

Аналитическое представление соотношений инерционного диффузионного транспорта

В. М. Розенбаум⁺¹⁾, И. В. Шапочкина^{*1)}

⁺ Институт химии поверхности им. Чуйко НАН Украины, 03164 Киев, Украина

^{*} Белорусский государственный университет, физический факультет, 220050 Минск, Беларусь

Поступила в редакцию 25 мая 2015 г.

После переработки 8 июля 2015 г.

Предложен обобщенный подход к описанию диффузионного транспорта инерционных частиц, при котором известные безынерционные соотношения (в частности, между концентрацией частиц и соответствующим потоком) дополнены фактором, допускающим расчет инерционных эффектов в терминах матричного метода непрерывных дробей. Преимущество данного подхода, состоящее в аналитическом представлении результатов, иллюстрируется решением задачи нахождения эффективного коэффициента диффузии инерционной частицы в пилообразном потенциале и средней скорости адиабатического инерционного рэтчета. Установлен характер неаналитического поведения этих величин при наличии больших градиентов потенциала.

DOI: 10.7868/S0370274X15160110

Диффузионный транспорт частиц в наклонном периодическом потенциале обычно рассматривается в условиях доминирования трения над инерцией, что делает справедливым описание в терминах уравнения Смолуховского [1], аналитические решения которого в ряде частных случаев известны [2]. Учет инерции в статистическом описании диффузионного транспорта приводит к значительно более сложному уравнению Клейна–Крамерса [3, 4]. Его аналитические решения ограничены случаями простейших потенциалов (линейные зависимости силы от координаты) [2]. Поэтому ряд результатов теории скоростей реакций [5–7] и расчет средней скорости движения частицы в наклонном периодическом потенциале [8] получены в приближении высоких (по сравнению с тепловой энергией) потенциальных барьеров, когда окрестности экстремумов плавных потенциалов можно считать параболическими. Кроме того, для получения аналитических результатов в подходе работы [8] преодоление параболических барьеров рассматривалось без учета диссипации, т.е. коэффициент трения считался малым. Решения уравнения Клейна–Крамерса для произвольных потенциалов и коэффициентов трения требуют использования различных численных схем, среди которых особое место занимает матричный метод непрерывных дробей (ММНД) [2, 9–12], позволяющий, в частности, связать концентрацию частиц с соответствующей

плотностью потока. Идея данной статьи состоит в том, что подобно тому, как ряд безынерционных задач аналитически решается представлением уравнения Смолуховского в виде уравнения непрерывности, дополненного законом связи потока и концентрации частиц (законом Фика в отсутствие потенциала), инерционную задачу также можно решать относительно концентрации частиц, дополнив то же уравнение непрерывности формальной операторной связью потока с концентрацией. При этом зависимость от массы частиц содержится непосредственно в операторе связи между этими величинами, который может быть рассчитан в рамках ММНД. Преимущества такого описания иллюстрируются примерами, в которых предлагаемый подход позволяет обобщить известные аналитические решения безынерционной задачи посредством инерционного фактора. Это обобщение делает ясной математическую структуру результата, из которой следуют аналитические выражения в тех случаях, когда инерционный фактор также представим в аналитическом виде.

К таким случаям относится расчет эффективного коэффициента диффузии в пилообразном асимметричном потенциале, амплитуда которого мала по сравнению с тепловой энергией (приближение, противоположное использованному, например, в [8]). При увеличении асимметрии градиенты потенциала возрастают на определенных его участках и стремятся к бесконечности, когда потенциал становится предельно асимметричным. Наличие скачков потен-

¹⁾ e-mail: vik-roz@mail.ru; shapoch@mail.ru

циала еще приемлемо при решении безынерционных диффузионных задач. Однако оно становится непреодолимой трудностью при учете инерции, поскольку существующие схемы численных решений уравнения Клейна–Крамерса (или моделирования на основе соответствующего уравнения Ланжевена) в такой ситуации малопригодны. Поэтому предложенный в данной статье подход, позволивший продемонстрировать обусловленное инерцией неаналитическое поведение эффективного коэффициента диффузии при возникновении скачков пилообразного потенциала, по-видимому, является уникальным подходом, с помощью которого такой результат вообще мог быть получен.

Основными характеристиками, обеспечивающими статистическое описание транспорта ансамбля частиц, являются плотность вероятности $\rho(x, t)$ и поток $J(x, t)$, задающие концентрацию в точке x и поток через сечение x в момент времени t . Они связаны между собой уравнением непрерывности:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

являющимся локальным законом сохранения массы частиц в рассматриваемом элементе объема. Для расчета $\rho(x, t)$ в конкретных случаях уравнения (1), конечно же, недостаточно. Требуется какое-либо дополнительное уравнение связи $J(x, t)$ с $\rho(x, t)$, содержащее характеристики рассматриваемой системы, а также определенные граничные и начальные условия. Простейшая связь такого рода существует для безынерционного транспорта в достаточно вязкой среде [2]:

$$J(x, t) = \hat{J}(x)\rho(x, t), \quad \hat{J}(x) = -De^{-\beta U(x)}\partial_x e^{\beta U(x)}. \quad (2)$$

Здесь $\hat{J}(x)$ – оператор потока в потенциальном поле с энергией $U(x)$, производная которой $U'(x) = \partial_x U(x)$ считается периодической функцией с периодом L , $D = (\beta\zeta)^{-1}$ – коэффициент диффузии, ζ – коэффициент трения, зависящий от вязкости среды, размера и формы частицы, $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обратная тепловая энергия (k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура). В отсутствие потенциальной энергии уравнение (2) переходит в закон Фика. Подстановка (2) в (1) дает уравнение Смолуховского [1] (а при $U(x) = 0$ – уравнение диффузии).

Статистическое описание ансамбля инерционных частиц массы m обычно проводится в терминах полной функции распределения $\rho(x, v, t)$ (плотности вероятности найти частицу в точке x , со скоростью v

в момент времени t), удовлетворяющей уравнению Клейна–Крамерса [3, 4]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, v, t) = \\ & = \left\{ -\frac{\partial}{\partial x} v + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial v} \left[\zeta v + U'(x) + \frac{\zeta}{m\beta} \frac{\partial}{\partial v} \right] \right\} \rho(x, v, t). \end{aligned} \quad (3)$$

Величины $\rho(x, t)$ и $J(x, t)$ являются, соответственно, нулевым и первым моментом функции распределения $\rho(x, v, t)$:

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \rho(x, v, t), \quad J(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dv v \rho(x, v, t), \quad (4)$$

и, вообще говоря, друг через друга непосредственно не выражаются.

В данном сообщении предложен подход, являющийся развитием ММНД [2, 9–12], который позволяет формально выразить $J(x, t)$ через $\rho(x, t)$ следующим образом:

$$J(x, t) = \int_0^t dt' \int_0^L dx' G_0(x, x'; t - t') \hat{J}(x') \rho(x', t'). \quad (5)$$

Тогда подстановка (5) в (1) приводит к интегродифференциальному уравнению относительно $\rho(x, t)$, в котором вся информация об инерционных эффектах содержится только в ядре интегрального уравнения $G_0(x, x'; t - t')$. Такой подход дает ключ к аналитической записи решений ряда задач теории инерционного транспорта, для которых известны точные выражения, полученные только в отсутствие инерции. Основная идея и плодотворность подхода могут быть проиллюстрированы следующим образом.

Воспользуемся представлением Лапласа для зависящих от времени величин $\rho(x, t)$ и $J(x, t)$:

$$\begin{aligned} & \tilde{\rho}(x, s) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} \rho(x, t), \\ & s\tilde{\rho}(x, s) - \rho(x, 0) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) \end{aligned} \quad (6)$$

(представление для $J(x, t)$ аналогично). Тогда система уравнений, составленная из уравнения непрерывности (1), проинтегрированного по x :

$$\tilde{J}(x, s) = \tilde{J}(0, s) + \int_0^x dy [\rho(y, 0) - s\tilde{\rho}(y, s)], \quad (7)$$

и уравнения (5), записанного в операторной форме: $\tilde{J}(x, s) = \hat{G}_0(x, s)\tilde{J}(x)\tilde{\rho}(x, s)$, сводится к следующему интегро-дифференциальному уравнению:

$$-D\partial_x e^{\beta U(x)}\tilde{\rho}(x, s) = e^{\beta U(x)}\hat{G}_0^{-1}(x, s) \times \left\{ \tilde{J}(0, s) + \int_0^x dy[\rho(y, 0) - s\tilde{\rho}(y, s)] \right\}. \quad (8)$$

Это уравнение легко решается относительно $\tilde{\rho}(x, s)$ в следующих двух важных частных случаях.

Первый частный случай – стационарная задача движения инерционной частицы в периодическом потенциале $V(x+L) = V(x)$ под действием постоянной силы F . В этом случае полная потенциальная энергия равна $U(x) = V(x) - Fx$. Тогда $\rho(x, t) = \rho(x)$, $\tilde{\rho}(x, s) = s^{-1}\rho(x)$, а изображение Лапласа $\tilde{J}(0, s) = s^{-1}J$ определяется не зависящим от координаты потоком J , так что уравнение (8) принимает вид $-D\partial_x e^{\beta U(x)}\rho(x) = e^{\beta U(x)}\hat{G}_0^{-1}(x)J$, где $\hat{G}_0^{-1}(x) = \hat{G}_0^{-1}(x, 0)$. Решение этого дифференциального уравнения содержит две произвольные постоянные (J и $\rho(0)$), которые находятся из условия периодичности $\rho(x+L) = \rho(x)$ и условия нормировки $\int_0^L \rho(x)dx = 1$. В результате получаем

$$J = D \left(1 - e^{-\beta FL} \right) / \left(\int_0^L dx e^{-\beta U(x)} \times \int_0^L dx e^{\beta U(x)} \hat{G}_0^{-1}(x) - (1 - e^{-\beta FL}) \int_0^L dx e^{-\beta U(x)} \times \int_0^x dy e^{\beta U(y)} \hat{G}_0^{-1}(y) \right). \quad (9)$$

В отсутствие инерции $\hat{G}_0^{-1}(x) = \hat{1}$ и соотношение (9) переходит в известную формулу Стратоновича [13]. Линейное по F разложение средней скорости частицы $\langle v \rangle = JL \approx \mu F$ дает выражения для подвижности μ в нулевом внешнем поле и связанного с ней эффективного коэффициента диффузии D_{eff} в периодическом потенциальном профиле $V(x)$:

$$D_{\text{eff}} = k_B T \mu = D \left[\int_0^L dx e^{-\beta V(x)} \int_0^L dx e^{\beta V(x)} \hat{G}_0^{-1}(x) \right]^{-1}. \quad (10)$$

Второй частный случай точного аналитического решения уравнения (8) состоит в нахождении пото-

ка $\Phi(x) = \int_0^\infty J(x, t)dt = \lim_{s \rightarrow 0} \tilde{J}(x, s)$, интегрированно-го за большой промежуток времени, в течение которого состояние частицы изменяется от начального распределения $\rho(x, 0)$ с максвелловским распределением по скоростям до равновесного в потенциале $V(x)$ конечного распределения $\rho(x, \infty)$. Поскольку $\lim_{s \rightarrow 0} s\tilde{\rho}(x, s) = \rho(x, \infty)$, уравнение (8) при $s \rightarrow 0$ принимает вид

$$-D\partial_x e^{\beta V(x)}\tilde{\rho}(x, 0) = e^{\beta V(x)}\hat{G}_0^{-1}(x) \times \left\{ \Phi(0) + \int_0^x dy[\rho(y, 0) - \rho(y, \infty)] \right\}. \quad (11)$$

Вследствие периодичности функции $e^{\beta V(x)}\tilde{\rho}(x, 0)$ интегрирование по x левой и правой части уравнения (11) от 0 до L позволяет найти величину $\Phi(0)$:

$$\Phi(0) = \int_0^L dx \hat{q}(x) \int_0^x dy [\rho(y, \infty) - \rho(y, 0)],$$

$$\hat{q}(x) = Z_{in}^{-1} q(x) \hat{G}_0^{-1}(x), \quad (12)$$

$$q(x) = e^{\beta V(x)} / \int_0^L dx e^{\beta V(x)}, \quad Z_{in} = \int_0^L dx q(x) \hat{G}_0^{-1}(x),$$

а соотношение (7) при учете равенств $\Phi(x) = \lim_{s \rightarrow 0} \tilde{J}(x, s)$ и $\lim_{s \rightarrow 0} s\tilde{\rho}(x, s) = \rho(x, \infty)$ – и величину $\Phi(x)$. Полученное выражение (12) является обобщением известной леммы Паррондо [14] на случай инерционных частиц (в отсутствие инерции при $\hat{G}_0^{-1}(x) = \hat{1}$ и $\hat{q}(x) = q(x)$ оно сводится собственно к лемме Паррондо). Физическая трактовка величины $\Phi(x)$ очень проста. Если в начальный момент времени частица находилась в равновесном состоянии $\rho(x, 0) = \rho_a(x)$ в потенциале $V_a(x)$, в момент времени $t = 0$ потенциал $V_a(x)$ мгновенно перешел в потенциал $V_b(x)$, а конечным состоянием является равновесное распределение $\rho(x, \infty) = \rho_b(x)$ в потенциале $V_b(x)$, то величина $\Phi(x) = \Phi_{ab}(x)$ определяет долю частиц, перешедших через точку x за время жизни потенциала $V_b(x)$. Циклический (с периодом цикла τ) дихотомный процесс переключения потенциалов $V_a(x)$ и $V_b(x)$, характеризующихся пространственным периодом L , инициирует направленное движение частицы, средняя скорость которого может быть представлена в виде

$$\langle v \rangle = \frac{L}{\tau} [\Phi_{ab}(0) + \Phi_{ba}(0)] = \frac{L}{\tau} \int_0^L dx [\hat{q}_b(x) - \hat{q}_a(x)] \int_0^x dy [\rho_b(y) - \rho_a(y)]. \quad (13)$$

Здесь операторы $\hat{q}_a(x)$ и $\hat{q}_b(x)$ определяются выражениями (12), в которых в качестве потенциала $V(x)$ используются $V_a(x)$ и $V_b(x)$ соответственно.

Анализ результирующих соотношений (9), (10), (12) и (13) показывает, что учет инерции заключен в операторе $\hat{G}_0^{-1}(x)$, который расположен справа от экспонент $e^{\beta U(x)}$ или $e^{\beta V(x)}$, фигурирующих в точных аналитических выражениях для соответствующих безынерционных величин. Теория ММНД [2] дает следующий алгоритм вычисления оператора $\hat{G}_0^{-1}(x, s)$:

$$\begin{aligned} & \hat{G}_{n-1}^{-1}(x, s) = \\ & = \hat{1} + \tau_v \frac{n+1}{(n+\tau_v s)(n+1+\tau_v s)} \partial_x \hat{G}_n(x, s) \hat{J}(x), \end{aligned} \quad (14)$$

$$\tau_v = m/\zeta, \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad \hat{G}_N(x, s) = \hat{1},$$

справедливый при достаточно больших N . Идея получения рекуррентного соотношения (14) состоит в разложении искомой функции распределения $\rho(x, v, t)$ в ряд по полиномам Эрмита, зависящим от скорости частицы v . Тогда уравнение Клейна–Крамерса (3) сводится к системе зацепляющихся дифференциальных уравнений на коэффициенты этого разложения, зависящие от координаты x . Связь значений $(n-1)$ -го и n -го коэффициентов как раз и задает соотношение (14). Операторная форма записи соотношений (9), (10), (12)–(14) предполагает дальнейшее использование определенного представления, в котором операторные преобразования становятся матричными и допускают непосредственное вычисление искомых величин. Соотношение (5) является примером координатного представления, в котором оператор $\hat{G}_0(x, s)$ представлен интегральным ядром $G_0(x, x'; t - t')$. Для задач с периодическими граничными условиями (рассматриваемыми в данной статье) более продуктивным является “квазиимпульсное” представление, в котором матричные элементы произвольного оператора определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} A_{pp'} &= L^{-1} \int_0^L dx e^{-ik_p x} \hat{A}(x) e^{ik_{p'} x}, \\ p, p' &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad k_p = 2\pi L^{-1} p. \end{aligned} \quad (15)$$

Тогда интегральные представления результирующих величин (9), (10), (12), (13), а также рекуррентное соотношение (14) сведутся к суммированию по p , которое в численных расчетах должно проводиться от некоторого $-p_m$ до p_m , где $p_m > 0$ выбирается настолько большим, чтобы обеспечить требуемую точность.

Таким образом, запись величин J , D_{eff} , $\Phi(0)$ или $\langle v \rangle$, формально совпадающая с известными аналитическими безынерционными соотношениями и учитывающая инерцию посредством введения определенного оператора, имеет все преимущества аналитического представления результатов и допускает непосредственное их вычисление. В качестве простейшей иллюстрации продуктивности предлагаемого подхода исследуем влияние больших градиентов потенциала на эффективный коэффициент диффузии, представленный формулой (10).

Рассмотрим пилообразный потенциал, характеризуемый энергетическим барьером V и ширинами звеньев l и $L-l$ (L – период), задающими коэффициент пространственной асимметрии $\kappa = 1 - 2l/L$. При $l \rightarrow 0$ (предельно асимметричный потенциал, $\kappa \rightarrow 1$) градиент потенциала V/l стремится к бесконечности. Поэтому такой потенциал наилучшим образом подходит для решения поставленной задачи. К тому же для него известен безынерционный вклад в эффективный коэффициент диффузии $D_{\text{eff}}^{(m=0)} = D(a/\sinh a)^2$, $a = \beta V/2$, который оказывается не зависящим от κ (см., например, [15]). Тогда соотношение (10) можно записать в виде

$$D_{\text{eff}} = D_{\text{eff}}^{(m=0)} / Z_{in}, \quad (16)$$

$$Z_{in} = 1 + \beta D \tau_v \sum_{p, p' \neq 0} k_p k_{p'} q_{-p} (\hat{G}_1)_{pp'} V_{p'},$$

где $(\hat{G}_1)_{pp'}$ – матричные элементы оператора $\hat{G}_1(x, 0)$, определяемые соотношением (15), а q_p и V_p – фурье-компоненты величины $q(x)$ (см. (12)) и пилообразного потенциала $V(x)$:

$$\begin{aligned} q_p &= 4a^2 \frac{\cos(k_p l/2) - i \coth(a) \sin(k_p l/2)}{l(L-l)k_p^2 + 2i\kappa L a k_p + 4a^2}, \\ V_p &= -2iV \frac{\sin(k_p l/2)}{l(L-l)k_p^2}. \end{aligned} \quad (17)$$

Поскольку при $a < aL/l \ll 1$ множитель $q_{-p} V_{p'}$ в выражении для Z_{in} (16) оказывается порядка a^2 , с точностью до a^2 можно считать $(\hat{G}_1)_{pp'}$ не зависящим от потенциала. В таком высокотемпературном приближении ($k_B T \gg V$) матрицы $(\hat{G}_n)_{pp'}$ (и, в частности, матрица $(\hat{G}_1)_{pp'}$) становятся диагональными, $(\hat{G}_n)_{pp'} \approx g_p^{(n)} \delta_{pp'}$, а диагональные матричные элементы $g_p^{(n)}$ удовлетворяют рекуррентному соотношению $g_p^{(n-1)} = [1 + (\gamma_p/n)g_p^{(n)}]^{-1}$, $n = 1, 2, \dots, N$, $\gamma_p = D\tau_v k_p^2$, $g_p^{(N)} = 1$, следующему из (14) при $V(x) = 0$ и $s = 0$. Используя приведенное в [2] интегральное представление непрерывной дроби $1/[1 +$

+ $(\gamma_p/2)/[1 + (\gamma_p/3)/[1 + \dots]]$, которая как раз и равна $g_p^{(1)}$, получаем

$$g_p^{(1)} \underset{p \neq 0}{=} \int_0^1 dz \exp[-\gamma_p(z-1-\ln z)] \underset{\gamma_p \gg 1}{\approx} \sqrt{\frac{\pi}{2\gamma_p}}, \quad g_0^{(1)} = 1. \quad (18)$$

Приближенное равенство в (18) соответствует случаю большой инерции, когда время τ_v релаксации скоростей к максвелловскому распределению много больше времени диффузии частицы $\tau_D = L^2/D$ на периоде потенциала L . Примечательно, что суммирование в (16) после подстановки выражений (17) и приближенного значения $g_p^{(1)}$ (18) может быть выполнено аналитически. Оно дает следующий результат для Z_{in} :

$$Z_{in} \underset{\tau_v/\tau_D \gg 1}{\approx} 1 - \frac{8a^2L^2\sqrt{\tau_v/\tau_D}}{\sqrt{2\pi}l^2(L-l)^2} \times \\ \times \int_0^l dx (l-x) \ln[2 \sin(\pi x/L)] \underset{l/L \ll 1}{\approx} \\ \underset{l/L \ll 1}{\approx} 1 - 4a^2 \sqrt{\frac{\tau_v}{2\pi\tau_D}} \left[\frac{3}{2} + \ln(2\pi l/L) \right]. \quad (19)$$

На рис. 1 полученная приближенная зависимость Z_{in} от l/L сравнивается с точной, рассчитанной в рамках ММНД. Видно, что инерционность частицы, описываемая фактором Z_{in} , приводит к зависимости эффективного коэффициента диффузии от асимметрии потенциала. В области не очень малых l формула (19) достаточно точно воспроизводит расчет ММНД. Обратим внимание на нетривиальное температурное поведение инерционного вклада в Z_{in} : поскольку $a \propto T^{-1}$, $\tau_D \propto D^{-1} \propto T^{-1}$, имеем $Z_{in} - 1 \propto T^{-3/2}$ и указанный вклад в D_{eff} пропорционален $T^{-1/2}$. В области малых l ($l/L \ll a$), где градиент потенциала велик, логарифмическая асимптотика в (19), справедливая при $a \ll l/L \ll 1$, сменяется сложным неаналитическим поведением, анализируемым только численно. Поскольку допустимые значения l/L в обсуждаемой асимптотике ограничены параметром a , можно утверждать, что при $l = 0$ величина Z_{in} имеет конечное значение, характеризуемое неаналитической асимптотикой $Z_{in} - 1 \propto -a^2 \ln(a)$ при $a \rightarrow 0$.

Природа обсуждаемого неаналитического поведения эффективного коэффициента диффузии в периодическом потенциале, содержащем скачок на каждом периоде, состоит в следующем. При учете инерции не выполняется определенное “прыжковое условие” (jump condition [2]), накладываемое в отсутствие инерции на концентрации по обе стороны от скачка

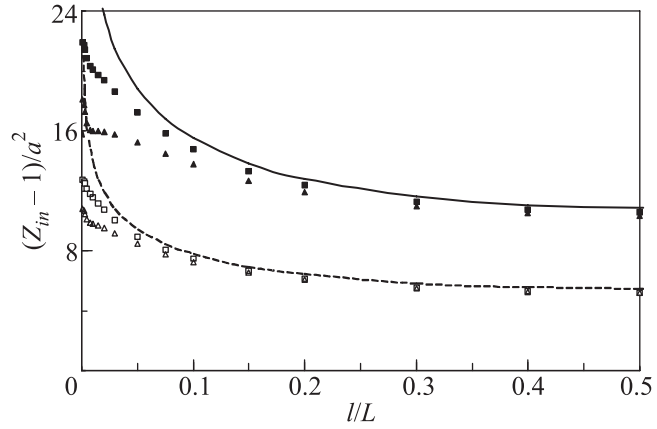


Рис. 1. Зависимости инерционного вклада $(Z_{in} - 1)/a^2$ в эффективный коэффициент диффузии частицы $D_{\text{eff}} = D(a/\sinh a)^2/Z_{in}$ в пилообразном потенциале от относительной ширины его наименьшего звена l/L . Квадратные и треугольные маркеры соответствуют точному численному расчету в рамках ММНД при $a = 0.025$ и 0.05 ($N = 100$, $p_m = 100$). Кривые рассчитаны в высокотемпературном приближении ($a < aL/l \ll 1$) в случае большой инерции ($\tau_v \gg \tau_D$) по формуле (19). Штриховые и сплошные кривые, а также открытые и закрытые маркеры отвечают $\tau_v/\tau_D = 4$ и 16 соответственно

потенциала: отношение значений $\rho(x, t)$ по обе стороны от скачка равно $\exp(\beta V)$. Оно следует из соотношения связи (2) между потоком, непрерывным в точке скачка, и концентрацией. При учете инерции соотношение (2) больше не справедливо, распределение частиц по скоростям не подчиняется распределению Максвелла, а скорость частицы по обе стороны от скачка потенциала удовлетворяет закону сохранения энергии (разность кинетических энергий равна барьеру потенциала V). В результате переменная v в функции распределения $\rho(x, v, t)$ претерпевает скачок при переходе переменной x через точку скачка потенциала. Это происходит при $l \rightarrow 0$, когда характерное время скольжения частицы $\tau_s = \zeta l^2/V$ по участку потенциала с большим градиентом стремится к нулю и не может конкурировать с характерным временем τ_v установления распределения Максвелла. Заметим, что в случае малой инерции $(\hat{G}_1)_{pp'} \approx \delta_{pp'}$ и суммирование по p и p' в (16) дает результат, приведенный в [15, 16]: $Z_{in} \approx 1 + 4D\tau_v a^2/[l(L-l)]$. Поэтому можно сказать, что по мере увеличения инерции особенность, возникающая вследствие больших значений градиента потенциала ($l \rightarrow 0$), стягивается в точку: степенное поведение l^{-1} переходит в $-\ln(l)$.

В заключение отметим, что стандартный путь описания с учетом малой инерции состоит в исполь-

зовании связи потока $J(x, t)$ с плотностью вероятности $\rho(x, t)$ посредством модифицированного оператора потока $\hat{J}(x) = [1 + (m/\zeta^2)U''(x)]\hat{J}(x)$, в котором наряду с безынерционным вкладом (см. оператор потока $\hat{J}(x)$ в (2)) содержится линейная по массе поправка [2, 15, 16]. В данной статье эта связь записывается в формальном операторном виде для произвольной инерции. Такой прием позволяет получить из уравнения непрерывности (1) ряд аналитических соотношений, являющихся обобщением известных выражений в отсутствие инерции. При этом оператор связи между $J(x, t)$ и $\rho(x, t)$, содержащий всю информацию об инерционности частицы, может быть рассчитан в рамках ММНД. Плодотворность предложенного подхода проиллюстрирована на примере расчета эффективного коэффициента диффузии инерционной частицы в пилообразном потенциале. Такой выбор потенциала позволил получить явные выражения для этого коэффициента в высокотемпературном приближении и продемонстрировать характер его неаналитического поведения при больших градиентах потенциала. Можно также показать, что аналогичное неаналитическое поведение характерно и для средней скорости адиабатического инерционного рэтчета, представленной соотношением (13).

1. M. von Smoluchowski, *Ann. Phys.* **48**, 1103 (1915).
2. H. Risken, *The Fokker-Planck Equation. Methods of*

Solution and Applications, Springer-Verlag, Berlin (1989), 288 p.

3. O. Klein, *Ark. Mat., Astron. Fys.* **16**(5), 1 (1922).
4. H. A. Kramers, *Physica* **7**, 284 (1940).
5. V. I. Mel'nikov and S. V. Meshkov, *J. Chem. Phys.* **85**, 1018 (1986).
6. P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 251 (1990).
7. V. I. Mel'nikov, *Phys. Rep.* **209**, 1 (1991).
8. В. И. Мельников, Письма в ЖЭТФ **40**, 56 (1984) [*JETP Lett.* **40**, 787 (1984)].
9. W. T. Coffey and Yu. P. Kalmykov, *The Langevin Equation*, 3rd ed., World Scientific, Singapore (2012), ch. 12.
10. W. L. Reenbohn and M. C. Mahato, *J. Stat. Mech.: Theor. Exp.*, P03011 (2009).
11. S. Saikia and M. C. Mahato, *Phys. Rev. E* **80**, 062102 (2009).
12. W. T. Coffey, Y. P. Kalmykov, and S. V. Titov, *Eur. Phys. J. Special Topics* **222**, 1847 (2013).
13. Р. Л. Стратонович, *Радиотехн. и электрон.* **4**, 497 (1958).
14. J. M. R. Parrondo, *Phys. Rev. E* **57**, 7297 (1998).
15. В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина, Т. Е. Корочкова, Письма в ЖЭТФ **98**, 637 (2013) [*JETP Lett.* **98**, 568 (2013)].
16. V. M. Rozenbaum, Yu. A. Makhnovskii, I. V. Shapochkina, S.-Y. Sheu, D.-Y. Yang, and S. H. Lin, *Phys. Rev. E* **89**, 052131 (2014).