

ВЛИЯНИЕ ДРЕЙФА НА ВРЕМЕННУЮ АСИМПТОТИКУ ВЕРОЯТНОСТИ ВЫЖИВАНИЯ ЧАСТИЦ В СРЕДАХ С ПОГЛОЩАЮЩИМИ ЛОВУШКАМИ: ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

В. Е. Архинчев*, Б. В. Хабитуев**, С. П. Мальцев***

Бурятский государственный университет им. Доржи Банзарова
670000, Улан-Удэ, Россия

Поступила в редакцию 16 декабря 2024 г.,
после переработки 16 декабря 2024 г.
Принята к публикации 28 декабря 2024 г.

Проведено численное моделирование частиц, диффундирующих в средах с поглощающими ловушками в электрическом поле. В результате моделирования показано, что на достаточно больших временах именно этот дрейфовый механизм определяет новое временное поведение вероятности выживания. Установлены зависимости характерного времени, описывающего экспоненциальное убывание числа частиц, от концентрации ловушек и от величины электрического поля.

DOI: 10.31857/S0044451025050086

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема диффузии частиц в средах с поглощающими ловушками изучалась во многих работах [1–3]. Интерес обусловлен как различными приложениями, так и аналогией с проблемой плотности состояний в неупорядоченных средах [4], а также возможными новыми особенностями в транспорте частиц [5]. В работе [6] подробно исследовался случай захвата на поглощающие ловушки случайно распределенных в пространстве диффундирующих частиц. Было показано, что вероятность выживания частиц $W(t; c)$ на малых временах $t \ll t_c$, где $t_c = (Dc^2)^{-1}$ (здесь D — коэффициент диффузии, c — концентрация ловушек в одномерном случае) убывает по экспоненциальному закону

$$W(t; c) \approx W_0 \exp\left(-\frac{t}{t_c}\right). \quad (1)$$

Однако на больших временах асимптотика вероятности выживания определяется существованием достаточно больших областей, свободных от поглоща-

ющих ловушек, и носит дробно-экспоненциальный характер:

$$W(t; c) \approx W_0 \left(\frac{Dtc^2}{3\pi}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{3\sqrt{\pi}}{2}(Dtc^2)^{1/3}\right\}. \quad (2)$$

Ранее в работах [7–9] был исследован механизм переноса частиц, обусловленный дрейфом частиц. Было показано, что на достаточно больших временах именно этот механизм будет определять временную асимптотику вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками. Необходимо отметить, что в проблеме диффузии с поглощающими ловушками при включении электрического поля дополнительно возникают два новых параметра. Первый из них — это «полевое» время, на котором дрейфовое смещение сравнивается с диффузионным, $v^2 t_E^2 \approx Dt_E$ (v — дрейфовая скорость частицы):

$$t_E = \frac{v^2}{D}. \quad (3)$$

Легко понять, что на временах, больших по сравнению с «полевым», дрейф частиц становится доминирующим. Соответственно, в достаточно сильных полях было предсказано новое асимптотическое поведение для вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками с характерным временем, зависящим от величины электриче-

* E-mail: varkhin@mail.ru

** E-mail: bairkhabituiev@bsu.ru

*** E-mail: staeth@mail.ru

ского поля. Второй безразмерный параметр связан также с дрейфом в электрическом поле и равен отношению потенциальной энергии к температуре

$$\frac{vl}{D} = \frac{qEl}{kT}. \tag{4}$$

Используя известное соотношение Эйнштейна $\mu kT = D$, где μ — подвижность частицы ($v = \mu E$), а kT — температура, легко получить этот параметр.

В настоящей работе проведено численное моделирование процессов диффузии в средах с ловушками в электрическом поле. Показано, что включение электрического поля приводит к появлению нового характерного «полевого» времени. Исследована зависимость эффективного времени, описывающего экспоненциальное убывание вероятности выживания от электрического поля и концентрации ловушек. Построена зависимость эффективного времени от двух параметров в виде двумерной поверхности. Статья построена следующим образом. В разд. 2 приведены основные теоретические результаты по влиянию электрического поля на захват частиц. В разд. 3 описаны алгоритм, методы моделирования, включая визуализацию результатов, а также приведены результаты численного моделирования. В заключении обсуждены полученные результаты.

2. ДИФФУЗИЯ В СРЕДАХ С ЛОВУШКАМИ. ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ЗАХВАТ ЧАСТИЦ

Кратко изложим основные рассуждения по проблеме диффузии в средах с ловушками, приводящие к результату (1). Согласно работе [6] строится решение стандартного уравнения диффузии

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2} \tag{5}$$

с начальными и граничными условиями

$$W(x, 0) = \frac{1-c}{L}, \quad W(x_i, t) = W(x_{i+1}, t) = 0. \tag{6}$$

Здесь L — длина цепочки, x_i, x_{i+1} — координаты поглощающих ловушек. Это решение имеет вид

$$W(x, t : x_i) = \frac{4}{L} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{Dk_n^2 t}{2}\right) \frac{\sin(k_n(x-x_i))}{k_n l_i}. \tag{7}$$

где

$$k_n = \frac{(2n+1)\pi}{l_i}, \quad l_i = |x_{i+1} - x_i|.$$

Искомая величина — вероятность выживания $W(x, t : \bar{W}(t))$ равна среднему значению

$$\bar{W}(t) = \sum_i W(t, x_i) = \sum_i \int_{x_i}^{x_{i+1}} W(x, t; x_i) dx. \tag{8}$$

Для случайного пуассоновского распределения ловушек $f(l) = c \exp(-cl)$, где $c = N/L$ — концентрация ловушек, l — расстояние между ловушками, получим на малых временах формулу (1), а на больших временах формулу (2).

2.1. Влияние электрического поля на вероятность выживания в средах с ловушками

Включим электрическое поле в проблему диффузии в средах с поглощающими ловушками стандартным образом. Соответственно уравнение диффузии в электрическом поле примет вид

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2} + v \frac{\partial W(x, t)}{\partial x}. \tag{9}$$

Здесь $v = \mu E$ — дрейфовая скорость частиц в электрическом поле E, μ — подвижность частицы. Начальные и граничные условия ставим аналогично сформулированным выше условиям (6). Соответственно, ищем решение в виде разложения по собственным функциям

$$W(x, t; E) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n \exp(-E_n t), \tag{10}$$

где собственные функции равны

$$\varphi_n = \exp\left(\frac{v(x-x_i)}{2D}\right) \sin(k_n(x-x_i)), \tag{11}$$

а собственные значения определяются выражением

$$E_n = Dk_n^2 + \frac{v^2}{4D}. \tag{12}$$

На временах $t \gg t_E$ получим экспоненциальное убывание за счет дрейфа частиц на поглощающие ловушки под действием электрического поля, соответствующее приближению среднего поля

$$\bar{W}(t; E) \approx \exp\left(-\frac{v^2 t}{4D}\right). \tag{13}$$

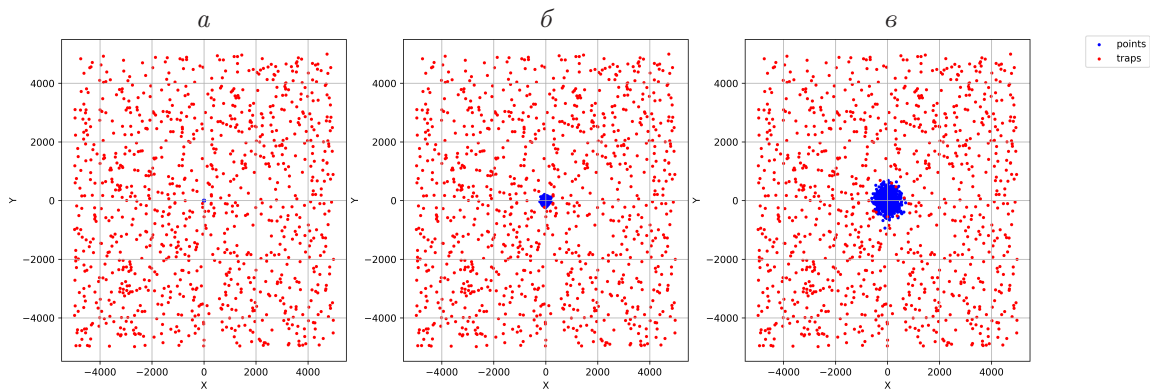


Рис. 1. Распределение частиц в моменты времени: $t = 0$ (а), 10000 (б), 100000 (в)

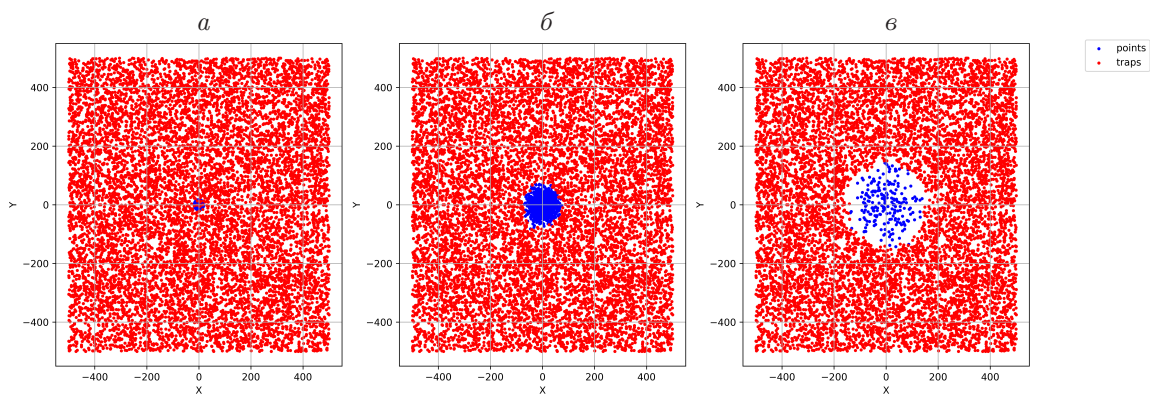


Рис. 2. Распределения частиц в средах с ловушками без электрического поля с более высокой концентрацией ловушек при $t = 0$ (а), 2000 (б), 25000 (в)

2.2. Учет флуктуаций концентрации поглощающих ловушек и влияния электрического поля на флуктуационный механизм

Согласно результатам работ [7–9] асимптотический вид решения зависит от величины электрического поля. В случае слабых полей (или малых масштабов), $vl/D \ll 1$, получим известный результат: вероятность выживания определяется флуктуациями концентрации поглощающих ловушек, другими словами, наличием областей большого размера, свободных от ловушек — формула (2). В обратном предельном случае сильных полей, $vl/D \gg 1$, возникает новое асимптотическое поведение:

$$W(t; E) \approx W_0 \exp \left\{ -\frac{v^2}{4D} t - \frac{3\sqrt{\pi}}{2} \left(Dtc^2 \left[1 + \frac{qE}{4ckT} \right] \right)^{1/3} \right\}. \quad (14)$$

Обсудим полученные результаты. Как следует из выражения (14), на больших масштабах и/или в сильном электрическом поле вероятность выживания частиц при поглощении ловушками на больших временах определяется новым механизмом — дрейфом частиц под действием электрического поля, что описывается первым членом в экспоненте, а также, наряду с флуктуациями концентрации, — дрейфом на расстояние порядка среднего расстояния между поглощающими ловушками, который описывается вторым членом в экспоненциальном множителе. Для проверки развитых теоретических представлений было проведено численное моделирование.

3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ЗАХВАТ ЧАСТИЦ

Целью численного моделирования является изучение поведения и динамики частиц в двумерном

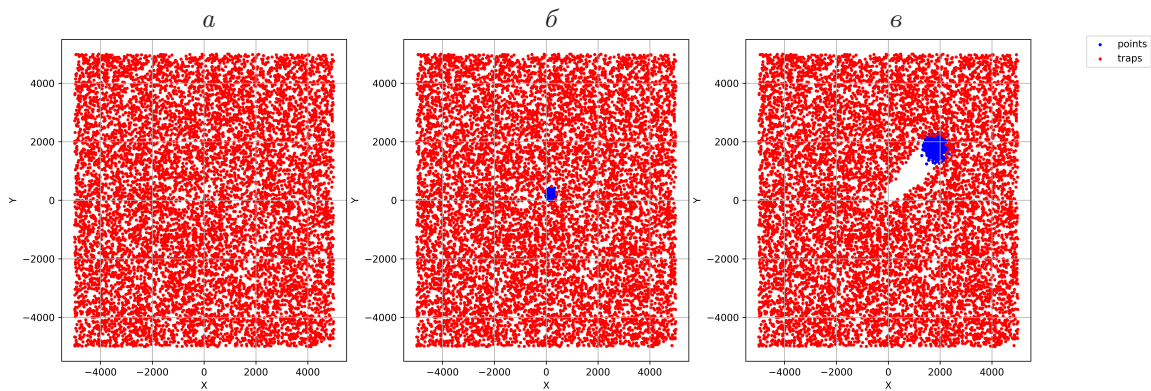


Рис. 3. Распределение частиц в электрическом поле при $t = 0$ (а), 10000 (б), 100000 (в)

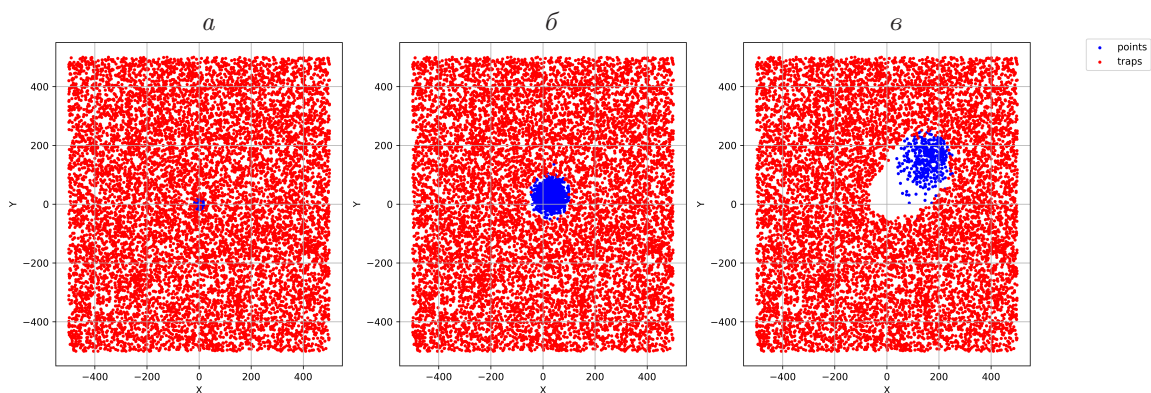


Рис. 4. Распределение частиц в электрическом поле при $t = 0$ (а), 2000 (б), 10000 (в)

пространстве под воздействием электрического поля в среде с поглощающими ловушками. Моделирование направлено на исследование распределения частиц, а также установление асимптотики вероятности выживания частиц при наличии ловушек и влияние электрического поля на временную асимптотику. А именно, было исследовано влияние дрейфового механизма переноса частиц под воздействием электрического поля на вероятность их выживания при поглощении частиц, попадающих в ловушки. В модели учитывается ряд параметров, которые непосредственно влияют на движение частиц: направление и интенсивность электрического поля, взаимодействие частиц в пространстве, расположение ловушек и начальные условия. Такой набор параметров позволяет смоделировать систему, в которой электрическое поле создает дрейфовый перенос частиц на поглощающие ловушки, что должно приводить к увеличению поглощения частиц.

3.1. Модель и алгоритм

Для моделирования движения частиц используется модель, позволяющая исследовать взаимодействие частиц с электрическим полем и поглощающими ловушками. В основе лежит модель случайного блуждания, в которой частицы перемещаются дискретными шагами в четырех направлениях параллельно осям координат с учетом влияния электрического поля. Электрическое поле в модели представлено как постоянное и равномерно распределенное по всему пространству. Его влияние задает направленный дрейф, оказывающий воздействие на вероятность перемещения частиц. Это смещение моделируется как дополнительное смещение вероятности в сторону поля, что увеличивает вероятность движения частиц в одном из направлений. Основные аспекты алгоритма моделирования описаны в Приложении и включают инициализацию системы, алгоритм движения частиц и проверку на поглощение.

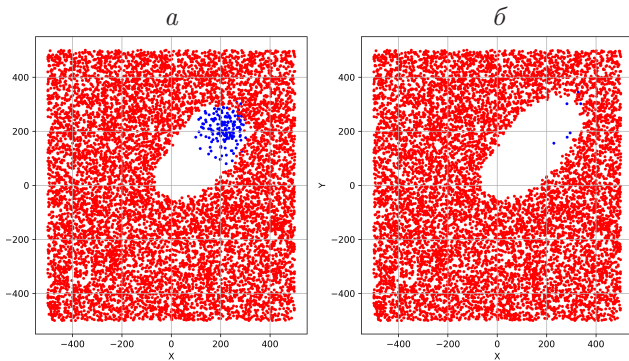


Рис. 5. Асимптотика поглощения части в электрическом поле при $t = 15000$ (а), 25000 (б)

3.2. Реализация модели

Реализация выполнена на C++, что обеспечивает высокую производительность. Для моделирования случайных перемещений частиц используется генератор случайных чисел вихрь Мерсенна, обладающий высокой скоростью и качеством случайных последовательностей, что позволяет достоверно воспроизводить вероятностные смещения частиц. Реализованы собственные классы для работы с хеш-таблицами, которые обеспечивают быстрый доступ к данным о частицах и ловушках в пространстве. Такая структура позволяет быстро отслеживать нахождение частиц в определенных ячейках, избегая коллизий и обеспечивая эффективное управление ресурсами. Для ускорения моделирования используется параллелизация с помощью OpenMP. Расчеты для экспериментов в серии выполняются параллельно, что позволяет значительно уменьшить время выполнения моделирования. Реализованы гибкие настройки начальных параметров системы, такие как плотность частиц, интенсивность электрического поля и другие параметры. Эти параметры настраиваются через конфигурационные файлы, что позволяет экспериментировать с различными значениями без изменения основного кода программы. Данная реализация позволяет легко изменять правила взаимодействия, например, вводить новые типы ловушек или корректировать правила движения частиц под действием поля.

3.3. Визуализация и анализ данных

Для анализа и визуализации результатов моделирования применялись следующие подходы.

1. 2D-графики для траекторий частиц: визуализация движения частиц на плоскости позволяет от-

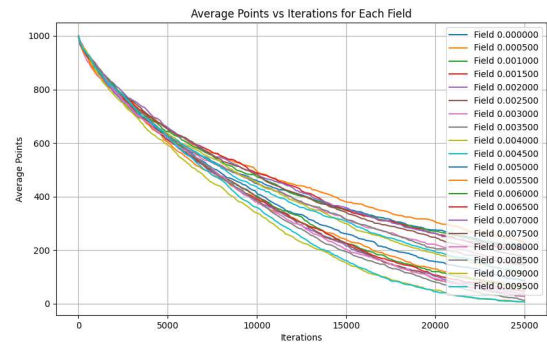


Рис. 6. График зависимости убывания числа частиц от времени при разных значениях электрического поля

следить изменение их позиций и влияние электрического поля.

2. Тепловые карты плотности: отображение плотности частиц в каждом участке пространства позволяет выявить скопления, вызванные полем, и области, где движение замедлено или затруднено.

3. Графики изменения вероятности перемещений: позволяют отслеживать, как вероятность движения частиц меняется под воздействием поля и с течением времени.

3.4. Результаты моделирования

Промоделирована среда с ловушками, ловушки распределены случайно в пределах квадрата размерами 10000×10000 . Концентрация ловушек равна $N_t = 10^{-4}$. Начальное распределение частиц задавалось в круге в центре координат. На рис. 1 показаны распределение частиц в начальный момент $t = 0$ и при $t = 10000$, $t = 100000$.

На графиках наблюдается очевидное диффузионное расплывание частиц и уменьшение плотности ловушек в центре за счет их заполнения диффундирующими частицами.

Таким образом, в силу более высокой концентрации ловушек поглощение диффундирующих частиц идет более высокими темпами и, соответственно, появляются случайные области, свободные от ловушек (см. рис. 2 в).

Далее исследовано влияние слабого электрического поля на распределения частиц в различные моменты времени. Параметр анизотропии равен 0.001.

Влияние слабых электрических полей проявляется на больших временах, когда основным механизмом переноса становится дрейфовый — частицы в основном двигаются вдоль направления электри-

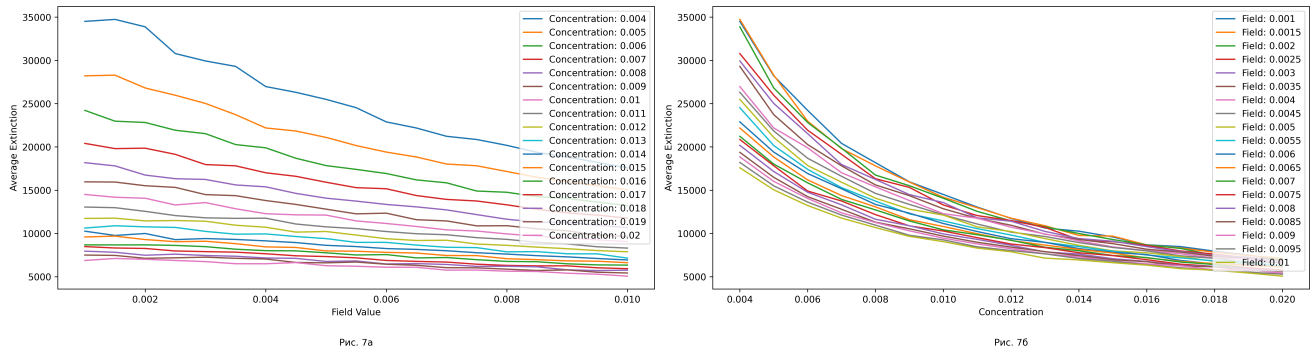


Рис. 7. Зависимость эффективного времени убывания числа частиц от различных параметров

ческого поля и, соответственно, поглощаются вдоль направления движения, что видно на рис. 3 в.

Далее исследовано влияние электрического поля в случаях сильного электрического поля при большом значении параметра анизотропии. Он равен 0.01. Результаты представлены на рис. 4.

В случае сильных электрических полях дрейфовый механизм проявляется на меньших временах — согласно (3) частицы смещаются в основном вдоль электрического поля и поглощаются более интенсивно уже при $t = 10000$ (см. рис. 4 в).

С увеличением времени проявляются целые области ловушек, заполненных диффундирующими частицами, вытянутые вдоль направления электрического поля. Полученные результаты представлены на рис. 5.

Согласно рис. 6 убывание числа частиц зависит от величины электрического поля — чем сильнее электрическое поле, тем быстрее убывает число частиц со временем.

Аппроксимируя полученные зависимости экспоненциальной зависимостью

$$\bar{W}(t; c, E) \approx \exp\left(\frac{-t}{t_{eff}}\right), \quad (15)$$

получим численные значения эффективного времени релаксации как функцию от двух переменных — концентрации ловушек и величины анизотропии (электрического поля).

На рис. 7 представлена зависимость эффективного времени убывания числа частиц от следующих параметров: a — от концентрации ловушек при различных значениях электрического поля, b — от электрического поля при различных концентрациях ловушек. Однако более наглядно полученные результаты зависимости эффективного времени убывания можно представить в виде зависимости от двух переменных.

Полученная двумерная поверхность, описывающая зависимость эффективного времени релаксации от двух параметров, подтверждает двухпараметрический скейлинг в задачах захвата частиц на ловушки в электрическом поле, предложенный в работах [9–12].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей статье исследован случай захвата диффундирующих частиц на ловушки в электрическом поле методами численного моделирования. Установлены асимптотические временные зависимости выживания частиц и влияние на эти асимптотики двух параметров — концентрации ловушек и величины электрического поля. Как было показано ранее, в этом случае при наличии этих параметров возникают два характерных времени — время диффузии на расстояние, соответствующее среднему расстоянию между ловушками, $t_c = (Dc^2)^{(-1)}$ и «полевое» время $t_E = v^2/D$. Соответственно, с учетом введения новых переменных, $x = t/t_c$ и $y = t/t_E$, полученные выше результаты, а именно логарифм вероятности выживания частиц, можно представить как функцию двух переменных:

$$\ln(W(x; y/W_0)) = -f(x, y). \quad (16)$$

Поскольку в задачах диффузии возникают только два характерных времени и, соответственно, только два параметра, предположим автомодельный характер решения задачи о захвате диффундирующих частиц в электрическом поле:

$$f(x, y) \approx x^{1/3} g\left(\frac{y}{x}\right) = \begin{cases} x^{1/3}, & 1 \ll x, y \ll 1, \\ Ay^{1/3}, & 1 \ll x \ll y. \end{cases} \quad (17)$$

В соответствии со скейлинговым подходом в слабых электрических полях функция зависит только

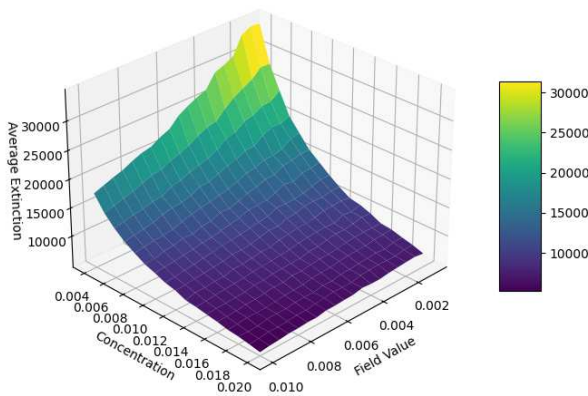


Рис. 8. Зависимость эффективного времени убывания от концентрации ловушек и электрического поля

от текущего времени и времени захвата на ловушки $t_c = (Dc^2)^{-1}$, т.е. только от параметра x степенным образом — верхняя асимптотика формулы (17). В случае сильных электрических полей, когда «полевая» длина $L_E = kT/qE$ становится меньше расстояния между ловушками $L_c = 1/c : L_c \ll L_E$ или в терминах электрического поля $1 \ll qE/kTc$ получим зависимость только от параметра y — нижнюю асимптотику формулы (17).

Этот скейлинговый подход действительно соответствует рис. 8, и, следовательно, проведенное численное моделирование процессов захвата диффундирующих частиц на ловушки и влияние электрического поля подтверждают возможность развития и использования скейлингового подхода для исследуемых задач. Однако есть и некоторая асимметрия в зависимости от параметров, а именно более медленное убывание эффективного времени от электрического поля. По-видимому, это можно описать, введя коэффициент $A < 1$, однако необходимо дальнейшие исследования для понимания возникшей асимметрии.

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант №24-21-00356), <https://rscf.ru/project/24-21-00356>.

ПРИЛОЖЕНИЕ. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ И АЛГОРИТМА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Параметры, непосредственно влияющие на движение частиц, следующие.

1. Направление и интенсивность электрического поля: электрическое поле оказывает направленное воздействие на частицы, заставляя их чаще сме-

щаться в сторону поля. Для этого к случайным перемещениям частиц добавляется постоянный сдвиг, описывающий действие электрического поля.

2. Взаимодействие частиц в пространстве: частицы не притягиваются и не отталкиваются друг от друга, но не могут занимать одно и то же место одновременно. В случае попытки смещения двух частиц в одну и ту же точку, они возвращаются на исходные позиции. Это ограничение моделирует «отталкивание» при попытке пересечения в пространстве.

3. Расположение ловушек: в пространстве случайным образом размещены ловушки, которые поглощают частицу, попавшую в них. Попадание в ловушку приводит к полному исчезновению частицы из системы. Местоположение ловушек остается фиксированным в течение моделирования, что позволяет изучить влияние ловушек на выживание частиц.

4. Начальные условия: начальные позиции частиц и ловушек определяют их исходное расположение. Плотность и распределение ловушек, а также исходное положение частиц задаются таким образом, чтобы исследовать различные сценарии взаимодействия с ловушками и дрейфового смещения под воздействием поля.

Такой набор параметров позволяет смоделировать систему, в которой электрическое поле создает дрейфовый перенос частиц на поглощающие ловушки, что должно приводить к увеличению поглощения частиц. Основные аспекты алгоритма моделирования включают в себя следующие этапы.

Инициализация системы. Задаются несколько параметров.

1. Количество частиц. Их начальные позиции и распределение в пространстве определяются одним из классов, отвечающих за генерацию первоначальной популяции. Этот класс выбирается один раз до начала моделирования как один из параметров системы.

2. Количество ловушек. Их начальные позиции и распределение в пространстве также определяются одним из классов, отвечающих за генерацию ловушек. Этот класс выбирается один раз до начала моделирования как один из параметров системы.

3. Класс поведения ловушек, который определяет действия при попадании частиц в ловушки.

4. Время проведения моделирования, которое определяет количество итераций алгоритма. Также задается количество итераций, по прошествии которых программа сохраняет конфигурацию системы.

5. Значение электрического поля в виде вектора. Координаты этого вектора задают вероятность смещения частицы в выбранном направлении.

6. Алгоритм движения частиц и способ взаимодействия при их столкновении.

Алгоритм движения частиц. На каждом временном шаге для каждой частицы случайным образом выбирается одно из четырех направлений (вдоль осей координат). Влияние электрического поля учитывается путем увеличения вероятности движения в направлении поля. В случае, если две частицы пытаются попасть на одну и ту же позицию, они «отталкиваются» и остаются на своих прежних местах. Если в столкновении участвует больше двух частиц, используется алгоритм разрешения коллизий, который в начале определяет все участвующие в столкновении частицы, а затем определяет итоговое положение для каждой из них.

Проверка на поглощение. При попадании частицы в позицию, в которой находится ловушка, частица удаляется из системы. За поведение ловушки отвечает отдельный класс, определяющийся при инициализации системы.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. W. Montroll and G. H. Weiss, *J. Math. Phys.* **6**, 167 (1965).
2. А. А. Овчинников, А. А. Белый, *Теорет. и эксперим. химия* **2**, 405 (1966).
3. Г. В. Рязанов, *ТМФ* **10**, 271 (1972).
4. И. М. Лифшиц, *УФН* **83**, 617 (1964).
5. Б. Я. Балагуров, В. Г. Вакс, *ЖЭТФ* **65**, 1600 (1973) [*Sov. Phys. JETP* **38**, 799 (1974)].
6. Б. Я. Балагуров, В. Г. Вакс, *ЖЭТФ* **65**, 1939 (1973).
7. V. E. Arkhincheev, *The Two-Parametric Scaling and New Temporal Asymptotic of Survival Probability of Diffusing Particle in the Medium With Traps*, *Chaos* **27**, 033117 (2017), DOI:10.1063/1.4979349.
8. В. Е. Архинчев, *Скейлинг в проблеме захвата диффундирующих частиц на поглощающие ловушки в электрическом поле*, *ЖЭТФ* **155**, 184 (2019).
9. В. Е. Архинчев, *Временная зависимость выживания диффундирующих частиц в многомерных средах с поглощающими ловушками в электрическом поле*, *ЖЭТФ* **157**, 97 (2020).
10. В. Е. Архинчев, *Новые временные асимптотики вероятности выживания при захвате частиц в средах с аномальной диффузией*, *ЖЭТФ* **158**, 853 (2020).
11. T. Berlioz, D. Venturelli, A. Grabsch et al., *Current Fluctuations in the Symmetric Exclusion Process Beyond the One-Dimensional Geometry*, *J. Stat. Mech.* 113508 (2024).
12. A. Grabsch, T. Berlioz, P. Rizkallah, P. Illien, and O. Bénichou, *Phys. Rev. Lett.* **132**, 037102 (2024).