УДК 539.21

ДИФФУЗИЯ В ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЕ СО СТАТИЧЕСКИМ БЕСПОРЯДКОМ

М. П. Фатеев, Н. П. Лазарев

На основе разложения по флуктуациям вероятностей переходов частиц получены выражения для частотно-зависимых коэффициентов диффузии и Барнетта в одномерной решетке со статическим беспорядком, характеризующимся наличием случайных барьеров и случайных ловушек.

В последнее время возрос интерес к исследованию диффузии в неупорядоченных структурах [1–3]. Задачи такого типа возникают при изучении процессов проводимости полупроводников, органических соединений, диффузии в сплавах и стеклах и т. д. Было показано, что в этом случае диффузия или прыжковая проводимость проявляют немарковское поведение [1].

Во всех имеющихся работах рассматривают две модели: модель со «случайными барьерами» (МСБ), когда хаотические частоты переходов $\{W_{nn'}\}$ между ближайшими углами решетки удовлетворяют условию $W_{nn'}=W_{n'n}$, и модель со «случайными ловушками» (МСЛ), когда $W_{nn'}=W_n$. Эти модели имеют существенно различные свойства. Хорошо известно, что беспорядок СБ-типа приводит к эффектам протекания, в то время как в системах СЛ-типа эти эффекты отсутствуют. Физической причиной этого является зависимость $W_{nn'}$ от направления перехода, что приводит к корреляционным эффектам в СБ-модели.

В силу известного различия свойств модели СБ- и СЛ-типа почти всегда рассматривались отдельно. Первая модель подробно исследована в пространстве произвольной размерности d с использованием приближения эффективной среды [4, 5]. Этот метод дает разумные результаты, хорошо совпадающие с моделированием методом Монте-Карло. В работе [2] найдено точное асимптотическое разложение коэффициента диффузии $U_0(\omega)$ и коэффициента Барнетта $U_2(\omega)$ для одномерной СБ-модели и для СЛ-модели в пространстве произвольной размерности. Подход, развитый в [2], основывается на разложении по флуктуациям частот переходов $\delta_n=(1/W_n-\langle 1/W\rangle)/\langle 1/W\rangle$ вблизи точного стационарного диффузионного коэффициента $D=\langle 1/W\rangle^{-1}$. Предполагалось существование моментов вида $\langle (1/W)^m\rangle$ (случай «слабого» беспорядка). Было показано, что для СБ-модели коэффициент диффузии при $\omega\to 0$ имеет вид ($d=1$)

$$U_0(\omega)=D-\frac{1}{2}\alpha_0\sqrt{D\omega}+\alpha_1\omega+\alpha_2\omega^{3/2}+O(\omega^2), \qquad (1)$$

где α_0, α_1, α_2 — коэффициенты, которые выражаются через первые моменты случайной величины δ_n. Аналогичное разложение получено для СЛ-модели, где находился коэффициент Барнетта (как известно, в этом случае коэффициент диффузии является постоянным).

Важность разложений вида (1) заключается в том, что по известной частотной зависимости коэффициентов диффузии и Барнетта можно, во-первых, восстановить информацию о случайных вероятностях переходов $\{W_{nn'}\}$ путем нахождения первых моментов функции распределения

$\rho(W)$, а во-вторых, проверить приближения (типа эффективной среды), используемые для исследования диффузии на многомерных решетках путем сравнения с точными разложениями типа (1).

При диффузии в твердых разупорядоченных телах (сплавы, стекла и т. д.) наряду с беспорядком «барьеров», как правило, одновременно присутствует беспорядок, связанный со случайными «ловушками». Если предположить, что частоты переходов W имеют аррениусовский вид

$$W_{nn'} = \exp(-\beta[\varepsilon_{nn'} - \varepsilon_n]), \tag{2}$$

то можно говорить о случайных энергиях миграции $\varepsilon_{nn'}$ и активации ε_n [6, 7].

В данной работе найдено асимптотическое разложение ($\omega \to 0$) коэффициента диффузии и коэффициента Барнетта в одномерной системе ($d=1$) при наличии одновременно беспорядка СБ- и СЛ-типов. Предполагается, что функции распределения, задающие случайные величины СБ- и СЛ-типов независимы и, кроме того, нет корреляций между различными узлами и связями, на которых заданы $\{W_{nn'}\}$. Рассматривается случай «слабого» беспорядка, когда существует несколько первых моментов вида $\langle (W)^{-m} \rangle$ [1]. Задача нахождения низкочастотного разложения коэффициентов диффузии и Барнетта в пределе «сильного» беспорядка, при котором первые моменты $\langle (W)^{-m} \rangle$ расходятся, требует отдельного исследования и здесь не рассматривается [1, 8, 9].

1. Общий формализм

Рассмотрим основное кинетическое уравнение со случайными значениями частот переходов $\{W_{nn'}\}$ между парами ближайших узлов [1]

$$\frac{dP}{dt}(n/m;\ t) = -\sum_{\langle n' \rangle} [P(n/m;\ t) W_{nn'} - P(n'/m;\ t) W_{n'n}] \tag{3}$$

с начальными условиями

$$P(n/m;\ 0) = \delta_{nm} P^0(n),$$

где $P(n/m;\ t)$ — условная вероятность найти частицу в момент времени t в узле n, если при $t=0$ она находилась в узле m с вероятностью $P^0(m)$. Суммирование в (1) проводится по ближайшим соседям узла n. Представим случайную величину $W_{nn'}$ в виде

$$W_{nn'} = \Gamma_{nn'} \Gamma_n, \quad \Gamma_{nn'} = \Gamma_{n'n}. \tag{4}$$

Величины $\Gamma_{nn'}$ и Γ_n задаются двумя независимыми функциями распределения $\rho_1(\Gamma_1)$ и $\rho_2(\Gamma_2)$ (где индекс «1» относится к величинам СЛ-типа, а индекс «2» — к величинам СБ-типа). В дальнейшем предполагается, что существуют моменты ($m \gg 1$) [1]

$$\left\langle \left(\frac{1}{\Gamma_{nn'}} \right)^m \right\rangle \equiv \left\langle \left(\frac{1}{\Gamma_2} \right)^m \right\rangle < \infty,$$

$$\left\langle \left(\frac{1}{\Gamma_n} \right)^m \right\rangle \equiv \left\langle \left(\frac{1}{\Gamma_1} \right)^m \right\rangle < \infty.$$

Для определенности начальные условия положим равновесными [1]

$$P^0(n) = \left\langle \frac{1}{\Gamma_1} \right\rangle^{-1} \frac{1}{\Gamma_n}. \tag{5}$$

Преобразование Лапласа для функции $P(n/m;\ t)$ с учетом (4) удовлетворяет уравнению

$$\omega P(n/m;\ \omega) = -\sum_{\langle n' \rangle} [\Gamma_{nn'} \Gamma_n P(n/m;\ \omega) - \Gamma_{nn'} \Gamma_{n'} P(n'/m;\ \omega)] + \delta_{nm} P^0(n). \tag{6}$$

В матричных обозначениях [7] уравнение (6) принимает вид

$$\hat{G}^{-1}|P\rangle = |I\rangle,$$

$$\hat{G}^{-1} = \left\langle \frac{1}{\Gamma_1} \right\rangle \left[\sum_n \omega\Gamma_n |n\rangle\langle n| + \sum_{nn'} (\Gamma_{nn'}\Gamma_n^2 |n\rangle\langle n| - \Gamma_{nn'}\Gamma_n\Gamma_{n'} |n\rangle\langle n'|) \right],$$

$$|I\rangle = \sum_n \delta_{nm} |n\rangle, \quad |P\rangle = \sum_n P(n/m;\ \omega)|n\rangle. \tag{7}$$

Таким образом, задача сводится к нахождению усредненной матрицы $\langle G(\omega)\rangle_{nm}$ при заданных функциях распределения $\rho_1(\Gamma_1)$ и $\rho_2(\Gamma_2)$ статических переменных СБ- и СЛ-типов

$$\langle P(n/m;\ \omega)\rangle = P_{n-m}(\omega) \equiv \langle G(\omega)\rangle_{nm},$$

где $P_{n-m}(t)$ — вероятность смещения частицы на расстояние $|n-m|$ за время t. Физические величины, которые представляют интерес, определяются первыми моментами функции $P_n(t)$

$$\langle n^l\rangle_t = \sum_n n^l P_n(t) \quad (l = 1,\ 2,\ \ldots). \tag{8}$$

Введем функцию отклика $G(k,\ \omega)$, которая является Фурье-образом функции $\langle G(\omega)\rangle_{nm}$

$$G(k,\ \omega) = \sum_n e^{ikn} P_n(\omega), \tag{9}$$

где k — вектор обратной решетки.

Из обобщенной гидродинамики [2, 10] следует, что функцию $G(k,\ \omega)$ можно представить в виде

$$G(k,\ \omega) = (\omega + k^2 U(k,\ \omega))^{-1}. \tag{10}$$

Раскладывая величину $U(k,\ \omega)$ в ряд по k, имеем

$$U(k,\ \omega) = U_0(\omega) - k^2 U_2(\omega) + \ldots, \tag{11}$$

где $U_0(\omega)$, $U_2(\omega)$ — частотно-зависимые коэффициент диффузии и коэффициент Барнетта. Сравниваем (9) с разложением (11), и с учетом (10) получаем

$$\frac{1}{2}\langle n^2(\omega)\rangle = \omega^{-2} U_0(\omega),$$

$$\frac{1}{4!}\langle n^4(\omega)\rangle = \omega^{-2} U_2(\omega) + \omega^{-3} U_0^2(\omega). \tag{12}$$

Для нахождения усредненной функции Грина $\langle G\rangle_{nm}$ поступим следующим образом. Аналогично [2] введем величину

$$\hat{\Delta}_1 = D_1 \sum_n \left\{ \frac{1}{\Gamma_n} - \left\langle \frac{1}{\Gamma_1} \right\rangle \right\} |n\rangle\langle n|,$$

$$D_1 = \left\langle \frac{1}{\Gamma_1} \right\rangle^{-1}. \tag{13}$$

Подставляя флуктуационный оператор $\hat{\Delta}_1$ в выражение (7), имеем

$$\langle \hat{G}\rangle = \langle [\omega(1 + \hat{\Delta}_1)^{-1} + D_1(1 + \hat{\Delta}_1)^{-1}\hat{K}(1 + \hat{\Delta}_1)^{-1}]^{-1}\rangle,$$

$$\hat{K} = \frac{1}{2} \sum_{nn'} (|n\rangle - |n'\rangle)(\langle n| - \langle n'|)\Gamma_{nn'}. \tag{14}$$

Выражение (14) легко преобразовать к виду

$$\langle \hat{G}\rangle = \langle (1 + \hat{\Delta}_1)(1 + \omega\hat{g}\hat{\Delta}_1)^{-1}\hat{g}(1 + \hat{\Delta}_1)\rangle,$$

$$\hat{g} = (\omega + D_1\hat{K})^{-1}. \tag{15}$$

Определим также флуктуационный оператор, связанный со случайными «барьерами»

$$\hat{\Delta}_2 = D_2 \sum_n \left\{ \frac{1}{\Gamma_{n,\,n+1}} - \left\langle \frac{1}{\Gamma_2} \right\rangle \right\} | n \rangle \langle n |,$$

$$D_2 = \left\langle \frac{1}{\Gamma_2} \right\rangle^{-1}. \tag{16}$$

Используя (16), представим оператор $\hat{K}$ следующим образом:

$$\hat{K} = D_2 \hat{c}_1 (1 + \hat{\Delta}_2)^{-1} \hat{c}_2,$$

$$\hat{c}_1 = 1 - \sum_n | n+1 \rangle \langle n |,$$

$$\hat{c}_2 = 1 - \sum_n | n \rangle \langle n+1 |. \tag{17}$$

Подставляя (16), (17) в (15), имеем

$$\hat{g} = \hat{g}_0 + D\hat{c}_1 \hat{g}_0 \hat{\Delta}_2 \hat{g}_0 \, (1 + \omega \hat{\Delta}_2 \hat{g}_0)^{-1} \hat{c}_2,$$

$$\hat{g}_0 = (\omega + \hat{\Omega})^{-1}, \ \hat{\Omega} = D\hat{c}_1 \hat{c}_2,$$

$$D = D_1 D_2. \tag{18}$$

Учитывая (15) и (18), находим разложение усредненной функции Грина

$$\langle \hat{G} \rangle = \langle \hat{g} \rangle + \left\langle (\omega \hat{g} - 1)\, \hat{\Delta}_1 \sum_{l=0}^{\infty} (-\omega)^l \, (\hat{g} \hat{\Delta}_1)^{l+1} (\omega \hat{g} - 1) \right\rangle,$$

$$\hat{g} = \hat{g}_0 + D\hat{c}_1 \hat{g}_0 \hat{\Delta}_2 \sum_{l=0}^{\infty} (-\omega)^l \, (\hat{g}_0 \hat{\Delta}_2)^l \, \hat{g}_0 \hat{c}_2. \tag{19}$$

Функцию $G(k, \omega)$ можно представить в виде (см. Приложение 1)

$$G(k, \omega) = g_0(k, \omega) - \omega \Omega (k) g_0^2 (k, \omega) [A(k, \omega) + S(k, \omega)] +$$
$$+ \Omega^2 (k) g_0^2 (k, \omega) [B(k, \omega) + F(k, \omega)], \tag{20}$$

где $A(k, \omega)$ и $B(k, \omega)$ — функции, найденные в работе [2] для СБ- и СЛ-моделей, которые отличаются заменой $(2 \rightleftarrows 1)$; функции $S(k, \omega)$ и $F(k, \omega)$ описывают влияние корреляций между случайными величинами Γ и Γ_2. Введем обозначения

$$S(k, \omega) = S_0(\omega) - k^2 S_2(\omega),$$

$$F(k, \omega) = F_0(\omega) - k^2 F_2(\omega),$$

$$A(k, \omega) = A_0(\omega) - k^2 A_2(\omega),$$

$$B(k, \omega) = B_0(\omega) - k^2 B_2(\omega).$$

В приложении дан вывод выражений для функций S и F с точностью до флуктуаций шестого порядка. Они имеют вид

$$DS_0(\omega) = \Big[\frac{-\langle \Delta_1^2 \rangle \langle \Delta_2^2 \rangle}{8} + \left(\frac{\omega}{D}\right)^{1/2} \Big\{ \frac{1}{16} \langle \Delta_1^3 \rangle \langle \Delta_2^2 \rangle - \frac{15}{256} \langle \Delta_1^2 \rangle^2 \langle \Delta_2^2 \rangle +$$
$$+ \frac{3}{32} \langle \Delta_1^2 \rangle \langle \Delta_2^3 \rangle - \frac{15}{1152} \langle \Delta_1^2 \rangle \langle \Delta_2^2 \rangle^2 \Big\} + O(\omega) \Big],$$

$$DS_2(\omega) = -\frac{17}{72} \left(\frac{\omega}{D}\right)^{-1/2} \langle \Delta_1^2 \rangle \langle \Delta_2^2 \rangle^2 + O(1),$$

$$DF_0(\omega) = \Big[\frac{3}{8} \langle \Delta_1^2 \rangle \langle \Delta_2^2 \rangle + \left(\frac{\omega}{D}\right)^{1/2} \Big\{ -\frac{3}{16} \langle \Delta_1^2 \rangle \langle \Delta_2^3 \rangle + \frac{793}{2304} \langle \Delta_1^2 \rangle \langle \Delta_2^2 \rangle^2 +$$
$$+ \frac{5}{32} \langle \Delta_1^3 \rangle \langle \Delta_2^2 \rangle + \frac{373}{1152} \langle \Delta_1^2 \rangle^2 \langle \Delta_2^2 \rangle \Big\} + O(\omega) \Big],$$

$$\Delta_i = [1/\Gamma_i - \langle 1/\Gamma_i \rangle] D_i \ \ (i = 1, 2). \tag{21}$$

Учитывая соотношения (10) и (11), имеем

$$U_0(\omega)=D+\omega D(A_0+S_0),$$

$$U_2(\omega)=\frac{1}{12}D+D^2(B_0+F_0)+$$

$$+\omega\left[D(A_2+S_2)+\frac{1}{12}D(A_0+S_0)-D^2(A_0+S_0)^2\right]. \tag{22}$$

В результате, подставляя (21) в (22), получаем

$$U_0(\omega)=D\left[1+\left(\frac{\omega}{D}\right)^{1/2}a_1+\left(\frac{\omega}{D}\right)a_2+\left(\frac{\omega}{D}\right)^{3/2}a_3+O(\omega^2)\right],$$

$$U_2(\omega)=D\left[\left(\frac{\omega}{D}\right)^{-1/2}b_{-1}+b_0+\left(\frac{\omega}{D}\right)^{1/2}b_1+O(\omega)\right],$$

$$a_1=\frac{1}{2}\langle\Delta_2^2\rangle,$$

$$a_2=-\frac{1}{4}\langle\Delta_2^3\rangle+\frac{11}{24}\langle\Delta_2^2\rangle^2-\frac{1}{8}\langle\Delta_1^2\rangle\langle\Delta_2^2\rangle,$$

$$a_3=\frac{1}{8}\langle\Delta_2^4\rangle-\frac{3}{8}\langle\Delta_2^2\rangle^2-\frac{1}{16}\langle\Delta_2^2\rangle-\frac{61}{96}\langle\Delta_2^2\rangle\langle\Delta_2^3\rangle+\frac{1345}{2304}\langle\Delta_2^2\rangle^3+$$

$$+\frac{1}{16}\langle\Delta_2^2\rangle\langle\Delta_1^3\rangle-\frac{15}{256}\langle\Delta_1^2\rangle^2\langle\Delta_2^2\rangle+\frac{3}{32}\langle\Delta_2^3\rangle\langle\Delta_1^2\rangle-\frac{155}{1152}\langle\Delta_2^2\rangle^2\langle\Delta_1^2\rangle,$$

$$b_{-1}=\frac{1}{2}\langle\Delta_1^2\rangle,$$

$$b_0=\frac{1}{12}+\frac{\langle\Delta_2^2\rangle^2}{108}-\frac{1}{4}\langle\Delta_1^3\rangle+\frac{11}{24}\langle\Delta_1^2\rangle^2+\frac{3}{8}\langle\Delta_1^2\rangle\langle\Delta_2^2\rangle,$$

$$b_1=-\frac{1}{54}\langle\Delta_2^2\rangle\langle\Delta_2^3\rangle+\frac{1}{24}\langle\Delta_2^2\rangle+\frac{1}{27}\langle\Delta_2^2\rangle^3+\frac{1}{8}\langle\Delta_1^4\rangle-\frac{3}{8}\langle\Delta_1^2\rangle^2-$$

$$-\frac{1}{16}\langle\Delta_1^2\rangle-\frac{61}{96}\langle\Delta_1^2\rangle\langle\Delta_1^3\rangle+\frac{1345}{2304}\langle\Delta_1^2\rangle^3-\frac{3}{16}\langle\Delta_1^2\rangle\langle\Delta_2^2\rangle+\frac{5}{32}\langle\Delta_1^3\rangle\langle\Delta_2^2\rangle+$$

$$+\frac{373}{1152}\langle\Delta_1^2\rangle^2\langle\Delta_2^2\rangle-\frac{1109}{6912}\langle\Delta_1^2\rangle\langle\Delta_2^2\rangle^2. \tag{23}$$

2. Обсуждение результатов

Найденные выражения коэффициентов диффузии и Барнетта для обобщенной одномерной модели (4) показывают, что в разложениях этих величин по степеням $(\omega/D)\ll 1$ присутствуют слагаемые, связанные с беспорядками СБ- и СЛ-типов по отдельности, и интерференционные слагаемые. Как видно из (23), частотная зависимость $U_0(\omega)$ и $U_2(\omega)$ сохраняет характерные особенности, присущие моделям СБ и СЛ [2]. При $\omega=0$ коэффициент диффузии равен произведению коэффициентов диффузии D_1 и D_2, соответствующих случайным «барьерам» и «ловушкам». Это утверждение является случаем общего положения. Можно показать (см. Приложение 2), что в одномерной системе со случайными вероятностями переходов $\{W_{nn'}\}$ стационарный коэффициент диффузии всегда представим в виде произведения $D=D_1D_2$ независимо от статических свойств величин $\{\Gamma_n\}$ и $\{\Gamma_{nn'}\}$.

Коэффициенты разложения по степеням ω для $U_0(\omega)$ перенормируются благодаря интерференции беспорядков начиная с членов, пропорциональных ω, а для $U_2(\omega)$ — начиная с членов порядка ω^0. Таким образом, с точностью до членов порядка $\omega^{1/2}$ коэффициент диффузии обобщенной модели равен произведению частотно-зависимого коэффициента диффузии МСБ и коэффициента диффузии МСЛ.

В данной работе найдены величины $U_0(\omega)$ и $U_2(\omega)$ для равновесных начальных условий (4). Аналогичным образом можно рассмотреть и случай неравновесных начальных условий.

В заключение отметим, что полученные выражения (23) неприменимы в случае «сильного» беспорядка, когда не существуют первые моменты случайных величин $(\Gamma_1)_n^{-1}$, $(\Gamma_2)_{nn'}^{-1}$ [8, 9].

ПРИЛОЖЕНИЕ I

Найдем функции $F(k, \omega)$ и $S(k, \omega)$. Члены, дающие вклад в коэффициент диффузии с точностью до величин $O(\omega^{3/2})$ и в коэффициент Барнетта $O(\omega)$, имеют вид

$$\begin{gathered}
G = g_0 - \omega\Omega g_0^2 A + \Omega^2 g_0^2 B + (\omega g_0 - 1)^2 [\langle \Delta_1 (g_2 + g_3 + g_4) \Delta_1 - \omega \langle \Delta_1 g_1 \Delta_1 g_1 \Delta_1 \rangle - \\
- \{\omega \langle \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_2 \Delta_1 - \omega^2 \langle \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_1 \Delta_1 g_1 \Delta_1 \rangle - \omega^2 \langle \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_2 \Delta_1 \rangle\} - \\
- \{g_0 \rightleftarrows g_2;\ g_0 \rightleftarrows g_1\}] + \omega^2 [\langle (g_1 + g_2) \Delta_1 g_0 \Delta_1 (g_1 + g_2) \rangle + \langle g_1 \Delta_1 g_1 \Delta_1 g_1 \rangle + \\
+ \{\langle g_1 \Delta_1 g_1 \Delta_1 g_2 \rangle + \langle g_1 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_3 \rangle\} + \{g_1 \rightleftarrows g_3;\ g_1 \rightleftarrows g_2\} - \omega \langle g_1 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_1 \rangle + \\
+ \omega^2 \langle g_1 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_1 \rangle] + \omega (\omega g_0 - 1) [\langle \Delta_1 g_0 \Delta_1 (g_2 + g_3 + g_4) \rangle + \\
+ \langle (g_2 + g_3 + g_4) \Delta_1 g_0 \Delta_1 \rangle + \langle \Delta_1 g_1 \Delta_1 g_1 \rangle + \langle g_1 \Delta_1 g_1 \Delta_1 \rangle - \omega \langle \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_2 \rangle - \\
- \omega \langle g_2 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_0 \Delta_1 \rangle + \omega^2 \langle \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_2 \rangle + \omega^2 \langle g_2 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_0 \Delta_1 g_0 \Delta_1 \rangle], \\
g_i = (-\omega)^{i-1} D c_1 g_0 \Delta_2 (g_0 \Delta_2)^{i-1} g_0 c_2 \quad (i = 1,\ 2,\ 3,\ 4).
\end{gathered}$$

(Здесь мы опустили операторные обозначения величин). Выражения, стоящие в фигурных скобках, отличаются перестановкой местами соответствующих операторов.

Вычислим, например, член типа

$$\mathcal{J} = \langle \Delta_2 g_0 c_2 \Delta_1 c_1 g_0 \Delta_2 g_0 c_2 \Delta_1 c_1 g_0 \Delta_2 g_0 \Delta_2 \rangle,$$

возникающий при усреднении величины $g_1 \Delta_1 g_1 \Delta_1 g_2$, где черта означает, что флуктуации Δ_i берутся в одинаковых узлах и связях. В результате в k-представлении имеем

$$\mathcal{J} = \langle \Delta_1^2 \rangle \langle \Delta_2^2 \rangle^2 \frac{1}{N^2} \sum_{k_1,\ k_2} (g_0)_{k_1} (c_1 g_0)_{-k_1} (c_1 g_0)_{k_2} (c_1 g_0)_{k_3} (c_1 g_0)_{k_1 - k_2 - k_3}.$$

Аналогично преобразуются и другие слагаемые. При этом возникают выражения вида

$$\mathcal{J}_2(k) = \frac{1}{N} \sum_{k_1} (c_1 g_0)_{k_1} (c_1 g_0)_{k-k_1},$$

$$\mathcal{J}_3(k) = \frac{1}{N} \sum_{k_1} (c_1 g_0)_{k_1} \mathcal{J}_2(k - k_1),$$

$$\mathcal{J}_5(k) = \frac{1}{N} \sum_{k_1} (g_0)_{k_1} \mathcal{J}_2(k - k_1) \mathcal{J}_2(k_1 - k),$$

$$\mathcal{J}_4''(k) = \frac{1}{N^2} \sum_{k_1,\ k_2} (g_0)_{k_1} (g_0)_{k_2} (c_1 c_2 g_0^2)_{k - k_1 - k_2},$$

$$\mathcal{J}_4' = \frac{1}{N} \sum_{k_1} (g_0)_{k_1} (c_1 g_0)_{-k_1} \mathcal{J}_3(k_1),$$

$$\mathcal{J}_4 = \frac{1}{N} \sum_{k_1} (c_1 g_0)_{k_1} \mathcal{J}_3(-k_1).$$

Эти суммы находятся путем перехода к интегрированию с заменой $z=e^{ik}$ [2]. Например,

$$\mathcal{J}_2(k)=\frac{1}{2\pi iD}\oint\limits_{|z|=1}\frac{(z_1-z)\,z\,(1-z_1)\,dz_1}{(z_1-ze^{\alpha})(z_1-ze^{-\alpha})(z_1-e^{\alpha})(z_1-e^{-\alpha})}=$$

$$=\frac{(-1)}{D^2}\,\frac{(1-e^{-\alpha})(1-e^{\alpha})\,z\,(z+1)}{(e^{-\alpha}-e^{\alpha})(z-e^{2\alpha})(z-e^{-2\alpha})},$$

$$e^{\alpha}+e^{-\alpha}=2+\omega/D.$$

Аналогично вычисляют и остальные суммы. Для малых ω, $k\to 0$ ($k\ll\ll(\omega/D)^{1/2}$) имеем

$$\mathcal{J}_3(\omega,\ k=0)=0,$$

$$\mathcal{J}_4(\omega)=2^{-5}D^{-7/2}\omega^{-1/2},$$

$$\mathcal{J}_4'(\omega)=2^{-8}D^{-7/2}\omega^{-3/2},$$

$$\mathcal{J}_5(\omega,\ k)=\frac{5}{9}\cdot 2^{-5}D^{-7/2}\omega^{-3/2}-k^2\cdot 2^{-5}(D\omega)^{-5/2},$$

$$\mathcal{J}_4''(\omega,\ k)=6^{-2}(D\omega)^{-2}+O(k^4).$$

Выражения, не содержащие величин c_1 и c_2, найдены в работе [2].

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Запишем основное уравнение для одномерной диффузии в виде

$$\frac{dP(n,\ t)}{dt}=\Gamma_{n,n+1}[\Gamma_{n+1}P(n+1,\ t)-\Gamma_nP(n,\ t)]+$$

$$+\Gamma_{n,n-1}[\Gamma_{n-1}P(n-1,\ t)-\Gamma_nP(n,\ t)],$$

где $P(n,\ t)$ — функция распределения, удовлетворяющая условию нормировки

$$\frac{1}{N}\sum_n P(n,\ t)=c,\quad c<1.$$

Определим поток между n и $n+1$ узлами

$$j_n=\Gamma_{n,n+1}(\Gamma_nP(n)-\Gamma_{n+1}P(n+1)).$$

Равновесная функция распределения, зануляющая поток, есть

$$P_n^0=D_1c/\Gamma_n,\quad D_1^{-1}=\frac{1}{N}\sum_n\frac{1}{\Gamma_n}.$$

Предположим, что в узлах $n=0$ и $n=N$ заданы стационарные граничные условия, т. е.

$$P_0^{st}=D_1c_0/\Gamma_0,\quad P_N^{st}=D_1c_N/\Gamma_N,\quad c_0\neq c_N.$$

Тогда в системе при $t\to\infty$ устанавливается стационарный поток $j=j_n$. При этом стационарная функция распределения определяется соотношением

$$P_n^{st}=\frac{1}{\Gamma_n}\left(j\sum_{m=0}^{N-1}\Gamma_{m,m+1}^{-1}+c_ND_1\right),\quad n<N.$$

В результате имеем

$$j=-D(c_N-c_0)/N,$$

где

$$D = D_1 D_2 = \left(\frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N} \Gamma_n^{-1} \right)^{-1} \left(\frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} \Gamma_{m,\,m+1}^{-1} \right)^{-1}.$$

Обратим внимание, что это соотношение справедливо при произвольных статистических свойствах случайных величин Γ_n и $\Gamma_{n,n+1}$. Если величины Γ_n^{-1} и $\Gamma_{n,n+1}^{-1}$ являются самоусредняющимися, то величины D_1, D_2 и D становятся детерминированными при $N \to \infty$.

Список литературы

[1] Haus J. W., Kehr K. W. // Phys. Rep. 1987. V. 150. N 5/6. P. 236—416.
[2] Denteneer P. J. H., Ernst M. H. // Phys. Rev. 1984. V. B29. N 4. P. 1755—1768.
[3] Kundu K., Phillips P. // Phys. Rev. 1987. V. A35. N 2. P. 857—865.
[4] Брыксин В. В. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 7. С. 2048—2056.
[5] Webman I., Klafter J. // Phys. Rev. 1982. V. B26. N 10. P. 5958—5952.
[6] Белащенко Д. К. // ФММ. 1982. Т. 53. № 6. С. 1076—1082.
[7] Odagaki T., Lax M. // Phys. Rev. 1981. V. B24. N 9. P. 5284—5286.
[8] Alexander S., Bernasconi J., Schneider W. R., Orbach R. // Rev. Mod. Phys. 1981. V. 53. N 2. P. 175—198.
[9] Niemwenhuizen Th. M., Ernst M. H. // Phys. Rev. 1985. V. B31. N 6. P. 3518—3533.
[10] Брыксин В. В., Яшин Г. Ю. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 10. С. 3025—3035.

Харьковский физико-технический институт
АН УССР

Поступило в Редакцию
10 октября 1990 г.
В окончательной редакции
13 февраля 1991 г.