



Faculteit Wetenschappen
Bachelorproef Theoretische Fysica

Stroomfluctuaties en negatieve differentiële mobiliteit.

Jonas Berx

Promotor: Dr. Mieke Gorissen

Academiejaar 2015-2016

ABSTRACT

Jonas Berx

Stroomfluctuaties en negatieve differentiële mobiliteit

in periodieke roosters

Negatieve differentiële mobiliteit (NDM) is in de wetenschappelijke literatuur nog altijd een vrij nieuw begrip. Daarom is hierrond nog maar weinig onderzoek verricht.

Dit werk probeert een beter begrip te schetsen van dit fenomeen aan de hand van enkele computermodellen en analytische berekeningen. De uitgevoerde berekeningen en simulaties geven aan dat voor de bestudeerde modellen de keuze van normering sterk bepaalt of NDM al dan niet aanwezig is. Ook wordt hier de geïnduceerde barrièrestroom bestudeerd en wordt er geprobeerd een verklaring te vinden voor de stijging van de geïnduceerde barrièrestroom met het aangelegd krachtveld.

Inhoudsopgave

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Inleiding | 7 |
| 2 | Analytische berekeningen | 9 |
| 2.1 | Model 1: Obstructies in één laan | 9 |
| 2.1.1 | Oplossen door middel van een Mastervergelijking | 10 |
| 2.1.2 | Oplossen door middel van de cumulanten genererende functie | 12 |
| 2.2 | Model 2: Alternerende obstructies | 15 |
| 2.2.1 | Model 2A | 16 |
| 2.2.2 | Model 2B | 17 |
| 3 | Simulatie van de roosters | 19 |
| 3.1 | Simulatie in 1D: <i>two-lane</i> model | 19 |
| 3.2 | Simulatie in 2D: $L \times L$ periodiek rooster | 21 |
| 4 | Conclusie | 29 |
| 5 | Dankwoord | 31 |
| A | Afleidingen en bewijzen | 33 |
| A.1 | Afleidingen | 33 |
| A.2 | Bewijzen | 35 |
| B | Figuren | 37 |
| | Bibliografie | 41 |

Hoofdstuk 1

Inleiding

De evenredigheid tussen het aangelegd krachtveld en de resulterende snelheid van een deeltje wordt de mobiliteit genoemd. In veel literatuur wordt deze als constant en daarmee onafhankelijk van het aangelegd krachtveld beschouwd. In de werkelijkheid is vaak het tegengestelde waar. De mobiliteit hangt van de kracht af op een manier die uniek is voor elk systeem. Een fenomeen dat vaak voorkomt als er gewerkt wordt met mobiliteit is negatieve differentiële mobiliteit of NDM.

Zoals de naam al doet vermoeden duidt dit op systemen waarbij de afgeleide van de mobiliteit naar het aangelegd krachtveld negatief is $\mu \equiv \partial v / \partial F < 0$. Intuïtief betekent dit dat wanneer het krachtveld toeneemt, de snelheid van de deeltjes die onderhevig zijn aan dit krachtveld zal afnemen. Dit kan voorgesteld worden als een rooster met rigide barrières waar deeltjes achter vast komen te zitten met een zekere kans die afhankelijk is van het aangelegd veld. Deze gevangen deeltjes dragen dan (tijdelijk) niet meer bij tot de resulterende stroom en deze zal bijgevolg dus afnemen bij toenemend krachtveld.

Dit "*Getting more from pushing less*" [1] gedrag kan zeer gemakkelijk aangetoond worden voor een *two-lane model*, oftewel een model met twee banen. In deze banen kunnen rigide wanden geplaatst worden die deeltjes voor bepaalde tijd zullen verhinderen verder in de richting orthogonaal aan deze wanden te bewegen.

NDM komt bijvoorbeeld voor in bepaalde modellen voor Brownse motoren of voor elektron-overdracht in halfgeleiders op lage temperaturen [2].

Dit werk is gebaseerd op het artikel "*Role of trapping and crowding as sources of negative differential mobility*" [3]. Hierin worden verschillende methoden om NDM te modelleren voorgesteld. Het doel van dit werk is om de resultaten van deze paper te herhalen en vervolgens te interpreteren en deels uit te breiden. De paper focust vooral op de deeltjesstroom en het voorkomen van NDM zelf terwijl hier ook de geïnduceerde barrièrestroom wordt onderzocht.

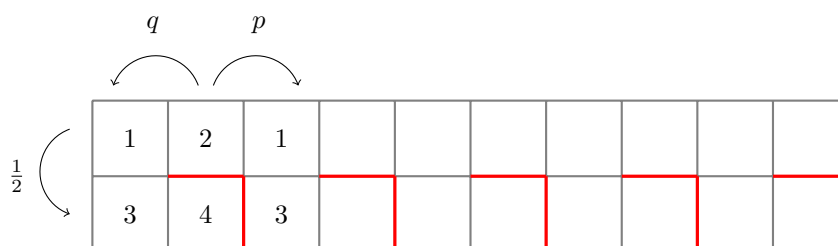
Hoofdstuk 2

Analytische berekeningen

Enkele simpele *toy models* voor de stroom in een rooster kunnen analytisch nog berekend worden. Een goed type model is een *two-lane* model bestaande uit twee banen met obstructies die op verschillende wijzen kunnen worden geplaatst. Meer ingewikkelde modellen met meer parameters zijn al snel niet meer analytisch te berekenen.

2.1 Model 1: Obstructies in één laan

Het eerste model bestaat uit een 2D rooster waarbij periodieke randvoorwaarden optreden. Dit betekent dat één "cel" beschouwd kan worden als representatie voor het volledige systeem. Een cel bestaat uit een rooster van vier toestanden waarin een deeltje zich kan bevinden. In de benedenhoek van het rooster is een L-vormige obstructie geplaatst, zodat deeltjes die hierin terecht komen niet verder naar rechts kunnen springen. Over het rooster wordt vervolgens een veld F aangelegd (gravitationeel, elektrisch etc.) van links naar rechts zodat deeltjes zich ook van links naar rechts zullen bewegen door middel van Markoviaanse spring-processen.



Figuur 2.1. Model 1: 2D rooster met L-vormige obstructies.

Om het model eenvoudig te houden wordt gekozen om $k_B T = 1$ te stellen en de afstand tussen roosterzellen ook 1 te nemen. *Detailed balance* treedt op wanneer volgende relatie geldt [3]:

$$k(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \exp(U(\mathcal{C}')) = k(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \exp(U(\mathcal{C})) \quad (2.1)$$

Dit betekent dat in evenwicht elke Markov-sprong uitgebalanceerd wordt door zijn inverse sprong. Met $U(\mathcal{C})$ de energie voor de configuratie \mathcal{C} . Wanneer de sprong $\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'$ in de richting van de kracht is, wordt het energieverval gewoon de arbeid $U(\mathcal{C}) - U(\mathcal{C}') = F$. Wanneer de sprong orthogonaal is aan de richting van de kracht zal $U(\mathcal{C}) = U(\mathcal{C}')$ zijn. De kansen om naar rechts en naar links te springen voldoen aan *detailed balance* en zijn respectievelijk

$$p = \frac{e^{F/2}}{e^{F/2} + e^{-F/2}} \quad q = \frac{e^{-F/2}}{e^{F/2} + e^{-F/2}}, \quad (2.2)$$

terwijl de kansen om naar boven en naar onder te springen gelijk zijn aan $1/2$, zie Figuur 2.1.

2.1.1 Oplossen door middel van een Mastervergelijking

De kans dat een deeltje op tijdstip $t + \Delta t$ zich in een toestand \mathcal{C} bevindt wordt gegeven door

$$P(\mathcal{C}, t + \Delta t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} P(\mathcal{C}', t) w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \Delta t + (1 - r(\mathcal{C}) \Delta t) P(\mathcal{C}, t) \quad (2.3)$$

met

$$r(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \quad (2.4)$$

de *escape rate* ("ontsnappingsnelheid") uit configuratie \mathcal{C} .

Termen verplaatsen geeft

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathcal{C}, t)}{\partial t} &= \frac{P(\mathcal{C}, t + \Delta t) - P(\mathcal{C}, t)}{\Delta t} \\ &= \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} [P(\mathcal{C}', t) w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) - w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') P(\mathcal{C}, t)] \end{aligned} \quad (2.5)$$

Als $t \rightarrow \infty$, zal het systeem naar een evenwichtstoestand evolueren, de *steady-state* oplossing. Hierbij is het systeem tijdsafhankelijk en bijgevolg verdwijnt de tijdsafgeleide in vgl. 2.5. De mastervergelijking wordt

$$\sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} [P^*(\mathcal{C}') w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) - w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') P^*(\mathcal{C})] = 0 \quad (2.6)$$

Waarbij $P^*(\mathcal{C})$ nu de stationaire toestand voor configuratie \mathcal{C} is. In het geval van het roostermodel met haken geeft deze formule een stelsel van vier vergelijkingen met vier onbekenden.

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{3}{2}P^*(1) + P^*(2) + \frac{1}{2}P^*(3) + 0P^*(4) = 0 \\ P^*(1) - P^*(2) + 0P^*(3) + 0P^*(4) = 0 \\ \frac{1}{2}P^*(1) + 0P^*(2) - \left(\frac{1}{2} + p\right)P^*(3) + qP^*(4) = 0 \\ 0P^*(1) + 0P^*(2) + pP^*(3) - qP^*(4) = 0 \end{array} \right.$$

met p, q zoals in (2.2). In matrixvorm:

$$\begin{pmatrix} -\frac{3}{2} & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & -(\frac{1}{2} + p) & q \\ 0 & 0 & p & -q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P^*(1) \\ P^*(2) \\ P^*(3) \\ P^*(4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

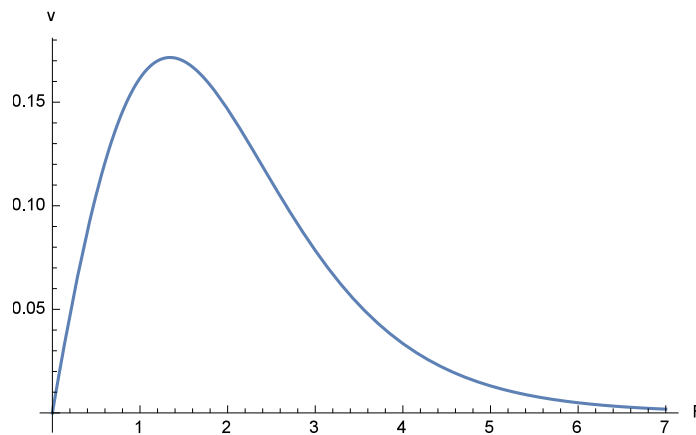
De steady-state oplossingen worden dan gegeven door:

$$\begin{cases} P^*(1) = \frac{e^{-F}}{\mathcal{Z}} \\ P^*(2) = \frac{e^{-F}}{\mathcal{Z}} \\ P^*(3) = \frac{e^{-F}}{\mathcal{Z}} \\ P^*(4) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \end{cases} \quad (2.8)$$

met $\mathcal{Z} = 1 + 3e^{-F}$ een normeringsfactor. De snelheid van een deeltje in het rooster is dan

$$\begin{aligned} v(F) &= p(P^*(1) + P^*(2)) - q(P^*(1) + P^*(2)) + pP^*(3) - qP^*(4) \\ &= (p - q)(P^*(1) + P^*(2)) + pP^*(3) - qP^*(4) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Geplot geeft dit het verloop zoals in Figuur 2.2 . Hier is duidelijk te zien dat er een gebied is waarbij er NDM optreedt. Dit wordt veroorzaakt doordat deeltjes die vast komen te zitten achter een obstructie in de onderste laan niet meer bijdragen aan de stroom in de richting van F .



Figuur 2.2. De snelheid van deeltjes in het rooster met haken in functie van het aangelegd veld. Er is een duidelijk gebied met NDM te zien.

2.1.2 Oplossen door middel van de cumulanten genererende functie

De Cumulanten Genererende Functie (CGF) wordt gedefinieerd als volgt

$$\mu(s, t) = \frac{\ln \langle e^{-sJ(t)} \rangle}{t} \quad (2.10)$$

Met $J(t)$ de stroom die gedefinieerd wordt als het aantal deeltjes dat per tijdseenheid van configuratie \mathcal{C} naar $\mathcal{C} + 1$ beweegt. Het voorkomen van $\langle \cdot \rangle$ duidt er op dat het om een gemiddelde over de historiek van stroom gaat. De eerste afgeleide van de CGF genereert de gemiddelde stroom per tijdseenheid

$$\left. \frac{\partial \mu(s, t)}{\partial t} \right|_{s=0} = \frac{\langle J(t) \rangle}{t} \quad (2.11)$$

De tweede afgeleide genereert de variantie

$$\left. \frac{\partial^2 \mu(s, t)}{\partial t^2} \right|_{s=0} = \frac{\langle J(t)^2 \rangle - \langle J(s) \rangle^2}{t} = \frac{\sigma^2(J(t))}{t} \quad (2.12)$$

Om hetzelfde formalisme aan te houden als in de vorige paragraaf introduceren we hetzelfde rooster met periodieke randvoorwaarden en *jump rates*. De mastervergelijking is dan dezelfde als in (2.5):

$$\frac{\partial P(\mathcal{C}, t)}{\partial t} = \frac{P(\mathcal{C}, t + \Delta t) - P(\mathcal{C}, t)}{\Delta t} = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} [P(\mathcal{C}', t)w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) - w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')P(\mathcal{C}, t)]$$

Nu kan de stroom geïntroduceerd worden in de vergelijking:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathcal{C}, J, t)}{\partial t} &= \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})P(\mathcal{C}', J, t) \\ &+ \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})P(\mathcal{C}', J - 1, t) \\ &+ \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})P(\mathcal{C}', J + 1, t) \\ &- r(\mathcal{C})P(\mathcal{C}, J, t) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Hierin is $P(\mathcal{C}, J, t)$ de kans dat het systeem op tijdstip t in configuratie \mathcal{C} zit met een stroom J . Vervolgens kan de vergelijking getransformeerd worden door middel van een Discrete Laplace Transformatie (DLT):

$$\hat{P}(\mathcal{C}, s, t) = \sum_{J=0}^{\infty} e^{-sJ} P(\mathcal{C}, J, t) \quad (2.14)$$

De mastervergelijking wordt dan

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{P}(\mathcal{C}, s, t)}{\partial t} &= \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \hat{P}(\mathcal{C}', s, t) \\
&+ \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) e^{-s} \hat{P}(\mathcal{C}', s, t) \\
&+ \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} w(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) e^s \hat{P}(\mathcal{C}', s, t) \\
&- r(\mathcal{C}) \hat{P}(\mathcal{C}, s, t)
\end{aligned} \tag{2.15}$$

De mastervergelijking kan dan door middel van een kwantummechanisch bra-ket formalisme met de toestanden $|\mathcal{C}\rangle$ als basisvectoren herschreven worden als een matrixvergelijking zodat $\hat{P}(\mathcal{C}, s, t) = \langle \mathcal{C} | \hat{P}(s, t) \rangle$ (zie Stelling 1 in appendix A voor de uitwerking)

$$\frac{\partial |\hat{P}(s, t)\rangle}{\partial t} = H(s) |\hat{P}(s, t)\rangle \tag{2.16}$$

De formele oplossing van deze vergelijking is

$$|\hat{P}(s, t)\rangle = e^{H(s)t} |\hat{P}(s, 0)\rangle \tag{2.17}$$

$H(s)$ wordt de gemodificeerde stochastische generator genoemd:

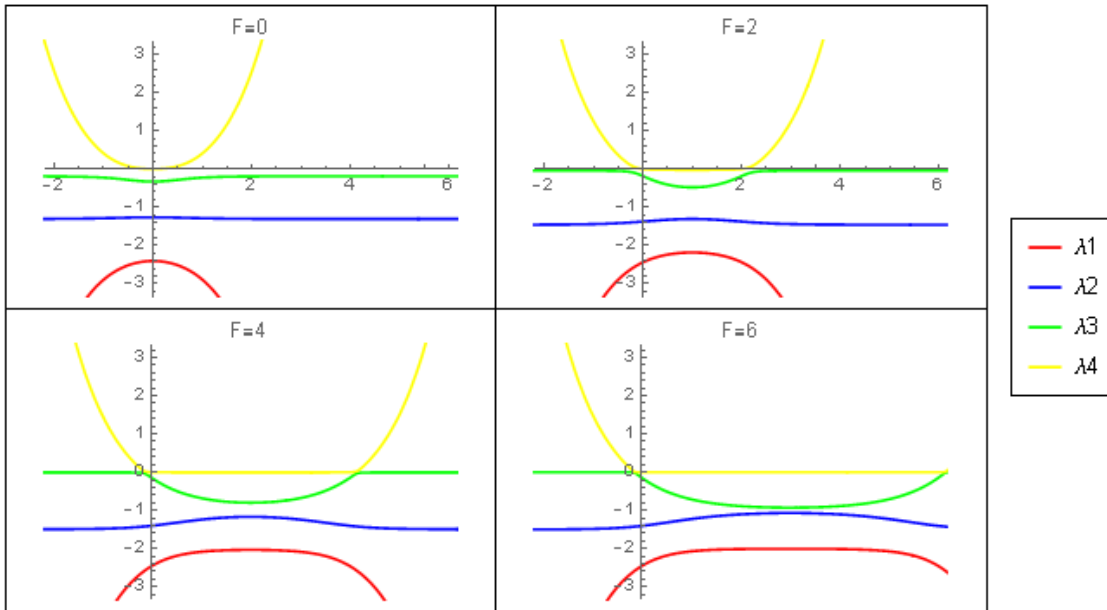
$$H(s) = \begin{pmatrix} -\frac{3}{2} & qe^s + pe^{-s} & \frac{1}{2} & 0 \\ pe^{-s} + qe^s & -1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & -(\frac{1}{2} + p) & q \\ 0 & 0 & p & -q \end{pmatrix} \tag{2.18}$$

Voor $s = 0$ vereenvoudigt deze stochastische generator tot de overgangsmatrix waarbij de diagonaalelementen de *escape rates* en de niet-diagonaalelementen de overgangswaarschijnlijkheden van de verschillende toestanden zijn.

De *steady-state* oplossing zal voor $t \rightarrow \infty$ bepaald worden door de grootste eigenwaarde van deze stochastische generator $H(s)$. Aangezien de eigenwaarden functies van s zijn, is de notie van "grootste" eigenwaarde natuurlijk volledig bepaald door de waarde van s . De vier eigenwaarden kunnen geplotted worden in functie van s voor verschillende waarden van F zodat de grootste eigenwaarde bepaald kan worden. In Mathematica levert dit Figuur 2.3 op.

In Figuur 2.3 is duidelijk te zien dat de eigenwaarde overeenkomstig met λ_4 de grootste is. Deze komt exact overeen met de uitdrukking van de CGF (Stelling 1, appendix A.2) en kan dus overeenkomstig met vergelijking (2.11) afgeleid worden om de stroom of de snelheid te vinden. Deze is

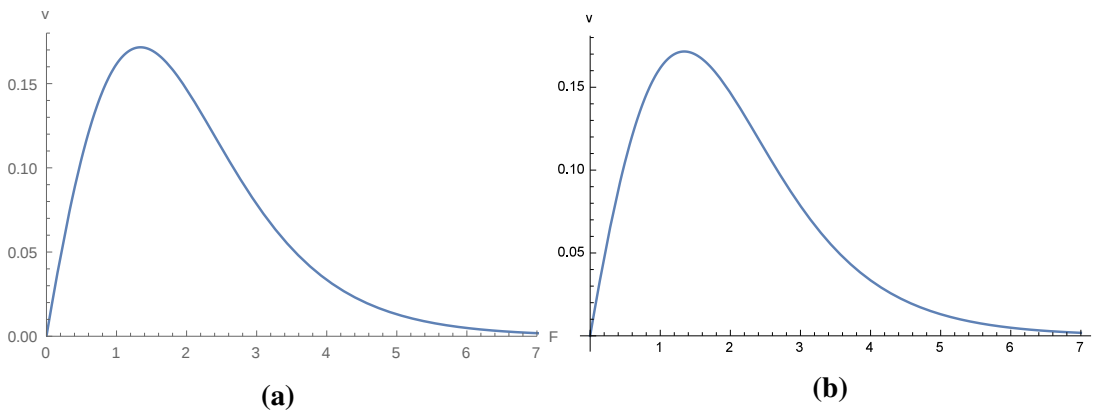
$$\frac{\langle J(t) \rangle}{t} = \left. \frac{\partial(\lambda_4)}{\partial s} \right|_{s=0} \tag{2.19}$$



Figuur 2.3. De vier eigenwaarden van de stochastische generator $H(s)$ in functie van s voor F respectievelijk 0, 2, 4 en 6. In alle vier de figuren is de eigenwaarde λ_4 de grootste.

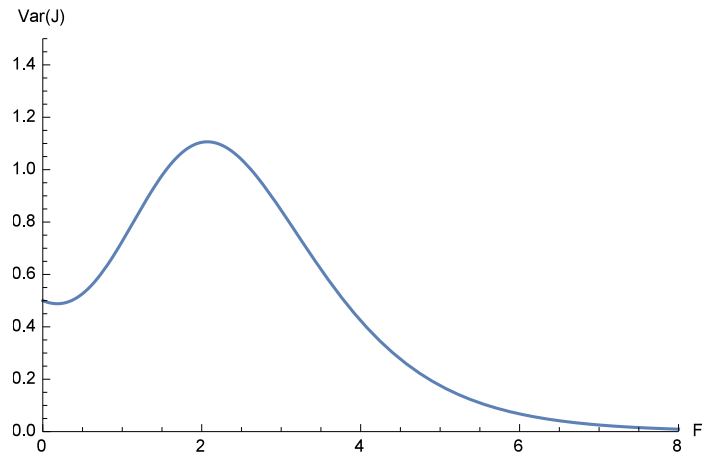
De stroom kan dan uitgezet worden in functie van het aangelegd veld, zodat er weer een gebied met NDM optreedt. Dit is te zien in Figuur 2.4a.

$$\frac{\sigma^2(J(t))}{t} = \left. \frac{\partial^2(\lambda_4)}{\partial s^2} \right|_{s=0} \quad (2.20)$$



Figuur 2.4. Vergelijking van de stroom berekend met de CGF (a) en door middel van de Mastervergelijking (b).

De resultaten verkregen door het oplossen van de Mastervergelijking en door het toepassen van de CGF zijn identiek (Figuur 2.4). Dit is ook de logische conclusie aangezien de twee methoden dezelfde stroom bepalen alleen op twee verschillende manieren. Net zoals de stroom de eerste afgeleide is, is de variantie de tweede afgeleide van de CGF (Figuur 2.5):

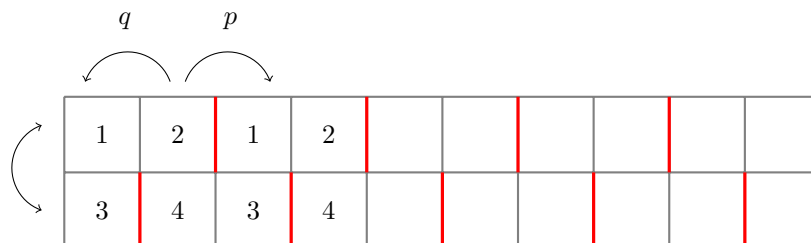


Figuur 2.5. De variantie in functie van het aangelegd veld. Voor hogere F is het duidelijk dat de variantie daalt.

De variantie stijgt sterk met de stroom. De varianties van de hierop volgende modellen zijn opgenomen in appendix B.

2.2 Model 2: Alternierende obstructies

Het tweede model is een 2D periodiek rooster met obstructies in alternerend de bovenste en onderste laan. De obstructies zijn deze keer eerder rigide "wanden" dan haken [3]. In Figuur 2.6 is het rooster grafisch weergegeven.



Figuur 2.6. 2D rooster met obstructies die alternerend in de bovenste en onderste laan voorkomen.

De kansen om respectievelijk naar rechts of naar links te springen (p en q) zijn nu verschillend van vergelijking (2.2).

In de volgende paragraaf worden twee verschillende normeringen voor hetzelfde systeem voorgesteld. Hieruit zal blijken dat de keuze van normering het al dan niet bestaan van NDM bepaalt. Deze twee beschouwingen zullen enkel in het formalisme van de CGF besproken worden. De uitwerking in het mastervergelijking formalisme is analoog aan die uit paragraaf 2.1.1 en is te vinden in appendix A.

De stroom in dit model kan nog zeer simpel worden gemodelleerd. De toestanden \mathcal{C}_1 zijn de toestanden waarbij de kracht het deeltje tegen de barrière duwt ($\mathcal{C} \in \{2, 3\}$) terwijl \mathcal{C}_2 de

toestanden zijn waarbij de kracht het deeltje wegtrekt van een barrière ($\mathcal{C} \in \{1, 4\}$). De kansen om in deze configuraties te zitten zijn

$$\begin{aligned} p(\mathcal{C}_1) &= p + u \\ p(\mathcal{C}_2) &= q + u \end{aligned} \quad (2.21)$$

De stroom of snelheid wordt dan gegeven door

$$v = p \cdot p(\mathcal{C}_2) - q \cdot p(\mathcal{C}_1) \quad (2.22)$$

2.2.1 Model 2A

In het eerste model zijn de sprongen naar rechts, links en boven/onder respectievelijk

$$p = \frac{e^{F/2}}{\mathcal{Z}} \quad q = \frac{e^{-F/2}}{\mathcal{Z}} \quad u = \frac{1}{4} \quad (2.23)$$

met

$$\mathcal{Z} = 2(e^{F/2} + e^{-F/2}) \quad (2.24)$$

De snelheid berekend door middel van 2.22 is

$$v = \frac{1}{8} \tanh \frac{F}{2} \quad (2.25)$$

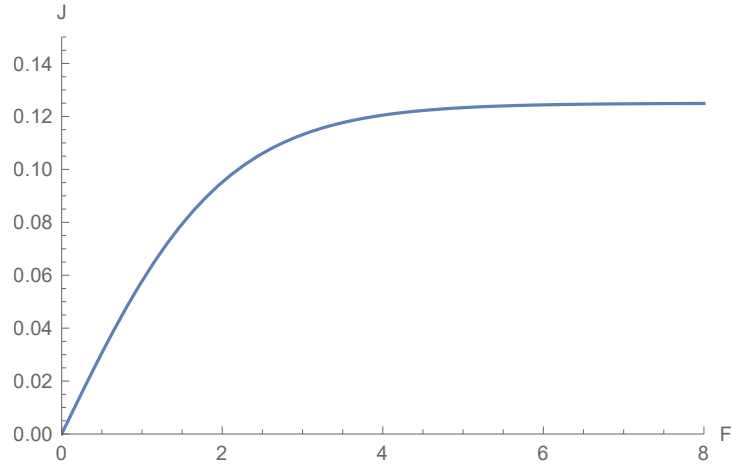
Wanneer $F = 0$ is te zien dat p en q reduceren tot $1/4$. De gemodificeerde stochastische generator voor dit model wordt dan

$$H(s) = \begin{pmatrix} -(q + \frac{1}{4}) & pe^{-s} & \frac{1}{4} & 0 \\ qe^s & -(p + \frac{1}{4}) & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & 0 & -(p + \frac{1}{4}) & qe^s \\ 0 & \frac{1}{4} & pe^{-s} & -(q + \frac{1}{4}) \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

Met de evolutie van de eigenwaarden weergegeven in Figuur B.0.1. Hieruit blijkt dat de eigenwaarde λ_4 de grootste is.

De stroom en de variantie kunnen dan weer gevonden worden door de afgeleiden uit (2.19) en (2.20). Deze worden weergegeven in respectievelijk Figuur 2.7 en Figuur B.0.3a.

De stroom berekend door middel van de CGF is dezelfde als berekend door 2.25. Deze keuze van normering resulteert duidelijk niet in NDM voor een deeltje in het rooster van model 2A.



Figuur 2.7. De stroom in functie van het aangelegd veld, berekend d.m.v. de CGF.

2.2.2 Model 2B

In het tweede model worden de sprongen naar respectievelijk rechts, links en boven/onder als volgt genormeerd

$$p = \frac{e^{F/2}}{\mathcal{Z}} \quad q = \frac{e^{-F/2}}{\mathcal{Z}} \quad u = \frac{1}{\mathcal{Z}} \quad (2.27)$$

met

$$\mathcal{Z} = e^{F/2} + e^{-F/2} + 2 \quad (2.28)$$

De snelheid berekend door middel van 2.22 is

$$v = \frac{e^{F/2} - e^{-F/2}}{e^{F/2} + e^{-F/2} + 2} \quad (2.29)$$

De gemodificeerde stochastische generator wordt:

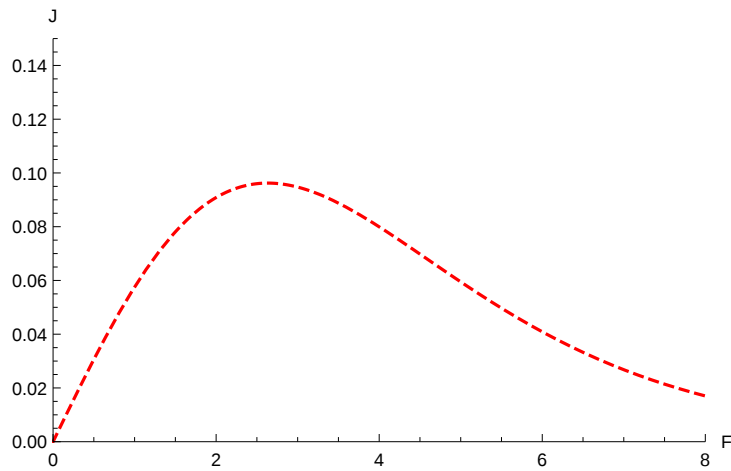
$$H(s) = \begin{pmatrix} r(1) & pe^{-s} & \frac{1}{\mathcal{Z}} & 0 \\ qe^s & r(2) & 0 & \frac{1}{\mathcal{Z}} \\ \frac{1}{\mathcal{Z}} & 0 & r(3) & qe^s \\ 0 & \frac{1}{\mathcal{Z}} & pe^{-s} & r(4) \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

Net zoals in Model A geldt dat als $F = 0$, p en q reduceren tot $1/4$.

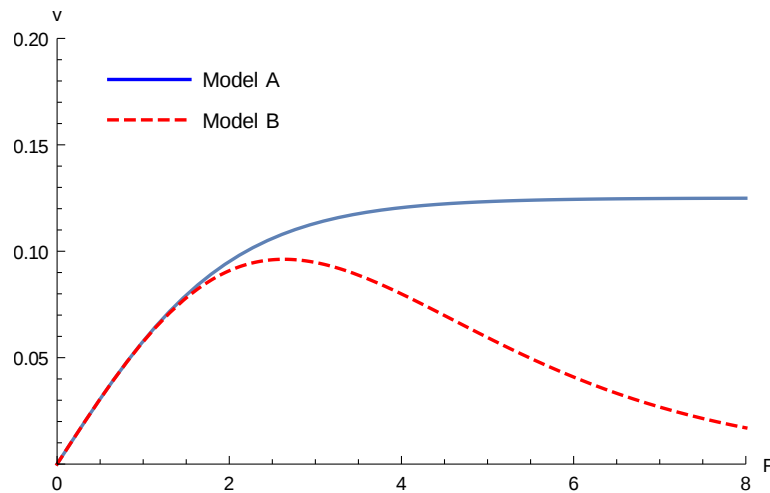
De evolutie van de vier eigenwaarden in functie van s wordt weergegeven in Figuur B.0.2.

De stroom en de variantie worden weergegeven in respectievelijk Figuur 2.8 en Figuur B.0.3b.

De stroom berekend door middel van de CGF is dezelfde als berekend door 2.29. Deze keuze van normering resulteert nu wel duidelijk in NDM voor een deeltje in het rooster van model 2B. De twee keuzes van normering kunnen met mekaar vergeleken worden zoals in Figuur 2.9.



Figuur 2.8. De stroom in functie van het aangelegd veld, berekend d.m.v. de CGF.



Figuur 2.9. De snelheid in functie van het aangelegd krachtveld voor model A en model B

Er kan aan de hand van de vorige twee modellen geconcludeerd worden dat de keuze van normering zeer belangrijk is voor het al dan niet voorkomen van NDM in een rooster. Afhankelijk van het fysisch systeem zal de normering gekozen moeten worden en zal er al dan niet NDM optreden. Zo kan bijvoorbeeld gekozen worden om de transversale sprongen van de deeltjes onafhankelijk of afhankelijk van het aangelegd krachtveld te maken, dit stemt overeen met respectievelijk Model A en Model B uit vorige paragraaf.

Hoofdstuk 3

Simulatie van de roosters

Wanneer modellen gekozen worden die de werkelijkheid beter weerspiegelen zal een analytische berekening al snel nagenoeg onmogelijk worden. De oplossing hiervoor is het simuleren van het rooster met deeltjes. Voor Markovprocessen zoals in deze modellen zijn Monte Carlo simulaties een zeer goede optie omdat deze gebaseerd zijn op het genereren van *random* getallen om zo fysische systemen realistisch te modelleren.

De simulaties kunnen in 1D uitgevoerd worden om vervolgens uit te breiden naar een 2D rooster met periodieke randvoorwaarden en meerdere parameters.

3.1 Simulatie in 1D: *two-lane* model

Om de theorieën uit vorig hoofdstuk te staven kunnen simulaties uitgevoerd worden op elk van de eerder besproken modellen. Omdat verschillende modellen programmatorisch amper van mekaar verschillen werd gekozen om Model 2B (2.2.2) te simuleren.

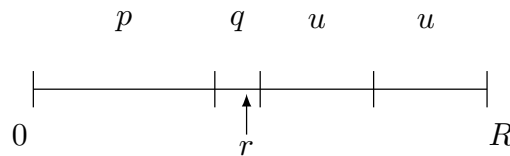
Allereerst wordt het model gesimuleerd door middel van een Discrete Time Markov Chain (DTMC) simulatie. Hierbij wordt na een initialisatie van het rooster een rooster cel random gekozen en worden sprongen met de kansen uit model 2B (2.27) uitgevoerd. Na afloop wordt de tijd met éénzelfde tijdseenheid voortgezet ook als er geen deeltje is gekozen, waarna het proces zich herhaalt. Na lange tijd kan dan de stroom gekarakteriseerd worden in functie van het aangelegd krachtveld.

De tweede mogelijkheid is om een Continuous Time Markov Chain (CTMC) simulatie uit te voeren. Hierbij bevindt het systeem zich in een welbepaalde configuratie en worden de sprongen die mogelijk zijn voor alle deeltjes samen beschouwd. Nadat de sprong gemaakt is wordt er een wachttijd uit een exponentiële verdeling getrokken omdat deze verdeling geheugenloos is en de verdeling dus dezelfde blijft als de stap ervoor. Zo een Gillespie algoritme bestaat uit volgende stappen:

- Stap 1: Initialisatie
- Stap 2: Opsommen van de verschillende mogelijke overgangswaarschijnlijkheden naar andere configuraties:

$$R = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} w(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$$

- Stap 3: Genereren van een random getal tussen 0 en R om te bepalen naar welke configuratie wordt overgegaan. Figuur 3.1 geeft dit grafisch weer.
- Stap 4: Overgaan tot de nieuwe configuratie en bijhouden van relevante gegevens.
- Stap 5: Genereren van een exponentiële wachttijd aan de hand van R .
- Stap 6: Terugkeren naar stap 2.

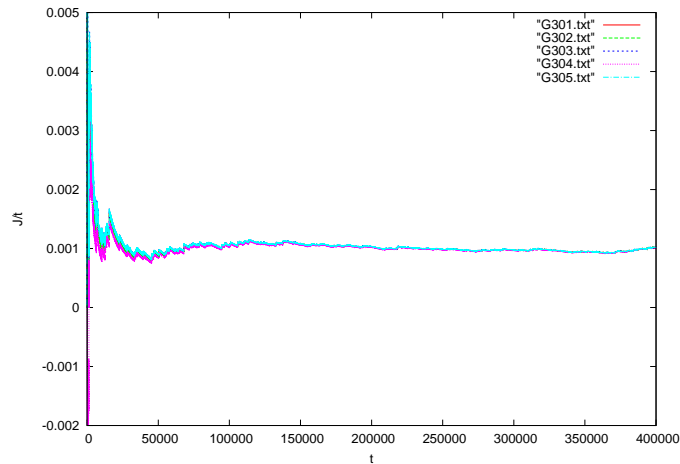


Figuur 3.1. Een mogelijke verdeling van de sprongkansen voor een Gillespie algoritme. De waarde van r bepaalt welke sprong wordt uitgevoerd.

Met behulp van zo een Gillespie algoritme kan dan de stroom in functie van de exponentieel verdeelde tijd uitgezet worden. Omdat één keer simuleren natuurlijk niet volstaat om statistisch relevante gegevens te verkrijgen wordt er uitgemiddeld over een zeker aantal simulaties met dezelfde parameters.

De uiteindelijk gebruikte simulatie is een combinatie van een DTMC en een CTMC. Er wordt eerst één deeltje gekozen en dan worden de verschillende mogelijke sprongkansen voor dat deeltje opgeteld, dit getal is R . Er wordt een random getal tussen 0 en R gegenereerd en afhankelijk hiervan wordt een sprong gekozen en wordt deze uitgevoerd. Na afloop wordt een exponentiële wachttijd aan de hand van R gegenereerd.

Dit algoritme zal voor een welbepaalde grootte van het krachtveld een tijdsafhankelijke stroom geven. Na korte tijd fluctueert de stroom nog steeds sterk maar na een langere tijd bereikt het systeem een stationaire toestand en zal de stroom stabiliseren. Om de stroom in functie van de kracht te karakteriseren is het belangrijk dat het systeem altijd in een stationaire toestand zit.

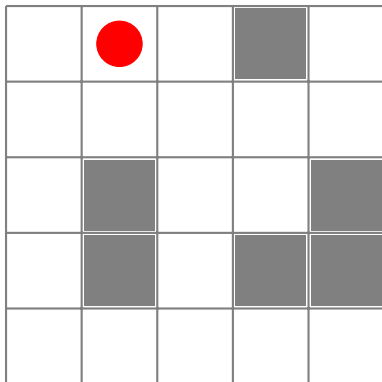


Figuur 3.2. De tijdsafhankelijke stroom voor $F = 3.0$. Hier is duidelijk te zien dat het systeem naar een stationaire toestand evolueert en de stroom stabiliseert.

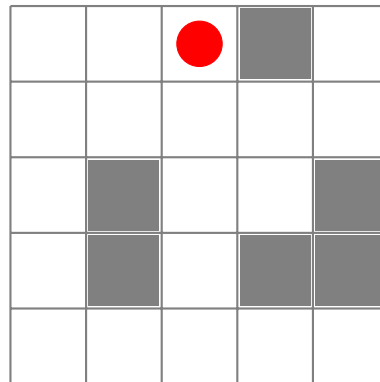
3.2 Simulatie in 2D: $L \times L$ periodiek rooster

Het model van vorige paragraaf kan veralgemeend worden naar een 2D rooster met zijde L waarvoor periodieke randvoorwaarden gelden. In dit rooster beweegt een getagd deeltje doorheen een "bad" van barrières met dichtheid ρ_b . Deze barrières kunnen ook bewegen maar hun beweging is onafhankelijk van het aangelegd krachtveld. De parameter die de beweging van de barrières bepaalt is γ , de mobiliteit van de barrières. Als $\gamma = 0$ is het bad statisch en bewegen de barrières niet. Wanneer $\gamma \gg 1$ zal het systeem evolueren naar de vloeistoflimiet doordat de barrières enorm mobiel worden [4].

Een mogelijke startconfiguratie voor een 5×5 rooster kan er uitzien zoals in Figuur 3.3.



Beginconfiguratie voor het 5×5 rooster.

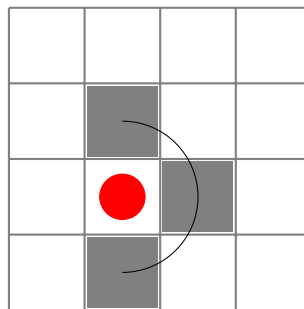


Configuratie van het rooster na 1 sprong.

Figuur 3.3. Een mogelijke startconfiguratie en configuratie na 1 sprong van een 5×5 rooster met $\rho_b = 0.20$.

De resulterende stroom van het deeltje varieert ten gevolge van de verandering in de kracht. Voor een vaste waarde van de kracht kan de tijdsafhankelijkheid van de stroom bestudeerd worden. Zoals te zien in Figuur 3.5 fluctueert de stroom wanneer de tijd klein is nog sterk maar na enige tijd stabiliseert de stroom rond een zekere waarde.

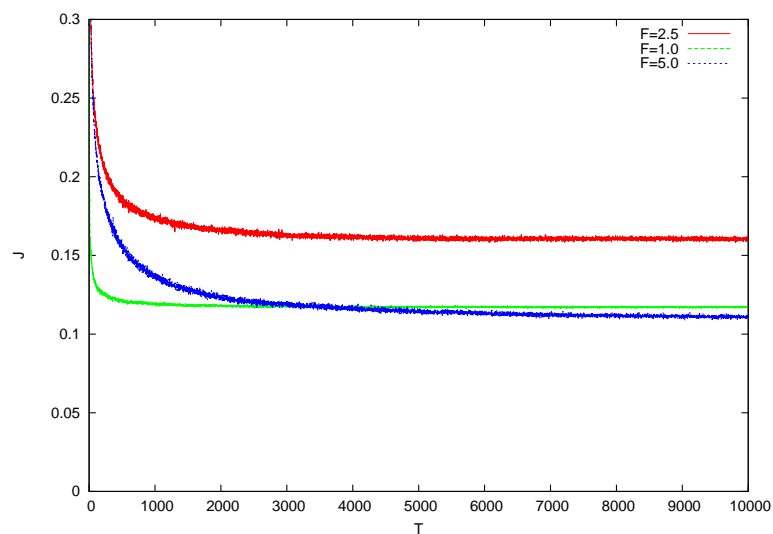
Om een juiste representatie voor de stroom in het rooster te verkrijgen moet voor elke kracht de stationaire stroom gevonden worden. Opmerkelijk is dat de stroom voor $F = 1.0$ en voor $F = 5.0$ bijna gelijk is terwijl de stroom voor $F = 2.5$ hoger ligt, dit geeft al een eerste indicatie dat er NDM zal optreden. Voor grotere kracht zal de stroom terug afnemen doordat het deeltje gevangen wordt in concave *traps* gevormd door de barrières (Figuur 3.4).



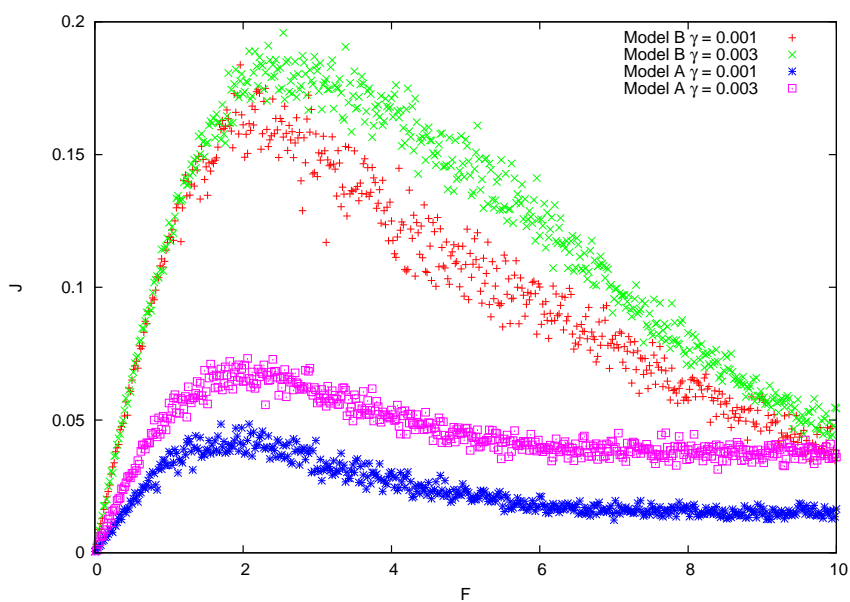
Figuur 3.4. Een concave *trap* gemaakt van barrières waaruit deeltjes moeilijk kunnen ontsnappen.

Deze concave traps zorgen er voor dat een gevangen deeltje niet transversaal of naar voren kan springen. De kans om tegen het krachtveld in te springen is zeer klein ten opzichte van de andere sprongkansen, zodat het deeltje zeer lange tijd in deze *trap* blijft zitten en dus niet bijdraagt aan de deeltjesstroom J_p .

Simulaties voor een rooster met $L = 20$ en $\rho_b = 0.20$ leveren het verloop uit Figuur 3.6 op. Zoals verwacht vertoont model B zeer sterke NDM maar in dit rooster vertoont ook model A dit gedrag. In model A stabiliseert de stroom zich al snel tot een zekere waarde terwijl in model B de grootte van de stroom blijft dalen. Beide modellen zijn ook zeer gevoelig voor de waarde van γ .

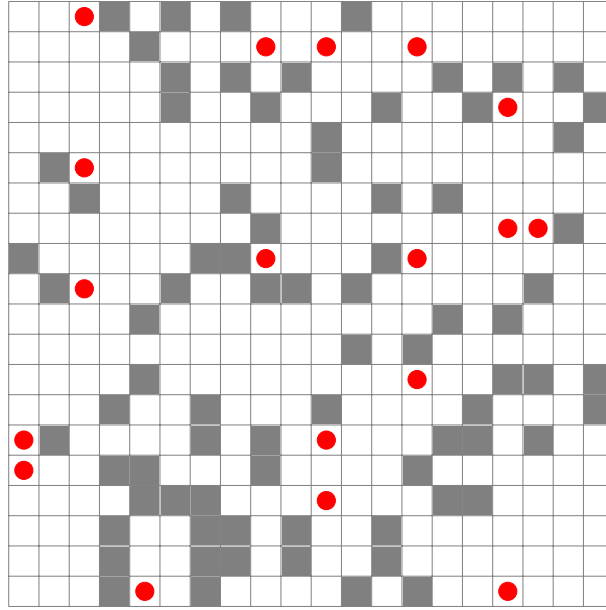


Figuur 3.5. De stroom van het getagd deeltje in functie van de tijd voor vaste waarden van F in model B met $\rho_b = 0.20$.



Figuur 3.6. De stroom van het getagd deeltje in functie van het aangelegd veld F .

Het vorige model kan uitgebreid worden tot een rooster van arbitraire grootte met een gegeven concentratie getagde deeltjes ρ_p (Figuur 3.7). De stroom is nu de verzamelde stroom voor elk van de getagde deeltjes.

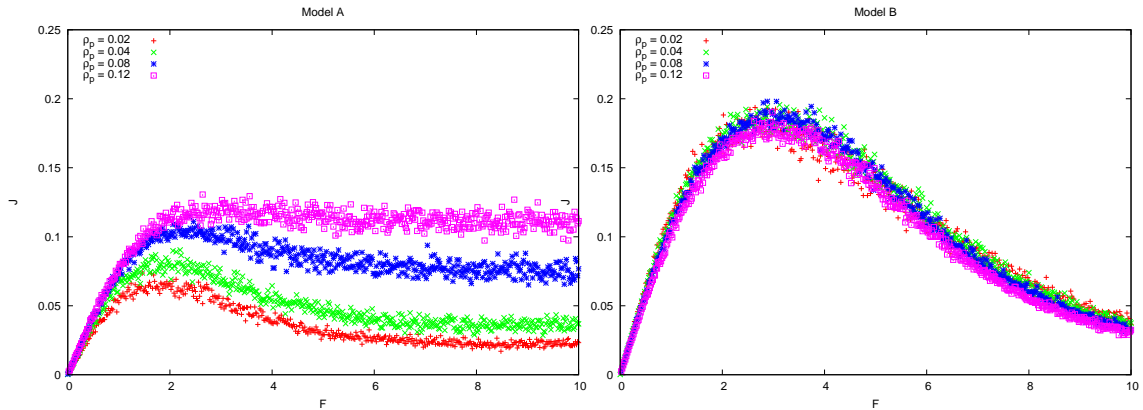


Figuur 3.7. Mogelijke configuratie voor een rooster met $L = 20$, $\rho_b = 0.20$, $\rho_p = 0.05$ en $\gamma = 10^{-3}$.

De deeltjesstroom (J_p) in model A (Figuur 3.8a) levert opnieuw weer NDM op voor lage waarden van ρ_b . Voor hogere waarden verdwijnt dit effect weer. Model B (Figuur 3.8b) vertoont zoals gewoonlijk wel weer overal NDM.

(a) Model A

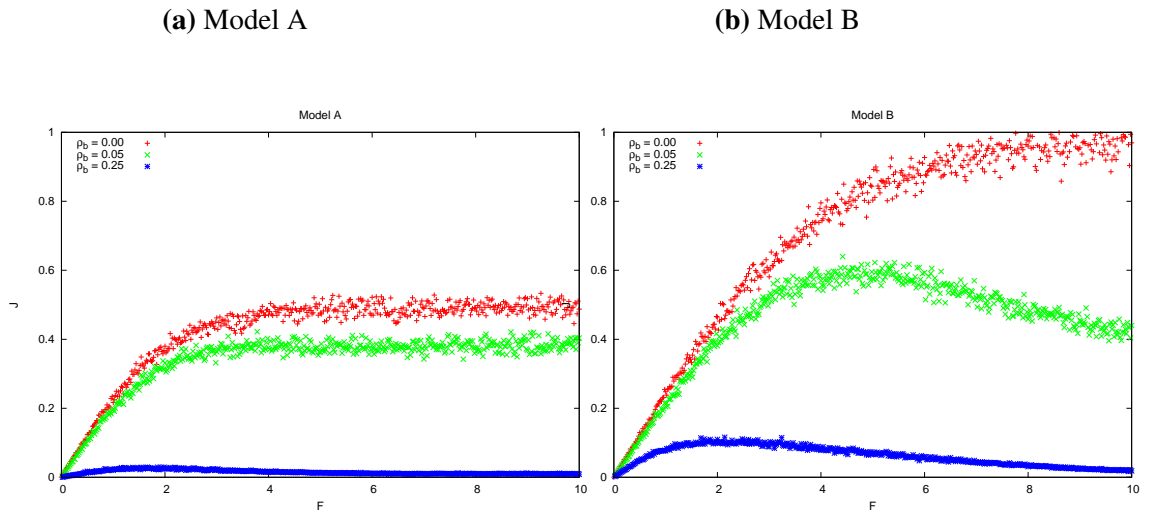
(b) Model B



Figuur 3.8. J_p voor verschillende waarden van ρ_p met $\rho_b = 0.20$, $\gamma = 0.001$.

In model A verdwijnt de NDM voor hoge waarden van ρ_p omdat de concave *traps* gesatureerd worden en de andere deeltjes terug vrij kunnen bewegen doorheen het rooster zonder in de *traps* te belanden.

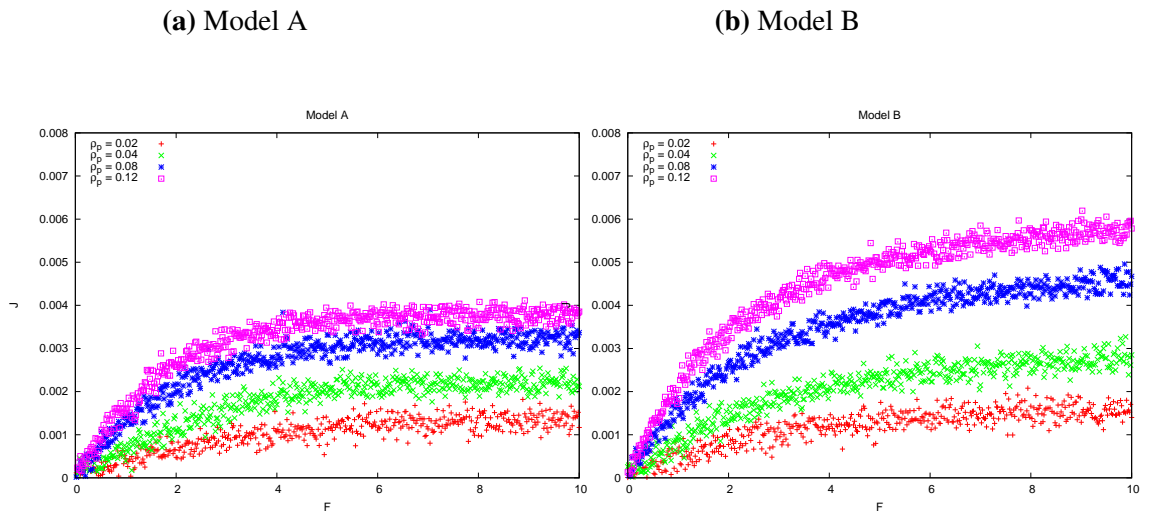
Om de verschillen tussen *trapping* en *crowding* [3] duidelijk te maken, kan ook de afhankelijkheid van de stroom ten opzichte van de barrièreconcentratie gesimuleerd worden.



Figuur 3.9. J_p voor verschillende waarden van ρ_b met $\rho_p = 0.02$ en $\gamma = 0.001$.

Uit Figuur 3.9 is duidelijk dat wanneer er geen barrières aanwezig zijn, de deeltjesstroom monotoon stijgt. Als ρ_b een kleine waarde aanneemt zal er NDM ontstaan door het gebruikelijke mechanisme. Wanneer echter ρ_b nog toeneemt zal de grootte van de stroom afnemen en wordt de NDM deels veroorzaakt door *trapping* en deels door *crowding*. Dit is vooral heel duidelijk in model B.

Het is ook interessant om in plaats van de deeltjesstroom de geïnduceerde barrièrestroom te bestuderen.



Figuur 3.10. J_b voor verschillende waarden van ρ_p met $\rho_b = 0.20$ en $\gamma = 0.001$.

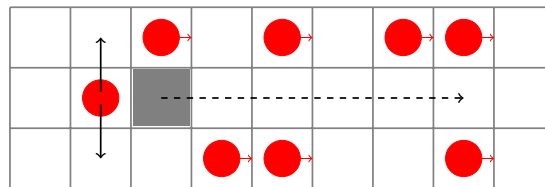
De monotoon stijgende functies in Figuur 3.10 geven het verloop van de barrièrestroom in model A en model B voor verschillende waarden van ρ_p . De geïnduceerde barrièrestroom stijgt in functie van het krachtveld.

Intuïtief kan hier een verklaring voor gegeven worden. Wanneer een *getagd* deeltje achter

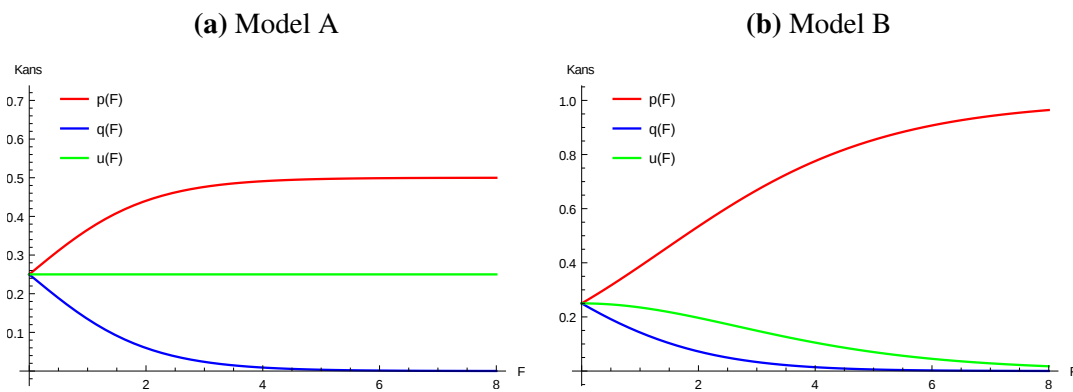
een barrière komt vast te zitten kan dat deeltje enkel naar boven of naar onder springen en bijna niet in de richting van de kracht. Doordat de barrières veel minder mobiel zijn zullen zo lege 'banen' ontstaan achter de barrières, te vergelijken met een vloeistof die langs een voorwerp stroomt (Figuur 3.11).

Deze barrières kunnen dan ongehinderd in deze baan bewegen, terwijl achter en boven de barrières zich waarschijnlijk deeltjes bevinden. Wanneer de grootte van het krachtveld toeneemt zal de kans om in de richting van de kracht te springen toenemen terwijl de kans om tegen de richting in te springen afneemt. In model B neemt ook de kans om transversaal te springen af met toenemende kracht. Het gedrag van $p(F)$, $q(F)$ en $u(F)$ voor Model A en Model B is te zien in Figuur 3.12.

Naarmate de kracht stijgt, zullen deze lege banen langer blijven bestaan en meer mogelijkheid bieden aan de barrières om zich op deze baan in de richting van de kracht te bewegen. Hierdoor zal de barrièreestroom toenemen met de kracht.



Figuur 3.11. Onderdeel van een $L \times L$ rooster met een lege baan achter de barrière.

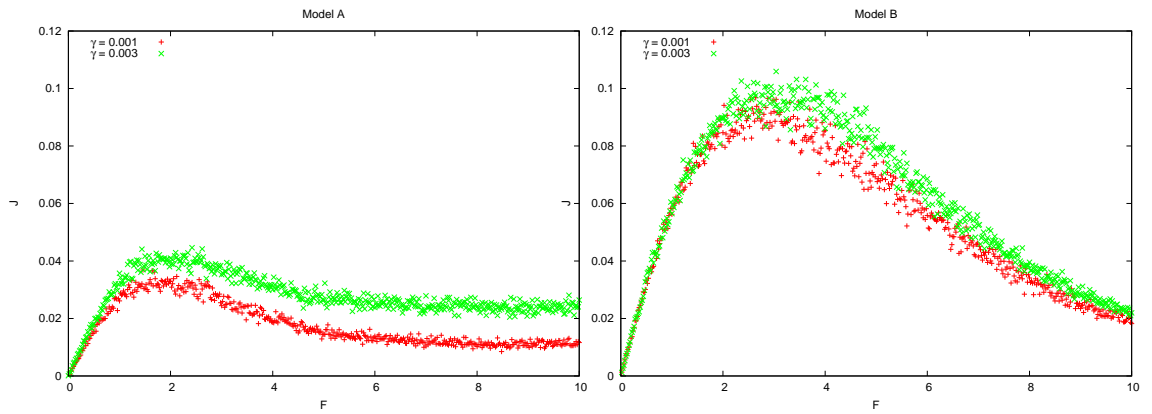


Figuur 3.12. Verandering van p , q en u in functie van F voor model A en model B.

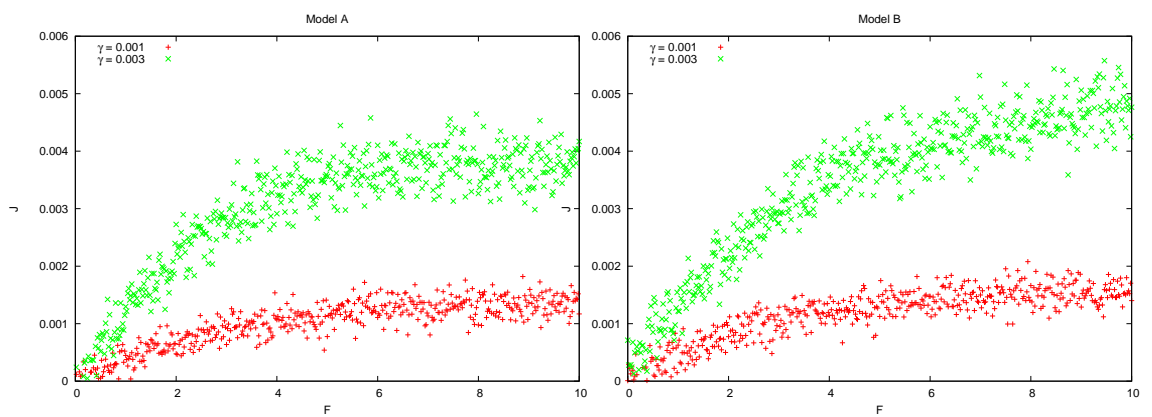
De grootte van zowel de deeltjesstroom als de barrièreestroom is ook zeer gevoelig voor veranderingen in γ (Figuur 3.13 en 3.14).

(a) Model A

(b) Model B



Figuur 3.13. J_p voor verschillende waarden van γ met $\rho_b = 0.20$ en $\rho_p = 0.02$.



Figuur 3.14. J_b voor verschillende waarden van γ met $\rho_b = 0.20$ en $\rho_p = 0.02$.

Hoofdstuk 4

Conclusie

Het voorkomen van NDM hangt volledig af van het te beschouwen systeem. Afhankelijk van dit systeem wordt een relevante normering gekozen die samen met andere systeemp parameters (γ , ρ_b en ρ_p) de stroom volledig karakteriseren. Voor eenvoudige systemen zoals het *two-lane* model (§ 2.2) is een analytische berekening door middel van een mastervergelijking of een Cumulanten Genererende Functie nog altijd mogelijk. Wanneer grotere systemen met meer parameters worden beschouwd valt de keuze snel op simulaties door middel van Monte Carlo technieken.

Hier zijn twee verschillende normeringen besproken voor een aantal systemen. Model A (vgl. 2.23) beschrijft de beweging van een getagd deeltje waarbij de transversale bewegingen onafhankelijk zijn van de grootte van het aangelegd krachtveld F . In Model B (vgl. 2.27) zijn deze net wel afhankelijk van het krachtveld. Voor het *two-lane* model zal Model A geen NDM vertonen terwijl Model B dit wel vertoont.

Een $L \times L$ rooster bestaande uit een aantal *getagde* deeltjes en een aantal barrièredeeltjes zal onder verschillende voorwaarden NDM vertonen. In tegenstelling tot het *two-lane* model zal dit rooster ook voor Model A NDM vertonen voor bepaalde waarden van ρ_b en ρ_p .

De geïnduceerde barrièrestroom is ook afhankelijk van het krachtveld terwijl de mobiliteit van de barrières γ zo wordt gekozen dat deze niet afhankelijk is van het krachtveld. Deze afhankelijkheid duidt op een geïnduceerd effect veroorzaakt door de beweging van de getagde deeltjes. Hieromtrent is nog maar weinig onderzoek gedaan en kan dus eventueel een onderwerp voor later onderzoek opleveren.

Hoofdstuk 5

Dankwoord

Eerst en vooral wil ik mijn promotor, dr. Mieke Gorissen, bedanken. Vooraleer ik aan deze bachelorproef begon wist ik amper iets van statistische mechanica af maar zij liet mij inzien dat dit een zeer rijke en interessante tak van de fysica is. Ook kon ik altijd rekenen op haar hulp en begeleiding wanneer ik vastzat of de computer code niet wilde meewerken.

Verder wil ik ook prof. dr. Carlo Vanderzande bedanken, op wiens onderzoek deze bachelorproef gebaseerd is.

Ook heb ik van mijn mede-studenten van het derde bachelorjaar veel steun gekregen, met name van Florian Driessen wiens bachelorproef ook statistische mechanica en simulaties inhield. Vaak zochten we samen naar een oplossing voor een probleem dat we allebei tegenkwamen in ons onderzoek.

Als laatste wil ik ook zeker prof. dr. Geert-Jan Bex bedanken. Zonder zijn lessen over de C programmeertaal zou deze bachelorproef misschien niet tot een goed einde zijn gekomen.

Bijlage A

Afleidingen en bewijzen

A.1 Afleidingen

Voor het *two-lane* model met alternerende obstructies (paragraaf 2.2) kan de stroom gevonden worden m.b.v. een mastervergelijking zoals in het model met obstructies in één baan. De sprongkansen zijn dezelfde als vergelijkingen (2.23) en (2.27). De mastervergelijking levert een stelsel met vier onbekenden op.

$$\begin{cases} -(p+u)P^*(1) + qP^*(2) + uP^*(3) + 0P^*(4) = 0 \\ pP^*(1) - (q+u)P^*(2) + 0P^*(3) + uP^*(4) = 0 \\ uP^*(1) + 0P^*(2) - (q+u)P^*(3) + pP^*(4) = 0 \\ 0P^*(1) + uP^*(2) + qP^*(3) - (p+u)P^*(4) = 0 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

In matrixvorm

$$\begin{pmatrix} -(p+u) & q & u & 0 \\ p & -(q+u) & 0 & u \\ u & 0 & -(q+u) & p \\ 0 & u & q & -(p+u) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P^*(1) \\ P^*(2) \\ P^*(3) \\ P^*(4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

De *steady-state* oplossingen worden dan gegeven door:

$$\begin{cases} P^*(1) = 1/\mathcal{Z}_A \\ P^*(2) = 1 + 3e^F/(3 + e^F)\mathcal{Z}_A \\ P^*(3) = 1 + 3e^F/(3 + e^F)\mathcal{Z}_A \\ P^*(4) = 1/\mathcal{Z}_A \end{cases} \quad \begin{cases} P^*(1) = 1/\mathcal{Z}_B \\ P^*(2) = e^{F/2}/\mathcal{Z}_B \\ P^*(3) = e^{F/2}/\mathcal{Z}_B \\ P^*(4) = 1/\mathcal{Z}_B \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

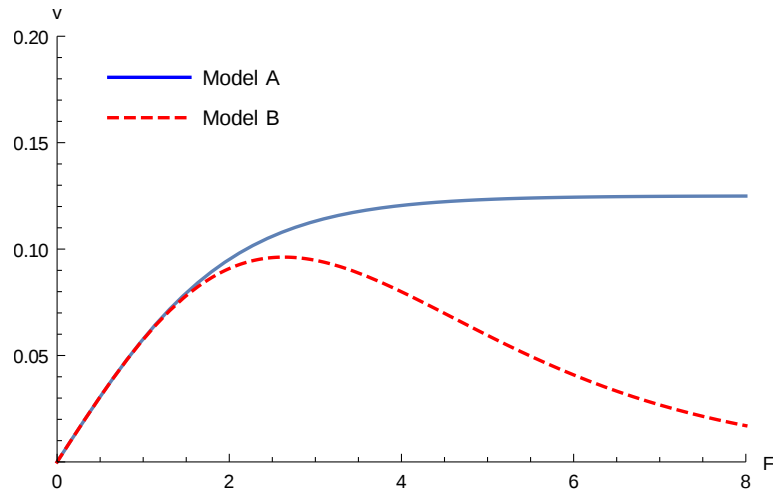
Voor respectievelijk model A en model B en met

$$\mathcal{Z}_A = 2 + \frac{2(1 + 3e^F)}{3 + e^F} \quad \mathcal{Z}_B = 2(1 + e^{F/2})$$

normeringsfactoren voor beide modellen. De stroom in het rooster wordt dan gegeven door

$$J = p(P^*(1) + P^*(4)) - q(P^*(3) + P^*(2)) \quad (\text{A.4})$$

Dit resulteert in de stroom zoals bekomen in Figuur 2.9.



Figuur A.1.1. De stroom in functie van het aangelegd veld voor Model A en Model B.

A.2 Bewijzen

Stelling 1 (Spectrale decompositie). *De CGF kan geschreven worden in termen van de eigenwaarden van de gemodificeerde stochastische generator $H(s)$.*

$$\langle e^{-sJ(t)} \rangle = \sum_{\mathcal{C}} \langle \mathcal{C} | e^{H(s)t} | \hat{P}(s, 0) \rangle$$

Hieruit kunnen dan de uitdrukkingen voor de cumulanten gevonden worden:

$$\kappa_n = \left. \frac{\partial^n \lambda_1(s)}{\partial s^n} \right|_{s=0}$$

Bewijs.

$$\begin{aligned} \langle e^{-sJ(t)} \rangle &= \sum_{\mathcal{C}} \sum_{J=0}^{\infty} e^{-sJ(t)} P(\mathcal{C}, J, t) \\ &= \sum_{\mathcal{C}} \hat{P}(\mathcal{C}, s, t) \\ &= \sum_{\mathcal{C}} \langle \mathcal{C} | \hat{P}(s, t) \rangle \\ &= \sum_{\mathcal{C}} \langle \mathcal{C} | e^{H(s)t} | \hat{P}(s, 0) \rangle \end{aligned}$$

□

In de limiet voor $t \rightarrow \infty$ zal enkel de grootste eigenwaarde $\lambda_1(s) > \lambda_2(s) > \dots > \lambda_n(s)$ doorwegen (power method):

$$\sum_{\mathcal{C}} \langle \mathcal{C} | e^{H(s)t} | \hat{P}(s, 0) \rangle \approx e^{\lambda_1(s)t}$$

Hierdoor vereenvoudigt de CGF tot volgende vorm

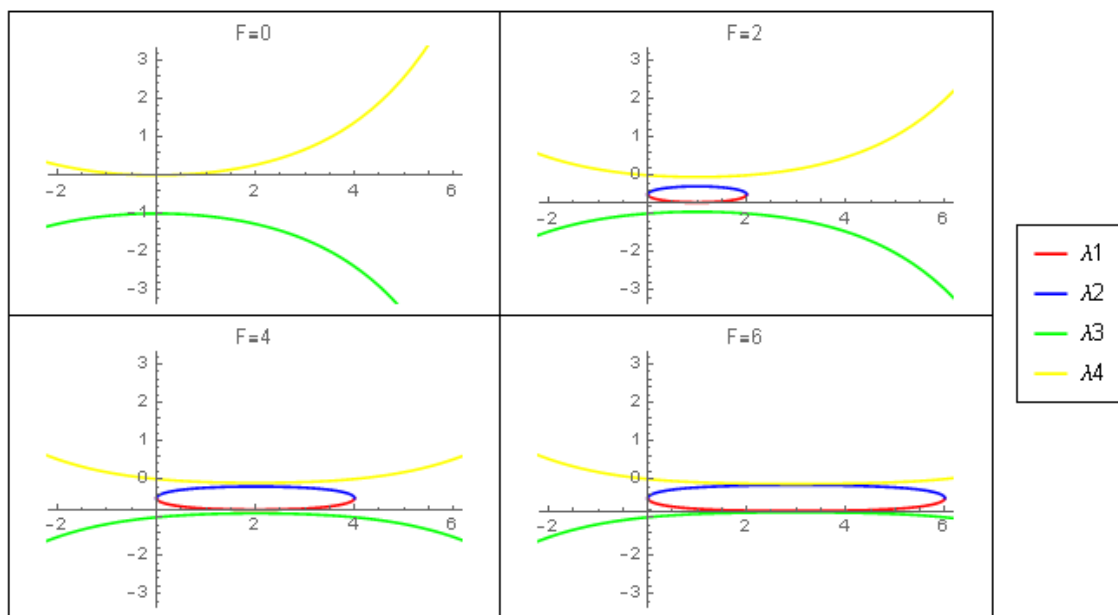
$$\begin{aligned} \mu(s, t) &= \frac{\ln \langle e^{-sJ(t)} \rangle}{t} \\ &= \frac{\ln (e^{\lambda_1(s)t})}{t} \\ &= \lambda_1(s) \end{aligned}$$

De cumulanten kunnen dan berekend worden aan de hand van

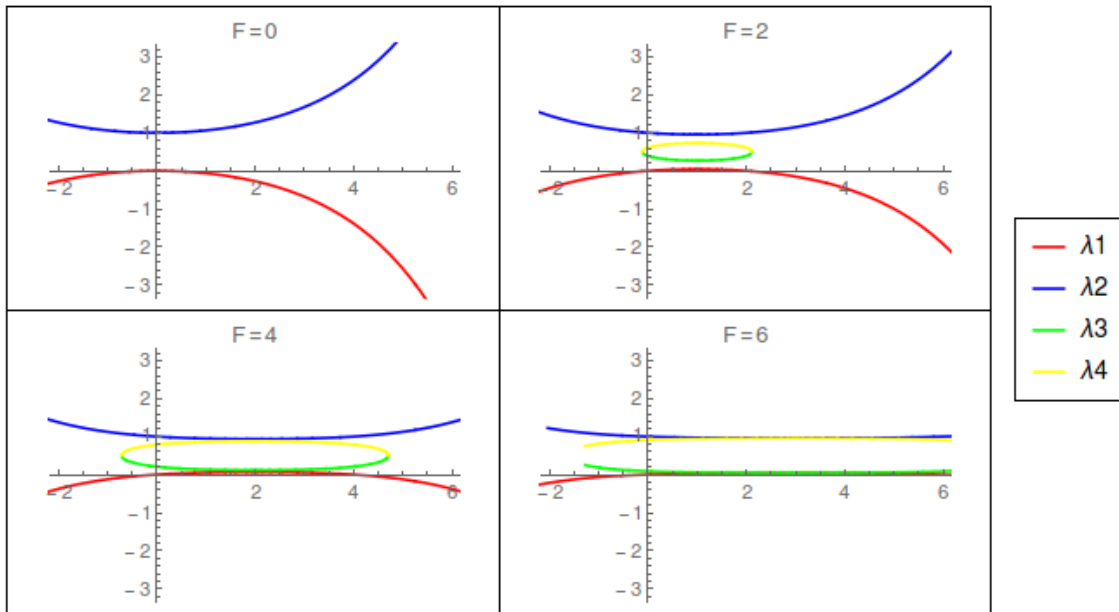
$$\kappa_n = \left. \frac{\partial^n \lambda_1(s)}{\partial s^n} \right|_{s=0}$$

Bijlage B

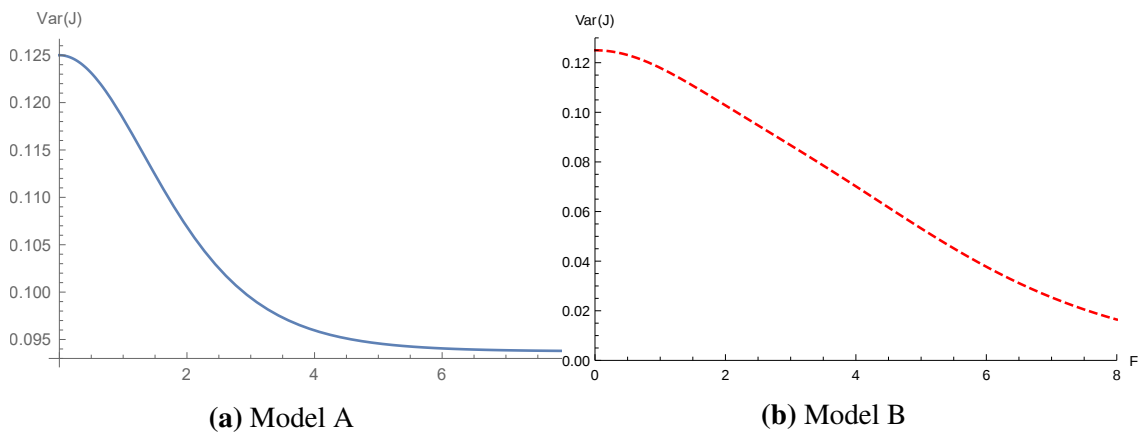
Figuren



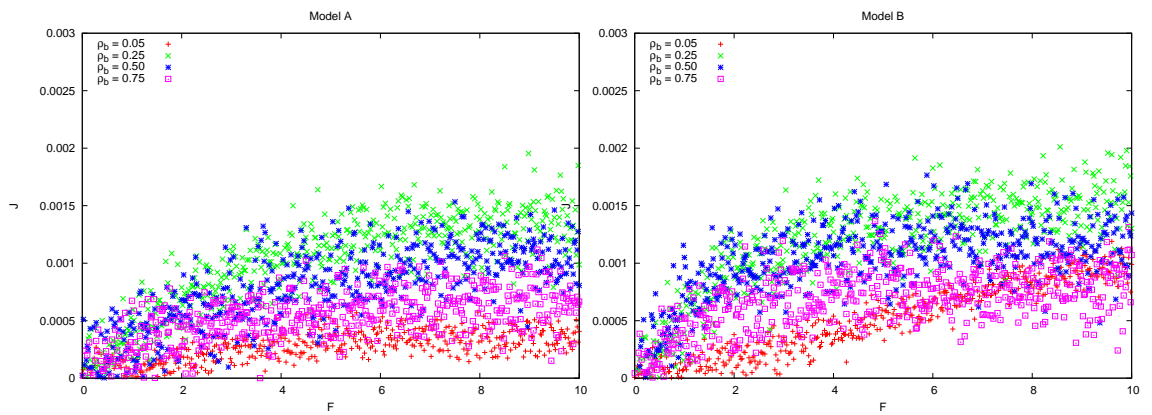
Figuur B.0.1. De vier eigenwaarden van de matrix $H(s)$ van model 2A in functie van s voor F respectievelijk 0, 2, 4 en 6. In alle vier de figuren is de eigenwaarde λ_4 de grootste.



Figuur B.0.2. De vier eigenwaarden van de matrix $H(s)$ van model 2B in functie van s voor F respectievelijk 0, 2, 4 en 6. In alle vier de figuren is de eigenwaarde λ_2 de grootste.



Figuur B.0.3. De variantie in functie van het aangelegd veld F , berekend d.m.v. de CGF.



(a) Model A

(b) Model B

Figuur B.0.4. J_b voor verschillende waarden van ρ_b met $\rho_p = 0.02$ en $\gamma = 0.001$.

Bibliografie

- [1] R. K. P. Zia, E. L. Praestgaard, and O. G. Mouritsen. Getting more from pushing less: Negative specific heat and conductivity in nonequilibrium steady states. *American Journal of Physics*, 70(4):384–392, 2002.
- [2] Sergey Vainshtein, Valentin Yuferev, Vassil Palankovski, Duu-Sheng Ong, and Juha Kostamo-ovaara. Negative differential mobility in GaAs at ultrahigh fields: Comparison between an experiment and simulations. *Applied Physics Letters*, 92(6), 2008.
- [3] Marco Baiesi, Attilio L. Stella, and Carlo Vanderzande. Role of trapping and crowding as sources of negative differential mobility. *Phys. Rev. E*, 92(4), oct 9 2015.
- [4] Urna Basu and Christian Maes. Mobility transition in a dynamic environment. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 47(25), 2014.