



TAMPEREEN TEKNILLINEN YLIOPISTO
TAMPERE UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

VISA SAARINEN ELEKTRONIEN KLASSINEN DIFFUUSIO LORENTZ-KAASUSSA

Kandidaatintyö

Tampere, 27. maaliskuuta 2018

Tarkastajat: Prof. Esa Räsänen, FM
Janne Solanpää

TIIVISTELMÄ

VISA SAARINEN: Elektronien klassinen diffuusio Lorentz-kaasussa

Tampereen teknillinen yliopisto

Kandidaatintyö, 22+3 sivua

27. maaliskuuta 2018

Teknis-luonnontieteellinen koulutusohjelma

Pääaine: Teknillinen fysiikka

Tarkastajat: Prof. Esa Räsänen, FM Janne Solanpää

Avainsanat: Lorentz-kaasu, kaaos, grafeeni, symplektinen integrointi, diffuusio

Tässä kandidaatintyössä tutkittiin laskennallisesti hiukkasen diffuusiota grafeenin kaltaisessa hilarakenteessa, Lorentz-kaasussa. Energian arvoina käytettiin Lorentz-kaasun sirottajien potentiaalien suhteen normalisoituja arvoja siten, että arvo $E = 1$ vastasi sirottajien potentiaalın suuruutta. Tätä pistettä kutsuttiin työssä *kriittiseksi energiaksi*, koska kyseisen pisteen jälkeen mallinnettavalla hiukkasella saattoi olla riittävästi energiaa ylittää mallinnetut pehmeät potentiaalit.

Lähellä kriittistä energiaa mallinnettavan hiukkasen havaittiin jäävän loukkuun tiettyille alueille, jolloin sen diffuusiokertoimen havaittiin lähestyvän nollaa eli hiukkasella havaittiin *subdiffuusiota*. Toisaalta pienillä muutoksilla potentiaalien pehmeyyteen ja vierekkäisten sirottajien väliseen etäisyyteen hiukkasen havaittiin *superdiffusoituvan* eli diffuusiokertoimen havaittiin kasvavan voimakkaasti, koska hiukkasella esiintyi ballistisia ratoja ja se kulkeutui lähes suoraviivaisesti pois päin alkupisteestään. Tarkasteltaessa lähemmin kyseisiä ballistisia ratoja havaittiin osan radoista olevan ballistisia mahdollisesti jopa 80% mallinnettavasta radasta, minkä jälkeen diffuusionopeus tasaantui ja hiukkasella esiintyi normaalia diffuusiota.

Selkeästi hiukkasen energian ollessa lähellä kriittistä energiaa sillä esiintyy mielenkiintoisia ominaisuuksia. Tässä työssä tutkittiin hiukkasen diffuusiota vain muutamilla eri parametreilla, ja lisälaskuille tulee olemaan tarvetta, jotta kyseisiä ilmiöitä voitaisiin ymmärtää paremmin.

ABSTRACT

VISA SAARINEN: The classical diffusion of electrons in soft Lorentz gas
Tampere University of Technology
Bachelor's thesis, 22+3 pages
March 27th, 2018
Bachelor's Degree Programme in Science and Engineering
Major: Technological physics
Examiners: Prof. Esa Räsänen, M.Sc. Janne Solanpää
Keywords: Lorentz gas, chaos, graphene, symplectic integration, diffusion

This thesis explored computationally a particle's diffusion in a graphene-like lattice structure called Lorentz gas. The used energy values were normalized to the scatterer potential energies so that the value $E = 1$ would correspond to the potentials' magnitude. This point was called the critical energy in the thesis because after that point the simulated particle could have enough energy to sometimes cut across the soft potential scatterers.

Near the critical energy the modeled particle was noticed to get trapped in certain areas so that its diffusion coefficient approached zero because the particle was sub-diffusing. Then again with small changes into the system parameters, namely the potential softness and the wideness of the gap between two advanced scatterers the particle's diffusion coefficient would sometimes be abnormally high because the particle was superdiffusing. Within these superdiffusing trajectories sometimes it was noticed that the particle would be ballistic even up to 80% of the modeled trajectory, after which it would derail from the ballistic trajectory and show normal diffusion.

Clearly with the energy of the particle being close to the critical energy the particle seems to have many interesting properties. In this thesis only a few different system parameters were explored and there is surely much more information to be found even in classical models such as this.

SISÄLTÖ

1. Johdanto	1
2. Taustaa Lorentz-kaasusta	3
2.1 Pehmeä ja kova Lorentz-kaasu	4
2.2 Kaaosteoria	4
2.3 Diffuusiokerroin	6
3. Liikkeyhtälön mallinnus	8
3.1 Newtonin liikkeyhtälö	8
3.2 Nopeus Verlet -algoritmi	8
3.3 Neljännen kertaluvun symplektinen integrointi	10
4. Tulokset	12
4.1 Pehmeä Lorentz-kaasu	12
4.2 Diffuusio kriittisellä energialla	14
5. Yhteenveto ja päätelmät	19
Lähteet	20

1. JOHDANTO

Kaaosteorian yhtenä uranuurtajana pidetään yhdysvaltalaisista matemaatikkoja ja meteorologia Edward Lorenzia, joka esitti vuonna 1972 julkaisussaan kysymyksen "Voiko perhosen siiven isku Brasiliassa aiheuttaa tornadon Texasissa?" [1]. Kyseisestä julkaisusta syntyi termi *perhosefekti*, jota on käytetty paljon muun muassa mediassa ja tieteellisissä julkaisuissa. Lorenzin kysymyksen tarkoituksena oli johdatella lukijaa kaaosteoriaan ja kaaokseen, jossa pienetkin muutokset tarkasteltavan järjestelmän alkuarvoihin saattoivat johtaa täysin erilaisiin lopputuloksiin [2]. Sitten kaaosteoriaa on sovellettu monenlaisiin eri järjestelmiin, jotka ovat vahvasti riippuvaisia niiden alkuarvoista. Yhtenä esimerkkinä tällaisesta järjestelmästä on H. A. Lorentzin esittämä *Lorentz-kaasu* (engl. Lorentz gas) [3].

Lorentz-kaasu on yksinkertainen malli metallien lämmön- ja sähkönjohtavuudelle. Tutkittaessa hiukkasten kulkeutumista Lorentz-kaasussa diffuusion nopeus eli *diffuusio-kerroin* on hyvin tärkeä ominaisuus. Diffuusiokertoimella kuvataan etäisyyttä, jolle hiukkaset voivat levitä alkupisteestään tietyn ajan kuluttua, eli diffuusionopeutta [3].

Lorentz-kaasua on aiemmin tutkittu melko kattavasti, mutta pääasiassa käyttäen sirottajina kovia potentiaaleja. Tämän työn tarkoituksena oli tutkia elektronien kulkeutumista laskennallisesti keinoitekoisessa grafeenissa, joka vastaa matemaattisen diffuusion tutkimuksessa Lorentz-kaasua [3]. Käytetyssä mallissa sirottajat olivat pehmeitä potentiaaleja eli kyseessä oli *pehmeä Lorentz-kaasu* (engl. soft Lorentz gas).

Koska hiukkasten kulkeutumista Lorentz-kaasussa on tutkittu kattavasti, tiedetään sen ominaisuudet hyvin tarkasti [3]. Lorentz-kaasu on deterministinen järjestelmä eli sen tila pystytään periaatteessa koska tahansa laskemaan tarkasti. Kuitenkin, koska Lorentz-kaasu on vahvasti alkuarvoistaan riippuvainen järjestelmä, pienetkin muutokset sen alkutilassa voivat saada aikaan erittäin suuria muutoksia hiukkasen rataa tarkasteltaessa. Näin ollen työ pohjautuu siis myös vahvasti kaaosteoriaan.

Työssä käytettiin sirottajien energioihin normalisoituja energian arvoja. Hiukkasten ratoja tutkittiin useilla eri kokonaisenergian alkuarvoilla lähellä normalisoitua energian arvoa $E = 1$. Lisäksi hiukkasille laskettiin diffuusiokertoimet jokaisella käytetyllä

energian arvolla. Käytetyillä kokonaisenergian arvoilla hiukkaselta odotettiin epätavallista diffuusiota. Joillakin energian arvoilla havaittiin, että hiukkasten kulkema matka kasvoi huomattavasti nopeammin kuin toisilla energian arvoilla tietyn ajan kuluttua alkuhetkestä. Tällöin kyseisillä energioilla havaittiin diffuusiokertoimen divergoivan äärettömyyteen.

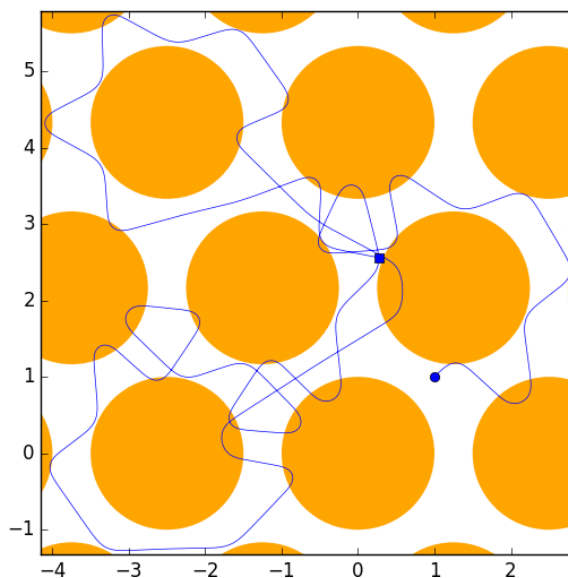
Tämä työ on jaettu viiteen lukuun. Luvussa 2 käydään läpi yleistä teoriaa Lorentz-kaasusta, kaaosteoriasta sekä diffuusiokertoimen määrittämisestä hiukkasille. Luku 3 keskittyy yleisiin liikeyhtälön integrointialgoritmeihin sekä varsinaiseen mallinnuksessa käytettyyn algoritmiin. Luvussa 4 esitellään mallinnuksesta saatuja tuloksia ja luvussa 5 tiivistetään työn oleelliset tulokset.

2. TAUSTAA LORENTZ-KAASUSTA

Grafeeni on vuonna 2004 löydetty yhdestä hiiliatomikerroksesta koostuva materiaali [4]. Sitä kutsutaan usein vuosituhaten ihmemateriaaliksi: se on kestävin ja joustavin tunnettu aine, 98-prosenttisesti läpinäkyvää mutta lähes täysin läpäisemätön, ja sillä on erinomaiset sähkön- ja lämmönjohtavuusominaisuudet. Vuonna 2009 valmistettiin ensimmäinen *keinotekoinen grafeeni* [5], jossa joitakin grafeenin ominaisuuksia voidaan hyödyntää muusta kuin hiilestä koostuvassa hunajakennorakenteessa. Nykyään keinotekoisia grafeenia valmistetaan puolijohdekvanttipisteistä [6] sekä metallimolekyylipintojen avulla [7, 8]. Tässä työssä mallinnettiin hiukkasta Lorentz-kaasussa, joka geometrisesti muistuttaa yllä kuvattua keinotekoisia grafeenia. Alkujaan Lorentz-kaasu on yksinkertaistettu malli metallien lämmön- ja sähkönjohtavuudelle, missä ionit oletetaan liikkumattomiksi ja elektronien väliset vuorovaikutukset jätetään huomiotta [3]. Lorentz-kaasun ionit toimivat elastisina sirottajina ja hiukkaset kimpoavat ioneista peilimäisesti.

Yhtenä esimerkkinä Lorentz-kaasusta on kuva 2.1, missä on käytetty kovien sirottajien sijaan pehmeitä sirottajia. Kuvassa oranssit ympyrät ovat Lorentz-kaasun sirottajia. Pieni sininen ympyrä kuvaa hiukkasen lähtöpaikkaa $\mathbf{x}(t_0)$, josta se kulkeutuu ajan $t - t_0$ kuluessa sinisellä viivalla merkittyä reittiään pitkin sinisellä neliöllä merkittyyn loppupisteeseen $\mathbf{x}(t)$ tietyn ajan kuluttua.

Tässä luvussa käydään läpi lyhyesti Lorentz-kaasun ominaisuuksia sekä pehmeän että kovan Lorentz-kaasun tapauksessa, minkä jälkeen tutustutaan hieman kaaosteoriaan tähän työhön liittyen. Lopuksi käydään läpi, miten diffuusiokerroin määritetään hiukkaselle Lorentz-kaasussa.



Kuva 2.1 Esimerkki hiukkasen radasta pehmeässä Lorentz-kaasussa.

2.1 Pehmeä ja kova Lorentz-kaasu

Tyypillisesti Lorentz-kaasun sirottajina käytetään kovia potentiaaleja, jolloin hiukkanen siroaa niistä elastisesti peilikuvana pinnan normaaliin nähden [9]. Kovan Lorentz-kaasun törmäyksissä hiukkasen kokonaisenergia säilyy, koska törmäykset ovat elastisia [3]. Kuitenkin myös pehmeässä Lorentz-kaasussa kokonaisenergia säilyy ja hiukkasen kineettinen energia muuttuu sen mukaan, miten lähellä se on potentiaaleja.

Pehmeässä Lorentz-kaasussa kovareunaiset sirottajat korvataan potentiaalilla

$$V_\alpha(\mathbf{r}) = \left[1 + \exp\left(\frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha\| - d}{\sigma}\right) \right]^{-1}, \quad (2.1)$$

jossa \mathbf{R}_α on sirottajan keskipisteen sijainti, \mathbf{r} on tarkasteltavan hiukkasen sijainti, d on sirottajan säde ja σ on vakio, joka kuvaa potentiaalin pehmeyttä [10]. Toisin sanoen pehmeän potentiaalin tapauksessa potentiaalin suuruus vakiokehoisilla ja vakiopehmyisillä sirottajilla riippuu lähtökohtaisesti vain tarkasteltavan hiukkasen etäisyydestä sirottajasta.

Pehmeäpotentiaalisessa Lorentz-kaasussa yhtälön (2.1) mukaisia potentiaaleja on äärettömän monta kuvan 2.1 kaltaisessa hilarakenteessa. Laskennallisesti on kuitenkin järkevintä ottaa potentiaalit huomioon vain tiettyyn etäisyyteen asti. Tämä voidaan huomata tarkasteltaessa funktion $V_\alpha(\mathbf{r})$ raja-arvoa kun $\mathbf{r} \rightarrow \infty$. Koska tiedetään, että $\lim_{x \rightarrow \infty} \exp(x) = \infty$, pidettäessä termit \mathbf{R}_α ja d vakioina

$$\lim_{\|\mathbf{r}\| \rightarrow \infty} V_\alpha(\mathbf{r}) = \lim_{\|\mathbf{r}\| \rightarrow \infty} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha\| - d}{\sigma}\right)} = 0 \quad (2.2)$$

eli hiukkasen siirtyessä etäämmälle potentiaalista, potentiaali lähestyy eksponentiaalisesti nollaa. Tällöin jo melko pienellä hilasumman katkaisulla päästään hyviin approksimaatioihin.

2.2 Kaaosteoria

Kaaosteoria on matematiikan haara, jossa tutkitaan epälineaarisia dynaamisia järjestelmiä. Nämä järjestelmät ovat usein hyvin vahvasti riippuvaisia niiden alkuarvoista,

mistä syystä niiden tilojen ennustaminen on hyvin vaikeaa tai jopa mahdotonta — ainakin pitkällä aikavälillä [11]. Kaaosteoriaa sovelletaan monilla eri tieteenhaaroilla, kuten esimerkiksi fysiikassa, kemiassa ja biologiassa.

Kaoottiset järjestelmät ovat deterministisiä eli periaatteessa tiedetään tarkasti, miten kappaleiden tulisi käyttäytyä tietyissä tilanteissa. Siitä huolimatta niiden käyttäytymistä on mahdotonta ennustaa tarkasti pidemmällä aikavälillä. Yhtenä syynä on se, että muuttujia on mahdotonta mitata täydellisen tarkasti. Toisaalta jopa suurempana syynä on liian monien muuttujien määrä. Kaikkia mahdollisia muuttujia ei aina pystytä ottamaan huomioon [12].

Kaaos on järjestelmän herkkyyttä alkuarvoille, ja sitä voidaan mallintaa kaksiulotteisen biljardin tapauksessa seuraavalla yhtälöllä [12]:

$$\|d\mathbf{x}(t)\| \approx e^{\lambda t} \|d\mathbf{x}(0)\|, \quad (2.3)$$

jossa λ on Lyapunovin eksponentti, joka on järjestelmän ratojen keskimääräinen erkaantumisnopeus, $\mathbf{x}(t)$ kuvaa hiukkasen sijaintia annetulla ajanhetkellä t jollain tietyllä radalla, ja $d\mathbf{x}(t)$ taas kuvaa ajanhetkellä t vaihtoehtoisella radalla kulkevan hiukkasen etäisyyttä alkuperäisestä radasta. [12]

Hiukkasen ollessa etäisyydellä $\|d\mathbf{x}(0)\|$ alkuperäisestä radasta voidaan sen dynamiikan ennustettavuutta kuvata korkeintaan Lyapunovin ajan (T_L) verran [12] eli

$$T_L \approx -\frac{1}{\lambda} \ln \left\| \frac{d\mathbf{x}(0)}{L} \right\|. \quad (2.4)$$

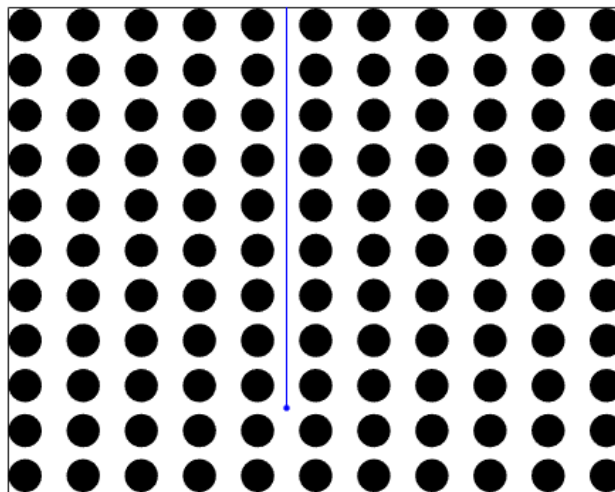
Yhtälössä (2.4) termi L kuvaa järjestelmän kokoa, eli sitä kuinka suureksi etäisyys $\|d\mathbf{x}(t)\|$ voi kasvaa. Kaoottisilla järjestelmillä Lyapunovin eksponentti on aina positiivinen, mutta positiivinen Lyapunovin eksponentti itsessään ei tarkoita järjestelmän olevan kaoottinen [12].

Lorentz-kaasu on hyvin vahvasti riippuvainen alkuarvoistaan. Hyvinkin pieni ero tarkasteltavan hiukkasen alkuarvoissa voi saada hyvin nopeasti radat erkanemaan toisistaan, eli kyseessä on kaoottinen järjestelmä. Koska hiukkanen saattaa kulkeutua aivan eri suuntaan riippuen sen alkuarvojen pienistä vaihteluista, diffuusiota Lorentz-kaasussa tutkitaan yhä paljon.

2.3 Diffuusiokerroin

Diffuusio kuvaa aineiden sekoittumisnopeutta. Esimerkiksi hajuvesipullon avaaminen toisella puolella huonetta saa hajuvien molekyylien vapautumaan ilmaan ja leviämään diffuusion avulla koko huoneen alueelle. Oikeassa elämässä diffuusio on kuitenkin vain marginaalinen leviämistapa hajuvien molekyylille, ja pelkän diffuusion avulla hajuvien leviäminen huoneen toiseen päähän veisi mahdollisesti useita päiviä [13]. Diffuusio on kuitenkin merkittävämpi ilmiö pienessä mittakaavassa kuten Lorentz-kaasussa [3]. Hiukkasen siirtymää Lorentz-kaasussa voidaan kuvata diffuusiokertoimella D , jonka yksikkönä on m^2/s . Diffuusiokerroin kuvaa nopeutta, jolla hiukkaset keskimäärin pysyvät leviämään jollekin alueelle tietyssä ajassa [13].

Tarkasteltaessa Lorentz-kaasua \mathbb{R}^d :ssa, jossa d ilmoittaa vapausasteiden määrän, \mathbb{R}^2 on yksinkertaisimpia järjestelmiä, joilla voidaan havaita determinististä diffuusiota [12]. Jos käytetyt sirottajat ovat riittävän suuria ja hilarakenne on jokin muu kuin neliömäinen, hiukkasen keskimääräinen vapaa matka on äärellinen. Kuten kuvasta 2.2 voidaan huomata, äärettömän vapaan matkan tapauksessa hiukkanen ei koskaan törmää muihin kappaleisiin, vaan se voi matkata häiriöttä äärettömyyteen.



Kuva 2.2 Esimerkki neliömäisestä hilarakenteesta, jossa hiukkasen vapaa matka voi olla ääretön.

Diffuusiokertoimen määrittämiseksi hiukkaselle tarvitaan hiukkasen *keskimääräistä neliöityä siirtymää* (engl. mean squared displacement, MSD), jossa otetaan useiden ratojen pituuksien neliöiden keskiarvo eli $\langle \|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)\|^2 \rangle$, ja muodostetaan sen avulla lauseke diffuusiokertoimelle [12]:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)\|^2 \rangle}{2t \cdot d} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)\|^2 \rangle}{4t}. \quad (2.5)$$

Lorentz-kaasulle yhtälön (2.5) vapausasteiden määrä d on 2. Riittävän suurella ajan t arvolla voidaan approksimoida, että $D \approx \langle \|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)\|^2 \rangle / 4t$. Ottamalla riittävän monta rataa huomioon ratojen pituuksien neliöllistä keskiarvoa laskettaessa ja käyttämällä sopivan suurta aikaa t , voidaan diffuusiokertoimelle näin saada melko hyvä approksimaatio.

Normaalissa diffuusiiossa hiukkasen MSD on likimain suoraan verrannollinen kuluneeseen aikaan, jolloin myös $D \sim \text{vakio}$. Tämän lisäksi on olemassa kahden tyyppistä anomaalista diffuusiota: *superdiffuusio* ja *subdiffuusio* [14, 15]. Subdiffuusiiossa eli $MSD \sim t^\alpha$, kun $\alpha < 1$ MSD kasvaa hitaasti, jolloin hiukkanen voi jäädä loukkuun jollekin alueelle. Tällöin diffuusiokerroin $D = 0$. Superdiffuusiiossa taas MSD kasvaa eksponentiaalisesti eli $\alpha > 1$. Jos hiukkanen pääsee etenemään häiriöittä, kuten kuvan 2.2 tapauksessa, huomataan hiukkasen superdiffusioituvan. Yhtälössä (2.5) MSD on suoraan verrannollinen kuljettuun matkaan, joka on yhtälössä toiseen potenssiin. Tällöin $MSD \sim t^2$ eli kyseinen hiukkanen superdiffusioituu.

Jaksollisessa Lorentz-kaasussa voidaan havaita determinististä diffuusiota [12], joka vaikuttaa ulkoisesti hyvin satunnaiselta, mutta siitä huolimatta se ei ole satunnais-ta. Deterministisessä diffuusiiossa hiukkasen liikettä mallinnettaessa voidaan esimerkiksi diffuusiokertoimelle muodostaa yhtälö ilman approksimaatioita [12]. Kuitenkin käytännössä diffuusiokertoimen laskennallisessa määrittämisessä joudutaan tekemään approksimaatioita, mutta se voidaan määrittää halutulla tarkkuudella.

3. LIIKEYHTÄLÖN MALLINNUS

Työssä tutkittiin yksittäisen pistemäisen kappaleen liikettä hilarakenteessa. Jotta kappaleen liikettä voidaan mallintaa, täytyy liikkeelle pystyä ensin muodostamaan liikeyhtälö. Tässä tarkastellaan liikeyhtälön käyttöä ensin perustasolla, minkä jälkeen käydään läpi hieman monimutkaisempaa numeerista integrointia velocity Verlet -menetelmää käyttäen. Lopuksi tutustutaan vielä erääseen neljännen kertaluvun symplektiseen algoritmiin, jota käytettiin työssä hiukkasten liikkeen laskemiseen.

3.1 Newtonin liikeyhtälö

Yksinkertaisimmillaan liikeyhtälönä voidaan käyttää Newtonin toista lakia, eli

$$\mathbf{F}(t) = m\mathbf{a}(t), \quad (3.1)$$

jossa \mathbf{F} on voima ajan t funktiona, m on tarkasteltavan kappaleen massa ja \mathbf{a} on kappaleen kiihtyvyys ajan funktiona. Jos tunnetaan kappaleeseen vaikuttavat voimat, niin yhtälön (3.1) mukaan voidaan ratkaista kappaleen liikerata, koska tällöin tunnetaan myös kappaleen kiihtyvyys. Tästä voidaan myös johtaa differentiaaliyhtälö (3.2), koska kiihtyvyys \mathbf{a} voidaan ilmaista nopeuden \mathbf{v} ja paikan \mathbf{x} aikaderivaattojen avulla:

$$\mathbf{F}[\mathbf{x}(t)] = m \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = m \frac{d^2\mathbf{x}(t)}{dt^2}. \quad (3.2)$$

Tämä yhtälö voidaan ratkaista useilla eri differentiaaliyhtälöiden ratkaisumenetelmillä, joista seuraavaksi käydään läpi eräät ratkaisumenetelmät toisen ja neljännen kertaluvun differentiaaliyhtälöille.

3.2 Nopeus Verlet -algoritmi

Yksi yleinen toisen kertaluvun differentiaaliyhtälön ratkaisumenetelmä on numeerinen Verlet -integrointi [16]. Nopeus-Verlet -menetelmä on paranneltu versio tavallisesta

Verlet-integroinnista. Nopeus-Verletissä edetään aika-askeleissa $t = t_0 + \Delta t$, ja yksi aika-askel voidaan kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned}
 (1) \quad \mathbf{v}\left(t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) &= \mathbf{v}(t_0) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{a}[\mathbf{x}(t_0)] \\
 (2) \quad \rightarrow \mathbf{x}(t) &= \mathbf{x}(t_0) + \mathbf{v}\left(t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t \\
 (3) \quad \rightarrow \mathbf{v}(t) &= \mathbf{v}\left(t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{a}[\mathbf{x}(t)].
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Nopeus-Verletissä määritellään yhtälön (3.3) vaiheessa (1) ensin nopeus puolen aika-askeleen päästä alkuhetkestä, toisin kuin esimerkiksi leapfrog-menetelmässä, jossa käytetään kokonaisia aika-askeleita. Nopeus-Verletissä käytetään tunnettuja nopeuden ja sijainnin arvoja alkuhetkellä, ja tämän jälkeen lasketaan aina seuraava vaihe käyttäen edellisestä vaiheesta saatua tulosta. Vaiheessa (2) käytetään edellisestä vaiheesta saatua nopeutta, jonka jälkeen vaiheessa (3) lasketaan vaihe (1) uudestaan käyttämällä edellisessä vaiheessa laskettua sijaintia ja (1) vaiheessa laskettua nopeutta [17]. Nopeus-Verlet on yksi esimerkki symplektisestä integrointialgoritmista. Yhtälössä (3.3) kiihtyvyys a ei saa riippua kappaleen nopeudesta v , koska tällöin käytetty algoritmi ei enää toimi eikä ole symplektinen [18].

Symplektiset integraattorit ovat numeerisia integrointijärjestelmiä, jotka säilyttävät integroitaessa kappaleen ominaisuuksia, kuten kokonaisenergian ja pyörimismäärän, ja ne ovat myös ajan suhteen kääntyviä [19]. Esimerkiksi laskettaessa hiukkasen etenemistä käyttäen kyseistä menetelmää, hiukkanen voi menettää liike-energiaansa, mutta tällöin se myös saa potentiaalienergiaa siten, että sen kokonaisenergia ei kuitenkaan muutu. Koska symplektinen integrointi on ajan suhteen kääntyvä [18], niin ajan suhteen toiseen suuntaan integroitaessa ajanhetkellä t_0 hiukkasella olisi kuitenkin yhtä paljon kokonaisenergiaa ja sama määrä liike-energiaa ja potentiaalienergiaa kuin alussa.

Koska nopeus-Verlet on toisen kertaluvun menetelmä, saadaan menetelmän virheen ε suuruusluokaksi osoitettua $\varepsilon \sim \Delta t^3$ [19], jolloin tuloksen tarkkuus on verrannollinen käytetyn aika-askeleen toiseen potenssiin. Pienillä aika-askeleilla toisen kertaluvun menetelmää käyttäen voidaan siis saada jo melko hyviä tuloksia. Lisäksi koska nopeus-Verlet -menetelmässä käytetään aika-askeleen puolikasta kokonaisen aika-askeleen sijaan, saadaan pienillä aika-askeleilla myös hieman parannettua tulosta esimerkiksi verrattuna aiemmin mainittuun leapfrog-menetelmään.

3.3 Neljännen kertaluvun symplektinen integrointi

Tämän työn simulaatioissa käytettiin Yoshidan sekä Forestin ja Ruthin esittelemää symplektistä neljännen kertaluvun integrointialgoritmia, jota pystytään tarvittaessa muokkaamaan myös kuudennen tai kahdeksannen kertaluvun menetelmäksi toistamalla samat vaiheet, joilla algoritmi saatiin muodostettua [19, 20].

Kyseisellä algoritmilla neljännen kertaluvun symplektiset integraattorit ovat muotoa

$$\begin{aligned} S_4(\tau) &= \prod_{i=1}^4 e^{c_i \tau A} e^{d_i \tau B} + \varepsilon \\ &= e^{c_1 \tau A} e^{d_1 \tau B} e^{c_2 \tau A} e^{d_2 \tau B} e^{c_3 \tau A} e^{d_3 \tau B} e^{c_4 \tau A} e^{d_4 \tau B} + \varepsilon, \end{aligned} \quad (3.4)$$

jossa τ on käytetty aika-askel, $\varepsilon \sim \tau^5$ on virhetermi. Tällöin saatu tulos vastaa tulosta $e^{\tau(A+B)}$ aina aika-askeleen neljänteen potenssiin asti, kun A ja B ovat ei-kommutoivia operaattoreita [19]. Yhtälön (3.4) kertoimet c_i ja d_i ovat integroimisvakioita, joiden avulla kappaleen liikerataa voidaan laskea askeleittain. Yhtenä esimerkkinä Yoshida antaa approksimaation (3.4) kertoimiksi [19]

$$\begin{aligned} c_1 &= c_4 = \frac{1}{2(2 - 2^{1/3})} \\ c_2 &= c_3 = \frac{1 - 2^{1/3}}{2(2 - 2^{1/3})} \\ d_1 &= d_3 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}} \\ d_2 &= -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}} \\ d_4 &= 0. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Käytetyissä järjestelmissä tunnetaan vektori \mathbf{z}_0 , joka sisältää alkuarvot paikkakoordinaateille x_0 ja y_0 sekä x- ja y-suuntaiset nopeustermit v_{x0} ja v_{y0} eli

$$\mathbf{z}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_0 \\ \mathbf{v}_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \\ v_{x0} \\ v_{y0} \end{bmatrix}.$$

Yhtälössä (3.4) esiintyvät operaattorit A ja B ovat käytetyissä järjestelmissä Hamiltonin operaattoreita [10]. Operaattorilla A voidaan laskea uudet paikkakoordinaatit hiukkaselle eli

$$e^{c_1 \tau A} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_0 \\ \mathbf{v}_0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{v}_0 \end{bmatrix}$$

ja vastaavasti operaattorilla B uudet nopeudet hiukkaselle eli

$$e^{d_1\tau B} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{v}_0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{v}_1 \end{bmatrix}.$$

Toisin sanoen yhtälön (3.4) vakioiden avulla voidaan operoida nopeutta ja paikkaa samaan tapaan, kuin yhtälössä (3.3) aiemmin esitellyllä velocity Verlet -menetelmällä [19, 21]. Tunnettaessa kappaleen alkunopeus ja alkusijainti voidaan laskea yksi aika-askel seuraavasti: 1) operoidaan vektoria \mathbf{z}_0 termillä $e^{c_1\tau A}$, jotta saadaan laskettua hiukkasen uusi sijainti, 2) operoidaan edelleen vektoria \mathbf{z}'_0 termillä $e^{d_1\tau B}$, jolloin saadaan vektori \mathbf{z}_1 , 3) toistetaan vaihe 1 operoimalla uutta vektoria \mathbf{z}_1 termillä $e^{c_2\tau A}$, jolloin saadaan vektori \mathbf{z}'_1 , 4) operoidaan vektoria \mathbf{z}'_1 termillä $e^{d_2\tau B}$, jolloin saadaan termi \mathbf{z}_2 . Näitä vaiheita toistamalla saadaan laskettua yksi aika-askel yhtälön (3.6) mukaisesti [19, 21].

$$\begin{aligned}
 1) \quad & e^{c_1\tau A} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_0 \\ \mathbf{v}_0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{v}_0 \end{bmatrix} \\
 2) \quad & e^{d_1\tau B} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{v}_0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{v}_1 \end{bmatrix} \\
 3) \quad & e^{c_2\tau A} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{v}_1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{v}_1 \end{bmatrix} \\
 4) \quad & e^{d_2\tau B} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{v}_1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{v}_2 \end{bmatrix} \\
 5) \quad & e^{c_3\tau A} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{v}_2 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{v}_2 \end{bmatrix} \\
 6) \quad & e^{d_3\tau B} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{v}_2 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{v}_3 \end{bmatrix} \\
 7) \quad & e^{c_4\tau A} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{v}_3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{r}_4 \\ \mathbf{v}_3 \end{bmatrix} \\
 8) \quad & e^{d_4\tau B} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_4 \\ \mathbf{v}_3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{r}_4 \\ \mathbf{v}_4 \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

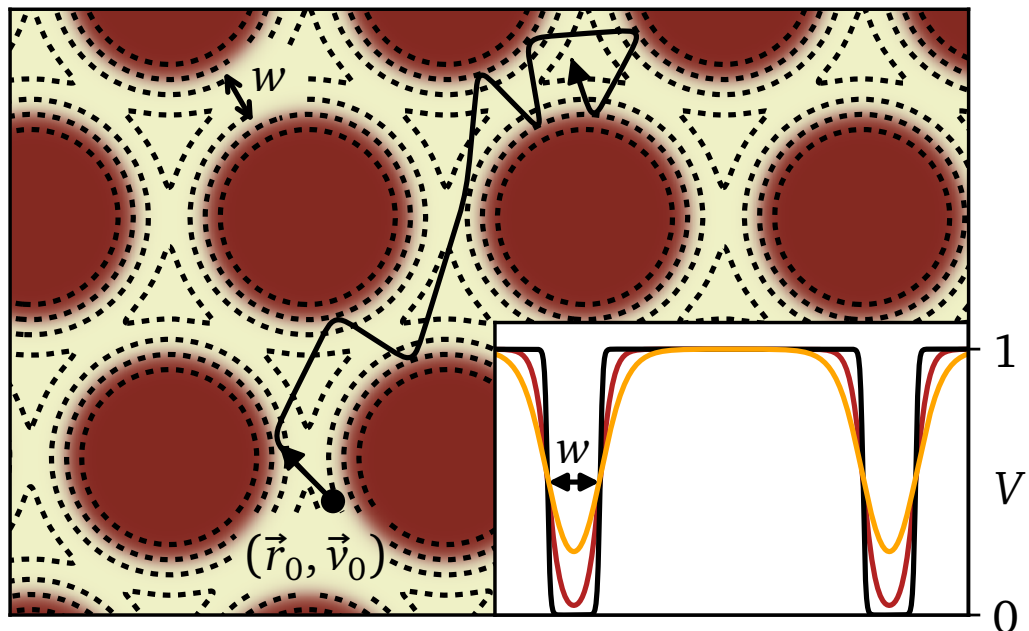
Kuten voidaan huomata, tämä menetelmä on melko samankaltainen yhtälössä (3.3) esitellyn velocity Verlet -menetelmän kanssa.

4. TULOKSET

Tässä luvussa käydään läpi simulaatioissa käytetty järjestelmä, minkä jälkeen esitellään simulaatioista saadut tulokset. Simulaatioissa käytettiin bill2d-ohjelmaa [10], joka tarjoaa hyvin monipuolisia mahdollisuuksia erilaisten klassisten, dynaamisten järjestelmien simuloimiseen.

4.1 Pehmeä Lorentz-kaasu

Työssä tutkittiin jaksollista pehmeää Lorentz-kaasua, jonka sirottajien potentiaali on määritelty yhtälössä (2.1). Kuva 4.1 havainnollistaa työssä käytettyä järjestelmää. Ruskeat ympyrät ovat yhtälön (2.1) mukaisia pehmeitä sirottajia, ja niiden ympärillä olevat katkoviivat kuvaavat tasapotentiaalikäyriä. Mallinnetulla hiukkasella on liike-energiaa, jonka avulla se voi nousta korkeampaan potentiaaliin ja riittävän isolla energialla ($E > 1$) jopa sirottajien päälle.



Kuva 4.1 Esimerkki tutkitusta järjestelmästä. Kuva on lainattu lähteestä [22] tekijöiden luvalla.

Yhtälöä (2.2) tarkasteltaessa huomattiin sirottajien potentiaalien lähestyvän nollaa nopeasti niistä loitottaessa. Hiukkaseen vaikuttavista sirottajista mallinnuksessa otettiin huomioon hiukkasen ympärillä olevan yksikkökopin lisäksi myös sirottajat viidenteen lähimpään asti. Kahden potentiaalin väliin jäävää väliä kohdassa $V = 0,5$ merkitään kirjaimella $w = \|\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_{\alpha'}\| - 2d$ (ks. kuva 4.1), missä \mathbf{R}_α ja $\mathbf{R}_{\alpha'}$ ovat vierekkäisten sirottajien keskipisteet ja d on sirottajien säde kuten yhtälössä (2.1).

Kuvan 4.1 potentiaalikuvaajassa on myös havainnollistettu potentiaalin pehmeuden vaikutusta. Välin w keskellä hiukkaseen vaikuttava potentiaali on pienimmillään, kun taas sen lähestyessä sirottajien reunoja sen potentiaalienergia kasvaa.

Tässä työssä käytettiin sirottajien säteelle arvoa $r_p = 1$. Kahden vierekkäisen sirottajan väliin jäävälle etäisyydelle käytettiin arvoja $w = 0,5$ ja $w = 0,05$. Vastaavasti potentiaalin pehmeydelle eli yhtälössä (2.1) σ :lle käytettiin arvoja $\sigma = 0,05$ sekä $\sigma = 0,01$. Simulaatiot ajettiin aika-askeleilla $\Delta t = 0,001$ aikaan $t = 1500$ asti, missä yksikköinä käytettiin *atomaarisia yksiköitä* (ajalle 1 a.y. = $2,418884326505(16) \cdot 10^{-17}$ s, etäisyyksille 1 a.y. = $5,2917721092(17) \cdot 10^{-11}$ m). Koska diffuusiokertoimen määrittämisessä yhtälössä (2.5) otetaan keskiarvo useista eri radoista, jokaisessa simulaatiossa laskettiin 70 000 rataa kullekin energian arvolle. Näin pystyttiin laskemaan MSD eli keskiarvo ratojen neliölliselle pituudelle. Hiukkasen etenemistä laskettiin luvussa 3.3 esitellyllä Yoshidan neljännen kertaluvun symplektisellä integrointialgoritmilla.

Suurin osa simulaatioista suoritettiin likimain samoilla parametreilla muuttaen vain energian arvoja, potentiaalin pehmeyttä ja sirottajien välin leveyttä. Eräs esimerkki simulaatioihin käytetystä komennosta on

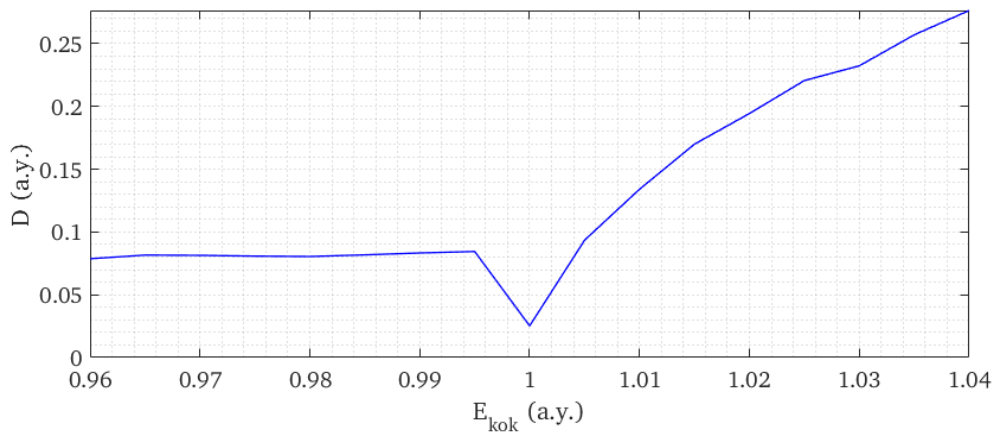
```
bill2d_diffusion_coefficient --table 0 --soft-lorentz-gas --periodic --billtype 3
--propagator 4 --soft-lorentz-radius 1 --unit-cell 2.5 --soft-lorentz-sharpness 0.05
--soft-lorentz-lattice-sum-truncation 3 --energy 1.140 --max-t 1500 --delta-t 1e-3
--ensemble-size 70000.
```

Yllä esitelyihin parametreihin voi tutustua tarkemmin bill2d:n USERGUIDE -dokumentaatiossa [23]. Näillä parametreilla määriteltiin järjestelmäksi jaksollinen pehmeä Lorentz-kaasu ilman seiniä, joista hiukkanen pääsisi kimpoamaan. Mallinnettavalle hiukkaselle otettiin huomioon vuorovaikutukset sirottajien kanssa, mutta ilman magneettikenttiä. Simulaatioissa otettiin huomioon kolme lähintä yksikkökoppia eli viidenteen lähimpään sirottajaan asti ja sirottajien säteenä käytettiin arvoa $r_p = 1$. Yksittäisten simulaatioiden laskeminen kesti noin kuusi tuntia, mutta riippuen käytetystä energiareoluutiosta, joilla simulaatiot lasketaan, laskuissa voi kestää huomattavasti pidempäänkin.

Simulaatioista saatiin 1500 tulosta kullekin käytetylle energian arvolle. Jokainen tulos antoi tarkastellun hiukkasen ratojen siirtymien neliöidyn keskiarvon eli MSD:n ajanhetkellä t , kun $t_{max} = 1500$. Saaduista tuloksista jätettiin ensimmäiset 1250 huomioimatta tarkkuuden parantamiseksi ja loppujen 250 tuloksen avulla muodostettiin Matlabilla [24] lineaarista regressiota hyödyntäen sovite hiukkasen diffuusiokertoimelle D ajan t funktiona.

4.2 Diffuusio kriittisellä energialla

Työn inspiraationa olivat lähteen [25] tulokset, joiden mukaan hiukkasen liikettä mallinnettaessa odotettiin hiukkasen jäävän loukkuun jollekin alueelle energian arvoilla $E \approx 1$, jolloin hiukkasen diffuusiokerroin $D \rightarrow 0$. Saadut tulokset esitellään kuvassa 4.2.

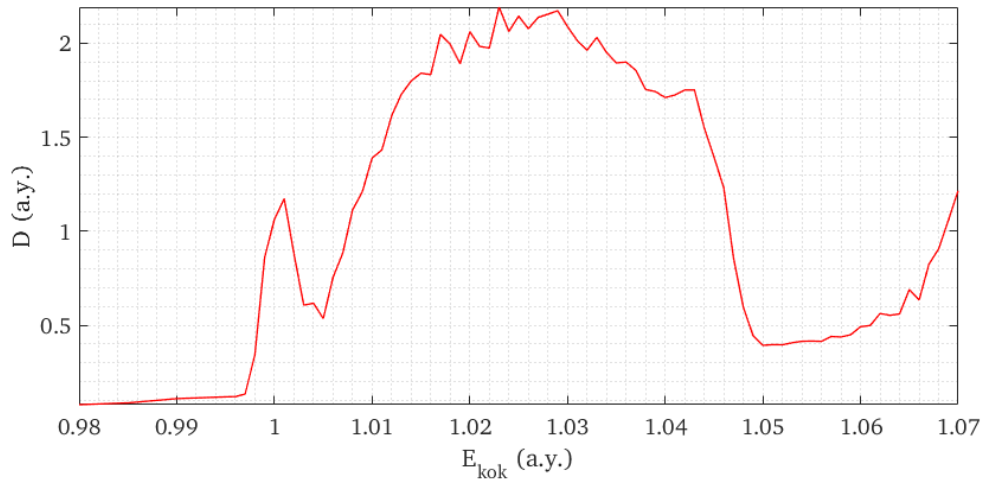


Kuva 4.2 Diffuusiokerroin kokonaisenergian funktiona simulaatioparametreilla $w = 0,05$ ja $\sigma = 0,01$. Simulaatiot laskettiin energiaväleillä $\Delta E = 0,005$.

Kuten kuvasta 4.2 voidaan huomata, energian arvoilla $E \approx 1$ hiukkasen diffuusi nopeus pienenee lähelle nollaa. Tällöin voidaan päätellä hiukkasten jäävän loukkuun tietylle alueelle, eivätkä ne kulkeudu kovinkaan pitkälle alkupisteestään. Kyseiset simulaatiot ajettiin potentiaalien pehmeydellä $\sigma = 0,01$, kun sirottajien väliin jäävä etäisyys oli $w = 0,05$. Kuvaajasta voidaan myös huomata energian arvoilla $E < 0,995$ diffuusiokertoimen pysyvän likimain vakiona, jolloin hiukkasen alkuenergian muuttaminen ei muuta sen diffuusionopeutta. Toisaalta energian arvoilla $E > 1,010$ diffuusiokertoimen huomataan kasvavan voimakkaasti. Suuremmilla energian arvoilla hiukkanen pääsee yhä todennäköisemmin pehmeiden potentiaalien päälle, tai jopa lähes suoraan niiden yli. Tällöin hiukkanen pääsee kulkeutumaan lähes samalla tavalla kuin kuvassa 2.2, jolloin hiukkasilla esiintyy superdiffuusiota. Tällaisten ratojen

voidaan sanoa olevan ballistisia eli niissä hiukkasen $MSD \sim t^2$.

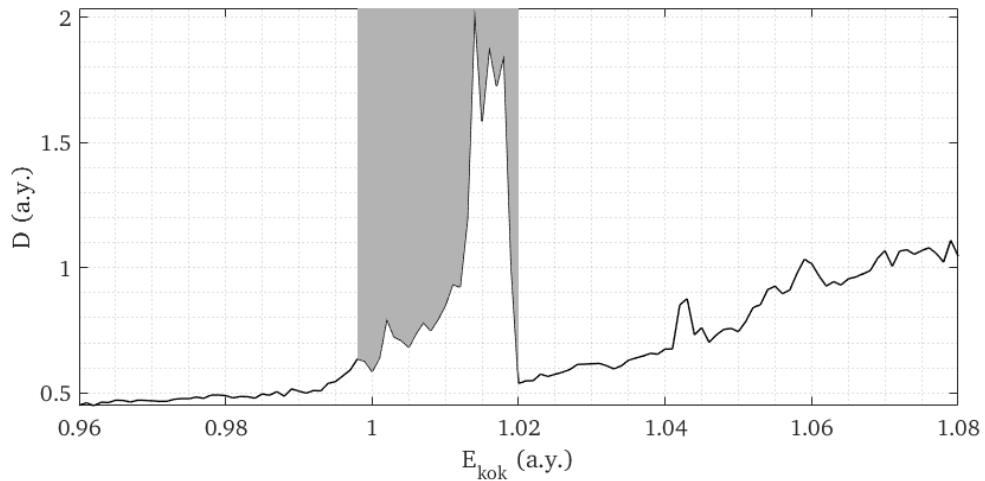
Seuraavana tavoitteena oli tutkia, miten hiukkanen käyttäytyy hieman muutetuilla lähtöarvoilla. Kuvan 4.3 simulaatioissa sirottajien välinen etäisyys pidettiin vakiona, mutta niiden potentiaalien pehmeyttä kasvatettiin arvoon $\sigma = 0,05$.



Kuva 4.3 Diffuusiokerroin kokonaisenergian funktiona simulaatioparametreilla $w = 0,05$ ja $\sigma = 0,05$. Simulaatiot laskettiin energiaväleillä $\Delta E = 0,001$.

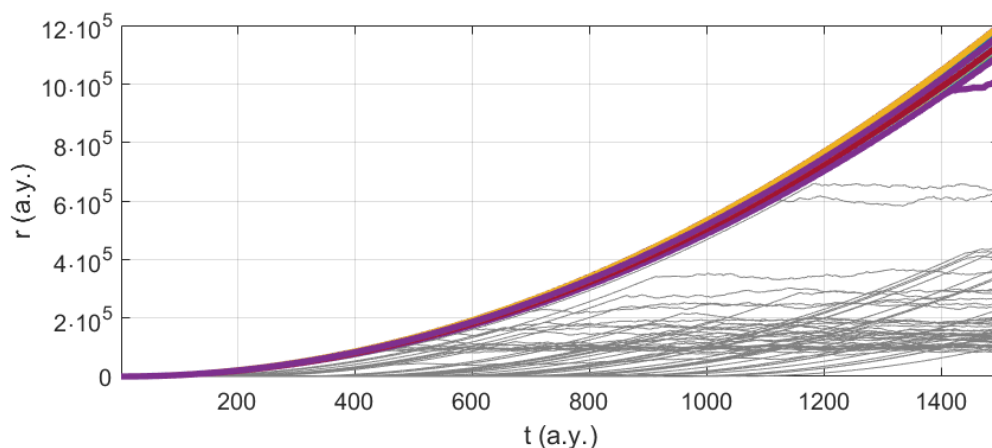
Vaikka simulaatioissa käytettiin lähes samoja parametreja, saadut tulokset poikkesivat merkittävästi toisistaan. Toisin kuin kuvassa 4.2, kuvan 4.3 tuloksista huomataan, että hiukkanen ei jää täysin loukkuun millään energian arvoilla. Kasvattamalla potentiaalın pehmeyttä 0,01:stä 0,05:een ja energian ollessa välillä $0,995 < E < 1,050$ hiukkasella esiintyy ballistisia ratoja, joiden takia sen diffuusionopeus kasvaa voimakkaasti. Toisaalta näillä lähtöarvoilla energian arvon $E = 1,050$ jälkeen hiukkasen käyttäytyminen palaa odotetun kaltaiseksi, kun sen energiaa kasvatetaan.

Seuraavaksi tutkittiin edelleen hieman muutetuilla järjestelmäparametreilla hiukkasen käyttäytymistä. Tällä kertaa potentiaalın pehmeys pidettiin vakiona, mutta kasvatettiin sirottajien väliin jäävä etäisyys arvoon $w = 0,5$. Tulokset muuttuivat jälleen merkittävästi melko pienen parametrimuutoksen jälkeen. Kuvassa 4.4 harmaalla merkityllä alueella energian arvoilla $0,998 < E < 1,020$ havaittiin hiukkasella esiintyvän erityisen paljon ballistisia ratoja, joiden takia hiukkasen diffuusiokerroimen arvot divergoivat kohti äärettömyyttä. Toisaalta erityisen mielenkiintoista on myös ballististen ratojen lähes täydellinen häviäminen kokonaisenergialla $E = 1,020$.



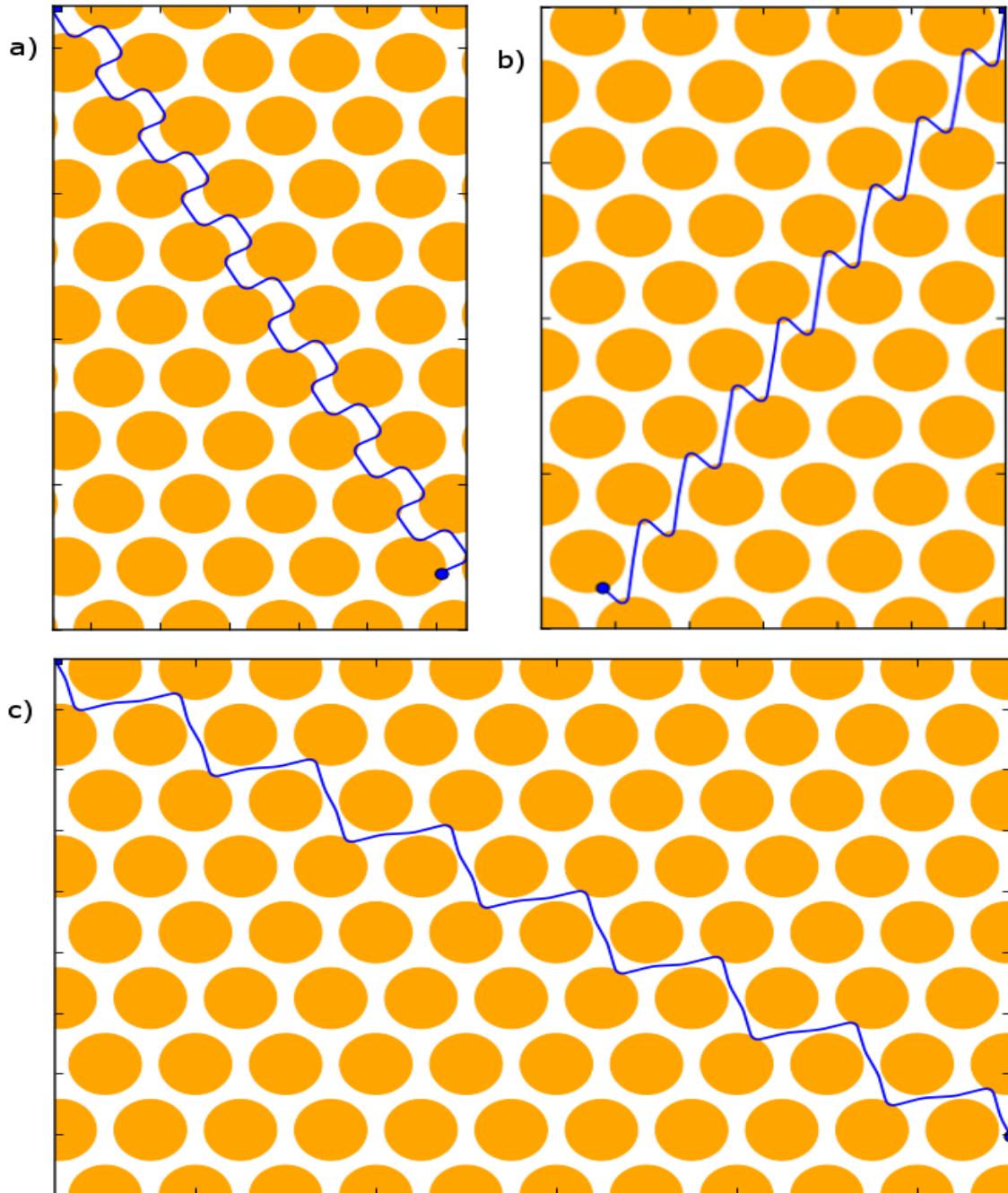
Kuva 4.4 Diffuusiokerroin kokonaisenergian funktiona simulaatioparametreilla $w = 0,5$ ja $\sigma = 0,05$. Simulaatiot laskettiin energiaväleillä $\Delta E = 0,001$.

Tarkasteltaessa tarkemmin kuvan 4.4 korkeinta piikkiä havaitaan sen olevan kohdassa $E = 1,014$. Koska tällä energialla tiedetään esiintyvän erityisen paljon ratoja, jotka diffusoituvat nopeasti kauas alkupisteestään, on järkevää tarkastella myös hiukkasen yksittäisiä ratoja. Yhtenä esimerkkinä kuvassa 4.5 on hiukkasen kokonaisenergian arvolla $E = 1,014$ joitakin ratoja. Kuvaa piirrettyjen värillisten ratojen havaitaan käyttäytyvän ballistisesti, eli hiukkasen kulkema etäisyys kasvaa likimain $r \sim t^2$ suhteessa. Näiden ballististen ratojen olemassaolo saa myös hiukkasen diffuusiokerroimen arvon kasvamaan merkittävästi, mistä johtuen diffuusiokerroimen kuvaajassa (kuva 4.4) havaitaan piikki.



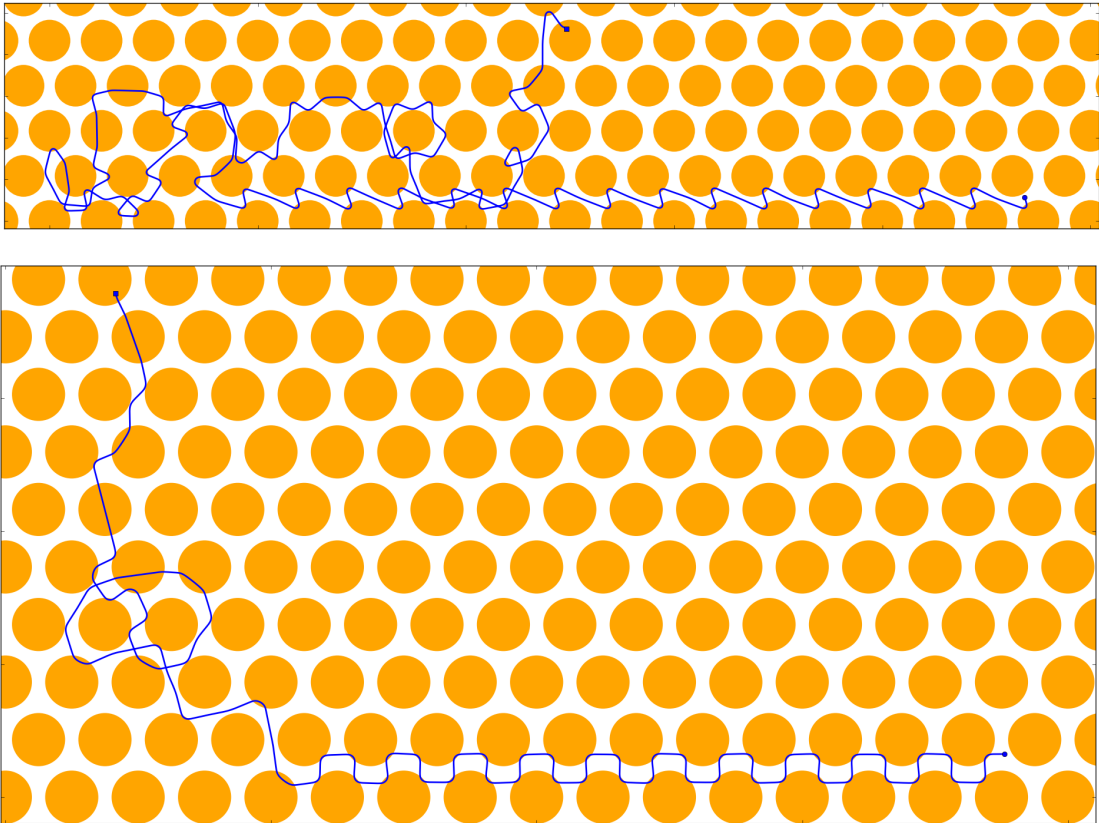
Kuva 4.5 Joitakin yksittäisiä ratoja, kun hiukkasen kokonaisenergia $E = 1,014$.

Edelleen hieman lähemmin tarkasteltaessa kyseisiä kuvan 4.5 ratoja, huomataan hiukkasen saavan kokonaisenergiastaan riippuen aina tietyn muotoisia säännöllisiä ratoja. Nämä ballistiset radat saavat samalla energialla aina saman muotoisia ratoja ja kuvassa 4.6 näytetään kolmella eri energialla kyseisten ratojen mahdollisia muotoja.



Kuva 4.6 Lyhyillä aikaväleillä yksittäisiä ballistisia ratoja parametreilla $w = 0,5$ ja $\sigma = 0,05$. Kuvan kohdassa a) $E = 1,190$ b) $E = 1,014$ c) $E = 1,058$.

Kuvasta 4.6 voidaan huomata hiukkasen diffuusionopeuden olevan selkeästi suuri, koska hiukkasen liike on kauempaa tarkasteltuna lähes suoraviivaista kuten kuvan 2.2 äärettömän vapaan matkan tapauksessa. Vaikka hiukkasen liike jatkui hyvin pitkään samanlaisena, huomattiin tietyn pisteen jälkeen myös tapahtuvan äkillisiä liikeradan muutoksia, jolloin hiukkanen vaihtoi kulkusuuntaansa. Esimerkkinä kyseisestä tilanteesta kuvassa 4.7 on kaksi tapausta, joista kummastakin on jätetty noin 60% alkupään vakiomuotoisesta liikkeestä pois kuvan selkeyttämiseksi.



Kuva 4.7 Yksittäisiä ratoja parametreilla $w = 0,05$ ja $\sigma = 0,05$ energian arvoilla $E = 1,014$ ja $E = 1,190$.

Lähtökohtaisesti Lorentz-kaasun tiedettiin olevan kaoottinen järjestelmä, mikä tarkoittaa kuvan 4.7 kaltaista dynamiikkaa. Simulaatioissa hiukkasen liike pysyi lähes suoraviivaisena hyvinkin pitkään, mutta siinä saattoi kuitenkin tapahtua pieniä lähes huomaamattomia muutoksia, jotka kasaantuivat hiljalleen ja lopulta saivat hiukkasen suistumaan radaltaan.

5. YHTEENVETO JA PÄÄTELMÄT

Tässä työssä tutkittiin muutamilla eri parametreilla hiukkasen diffuusiota Lorentz-kaasussa sen kokonaisenergian ollessa lähellä kriittistä energiaa $E = 1$. Hiukkaselta odotettiin epänormaalia käyttäytymistä lähellä kriittistä energiaa, ja saadut tulokset olivatkin mielenkiintoisia. Hiukkasen diffuusiota tutkittaessa kyseisillä energian arvoilla havaitaan selvästi ilmiöitä, joita ei pystytä vielä täysin selittämään ilman kattavia lisälaskuja.

Hiukkasella havaittiin käytetyillä järjestelmäparametreilla usein joko subdiffuusiota tai superdiffuusiota riippuen järjestelmän pehmeydestä ja sirottajien välisestä etäisyyksistä. Kriittisen energian läheisyydessä ballististen ratojen havaittiin olevan aina saman muotoisia säännöllisiä ratoja riippuen vain hiukkaselle annetun kokonaisenergian suuruudesta. Toisaalta myös näennäisesti ballistisilla radoilla havaittiin erkaantumista säännöllisestä radasta tietyn ajan kuluttua. On mahdollista, että kyseinen säännölliseltä radalta suistuminen tapahtuu lopulta kaikilla ballistisilla radoilla tietyn ajan kuluttua.

Kokonaisuudesta ei vielä pystytä luomaan riittävän tarkkoja johtopäätöksiä ilman kattavaa lisätutkimusta, jossa tutkitaan hiukkasen käyttäytymistä useilla eri parametreilla vaihdellen potentiaalien pehmeyttä ja vierekkäisten sirottajien väliin jäävän alueen leveyttä. Aihe tarjoaakin paljon tutkittavaa tulevaa ajatellen erityisesti, koska kyseiset simulaatiot vievät hyvin paljon aikaa.

LÄHTEET

- [1] A. Ralph and U. Yoshisuke. *Chaos Avant-garde, The: Memoirs Of The Early Days Of Chaos Theory*. World Scientific Publishing Company, 2001.
- [2] E. N. Lorenz. *The Essence Of Chaos*. Jessie and John Danz lectures. Taylor & Francis, 1995.
- [3] C. P. Dettmann. Diffusion in the lorentz gas. *Communications in Theoretical Physics*, 62(4):521, 2014. arXiv:1402.7010.
- [4] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–162, 2009. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>.
- [5] M. Polini, F. Guinea, M. Lewenstein, H. C. Manoharan, and V. Pellegrini. Artificial honeycomb lattices for electrons, atoms and photons. *Nature Nanotechnology*, 8, 2018. <http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2013.161>.
- [6] S. Wang, D. Scarabelli, Lingjie L. Du, Y. Y. Kuznetsova, L. N. Pfeiffer, K. W. West, G. C. Gardner, M. J. Manfra, V. Pellegrini, S. J. Wind., and A. Pinczuk. Observation of dirac bands in artificial graphene in small-period nanopatterned gaas quantum wells. *Nature Nanotechnology*, 13, 2018. <https://doi.org/10.1038/s41565-017-0006-x>.
- [7] K. K. Gomes, W. Mar, W. Ko, F. Guinea, and H. C. Manoharan. Designer dirac fermions and topological phases in molecular graphene. *Nature*, 483, 2012. <http://dx.doi.org/10.1038/nature10941>.
- [8] S. Paavilainen, M. Ropo, J. Nieminen, J. Akola, and E. Räsänen. Coexisting honeycomb and kagome characteristics in the electronic band structure of molecular graphene. *Nano Letters*, 16(6):3519–3523, 2016. <http://dx.doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b00397>.
- [9] S. Lansel, M. A. Porter, and L. A. Bunimovich. One-particle and few-particle billiards. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 16(1):013129, 2006. <https://doi.org/10.1063/1.2147740>.
- [10] J. Solanpää, P. J. J. Luukko, and E. Räsänen. Bill2d — a software package for classical two-dimensional hamiltonian systems. *Computer Physics Communications*, 199:133 – 138, 2016. <https://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2015.10.006>.

- [11] G. Boeing. Visual analysis of nonlinear dynamical systems: Chaos, fractals, self-similarity and the limits of prediction. *Systems*, 4(4), 2016. <https://dx.doi.org/10.3390/systems4040037>.
- [12] P. Cvitanović, R. Artuso, R. Mainieri, G. Tanner, and G. Vattay. Chaos: Classical and quantum. Niels Bohr Institute, Copenhagen 2016, [Online. Viitattu 26.11.2017] <http://www.chaosbook.org/>.
- [13] D. V. Schroeder. *An Introduction to Thermal Physics*. Addison Wesley, 2000.
- [14] S. Havlin and D. Ben-Avraham. Diffusion in disordered media. *Advances in Physics*, 51(1):187–292, 2002. <https://doi.org/10.1080/00018730110116353>.
- [15] Anomalous diffusion. [Online. Viitattu 9.1.2018] https://en.wikipedia.org/wiki/Anomalous_diffusion.
- [16] Verlet integration. [Online. Viitattu 2.10.2017] https://en.wikipedia.org/wiki/Verlet_integration.
- [17] W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens, and K. R. Wilson. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters. *The Journal of Chemical Physics*, 76(1):637–649, 1982. <https://doi.org/10.1063/1.442716>.
- [18] I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, and R. Folk. Optimized forest–ruth- and suzuki-like algorithms for integration of motion in many-body systems. *Computer Physics Communications*, 146(2):188 – 202, 2002. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(02\)00451-4](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(02)00451-4).
- [19] H. Yoshida. Construction of higher order symplectic integrators. *Physics Letters A*, 150(5):262 – 268, 1990. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(90\)90092-3](https://doi.org/10.1016/0375-9601(90)90092-3).
- [20] E. Forest and R. D. Ruth. Fourth-order symplectic integration. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 43(1):105 – 117, 1990. [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(90\)90019-L](https://doi.org/10.1016/0167-2789(90)90019-L).
- [21] Symplectic integrator. [Online. Viitattu 22.2.2018] https://en.wikipedia.org/wiki/Symplectic_integrator.
- [22] Tampereen teknillisen yliopiston QCAD-tutkimusryhmän ja Queen Mary University of London -yliopiston R. Klagesin tutkimusryhmän kollaboraatio, julkaisematon työ.
- [23] J. Solanpää ja P. J. J. Luukko ja E. Räsänen. Bill2d [10] USERGUIDE, git commit c13c3714b.

- [24] MATLAB and Statistics Toolbox Release 2017a, The MathWorks, Inc., Natick, Massachusetts, United States.
- [25] R. Klages, S. S. Gil Gallegos, J. Solanpää, M. Sarvilahti ja E. Räsänen, unpublished draft on diffusion in soft lorentz gas (2017).