

# 周期场中非各态历经布朗运动\*

卢 宏 覃 莉 包景东†

(北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2009 年 3 月 30 日收到, 2009 年 4 月 15 日收到修改稿)

将自由状态下呈弹道扩散的非各态历经系统置于周期场中, 进而将非各态历经布朗运动分为两类. 第一类是阻尼核的 Laplace 变换的低频为零的系统, 当温度远大于势垒高度时, 系统平均能量的动能部分依赖粒子的初始速度分布, 随温度降低, 系统的各态历经性得到恢复. 然后将第一类系统的稳定速度变量作为一个内部噪声, 再去驱动一个自由布朗粒子, 则阻尼核的 Laplace 变换在零频时为无穷大. 结果发现, 粒子扩散系数随温度的增加而趋于零, 显示一种经典局域化特征, 系统的渐进分布依赖于初始坐标分布. 这是第二类非各态历经性运动, 不能通过外加势而恢复.

关键词: 非各态历经, 非 Markov 布朗运动, 扩散系数, 噪声谱

PACC: 0540, 6610C, 8220F

## 1. 引 言

各态历经假设是平衡态统计物理与非平衡态统计物理的大部分研究工作的基础, 最早由 Boltzmann 提出. 一个正则系统在各态历经条件(即力学量系综平均等于它的时间平均)约束下, 系统长时间后一定走向平衡, 也就是它的稳定分布不依赖于其初始准备的坐标或速度. 迄今对非各态历经的研究主要集中在哈密顿系统和简单的自由场情形, 而对于随机系统和复杂势场情形则从未涉及. 很少有实例来帮助人们理解各态历经性被破坏的原因以及它与平衡性的关系. 这也是各态历经假设饱受争议的一方面原因. 近年来, 由于实验手段的进步, 人们对小系统(尺度小于 100 nm)行为的研究倾注了极大的兴趣, 发现满足涨落耗散定理的极端非欧姆摩擦系统(如弹道扩散系统和局域化系统)自由场中各态历经被破坏<sup>[1, 2]</sup>. 这种具有非各态历经特点的非平衡热力学, 无论在理论上还是在实验上都具有挑战性<sup>[3-5]</sup>.

运动粒子的布朗运动动力学演化遵守广义 Langevin 方程(GLE)<sup>[6]</sup>, 是描述非 Markov 随机过程的一种直观方式, 可应用于反常输运行为系统和复杂小系统的研究<sup>[7]</sup>. 另一方面, 很多物理、化学以及通信领域中的问题都可以用周期势的布朗运动模型进

行研究, 如约瑟夫森结、电荷密度波、超离子导体、外势场中的偶极子旋转、锁相环和同步现象、表面扩散等. 此外, 由于晶格的周期性结构, 周期势模型还被广泛应用于各种晶体材料和器件的研究.

为了使非各态历经问题的研究更具普遍意义, 本文考虑周期势中的非 Markov 布朗运动, 将非各态历经分为两类, 并在一个框架下来显示和讨论. 分析系统的平均能量及扩散系数对初始分布的依赖性; 比较两类非各态历经系统在外势作用下的特点; 特别研究了经典局域化系统的扩散系数随温度的变化情况.

## 2. 第一类非各态历经运动

用一种“带通”噪声, 即文献[8]提出的简谐速度噪声(HVN), 作为内部热噪声, 其阻尼核函数的 Laplace 变换在低频正比于频率. 这是一种声子谱, 是由系统速度与环境振子坐标的耦合所引起. 在零频处功率谱恒为零, Markov 低频摩擦(有效摩擦)为零. 已有的研究表明这种噪声诱发自由粒子发生热扩散的极限, 超弹道扩散(即粒子的方均位移正比于时间的平方). 现考虑一个单位质量的布朗粒子在这种噪声驱动下, 在一维周期势  $U(x) = -U_0 \cos(x)$

\* 国家自然科学基金(批准号: 310674016, 10875013)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 200800270005)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: jdbao@bnu.edu.cn

中运动,运动方程如下 GLE:

$$\ddot{x} + \int_0^t \beta(t-s)\dot{x}(s)ds + U'(x) = z(t), \quad (1)$$

式中  $\beta(t-s)$  是记忆阻尼核函数,  $z(t)$  代表简谐速度噪声, 满足 Kubo 涨落耗散定理  $z(t)z(s) = k_B T \beta(t-s)$ . 这里  $T$  为热浴温度, 阻尼核函数为

$$\beta(t-s) = \frac{\eta_0 \Gamma^2}{\mu_1^2 - \mu_2^2} [ -\mu_1 \exp(\mu_1 |t-s|) + \mu_2 \exp(\mu_2 |t-s|) ], \quad (2)$$

其中  $\mu_1$  和  $\mu_2$  为方程  $\mu^2 + \Gamma\mu + \Omega^2 = 0$  的两根,  $\Gamma$  和  $\Omega^2$  分别为 HVN 的阻尼和频率,  $\eta_0$  为 HVN 的低频 Markov 强度. 为了将方程(1) 转换成一个 Markov 型 Langevin 方程组<sup>[9,10]</sup>, 现引入两个中间变量<sup>[11]</sup>

$$\begin{aligned} \omega(t) &= - \int_0^t \beta(t-s)\dot{x}(s)ds + z(t), \\ u(t) &= - \int_0^t [ \dot{\beta}(t-s) + \Gamma\beta(t-s) ] \dot{x}(s)ds \end{aligned} \quad (3)$$

替换方程(1)中的积分项, 则运动方程转化为一个 6 维 Markov 型 Langevin 方程组, 即

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= v(t), \\ \dot{v}(t) &= \omega(t) + f(x(t)), \\ \dot{\omega}(t) &= -\Gamma\omega(t) - \eta_0 \Gamma v(t) \\ &\quad - \Omega^2 y(t) - u(t) + \Gamma \xi(t), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\dot{u}(t) = \Omega^2 (\omega(t) - z(t)),$$

$$\dot{y}(t) = z(t),$$

$$\dot{z}(t) = -\Gamma z(t) - \Omega^2 y(t) + \Gamma \xi(t).$$

这里噪声变量  $z(t), y(t)$  的初始分布满足两个独立的高斯分布, 其二次矩为

$$\begin{aligned} z_0^2 &= \eta_0 \Gamma k_B T, \\ y_0^2 &= \frac{\eta_0 \Gamma k_B T}{\Omega^2}. \end{aligned}$$

由(3)式可知,  $\omega(t)$  和  $u(t)$  的初始分布条件为  $\omega_0 = z_0, u_0 = 0$ .

我们使用二阶随机 Runge-Kutta 方法<sup>[12,13]</sup> 对方程组(4) 进行数值模拟. 取粒子的初始速度分布为高斯函数, 满足  $\{v(0)\} = 0, \{v^2(0)\} = k_B T_0/m$ , 其中  $\{\cdot\}$  代表初始值平均,  $T_0$  为系统初始温度.

### 2.1. 系统初始准备对其稳定分布的影响

图 1 给出了不同温度下布朗粒子的平均动能  $E_k$  和平均势能  $E_p$  随时间的变化, 这里粒子的初始坐标选为坐标原点, 但初始温度分布不同. 可见, 在低温到中等温度, 如  $T=1$  时, 粒子稳态的平均动能不依赖初始速度; 当温度升高, 如  $T=5$  时, 稳态平均动能依赖初始速度, 平均势能的稳态值在  $T=1$  和  $T=5$  两种情况下, 都与初始速度分布无关. 这表

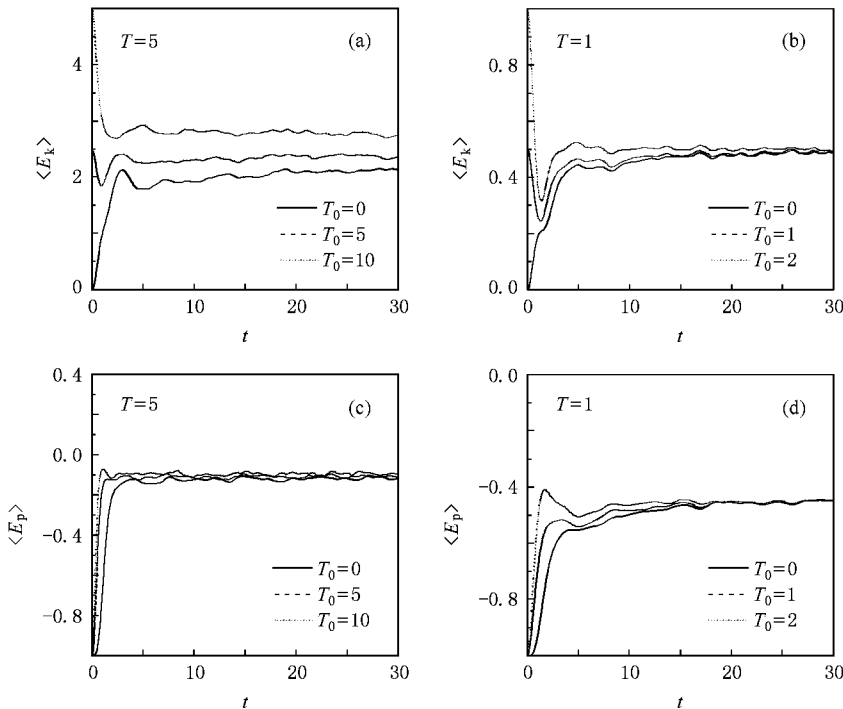


图 1 不同温度和初始速度分布下布朗粒子的平均动能和平均势能  $U_0 = 1, \Delta t = 0.001, \Gamma = 1, \Omega = 1, \eta_0 = 1, \{v_0^2\} = k_B T_0, \{x_0\} = 0$   
 (a)  $E_k, T=5, T_0=0, 5, 10$  (b)  $E_k, T=1, T_0=0, 1, 2$  (c)  $E_p, T=5, T_0=0, 5, 10$  (d)  $E_p, T=1, T_0=0, 1, 2$

明粒子的速度是一个非各态历经变量,而坐标是一个各态历经变量.因为当温度远大于势垒高度时,粒子运动很活跃,周期场的束缚作用弱小,粒子相当于在自由场中运动.由于系统的有效摩擦  $\hat{\beta}(0) = \int_0^\infty \beta(t) dt$  等于零,导致系统与环境之间的能量交换不充分,粒子的初始动能没有被完全消耗掉,即它的速度二次矩对其初始准备有记忆,表现为非各态历

经.而低温时,粒子被束缚在势场极小处,这时周期场的作用相当于束缚场,则外势场弥补了系统能量耗散及热浴传递给系统热能量的不足,系统的各态历经性得以恢复.

在图 2 中,我们考察了不同温度下,粒子初始坐标准备对平均势能和平均动能渐进结果的影响.从图 2 可见,长时间后粒子的平均动能和平均势能都不依赖于初始坐标的选择.

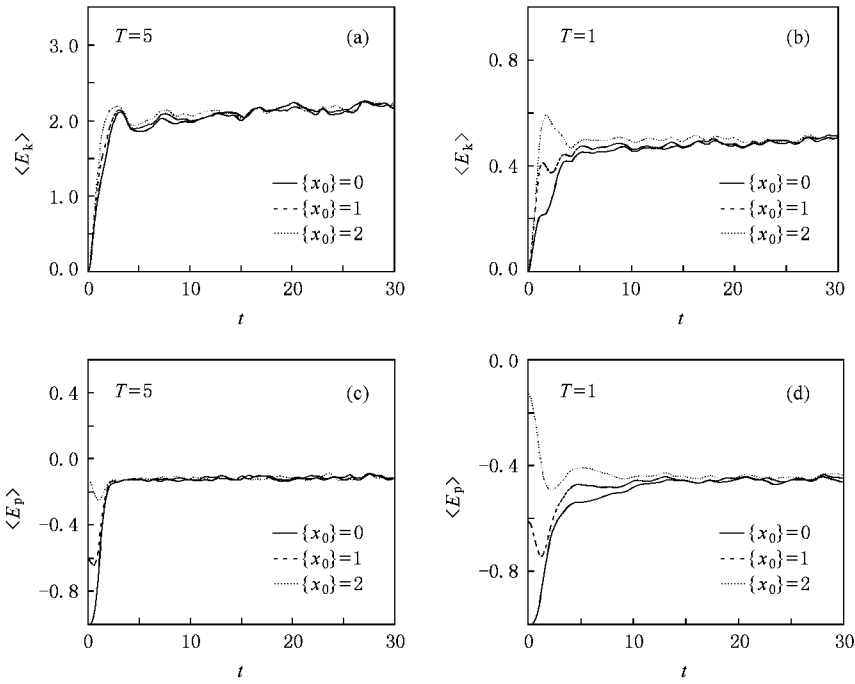


图 2 不同温度和初始坐标分布下布朗粒子的平均动能和平均势能  $U_0 = 1, \Delta t = 0.001, \Gamma = 1, \Omega = 1, \gamma_0 = 1, \{v_0\} = 0, \{x_0\}$  分别为 0, 1, 2 (a)  $E_k, T = 5, \{x_0\} = 0, 1, 2$  (b)  $E_k, T = 1, \{x_0\} = 0, 1, 2$  (c)  $E_p, T = 5, \{x_0\} = 0, 1, 2$  (d)  $E_p, T = 1, \{x_0\} = 0, 1, 2$

由以上结果和分析可知:阻尼核函数的 Laplace 变换低频为零的粒子在周期场中运动时,非各态历经性和各态历经性随温度的变化而发生转换.高温时,粒子相当于在自由场中做弹道扩散,系统的稳态平均动能依赖于它的初始速度准备,呈现非各态历经性.随着温度的降低,粒子受到势的束缚作用,各态历经性得到恢复.如果布朗运动的速度是非各态历经变量,而坐标是各态历经变量,本文称为第一类非各态历经运动,其可通过一个外部束缚势场得以恢复.

### 2.2. 谱密度分析

若一个随机变量能被当作噪声,其关联函数必须具有时间平移不变性.现考查周期场中粒子的速度变量,图 3 为它的关联函数曲线.从中可以看到,速度关联是稳定的,因此可以把这个随机变量  $v(t)$

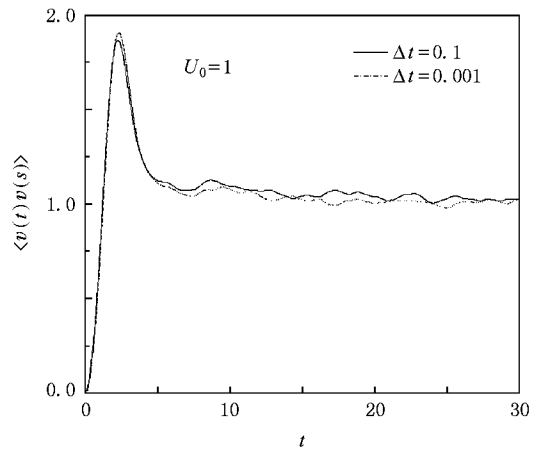


图 3 噪声关联函数 时间步长  $\Delta t$  分别取 0.1, 0.001,  $T = 1$

作为一个噪声源.我们对关联函数进行如下 Laplace 变换:

$$S(\omega) = \int_0^{\infty} \nu(t)\nu(0) \exp(-\omega t) dt. \quad (5)$$

图 4 给出了  $S(\omega)$  曲线. 在低温 (如  $T=0.5$ ) 时,  $S(\omega)$  在零频处为一有限值; 在高温 (如  $T=5$ ) 时,  $S(\omega)$  在零频附近发散, 这与自由场的结果相似. 若这种噪声被当作内部噪声, 根据涨落耗散定理可知, 记忆阻尼核函数的 Laplace 变换在低频发散, 即系统的 Markov 阻尼强度趋于无穷大. 故此系统的功率谱依赖于热浴温度  $T$ , 特别是当温度远大于周期势场的位垒高度时, 系统的有效阻尼无穷大, 将在自由粒子初始所处的位置上添加一个阻尼陷阱.

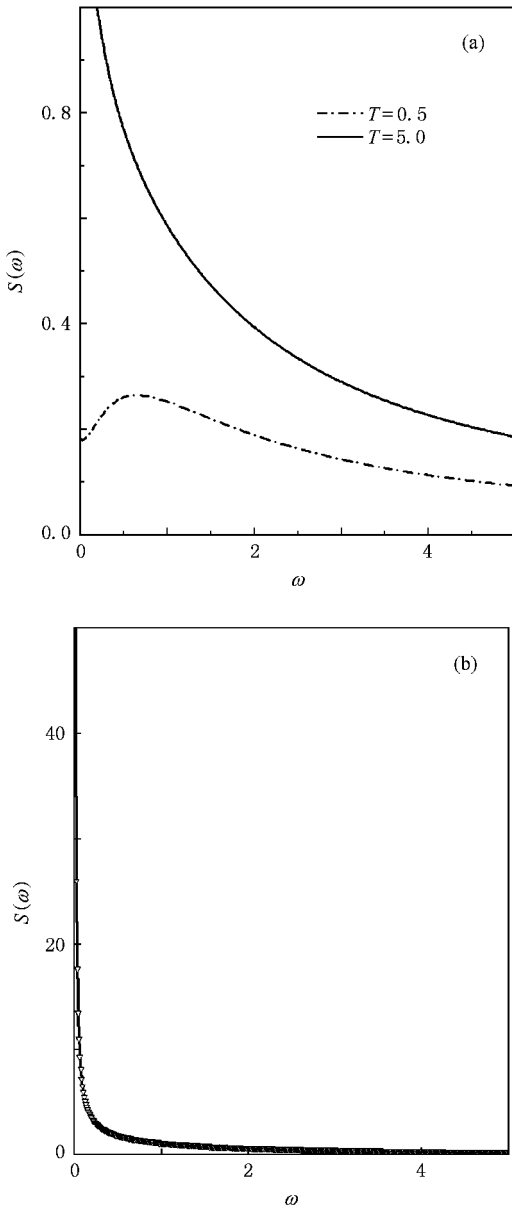


图 4 阻尼核函数的 Laplace 变换随频率的变化 (a) 周期场情形, (b) 自由场

### 3. 第二类非各态历经运动

#### 3.1. 模型的建立

现用以上噪声  $\epsilon(t) = \nu(t)$  去驱动另外一个自由粒子, 仍用 GLE 来描述. 但由于周期场的存在, 无法写出阻尼核函数的解析形式, 因此粒子的运动方程不能写成一个显式. 下面我们通过数值方法来构造 GLE. 记  $\chi(t)$  和  $\nu(t)$  为一维数组, 分别记录  $N$  个轨道在不同时刻阻尼核的值和粒子的速度. 稳态的噪声  $\epsilon(t)$  满足 Kubo 涨落耗散定理

$$\epsilon(t)\epsilon(s) = k_B T \chi(t-s).$$

第  $j$  个粒子  $t$  时刻 ( $t = i\Delta t$ , 其中  $\Delta t$  为时间步长) 的记忆速度项

$$\int_0^t \chi(t-s)\nu(s) ds = \sum_{k=0}^{i-1} \chi[i-k]\Delta t \nu(k\Delta t)\Delta t,$$

则粒子运动的方程组可表示为如下形式:

$$\begin{aligned} \dot{X} &= V, \\ \dot{V} &= - \sum_{k=0}^{i-1} \chi[i-k]\Delta t \nu(k\Delta t)\Delta t + \epsilon(t). \end{aligned} \quad (6)$$

对  $N$  个轨道分别运行  $M$  步之后, 即在  $t = M\Delta t$  时刻, 得到粒子的坐标二次矩  $X^2(t)$  和速度二次矩  $V^2(t)$  的一组数据.

图 5 显示了自由粒子的坐标和速度二次矩随时间的变化曲线. 从图 5 可见, 长时间后粒子的方均位移不再随时间增长, 相当于粒子的扩散被局域化. 粒子的坐标二次矩的渐进值依赖于坐标的初始准备, 而速度二次矩依然满足能量均分定理, 其渐进值不依赖它的初始值. 故此粒子的坐标是一个非各态历经变量, 而速度是一个各态历经变量.

图 6 为加入简谐势后粒子坐标二次矩随时间的变化. 从图 6 可见, 长时间后坐标二次矩依然依赖于坐标的初始值, 即这种非各态历经性不能通过外加束缚势恢复到各态历经. 这是因为局域化时, 系统的有效摩擦强度为无穷大, 粒子被局域在其初始位置附近作振荡, 导致原来的自由系统不能随时间的增长而无限地扩散. 即使加上一个外部束缚势, 粒子坐标二次矩的渐进值仍依赖于初始分布, 那么系统就不可能恢复各态历经性.

#### 3.2. 扩散系数

扩散系数是反映系统扩散能力的一个重要序参

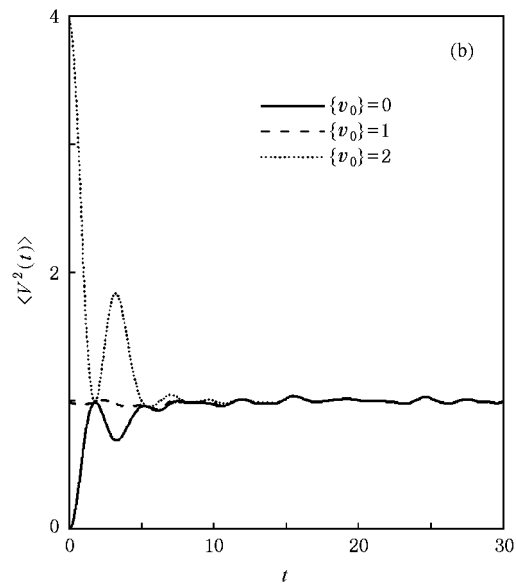
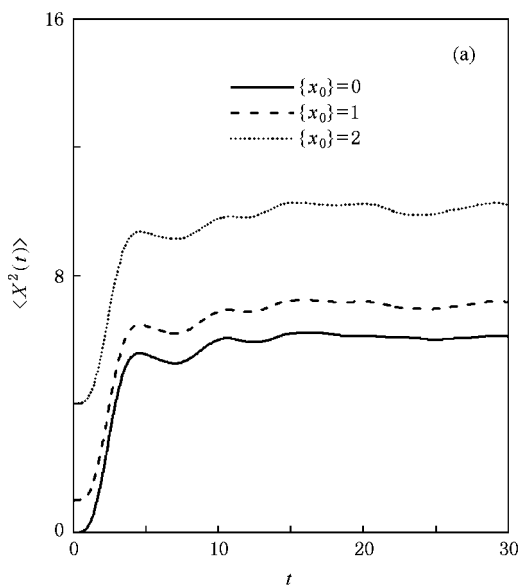


图 5 不同初始坐标准备下自由布朗粒子的坐标和速度二次矩  
 $T=1, \Gamma=1, \Delta=1, \eta_0=1, \Delta t=0.001, \{x_0\}=0$  (a)  $\{x_0\}=0$  (b)  $\{x_0\}=0$

量. 对于正常扩散, 有  $\langle X^2(t) \rangle - \langle X(t) \rangle^2 = 2Dt$ . 根据 Kubo 理论, 扩散系数  $D$  一般定义为<sup>[14,15]</sup>

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} [\langle X^2(t) \rangle - \langle X(t) \rangle^2] = \int_0^\infty \langle V(t)V(0) \rangle dt. \quad (7)$$

在图 7 中, 我们研究了此系统的扩散系数随温度的变化, 其中  $D_0 = \eta_0 k_B T$  是自由粒子的扩散系数, 这里取  $\eta_0 = 1, k_B = 1$ . 得到的重要结果如下: 扩散系数  $D$  随热浴温度呈现非单调变化. 低温时,  $D$  随  $T$  的增大而增加, 达到一个峰值; 随着温度的升

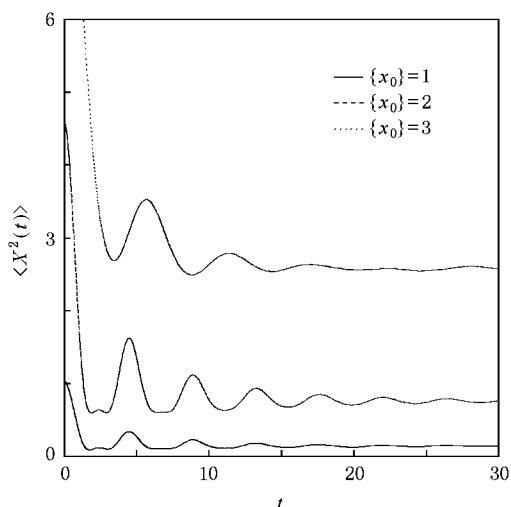


图 6 简谐势中粒子的坐标二次矩随时间的变化规律  $\omega=1, T=1, \Gamma=1, \Delta=1, \eta_0=1, \Delta t=0.001, \{V_0\}=0$

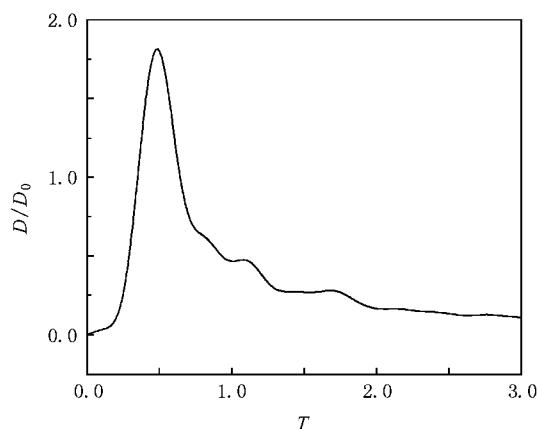


图 7 扩散系数随温度的变化曲线

高, 扩散系数  $D$  减小, 最后趋于消失. 我们用噪声的功率谱在零频处的特征来解释这种非单调行为. 令  $C_v(t) = \langle V(t)V(0) \rangle$ , 代表速度关联函数, 其 Laplace 变换为

$$\hat{C}_v(\omega) = \int_0^\infty C_v(t) e^{-\omega t} dt = \frac{C_v(0)}{\omega + S(\omega)}, \quad (8)$$

其中  $S(\omega)$  为阻尼核的 Laplace 变换. 把 (8) 式代入 (7) 式, 可得到扩散系数的另一种表达式, 即

$$D = \hat{C}_v(0) = \frac{C_v(0)}{S(0)}. \quad (9)$$

(6) 式表明, 扩散系数  $D$  与  $S(0)$  成反比. 我们知道, 有限温度情况下, 阻尼核的 Laplace 变换在零频处取极小值, 如图 4 中  $T=0.5$  的情形, 功率谱在零频处

小于  $l$ . 因此扩散系数存在一个峰值  $D_{\max}$ , 且  $D_{\max} > D_0$ , 此时的噪声加剧粒子的扩散. 高温时, 如图 4 中  $T = 5$  的情形, 噪声功率谱在零频处无穷大. 根据(9)式, 扩散系数  $D \rightarrow 0$ , 即粒子不发生扩散.

## 4. 结 论

本文建立了一个非 Markov 周期场模型, 把两类非各态历经系统纳入一个框架中进行分析和研究, 进而阐明了两类非各态历经系统的特点以及各态历经性被破坏的原因. 周期场中的布朗运动随热浴温度的变化呈现非各态历经性和各态历经性的恢复.

当温度远大于势垒高度时, 稳态的平均动能依赖于粒子的初始速度分布, 是非各态历经的. 随着温度的降低, 各态历经性得到恢复. 这类阻尼核的 Laplace 变换低频为零的系统是第一类非各态历经. 若阻尼核的 Laplace 变换在零频处为无穷大, 则粒子坐标二次矩的渐进值依赖于初始坐标分布, 这种非各态历经性不能通过加束缚势而恢复到各态历经性, 被称为第二类非各态历经运动. 此外, 还用 Monte-Carlo 方法数值计算了第二类系统的扩散系数, 发现其随温度的增加呈非单调变化, 最后趋于零, 显示为一种经典局域化.

- 
- [ 1 ] Moreira A A , Luís A , Amaral N 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 218702
- [ 2 ] Bai Z W , Meng G Q 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7477 ( in Chinese )  
[ 白占武、蒙高庆 2008 物理学报 **57** 7477 ]
- [ 3 ] Bao J D , Hänggi P , Zhuo Y Z 2005 *Phys. Rev. E* **72** 061107
- [ 4 ] Jabbari F S , Hajime T , Wegdam G H , Bonn D 2008 *Phys. Rev. E* **78** 061405
- [ 5 ] Lubelski A , Sokolov I M , Klafter J 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 250602
- [ 6 ] Mori H 1965 *Prog. Theor. Phys.* **33** 423
- [ 7 ] Bao J D , Zhuo Y Z , Oliveira F A , Hänggi P 2006 *Phys. Rev. E* **74** 061111
- [ 8 ] Bao J D , Song Y L , Qin J , Zhuo Y Z 2005 *Physica E* **72** 011113
- [ 9 ] Bao J D , Li R W , Wu W 2004 *J. Comput. Phys.* **197** 241
- [ 10 ] Bao J D 2004 *J. Stat. Phys.* **114** 112
- [ 11 ] Bai Z W , Bao J D , Song Y L 2005 *Phys. Rev. E* **72** 061105
- [ 12 ] Honeycutt R L 1992 *Phys. Rev. A* **45** 600
- [ 13 ] Bao J D 2009 *Random Simulation Method of Classical and Quantum Dissipation System* ( Beijing : Science Press ) pp105—135 ( in Chinese ) [ 包景东 2009 经典和量子耗散系统的随机模拟方法(北京 科学出版社)第 105—135 页 ]
- [ 14 ] Munakata T , Kawakatsu T 1985 *Prog. Theor. Phys.* **74** 262
- [ 15 ] Gehlen S V , Evstigneev M , Reimann P 2008 *Phys. Rev. E* **77** 031136

# Nonergodicity of Brownian motion in a periodic potential<sup>\*</sup>

Lu Hong Qin Li Bao Jing-Dong<sup>†</sup>

( *Department of Physics , Beijing Normal University , Beijing 100875 , China* )

( Received 30 March 2009 ; revised manuscript received 15 April 2009 )

## Abstract

Nonergodicity in Brownian dynamics can be divided into two classes by adding a periodic potential in a force-free ballistic diffusive system. Class-I is the system in which the Laplace transform of the damping kernel is equal to zero at low frequency. When the temperature is much higher than the barrier height, the kinetic part of the mean energy depends on the initial distribution of the velocity; with the temperature decreasing, the ergodicity is recovered. Thinking the stable velocity variance of class-I as an internal noise to drive a force-free Brownian particle, the Laplace transform of the damping kernel is infinite at zero frequency. It is found that the diffusion coefficient approaches vanishing with the temperature increasing, which exhibits the characteristic of classical locality. The asymptotic mean-square coordinates of the class-II depends on its initial coordinates and the ergodicity cannot be ensured through introducing a potential.

**Keywords** : nonergodicity , non-Markovian Brownian motion , diffusion coefficient , spectra of noise

**PACC** : 0540 , 6610C , 8220F

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10674016 , 10875013 ) and the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education Institutions , China ( Grant No. 200800270005 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : jdbao@bnu.edu.cn