená čárkovaná) odpovídá ustálené rychlosti neinteragujících částic.

Závěr

V této práci jsme studovali přetlumenou difuzi interagujících Brownovských částic v jedno-dimenzionálním periodickém potenciálu s periodickými okrajovými podmínkami. V teoretickém modelu pro případ plného obsazení, tj. s počtem částic rovnajícímu se počtu jam vnějšího potenciálu, se měřila ustálená rychlost částic, která je při této hustotě rovna proudu. Ze simulací byla rovněž vyhodnocována difuzní konstanta souboru částic charakterizující stacionární fluktuace proudu. Tyto dynamické veličiny jsme sledovali v závislosti na velikosti systému.

V kapitole 1 jsme shrnuli základní poznatky a výsledky modelu pro jednu částici, což odpovídá případu neinteragujících částic. K tomu byly zavedeny potřebné veličiny, shrnuty hlavní rovnice a řešeny některé vztahy vedoucí k analytickým výsledkům. Všechny tyto analytické výsledky byly porovnány s odpovídajícími simulacemi, které jsme provedli Euler–Maruyamaovou metodou.

Kapitola 2 obsahuje původní výsledky této práce. Rozšíření modelu o interagující částice a simulace, jejíž výsledky znázorňují vývoj hlavních dvou veličin: rychlosti a difuzního koeficientu souboru, pro dvě až dvanáct interagujících částic. Jako interakční potenciály částic byl použit model tuhých koulí a vyhlazená obdélníková bariéra. Jako interakční potenciál částic byl použit model tuhých koulí a vyhlazená obdélníková bariéra.Efekt snížení bariéry a blokování částic ovlivňující jejich rychlost je jako v nekonečných systémech pozorovaný také v systému o malém počtu částic, avšak v rozdílných poměrech. S rostoucí velikostí systému se zdá, že rychlost exponenciálně rychle konverguje k hodnotě v termodynamické limitě. Tato konvergence je tím rychlejší, čím je systém vystaven většímu driftu. To však pro větší šířky částic platí od jejich určitého počtu, který je překvapivě menší, než počet, který by odpovídal defektem zprostředkovanému transportu[12]. To má za následek útlum rychlosti menšího počtu částic.

V případě modelu tuhých koulí dochází ke zpomalení na úroveň v zablokovaném stavu. To neplatí pro částice s velkou šířkou s interakcí typu vyhlazené obdélníkové bariéry. V těchto případech dochází k jejich překrývání, čímž se usnadňuje kolektivní pohyb částic. Rychlost v takovémto systému může dosahovat podstatně vyšších hodnot, než v situaci kdy dochází k efektu snížení bariéry, zejména při nízké síle řídící jejich pohyb a velkých šířek částic. V této situaci má závislost rychlosti na velikosti systému netriviální charakter. Silně závisí na parametru měkkosti částic, výšce jejich potenciálové energie a vyvíjí se tlumenými výkyvy pro specifické počty částic. Tyto výkyvy by mohly souviset s počtem často vyskytujících se konfiguracích.

Difuzní koeficient má v jistých situacích složitější závislost. Zejména při malém driftu dochází ke zvýšení fluktuací částic, jejichž průměr roste s velikostí systému. Dominantně ale nastává pokles difuzního koeficientu souboru s rostoucí velikostí systému. Mezi další výsledky patří tlumené výkyvy fluktuací proudu, které se projevují se zvyšující se driftovou silou a rychle relaxují bez této závislosti s rostoucím driftem v případech, kdy řídící síla přesahuje hodnoty kritické síly f_c.

Studovaný případ dynamiky částic se slabou odpudivou interakci umožňuje předbíhaní částic. Tím je dynamika systému kvalitativně podobná dynamice v úzkých kanálcích, kde částice mají množnost měnit své uspořádání v průběhu

transportních procesů. Tímto je zde navržený model obecnější, než nedávno studovaný případ transportu tuhých sfér v periodických potenciálech [12], kde byla popsaná dynamika kolektivních termálních excitací. Zároveň zde reportované výsledky ukazují, že závislost na velikosti systému má mnohem bohatší průběh, než v případě dynamiky tuhých koulí. Jako další krok ve výzkumu tohoto modelu by mohlo být odvození přeskokových pravděpodobností pro jednotlivé částice, nebo škálovacích zákonů pro proud částic. Zároveň věříme, ze případ dynamiky částic se zde navrhovaným potenciálem je blíž reálnému transportu, než je případ tuhých sfér, proto v budoucnu by bylo zajímavé porovnat predikce modelu s kontrolovanými experimenty, jako jsou například pokusy s optickými pinzetami [23].

Seznam použité literatury

[1] A. Schadschneider, D. Chowdhury, and K. Nishinari. *Stochastic Transport in Complex Systems: From Molecules to Vehicles*. Elsevier Science, 3th edition, 2010.

[2] T. Chou, K. Mallick, and R. K. P. Zia. Non-equilibrium statistical mechanics: from a paradigmatic model to biological transport. *Reports on Progress in Physics*, 74(11):116601, oct 2011.

[3] A. B. Kolomeisky. Motor proteins and molecular motors: how to operate machines at the nanoscale. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25(46):463101, oct 2013.

[4] C. Appert-Rolland, M. Ebbinghaus, and L. Santen. Intracellular transport driven by cytoskeletal motors: General mechanisms and defects. *Physics Reports*, 593:1–59, 2015. Intracellular transport driven by cytoskeletal motors: General mechanisms and defects.

[5] S. Zeng, J. Chen, X. Wang, G. Zhou, L. Chen, and Ch. Dai. Selective transport through the ultrashort carbon nanotubes embedded in lipid bilayers. *The Journal of Physical Chemistry C*, 122(48):27681–27688, Dec 2018.

[6] M. Ma, F. Grey, L. Shen, M. Urbakh, S. Wu, J. Z. Liu, Y. Liu, and Q. Zheng. Water transport inside carbon nanotubes mediated by phonon-induced oscillating friction. *Nature Nanotechnology*, 10(8):692–695, Aug 2015.

[7] K. Hahn, J. Kärger, and V. Kukla. Single-file diffusion observation. *Phys. Rev. Lett.*, 76:2762–2765, Apr 1996.

[8] D. Lips, A. Ryabov, and P. Maass. Brownian asymmetric simple exclusion process. *Phys. Rev. Lett.*, 121:160601, Oct 2018.

[9] A. P. Antonov, A. Ryabov, and P. Maass. Driven transport of soft brownian particles through pore-like structures: Effective size method. *The Journal of Chemical Physics*, 155(18):184102, 2021.

[10] E. Cereceda-López, D. Lips, A. Ortiz-Ambriz, A. Ryabov, P. Maass, and P. Tierno. Hydrodynamic interactions can induce jamming in flow-driven systems. *Phys. Rev. Lett.*, 127:214501, Nov 2021.

[11] Q.-H. Wei, C. Bechinger, and P. Leiderer. Single-file diffusion of colloids in one-dimensional channels. *Science*, 287(5453):625–627, 2000.

[12] A. P. Antonov, D. Voráč, A. Ryabov, and P. Maass. Collective excitations in jammed states: ultrafast defect propagation and finite-size scaling. *New Journal of Physics*, 24(9):093020, sep 2022.

[13] R. M. Mazo. *Brownian Motion: Fluctuations, Dynamics, and Applications*. The International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, Oxford, 2002.

[14] H. Risken. *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*. Springer Series in Synergetics. Springer-Verlag, softcover reprint of the original 1st edition, 1984.

[15] P. Reimann, C. Van den Broeck, H. Linke, P. Hänggi, J. M. Rubi, and A. Pérez-Madrid. Diffusion in tilted periodic potentials: Enhancement, universality, and scaling. *Phys. Rev. E*, 65:031104, Feb 2002.

[16] C. W. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods: for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer Series in Synergetics. Springer-Verlag, 3th edition, 2004.

[17] P. E. Kloeden and E. Platen. *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*. Stochastic Modelling and Applied Probability. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2nd corrected edition, 1995.

[18] Don S. Lemon. *Introduction to Stochastic Processes in Physics*. The Johns Hopkins University Press, 2002.

[19] V. Ambegaokar and B. I. Halperin. Voltage due to thermal noise in the dc josephson effect. *Phys. Rev. Lett.*, 22:1364–1366, Jun 1969.

[20] A. Scala, Th. Voigtmann, and C. De Michele. Event-driven Brownian dynamics for hard spheres. *The Journal of Chemical Physics*, 126(13):134109, 2007.

[21] D. Lips, A. Ryabov, and P. Maass. Single-file transport in periodic potentials: The brownian asymmetric simple exclusion process. *Phys. Rev. E*, 100:052121, Nov 2019.

[22] A. Taloni, O. Flomenbom, R. Castañeda-Priego, and F. Marchesoni. Single file dynamics in soft materials. *Soft Matter*, 13:1096–1106, 2017.

[23] Dominik Lips, Eric Cereceda-López, Antonio Ortiz-Ambriz, Pietro Tierno, Artem Ryabov, and Philipp Maass. Hydrodynamic interactions hinder transport of flow-driven colloidal particles. *Soft Matter*, 18:8983–8994, 2022.