

Transporte y difusión anómalos de partículas Brownianas en superficies desordenadas

Marc Suñé Simon^{*,†}, J. M. Sancho^{**,†} and A. M. Lacasta^{***,‡}

[†]Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria,
Facultat de Física, Universitat de Barcelona,
Martí i Franquès, 1. E-08028 Barcelona, Spain

El transporte (velocidad) y la difusión (dispersión aleatoria) de las partículas Brownianas se estudian a partir del primer momento y la varianza de la distribución de las posiciones de dichas partículas. Cuando el sistema en estudio incluye potenciales no lineales, los momentos anteriores dejan de ser funciones lineales del tiempo, con lo que aparecen fenómenos anómalos en el transporte y la difusión.

Consideramos el caso particular del movimiento *over-damped* de partículas Brownianas idénticas que no interactúan entre ellas, bajo la acción de una fuerza constante en cada punto \vec{F} , y en un potencial desordenado $V(\vec{r})$, que es gaussiano, isótropo y de media nula, el cual se puede generar a partir de su correlación espacial, $\langle V(\vec{r})V(\vec{r}') \rangle = V_0^2 g(\frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{\lambda})$. La ecuación que describe el sistema es la ecuación de Langevin en dos dimensiones, cuya versión adimensional es, en cada una de las direcciones perpendiculares del plano,

$$\frac{dq_x}{d\tau} = -\frac{\partial U(\vec{q})}{\partial q_x} + \mathcal{F} \cos \theta + \xi_x(\tau),$$

$$\frac{dq_y}{d\tau} = -\frac{\partial U(\vec{q})}{\partial q_y} + \mathcal{F} \sin \theta + \xi_y(\tau).$$

Para llegar a las expresiones anteriores hemos aplicado las transformaciones de escala espaciales y temporales, $\vec{q} = \frac{\vec{r}}{\lambda}$ y $\tau = \frac{tV_0}{\eta\lambda^2}$, por lo que hemos introducido los parámetros adimensionales $\vec{\mathcal{F}} = \frac{\lambda\vec{F}}{V_0}$ y $\mathcal{T} = \frac{k_B T}{V_0}$. El término del ruido cumple la relación de fluctuación disipación,

$$\langle \xi_i(\tau)\xi_j(\tau') \rangle = 2\mathcal{T}\delta_{ij}\delta(\tau - \tau'),$$

dónde i, j pueden ser cualquiera de las dos direcciones perpendiculares en el espacio cartesiano q_x, q_y . La fuerza externa constante es $\vec{\mathcal{F}} = \mathcal{F} \cos \theta \hat{i} + \mathcal{F} \sin \theta \hat{j}$.

Los resultados de la simulación de la ecuación de Langevin por el método de Heun permiten obtener la velocidad y el tensor de difusión usando las siguientes prescripciones,

$$\langle \vec{v}(\tau) \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \vec{q}(\tau) \rangle}{\tau},$$

$$D_{ij}(\tau) = \frac{1}{2} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle (q_i - \langle q_i \rangle)(q_j - \langle q_j \rangle) \rangle}{\tau}.$$

A partir del tensor de difusión se pueden calcular los coeficientes de difusión paralela y perpendicular a la dirección de la fuerza formando un escalar con un vector unitario \hat{e} ,

$$\hat{e} \cdot D \cdot \hat{e} = \sum_{i,j=1}^2 e_i D_{ij} e_j.$$

Cuando $\vec{e}_{\parallel} = (\cos \theta, \sin \theta)$ es paralelo a la fuerza externa $\vec{\mathcal{F}}$ se obtiene el coeficiente de difusión paralela, D_{\parallel} , y cuando es perpendicular, $\vec{e}_{\perp} = (-\sin \theta, \cos \theta)$, el coeficiente de difusión perpendicular, D_{\perp} .

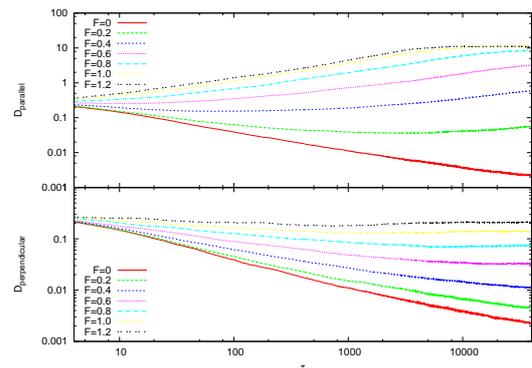


FIG. 1. Difusiones paralela y perpendicular a la dirección de la fuerza $\vec{\mathcal{F}}$. Los parámetros de la simulación son $N=1024$ puntos de discretización en cada dirección, un espaciado $\Delta=0.1$ entre puntos, $\mathcal{T} = 0.2$, $\lambda=1$, 100 partículas, 50 potenciales y $\tan \theta = 100/(20 \cdot L \cdot \Delta)$.

La siguiente expresión $\alpha \approx \log \frac{\langle (\Delta q(10\tau))_v^2 \rangle}{\langle (\Delta q(\tau))_v^2 \rangle}$, dónde $\nu = \parallel, \perp$; nos permite determinar el exponente que caracteriza las anomalías $\langle (\Delta q(\tau))_v^2 \rangle \propto t^\alpha$ en la difusión. Los resultados obtenidos para los casos representados en la figura anterior han sido: $\alpha=0.585$ ($\mathcal{F} = 0$), 1.196 ($\mathcal{F} = 0.2$), 1.348 ($\mathcal{F} = 0.4$), 1.405 ($\mathcal{F} = 0.6$), 1.288 ($\mathcal{F} = 0.8$), 1.117 ($\mathcal{F} = 1.0$), 1.031 ($\mathcal{F} = 1.2$) para la difusión paralela; y 0.592 ($\mathcal{F} = 0$), 0.673 ($\mathcal{F} = 0.2$), 0.792 ($\mathcal{F} = 0.4$), 0.939 ($\mathcal{F} = 0.6$), 1.012 ($\mathcal{F} = 0.8$), 1.027 ($\mathcal{F} = 1.0$), 1.014 ($\mathcal{F} = 1.2$) para la difusión perpendicular. Podemos apreciar que cuando $\alpha \approx 1$ hay difusión normal, mientras que si $\alpha < 1$ ó $\alpha > 1$ existe subdifusión o superdifusión respectivamente. También se presentarán resultados para el transporte anómalo.

[‡] Departament de Física Aplicada, Universitat Politècnica de Catalunya, Avinguda Doctor Marañón, 44. E-08028 Barcelona, Spain

* sune@ecm.ub.es

** jmsancho@ecm.ub.es

*** anna@fa.upc.edu