

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

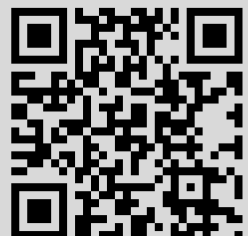
К. А. Пронин, Прыжковая миграция квазичастиц в одномерных неупорядоченных системах, *ТМФ*, 1984, том 61, номер 3, 442–452

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.85

20 марта 2025 г., 18:59:38



ПРЫЖКОВАЯ МИГРАЦИЯ КВАЗИЧАСТИЦ В ОДНОМЕРНЫХ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

Пронин К. А.

Рассматривается некогерентная миграция квазичастиц в цепочках со структурным беспорядком и беспорядком замещения с корреляциями случайных вероятностей прыжков самого общего вида. При больших временах найдены точное общее выражение предельного коэффициента диффузии и его дисперсия при ненулевом разбросе энергетических уровней центров, для модели структурного беспорядка найден также второй член разложения обобщенного коэффициента диффузии, а для модели случайных ловушек — первая зависящая от времени поправка к равновесной суммарной заселенности центров с фиксированными энергетическими уровнями.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование кинетических характеристик квазичастиц в одномерных неупорядоченных системах при конечных температурах является актуальной задачей. Это связано с активным изучением свойств квазиодномерных органических соединений типа полиацетилена, комплексных солей типа ТТФ—ТСNQ, биологических объектов типа молекул ДНК и др. [1].

Известно, что в одночастичном приближении при нулевой температуре введение сколь угодно малого случайного потенциала приводит к локализации всех состояний [2, 3, 4]. При конечных же температурах, как было показано в работах [5, 6], учет взаимодействия частицы с фононами, как правило, разрушает локализацию, и при больших временах движение принимает диффузионный характер.

В работах [5, 6] изучалась система с малым континуальным беспорядком и слабым электрон-фононным взаимодействием. Мы будем рассматривать в некотором смысле противоположный предельный случай — случай сильного электрон-фононного взаимодействия, когда движение частицы малого радиуса имеет характер некогерентных марковских прыжков по дискретным центрам [7]. Физически это соответствует ситуации, когда время установления термодинамического равновесия частицы с решеткой значительно меньше среднего времени между прыжками. В нашем рассмотрении беспорядок не будет предполагаться малым.

В сходной постановке задача исследовалась для случая чисто структурного беспорядка. Так, в работах [7, 8] рассматривалась цепочка с ненулевой долей разрывов, когда частица оказывается локализованной на сегментах конечной длины. В [9, 10] с использованием скейлинговой гипотезы исследовался диффузионный режим при предельно больших вре-

менах в цепочках без разрывов; было показано также, что при ненулевой плотности вероятности разрыва движение частицы при $t \rightarrow \infty$ имеет недиффузионный характер. В [11] было установлено, что усредненная заселенность начального центра при больших временах не зависит от корреляций конечного радиуса.

Результаты, полученные в работах [7–11], применимы к изоэнергетическим цепочкам. Целью настоящей работы является рассмотрение общей ситуации, когда разброс энергетических уровней конечен и сравним с тепловой энергией kT .

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Мы будем рассматривать кинетические характеристики некогерентной миграции квазичастиц в одномерных системах со структурным беспорядком и беспорядком замещения с корреляциями беспорядка общего вида. Решение основывается на управляющих (балансных) уравнениях для заселенностей центров (master equation) и проводится для случая, когда можно считать отличными от нуля вероятности перехода только между ближайшими соседями:

$$(1) \quad \frac{dP_n}{dt} = W_{n-1, n} P_{n-1} - (W_{n, n-1} + W_{n, n+1}) P_n + W_{n+1, n} P_{n+1}.$$

Начальные условия для уравнения (1), заданного на бесконечной прямой, возьмем в виде

$$(2) \quad P_n(t=0) = \delta_{n, 0},$$

соответствующем локализации частицы на нулевом центре. Здесь P_n — заселенность n -го центра, $-\infty < n < +\infty$, а $W_{i, j}$ — вероятность перехода между центрами с номерами i, j ($|i-j|=1$). Неупорядоченность системы учитывается случайным характером вероятностей перехода $W_{i, j}$.

Будем считать, что $W_{i, j}$ мультипликативно зависит от функций, описывающих по отдельности влияние структурного беспорядка и беспорядка замещения [2, 12]:

$$(3) \quad W_{ij} = W_0 W_{i, j}^s(R_{i, j}) W_{i, j}^a(E_i; E_j).$$

Здесь W_0 — константа, имеющая порядок частоты фононов, $W_{i, j}^s$ — симметричный по индексам i, j случайный множитель, учитывающий зависимость вероятности перехода от расстояния между центрами i, j ; $W_{i, j}^a$ — асимметричный по i, j случайный множитель, учитывающий зависимость $W_{i, j}$ от энергетических уровней центров, между которыми совершается прыжок. Будем считать, что случайные вероятности перехода не обращаются в ноль, т. е. цепочка не имеет разрывов; в остальном их функции распределения произвольны.

Каждая из величин $E_k, R_{i, j}$ может иметь пространственные корреляции произвольного радиуса; это может описывать, например, тенденцию к образованию сгущений однотипных атомов или частично коррелированной структуры типа молекул ДНК. Будет учтена также возможность корреляции обоих видов беспорядка между собой, т. е. зависимость $R_{n, n+1}$

от E_{n+1} , E_n . Это соответствует тому, что рассматриваемый атом имеет не только отличающийся от остальных энергетический уровень, но и отличающийся радиус локализации связанного состояния.

Из условия детального баланса следует, что асимметричная компонента вероятности W_a удовлетворяет следующему равенству:

$$(4) \quad W_{i,j}^a [W_{j,i}^a]^{-1} = f(E_j) f^{-1}(E_i),$$

где $f(E_k)$ — равновесная заселенность центра с энергетическим уровнем E_k . Система, описываемая управляющим уравнением (1) с вероятностью перехода (3), удовлетворяющей условию (4), имеет в качестве стационарного решения распределение $f(E)$.

Основное рассмотрение будет проведено для вероятностей перехода общего вида с использованием одного лишь условия (4). Конкретно интерес представляют следующие две модели с бальцмановским распределением $f(E) \sim \exp(-\beta E)$, где $\beta = (kT)^{-1}$.

I. Модель структурного беспорядка и беспорядка замещения. Асимметричная компонента определяется условием

$$(5) \quad W_{i,j}^a = \begin{cases} f(E_j) f^{-1}(E_i), & \text{если } E_j > E_i, \\ 1, & \text{если } E_j \leq E_i. \end{cases}$$

II. Модель структурного беспорядка и случайных ловушек:

$$(6) \quad W_{i,j}^a = f^{-1}(E_i).$$

Модель II изоморфна модели I в системе следующей структуры: ловушки случайной глубины случайным образом вкраплены в изоэнергетическую цепочку так, что они не «слипаются» в кластеры. Причина введения модели II состоит в возможности получения для нее некоторых более детальных, чем в общем случае, результатов.

3. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Применив к управляющим уравнениям (1) с начальными условиями (2) преобразование Лапласа ¹⁾

$$\hat{\mathcal{L}}f = \int_0^{\infty} \exp(-\epsilon t) f(t) dt,$$

получим систему алгебраических уравнений для изображений

$$(7) \quad -\delta_{n,0} + \epsilon P_n = W_{n-1,n} P_{n-1} - [W_{n,n-1} + W_{n,n+1}] P_n + W_{n+1,n} P_{n+1}.$$

Поясним основные этапы вывода рекуррентных соотношений, эквивалентных системе (7).

Рассмотрим сначала конечную цепочку из атомов с номерами $-N, \dots, \dots, N$. Уравнение для заселенности N -го центра будет иметь вид (7) с $n=N$ без последнего слагаемого. Выразим из этого соотношения P_N через P_{N-1} и подставим в (7) для $n=N-1$. Из получившегося соотношения вы-

¹⁾ Всюду в дальнейшем время обезразмерено с помощью характерного масштаба W_0^{-1} .

разим P_{N-1} через P_{N-2} , подставим в (7) с $n=N-2$ и т. д. до достижения начального центра. Устремив теперь N к бесконечности, получим цепочку рекуррентных соотношений, эквивалентных (7) и определяющих точное решение задачи для бесконечной системы.

Таким образом, находим, что заселенности центров связаны соотношениями

$$(8) \quad P_n = P_{n-1} W_{n-1, n} / (W_{n, n-1} + \varepsilon + G_n),$$

где вспомогательная функция G_n определяется рекуррентной формулой

$$(9) \quad G_n = W_{n, n+1} / (1 + W_{n+1, n} (\varepsilon + G_{n+1})^{-1}).$$

Заселенность начального центра дается выражением

$$(10) \quad P_0 = [\varepsilon + G_R + G_L]^{-1},$$

где G_R соответствует G_0 по формуле (9), а G_L получается изменением знаков всех индексов. Видно, что G_R и G_L являются в силу симметрии одинаково распределенными случайными величинами, коррелированными через уровень начального (нулевого) центра.

Отметим, что приведенный в [9, 10] вывод рекуррентных соотношений основывался на несколько искусственной аналогии с законами Кирхгофа для разветвленных электрических цепей и был справедлив только для случая симметричных вероятностей перехода.

Приравнивая вероятности левой и правой частей соотношения (9), можно получить для функции распределения случайной величины G интегральное уравнение типа уравнения Дайсона [13, 4], возникающего при изучении колебательного спектра одномерной неупорядоченной цепочки атомов. Такой путь решения использовался в работах [9, 10], где рассматривался случай чисто структурного беспорядка. Однако попытка применения этого метода к общему случаю приводит к существенным математическим трудностям. Нами общий ответ для больших и малых времен будет получен более простым способом — непосредственным разложением рекуррентного соотношения (9).

Нахождение заселенностей центров при больших временах с помощью (8) в [9, 10] было заменено некоторой строго не доказанной скейлинговой гипотезой. В данной работе будет строго вычислен не только коэффициент диффузии в общем случае, но и некоторые другие более сложные величины.

4. КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЧАСТИЦЫ ПРИ МАЛЫХ ВРЕМЕНАХ

Из общих теорем для преобразования Лапласа следует, что временная зависимость параметров при $t \rightarrow 0$ определяется их изображениями при $\varepsilon \rightarrow \infty$. В силу этого, используя малость параметра ε^{-1} , находим величину G непосредственным разложением рекуррентного соотношения (9)

$$(11) \quad G_n(E_n; E_{n+1}; R_{n, n+1}; \dots) = W_{n, n+1} - \varepsilon^{-1} W_{n, n+1} W_{n+1, n} + O(\varepsilon^{-2}).$$

Согласно (11) при малых временах скорость ухода с начального центра определяется только вероятностью первого прыжка. Следующий член дает вклад от прыжка с возвратом и т. д.

Соотношение (11) позволяет с помощью (8), (10) найти средний квадрат смещения частицы (угловые скобки обозначают усреднение по реализациям случайных параметров):

$$(12) \quad \langle R^2(t) \rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n^2 \langle P_n(t) \rangle,$$

и обобщенный коэффициент диффузии (ОКД), определяемый обычным соотношением

$$(13) \quad \langle R^2(t) \rangle = 2t\mathcal{D}(t).$$

При малых временах получаем

$$\mathcal{D}(t) = \langle W_{0,1} \rangle - 1/2 \{ \langle W_{0,1} W_{1,0} \rangle + \langle W_{0,1}^2 \rangle + \langle W_{0,1} W_{0,-1} \rangle - \\ - 3 \langle W_{0,1} W_{1,2} \rangle \} t + \dots$$

Как и должно быть, всякая неупорядоченность приводит к замедлению диффузии со временем, причем это замедление тем больше, чем больше беспорядок.

Дисперсия ОКД (точнее, среднеквадратичное отклонение) при $t \rightarrow 0$:

$$\text{disp}[\mathcal{D}]|_{t \rightarrow 0} = \{ \langle W^2 \rangle - \langle W \rangle^2 \}^{1/2},$$

конечна, т. е. имеет тот же порядок, что и само значение $\mathcal{D}(t \rightarrow 0)$. Таким образом, коэффициент диффузии при малых временах не является детерминированной величиной.

5. ОБЛАСТЬ БОЛЬШИХ ВРЕМЕН: НАХОЖДЕНИЕ ВСПОМОГАТЕЛЬНОЙ СЛУЧАЙНОЙ ФУНКЦИИ G

Согласно общим свойствам преобразования Лапласа, зависимость величин от времени при $t \rightarrow \infty$ определяется их изображениями при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Заметим, что из (9), (10) и физически очевидного условия убывания $P_0(t)$ со временем следует выполнение неравенства

$$(14) \quad G \gg \varepsilon \quad \text{при} \quad \varepsilon \rightarrow 0.$$

Возьмем фрагмент цепной дроби, определяемой рекуррентным соотношением (9), состоящий из N звеньев, и разложим его при $\varepsilon \rightarrow 0$ с учетом (14). Приравнивая в получившемся уравнении члены одного порядка и используя условие детального баланса (4), придем к системе

$$(15) \quad f(E_n) G_n^{(1)} = f(E_{n+N}) G_{n+N}^{(1)};$$

$$(16) \quad f(E_n) G_n^{(2)} = f(E_{n+N}) G_{n+N}^{(2)} + \varepsilon \sum_{i=1}^N f(E_{n+i}) - \\ - f^2(E_{n+N}) [G_{n+N}^{(1)}]^2 \sum_{i=1}^N [f(E_{n+i}) W_{n+i, n+i-1}]^{-1}.$$

где через $G_n^{(i)}$ обозначен i -й член разложения случайной функции G_n .

Из (15) следует, что величина $f(E_n)G$ является не зависящей от E_n константой. Для определения этой константы усредним (16) по случай-

ным параметрам $E_i, E_{i+1}, R_{i, i+1}, n \leq i \leq n+N-1$, и, разрешая получившееся уравнение, придем в итоге к выражению

$$(17) \quad G_n^{(1)} = \varepsilon^{1/2} f^{-1}(E_n) \langle f(E) \rangle^{1/2} \langle [f(E_i) W_{i, i-1}]^{-1} \rangle^{-1/2}.$$

Устремив в (16) N к бесконечности, приходим к выводу, что второй член разложения $G^{(2)}$ зависит от всей конфигурации случайных вероятностей перехода. В качестве приближения будем считать, что $G_n^{(2)}$ зависит явно только от энергетических уровней $N+1$ ближайшего центра E_n, \dots, E_{n+N} и N соответствующих межатомных расстояний $R_n, R_{n+1}, \dots, R_{n+N-1}, R_{n+N}$. При этом все остальные вероятности автоматически аппроксимируются эффективной самосогласованной средой. Это происходит вследствие того, что излагаемое рассмотрение основано на самосогласованном решении точных рекуррентных соотношений (9). Метод позволяет находить динамические характеристики в кластерных приближениях любого порядка без усреднения по реализациям указанного кластера.

Перепишем соотношение (16) для $N'=N+2$ и домножим левую и правую части на величину $[f(E_{n+N+2}) W_{n+N+2, n+N+1}]^{-1}$. Усредним в соответствии со смыслом принятого кластерного приближения получившееся уравнение по случайным величинам $E_{n+N+1}, E_{n+N+2}, R_{n+N+1}, R_{n+N+2}$, учитывая, что, в силу сказанного, $G_n^{(2)}$ от указанных вероятностей не зависит. Для нахождения $G_n^{(2)}$ из полученного уравнения остается только вычислить коррелятор $\langle G_i^{(2)} W_{i+1, i}^{-1} \rangle$. Для этого разложим при $\varepsilon \rightarrow 0$ одно звено цепной дроби, определяемой (9) с точностью до членов порядка $\varepsilon^{3/2}$, что приводит к следующему уравнению для $G_i^{(3)}$

$$(18) \quad f(E_i) G_i^{(3)} = f(E_{i+1}) G_{i+1}^{(3)} - 2f(E_{i+1}) W_{i+1, i}^{-1} G_{i+1}^{(1)} [G_{i+1}^{(2)} + \varepsilon] + f(E_{i+1}) W_{i+1, i}^{-2} [G_{i+1}^{(1)}]^3.$$

Усреднив (18) по $E_i, E_{i+1}, R_{i, i+1}$, выразим указанное среднее и, подставив его в ранее полученное уравнение, найдем выражение $G_n^{(2)}$ в N -центровом кластерном приближении

$$(19) \quad G_n^{(2)} = \varepsilon \frac{\langle f(E) \rangle}{f(E_n)} \left\{ \frac{1}{2} \frac{\langle f^{-2}(E_i) W_{i, i-1}^{-2} \rangle}{\langle f^{-1}(E_i) W_{i, i-1}^{-1} \rangle^2} + \frac{\langle f(E) \rangle^{-1} \langle W^{-1} \rangle}{\langle f^{-1}(E_i) W_{i, i-1}^{-1} \rangle} + \frac{\langle f^{-1}(E_{n+N+2}) W_{n+N+2, n+N+1}^{-1} \sum_{i=1}^{N+2} f(E_{n+i}) \rangle}{\langle f^{-1}(E_i) W_{i, i-1}^{-1} \rangle \langle f(E) \rangle} - \frac{\langle f^{-1}(E_{n+N+2}) W_{n+N+2, n+N+1}^{-1} \sum_{i=1}^{N+2} f^{-1}(E_{n+i}) W_{n+i, n+i-1}^{-1} \rangle}{\langle f^{-1}(E_i) W_{i, i-1}^{-1} \rangle^2} \right\}.$$

В соответствии с принятым приближением в двух последних слагаемых в фигурных скобках усреднение по центрам $n, \dots, n+N$ выделенного кластера не производится.

В дальнейшем нам понадобится выражение G для модели структурного беспорядка и случайных ловушек II без корреляций, являющееся частным случаем (19),

$$(20) \quad G_n^{(2)} = \varepsilon \frac{\langle f(E) \rangle}{f(E_n)} \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\langle [W^s]^{-2} \rangle}{\langle [W^s]^{-1} \rangle^2} + \right. \\ \left. + \langle f(E) \rangle^{-1} \sum_{i=1}^N f(E_{n+i}) - \langle [W^s]^{-1} \rangle^{-1} \sum_{i=1}^N [W_{n+i, n+i-1}^s]^{-1} \right\}.$$

Переход к пределу $N \rightarrow \infty$ в (19), (20) дает точный вид второго члена разложения случайной функции G .

6. ДИНАМИКА ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ ПРИ БОЛЬШИХ ВРЕМЕНАХ

Заселенность начального центра определяется с помощью исходной формулы (10) и разложения случайной функции G . После применения обратного преобразования Лапласа получим

$$\langle P_0(t \rightarrow \infty) \rangle = \frac{1}{2g^{(1)} \sqrt{\pi t}} \left\{ 1 + \frac{2g^{(2)} + 1}{8(g^{(1)})^2 t} + O(t^{-2}) \right\},$$

где $g^{(i)} = G^{(i)} \varepsilon^{-i/2}$.

Выражение заселенности n -го центра получается n -кратным применением соотношения (8):

$$(21) \quad P_n = P_0 \prod_{i=1}^n \frac{W_{i-1, i}}{W_{i, i-1} + G_i + \varepsilon}.$$

Вынося из всех n дробей в (21) множители $W_{i-1, i} W_{i, i-1}^{-1}$ и используя условие детального баланса (4), приходим к выражению

$$(22) \quad P_n = P_0 \frac{f(E_n)}{f(E_0)} \prod_{i=1}^n \left\{ 1 - \sqrt{\varepsilon} \frac{g_i^{(1)}}{W_{i, i-1}} + \right. \\ \left. + \varepsilon \left[\frac{(g_i^{(1)})^2}{W_{i, i-1}^2} - \frac{g_i^{(2)} + 1}{W_{i, i-1}} \right] + O(\varepsilon^{3/2}) \right\}.$$

Усредняя (22) по всем случайным величинам, кроме E_n , и используя (10) и (8), находим, что главный член заселенности n -го центра определяется формулой

$$(23) \quad P_n(E_n) = \frac{f(E_n) \langle f^{-1}(E_i) W_{i, i-1}^{-1} \rangle^{1/2}}{2 \sqrt{\varepsilon} \langle f(E) \rangle^{1/2}} \times \\ \times \{ 1 - \sqrt{\varepsilon} \langle f(E) \rangle^{1/2} \langle f^{-1}(E_i) W_{i, i-1}^{-1} \rangle^{1/2} \}^n.$$

С помощью этого соотношения несложно доказать, что скейлинговая гипотеза, предложенная в [9, 10] для системы с чисто структурным беспорядком, справедлива и в общем случае.

В дальнейшем нам также понадобятся выражения заселенностей центров в модели структурного беспорядка и случайных ловушек II с точностью до двух главных членов разложения при $\varepsilon \rightarrow 0$. Подставляя в (22) формулы (17) и (20) в пределе $N \rightarrow \infty$, находим

$$(24) \quad P_n(E_n) = \frac{f(E_n) \langle [W^s]^{-1} \rangle^{1/2}}{2 \sqrt{\varepsilon} \langle f(E) \rangle^{1/2}} \left\{ 1 - \sqrt{\varepsilon} \langle f(E) \rangle^{1/2} \langle [W^s]^{-1} \rangle^{1/2} \times \right.$$

$$\begin{aligned}
& \times \left[\frac{f(E_n)}{\langle f(E) \rangle} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{\langle [W^s]^{-2} \rangle}{\langle [W^s]^{-1} \rangle^2} \right] + O(\varepsilon) \Big\} \times \\
& \times \left\{ 1 - \sqrt{\varepsilon} \langle f(E) \rangle^{1/2} \langle [W^s]^{-1} \rangle^{1/2} + \varepsilon \langle f(E) \rangle \langle [W^s]^{-1} \rangle \times \right. \\
& \times \left. \left[\frac{3}{2} \frac{\langle [W^s]^{-2} \rangle}{\langle [W^s]^{-1} \rangle^2} - \frac{f(E_n)}{\langle f(E) \rangle} \right] + O(\varepsilon^{3/2}) \right\}^n; \quad n \neq 0; \\
(25) \quad P_0(E_0) &= \frac{f(E_0)}{2\sqrt{\varepsilon}} \frac{\langle [W^s]^{-1} \rangle^{1/2}}{\langle f(E) \rangle^{1/2}} \left\{ 1 - \right. \\
& \left. - \frac{1}{2} \sqrt{\varepsilon} \langle f(E) \rangle^{1/2} \langle [W^s]^{-1} \rangle^{1/2} \left[\frac{f(E_0)}{\langle f(E) \rangle} - \frac{\langle [W^s]^{-2} \rangle}{\langle [W^s]^{-1} \rangle^2} \right] + O(\varepsilon) \right\}.
\end{aligned}$$

Отметим, что, как видно из (24), (25), в случае чисто структурного беспорядка ($f(E) \equiv 1, \forall E$) скейлинговая гипотеза справедлива с точностью до второго члена разложения при малых ε .

С помощью полученных выражений можно вычислить функцию распределения плотности суммарной заселенности центров с энергетическими уровнями E :

$$(26) \quad P(E) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \langle P_n(E_n) \delta(E - E_n) \rangle.$$

Главный член общего результата, который может быть получен из (23), очевиден — это стационарное распределение $f(E) \langle f(E) \rangle^{-1}$. Для модели случайных ловушек можно найти и следующий член разложения, описывающий кинетику приближения к равновесной заселенности при больших временах. Из соотношений (24)–(26) получаем

$$(27) \quad P(E) = \rho(E) \left\{ \frac{f(E)}{\langle f(E) \rangle} + \frac{2}{\sqrt{\pi t}} \langle f(E) \rangle^{1/2} \left[\frac{f(E)}{\langle f(E) \rangle} - \frac{f^2(E)}{\langle f^2(E) \rangle} \right] + \dots \right\}.$$

Согласно (27) заселенность ловушек при конечных временах меньше их равновесной заселенности. При $t \rightarrow \infty$ приближение к равновесию имеет медленный степенной характер порядка $(\mathcal{D}t)^{-1/2}$. Отметим, что в трехмерном случае, как было показано в работе [14], посвященной кинетике диффузионно контролируемых реакций, соответствующая поправка имеет порядок $(\mathcal{D}t)^{-3/2}$.

7. КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ В ОБЛАСТИ БОЛЬШИХ ВРЕМЕН

Общий вид главного члена разложения заселенности n -го центра при больших t определяется соотношением (23). Вычисляя средний квадрат смещения по формуле (12) с использованием (23) и обращая результат в t -пространство, приходим к линейному по t главному члену разложения $\langle R^2(t) \rangle$, что свидетельствует о диффузионном характере миграции частицы при больших временах. Общее выражение предельного коэффициента диффузии имеет вид

$$(28) \quad \mathcal{D}(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{\langle f(E) \rangle \langle f^{-1}(E_i) W_{i, i-1}^{-1} \rangle}.$$

Эта формула является общей и точной, она справедлива для корреля-

ций самого общего вида. Как следует из (28), предельный коэффициент диффузии, вообще говоря, зависит от корреляции соседних энергетических уровней и локальной корреляции структурного беспорядка с беспорядком замещения и не зависит от пространственных корреляций межатомных расстояний. В частном случае чисто структурного беспорядка предельный ОКД принимает вид

$$\mathcal{D}(t \rightarrow \infty) = \langle [W^s]^{-1} \rangle^{-1},$$

что совпадает с полученным ранее в [9, 10] выражением.

Отметим, что, так как в нашем рассмотрении в качестве единицы времени взята обратная характерная вероятность перехода W_0^{-1} , а в качестве единицы длины — межатомное расстояние r_0 , для получения размерного коэффициента диффузии (28) нужно домножить на константу $r_0^2 W_0$. Используя соотношение Эйнштейна, связывающее электропроводность с коэффициентом диффузии частицы, получим выражение прыжковой проводимости поляронов на постоянном токе

$$\sigma_{d.c.} = \frac{ne^2}{kT} r_0^2 W_0 \langle f(E) \rangle^{-1} \langle f^{-1}(E_i) W_{i,i-1}^{-1} \rangle^{-1}.$$

Для модели структурного беспорядка можно найти и второй член разложения ОКД при больших временах. Используя в (12) выражения (24), (25), приходим к следующему результату:

$$(29) \quad \mathcal{D}(t \rightarrow \infty) = \langle [W^s]^{-1} \rangle^{-1} + \\ + 10(\pi t)^{-1/2} \langle [W^s]^{-1} \rangle^{-1/2} \langle [W^s]^{-2} \rangle \langle [W^s]^{-1} \rangle^{-2} - 1 + \dots$$

Коэффициент диффузии при конечных временах не является детерминированной величиной, а принимает (для различных реализаций и для различного выбора начальных центров) случайные значения с некоторой функцией распределения. Встает вопрос об оценке величины флуктуаций \mathcal{D} .

При малых временах, как мы видели в разделе 4, дисперсия коэффициента диффузии имеет тот же порядок, что и само значение ОКД. Перейдем к вычислению $\text{disp}[\mathcal{D}]$ при больших временах.

Как следует из определения среднего квадрата смещения частицы (12), квадрат его дисперсии определяется формулой

$$(30) \quad \text{disp}^2[R^2(t)] = \sum_{m, n=-\infty}^{\infty} m^2 n^2 \{ \langle P_m(t) P_n(t) \rangle - \langle P_m(t) \rangle \langle P_n(t) \rangle \}.$$

Корреляторы, стоящие в фигурных скобках в (30), вычисляем, используя выражение (23), предварительно обращенное в t -пространство:

$$(31) \quad \langle P_m P_n \rangle |_{t \rightarrow \infty} = \begin{cases} \langle P_m \rangle \langle P_n \rangle; & m \neq n; \\ \langle P_n \rangle^2 \frac{\langle f^2(E_n) \rangle}{\langle f(E) \rangle^2}; & m = n, \end{cases}$$

где

$$(32) \quad \langle P_k(t \rightarrow \infty) \rangle = (4\pi \mathcal{D} t)^{-1/2} \exp\{-k^2/4\mathcal{D}t\},$$

а \mathcal{D} определяется формулой (28).

Подставляя (32), (31) в (30) и заменяя суммирование интегрированием (что в пределе $t \rightarrow \infty$ справедливо), получаем

$$(33) \quad \text{disp} [R^2(t)]|_{t \rightarrow \infty} = \frac{3^{1/2}}{2^{3/4} \pi^{1/4}} \{ \langle f^2(E) \rangle \langle f(E) \rangle^{-2} - 1 \}^{1/2} (\mathcal{D}t)^{3/4}$$

или с учетом (13)

$$(34) \quad \text{disp} [\mathcal{D}]|_{t \rightarrow \infty} = \frac{3^{1/2}}{2^{3/4} \pi^{1/4}} \frac{\text{disp} [f(E)]}{\langle f(E) \rangle} \frac{\mathcal{D}^{3/4}}{t^{1/4}}.$$

Как следует из (34), флуктуации ОКД при $t \rightarrow \infty$ стремятся к нулю, т. е., как и должно быть, коэффициент диффузии при больших временах является самоусредняющейся детерминированной величиной [4]. Однако его дисперсия убывает со временем весьма медленно степенным образом — как $t^{-1/4}$.

При нулевом разбросе энергетических уровней, т. е. в случае чисто структурного беспорядка, дисперсия ОКД при больших временах имеет более высокий порядок малости. Качественно это отличие хорошо понятно — потенциальная яма захватывает и удерживает частицу гораздо эффективнее, чем удаленный от остальных изоэнергетический центр.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В работе на основе управляющих уравнений в приближении ближайших соседей рассматривалась некогерентная миграция квазичастиц в одномерных цепочках со структурным беспорядком и беспорядком замещения с корреляциями беспорядка самого общего вида. Беспорядок не предполагался малым.

В области малых времен получены разложение обобщенного коэффициента диффузии (ОКД) $\mathcal{D}(t)$ и его дисперсия.

Для больших времен найдено точное общее выражение ОКД $\mathcal{D}(t \rightarrow \infty) = \langle f(E) \rangle^{-1} \langle f^{-1}(E_i) W_{i,i-1}^{-1} \rangle^{-1}$ (где $f(E)$ — равновесная заселенность уровня E , $W_{i,j}$ — вероятность прыжка между центрами i ; j), в частном случае чисто структурного беспорядка совпадающее с результатами работ [9, 10]. Вычислена его дисперсия (среднеквадратичное отклонение) при ненулевом разбросе энергетических уровней центров: $\text{disp} [\mathcal{D}]$ пропорционально $\text{disp} [f(E)] \langle f(E) \rangle^{-1} \mathcal{D}^{3/4} t^{-1/4}$, описывающая медленное степенное убывание флуктуаций коэффициента диффузии. Для модели структурного беспорядка найден также второй член разложения ОКД, пропорциональный $\text{disp}^2 [(W^s)^{-1}] \langle (W^s)^{-2} \rangle \mathcal{D}^{1/2} t^{-1/2}$, а для модели случайных ловушек получена поправка к суммарной заселенности центров с фиксированным энергетическим уровнем, пропорциональная $(\mathcal{D}t)^{-1/2}$, описывающая кинетику приближения к равновесной заселенности.

Полученные результаты применимы к миграции квазичастиц при не слишком низких температурах, когда типичная энергия фононов превосходит разброс энергетических уровней, так что справедливо приближение ближайших соседей.

Автор выражает благодарность П. В. Елютину и чл.-корр. АН СССР А. А. Овчинникову за многочисленные полезные обсуждения.

Литература

- [1] Physics in One Dimension, ed. by J. Bernasconi, T. Schneider. Berlin: Springer, 1980, 368 p.
- [2] Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. М.: Мир, 1982, 662 с.
- [3] Березинский В. Л.— ЖЭТФ, 1973, 65, № 3, 1251—1266.
- [4] Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А. Введение в теорию неупорядоченных систем. М.: Наука, 1982, 358 с.
- [5] Гоголин А. А., Мельников В. И., Рашба Э. И.— ЖЭТФ, 1975, 69, № 1, 327—349; 1977, 72, № 2, 629—645.
- [6] Kenkre V. M., Reineker P. Exciton Dynamics in Molecular Crystals and Aggregates. Berlin: Springer, 1982, 226 p.
- [7] Alexander S., Bernasconi J., Orbach R.— Phys. Rev. B, 1978, 17, № 11, 4311—4314.
- [8] Odagaki T., Lax M.— Phys. Rev. Lett., 1980, 45, № 10, 847—850.
- [9] Bernasconi J., Schneider W. R., Wyss W.— Z. Physik B, 1980, 37, № 2, 175—184.
- [10] Alexander S., Bernasconi J., Schneider W. R., Orbach R.— Rev. Mod. Phys., 1981, 53, № 2, 175—198.
- [11] Titulaer U. M., Deutch J. M.— Phys. Rev. B, 1981, 24, № 8, 4329—4339.
- [12] Ovchinnikov A. A., Ovchinnikova M. Ya.— Adv. Quant. Chem., 1982, 16, 161—227.
- [13] Dyson F. J.— Phys. Rev., 1953, 92, № 6, 1331—1338.
- [14] Зельдович Я. Б., Овчинников А. А.— ЖЭТФ, 1978, 74, № 5, 1588—1598.

Институт химической физики
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
1. II. 1984 г.

HOPPING QUASIPARTICLE MIGRATION IN ONE-DIMENSIONAL DISORDERED SYSTEMS

Pronin K. A.

Incoherent transport in chains with structural and substitutional disorder with correlations of general form is considered. In the long-time limit exact expressions for the diffusion coefficient and its dispersion are obtained in the general case. For the model of random traps and structural disorder the second term of generalised diffusion coefficient expansion and the kinetic correction to energy level E occupation are calculated.