

УДК 539.21

© 1990

СЛУЧАЙНЫЕ БЛУЖДЕНИЯ НА РЕШЕТКЕ С НЕУПОРЯДОЧЕННЫМ ПРОТЯЖЕННЫМ ДЕФЕКТОМ

И. С. Брановицкий, С. А. Кохтев

Изучаются случайные блуждания частицы по узлам d -мерной решетки, содержащей неупорядоченный протяженный дефект. Под дефектом подразумевается d' -мерная ($d' < d$) решетка, погруженная в d -мерную. Вероятность перескока между узлами дефекта является случайной величиной. Для вычисления обобщенного коэффициента диффузии на узлах дефекта используется самосогласованное приближение эффективной среды. Подробно рассмотрены блуждания по узлам трехмерной решетки (матрицы), содержащей двумерный неупорядоченный дефект (интерфейс). Показано, что эффективная вероятность перехода между узлами интерфейса $W_B(\omega)$ аналитична в точке $\omega=0$. В результате неупорядоченность приводит лишь к перенормировке коэффициента диффузии в области интерфейса, но не меняет форму асимптотики среднеквадратичного смещения на больших временах.

Некогерентная миграция частиц (квазичастиц) в неупорядоченных средах (НС) привлекает к себе большое внимание [1-3], так как процессы такого типа происходят в раз нообразных физических системах, например в несобственных полупроводниках (прыжковое движение носителей), пористых фильтрах (просачивание загрязненной жидкости), молекулярных кристаллах (миграция экситонов) и т. д.

Во всех имеющихся работах рассматриваются НС, занимающие все пространство размерности d . Однако существует класс систем с низкоразмерной (d' -мерной) областью неупорядоченности, погруженной в упорядоченную d -мерную среду ($d' < d$). Это, в частности, неупорядоченные границы раздела (интерфейсы) двух упорядоченных сред, свободная поверхность с хаотически расположенными атомами, неупорядоченные дислокации и т. д. Беспорядок в области интерфейса может быть вызван хаотическим расположением солитонов (дислокаций несоответствия) или примесей, закрепленных вблизи границы раздела. Неупорядоченность в ядре дислокации может возникать в результате случайного расположения ступенек на экстраплоскости краевой дислокации или петель на линии винтовой дислокации. Примеси также нарушают упорядоченность в ядре дислокации. К НС этого класса относятся и неупорядоченные границы зерен, не отвечающие специальным ориентационным соотношениям.

Указанные выше системы (неупорядоченные интерфейсы, дислокации и т. д.), а также любую другую НС, погруженную в упорядоченную среду более высокой размерности, будем называть неупорядоченным протяженным дефектом (НПД) этой среды.

Как будет показано ниже, обобщенный коэффициент диффузии в области НПД определяется не только свойствами самого дефекта, но также свойствами и размерностью среды, в которой он находится. Таким образом, НПД нельзя рассматривать как изолированную d' -мерную НС и непосредственно использовать имеющийся формализм [1-3] для расчетов.

Цель настоящей работы — изучение диффузии на d -мерной решетке с d' -мерным НПД. Мы будем рассматривать диагональный беспорядок, соответствующий задаче случайных связей в теории проводимости неупорядоченных сред. Недиагональный беспорядок в области дефекта предполагается рассмотреть в отдельной работе.

1. Управляющее уравнение для случайных блужданий на решетке с НПД

Блуждания частицы на решетке описываются уравнением баланса управляющим уравнением [1-3]

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \sum_{\mathbf{r}'} \{W(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}) P(\mathbf{r}', t) - W(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}') P(\mathbf{r}, t)\}, \quad (1)$$

где $P(\mathbf{r}, t)$ — вероятность обнаружить частицу на узле \mathbf{r} в момент времени t , если в момент $t=0$ частица находилась на узле \mathbf{r}_0 ; $W(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}')$ — вероятность перехода с узла \mathbf{r} на узел \mathbf{r}' в единицу времени.

Под протяженным дефектом подразумевается d' -мерная решетка, погруженная в d -мерную матрицу. НПД характеризуется тем, что вероятность перехода между парами его узлов является случайной функцией, в то время как вероятность перехода между любыми другими парами узлов детерминирована и не зависит от координат. Для простоты будем считать, что матрица и дефект образованы узлами гиперкубической решетки единичного периода. В частности, дефект может представлять собой линию узлов ($d'=1$), слой ($d'=2$) и т. д. при более высокой размерности.

Запишем \mathbf{r} в виде $\mathbf{r}=(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, где $\mathbf{x}=(x_1, \dots, x_{d'})$ и $\mathbf{y}=(x_{d'+1}, \dots, x_d)$. При определенной фиксации \mathbf{y} вектор \mathbf{x} задает координаты узлов дефекта. В дальнейшем будем фиксировать положение дефекта условием $\mathbf{y}=0$. В соответствии с вышесказанным введем следующие обозначения:

$$W(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}') = \begin{cases} W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'), & \text{если } \mathbf{y} = \mathbf{y}' = 0, \\ W_{\mathbf{r}} & \text{в противном случае,} \end{cases}$$

где $W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')$ — вероятность перехода между узлами дефекта, которая является случайной величиной; $W_{\mathbf{r}}$ — вероятность перехода между любыми другими узлами. Полагаем $W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = W(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x})$, что соответствует диагональному беспорядку. Если $W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = W_0$ (при этом $W_0 \neq W_{\mathbf{r}}$), будем называть дефект упорядоченным. С учетом введенных обозначений перепишем уравнение (1) в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = & \sum_{\mathbf{x}'} [W_{\mathbf{r}} + \delta_{\mathbf{y}, 0} (W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') - W_{\mathbf{r}})] [P(\mathbf{x}', \mathbf{y}, t) - P(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)] + \\ & + W_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{y}'} [P(\mathbf{x}, \mathbf{y}', t) - P(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)]. \end{aligned} \quad (2)$$

Используя преобразование Лапласа с параметром ω и учитывая перескоки только между ближайшими соседями, запишем (2) следующим образом:

$$\begin{aligned} & \left\{ \omega + \sum_{\delta_{\mathbf{y}}} W_{\mathbf{r}} + \sum_{\delta_{\mathbf{x}}} [W_{\mathbf{r}} + \delta_{\mathbf{y}, 0} (W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \delta_{\mathbf{x}}) - W_{\mathbf{r}})] \right\} P(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \omega) - \\ & - W_{\mathbf{r}} \sum_{\delta_{\mathbf{y}}} P(\mathbf{x}, \mathbf{y} + \delta_{\mathbf{y}}, \omega) - \sum_{\delta_{\mathbf{x}}} [W_{\mathbf{r}} + \delta_{\mathbf{y}, 0} (W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \delta_{\mathbf{x}}) - W_{\mathbf{r}})] P(\mathbf{x} + \delta_{\mathbf{x}}, \mathbf{y}, \omega) = \\ & = \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}_0} \delta_{\mathbf{y}, \mathbf{y}_0}. \end{aligned} \quad (3)$$

Векторы $\delta_{\mathbf{x}}$ и $\delta_{\mathbf{y}}$ соединяют соседние узлы в \mathbf{x} - и \mathbf{y} -пространстве соответственно.

Для удобства дальнейших вычислений введем систему ортонормированных векторов $\{|\mathbf{x}, \mathbf{y}\rangle\}$ и перепишем (3) в виде матричного уравнения

$$\hat{H} |P\rangle = |I\rangle, \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\substack{(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ (\mathbf{x}', \mathbf{y}')}} |\mathbf{x}, \mathbf{y}\rangle \left\{ \left[\omega + \sum_{\delta_{\mathbf{y}}} W_{\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{x}''} (W_{\mathbf{r}} + \delta_{\mathbf{y}, 0} (W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'') - W_{\mathbf{r}})) \right] \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} \delta_{\mathbf{y}, \mathbf{y}'} - \right. \\ & \left. - (W_{\mathbf{r}} + \delta_{\mathbf{y}, 0} (W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') - W_{\mathbf{r}})) \delta_{\mathbf{y}, \mathbf{y}'} \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} - W_{\mathbf{r}} \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} \delta_{\mathbf{y}, \mathbf{y}'} \right\} \langle \mathbf{x}', \mathbf{y}' |, \end{aligned} \quad (5)$$

$$|P\rangle = \sum_{(x, y)} P(x, y, \omega) |x, y\rangle, \quad (6)$$

$$|I\rangle = \sum_{(x, y)} \delta_{x, x_0} \delta_{y, y_0} |x, y\rangle, \quad (7)$$

$$\Delta_{z, z'} = \begin{cases} 1, & \text{если } z \text{ и } z' \text{ ближайшие соседи,} \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Полную информацию о процессе диффузии содержит функция Грина $\langle |P\rangle \rangle$, где угловые скобки означают усреднение по реализациям случайных вероятностей перехода $W(x \rightarrow x')$. Из уравнения (4) находим

$$\langle |P\rangle \rangle = \langle \hat{H}^{-1} | I \rangle, \quad (8)$$

где \hat{H}^{-1} — матрица, обратная \hat{H} . Для вычисления матрицы $\langle \hat{H}^{-1} \rangle$ воспользуемся самосогласованным приближением эффективной среды (СПЭС). Подобное приближение широко используется при анализе случайных блужданий на неупорядоченных решетках, занимающих все пространство [4, 5], и демонстрирует высокую работоспособность.

В соответствии с общей идеологией СПЭС [4-6] матрица \hat{H} записывается в виде суммы двух слагаемых, первое из которых описывает диффузию на решетке с упорядоченным дефектом ($W(x \rightarrow x') \rightarrow W_E$, W_E — эффективная вероятность перехода между узлами дефекта), а второе содержит флуктуации

$$\hat{H} = \hat{H}_E + \delta \hat{H}.$$

Матрица \hat{H}_E — это выражение (5) с заменой $W(x \rightarrow x') \rightarrow W_E$. В нашем случае удастся реализовать ту же схему вычислений [7], что и для однородно неупорядоченных систем [4, 5]. В результате в рамках СПЭС

$$\langle \hat{H}^{-1} \rangle \simeq \hat{H}_E^{-1} (W_E(\omega')).$$

Эффективная вероятность перехода W_E , в общем случае зависящая от частоты, неявно задается условием самосогласования

$$\left\langle \frac{W_E - W'}{1 - \langle 0,0 | - \langle z_x, 0 | \hat{H}_E^{-1} (|0, 0\rangle - |z_x, 0\rangle) (W_E - W')} \right\rangle = 0, \quad (9)$$

где $\langle \dots \rangle = \int \dots \rho(W') dW'$, $\rho(W')$ — плотность распределения случайных вероятностей перехода в области дефекта.

Соотношение (9) будет использоваться для анализа конкретных систем. Точность приближения обсуждается в заключительном разделе (см. также [7]).

2. Среднеквадратичное смещение частицы в пространстве дефекта

Для того чтобы охарактеризовать процесс диффузии на решетке с НПД, вычислим моменты $\langle\langle x^2 \rangle\rangle$ и $\langle\langle y^2 \rangle\rangle$. Двойные угловые скобки означают усреднение по различным траекториям движения и по реализациям беспорядка. Величина $\langle\langle x^2 \rangle\rangle$ определяет среднеквадратичное смещение частицы по линии одномерного дефекта ($d' = 1$), в плоскости двумерного дефекта ($d' = 2$) и т. д. Расплывание частицы в y -пространстве характеризуется среднеквадратичным смещением $\langle\langle y^2 \rangle\rangle$.

Используя преобразование Фурье на решетке (переход от переменных (x, y) к переменным (k, q)), получим следующие соотношения [7]:

$$\langle\langle x^2 \rangle\rangle_\omega = \frac{W_V z_x}{\omega^2} + \frac{[W_E(\omega) - W_V] z_x}{\omega} J_{d-d'}, \quad (k=0, y_0, \omega), \quad (10)$$

$$\langle\langle y^2 \rangle\rangle_\omega = \frac{W_V z_y}{\omega^2} + \frac{y_0^2}{\omega}, \quad (11)$$

где z_x и z_y — координационные числа в x - и y -пространстве. а

$$J_{d-d'}(\mathbf{k}, \mathbf{y}_0, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^{d-d'}} \int_{\text{ЗБ}} G_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{y}_0} d\mathbf{q}, \quad (12)$$

$$G_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = \left\{ \omega + W_V \left[z_x - \sum_{\delta_x} e^{i\mathbf{k}\delta_x} \right] + W_V \left[z_y - \sum_{\delta_y} e^{i\mathbf{q}\delta_y} \right] \right\}^{-1}.$$

Интегрирование в (12) ведется по первой зоне Бриллюэна.

Первое слагаемое в (10) отвечает диффузии на d -мерной упорядоченной решетке, а второе возникает благодаря дефекту. Знак второго слагаемого в (10) может быть произвольным в зависимости от свойств функции $\Delta W_E(\omega) \equiv W_E(\omega) - W_V$, т. е. дефект может как ускорять, так и замедлять диффузию в x -пространстве. Из (11) следует, что среднеквадратичное смещение $\langle\langle \mathbf{y}^2 \rangle\rangle$ не реагирует на присутствие дефекта.

Если блуждания происходят на решетке с упорядоченным дефектом ($W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') \equiv W_0$), то выражение (10) становится точным. При этом среднеквадратичное смещение в x -пространстве зависит лишь от разности размерностей матрицы и дефекта. Если же d' -мерный дефект неупорядочен, функция $W_E(\omega)$ оказывается различной при разных d , так как от размерности решетки зависят матричные элементы оператора H_E^{-1} . Это означает, что неупорядоченные дефекты одной и той же размерности с одинаковыми статистическими характеристиками будут иметь различные эффективные параметры $W_E(\omega)$ при погружении в матрицы разной размерности.

Обобщенный (зависящий от ω) коэффициент диффузии в области НПД определяется как $D_E(\omega) = a^2 W_E(\omega)$ [3], где a — период решетки. Так как мы рассматриваем решетку с единичным периодом, то обобщенный коэффициент диффузии совпадает с эффективной вероятностью перехода между узлами дефекта.

Вначале рассмотрим блуждания на решетке с упорядоченным дефектом ($\Delta W_E(\omega) \rightarrow \Delta W_0 \equiv W_0 - W_V$), считая, что частица стартует с узла дефекта ($\mathbf{y}_0 = 0$). Обозначим среднеквадратичные смещения частицы в этой системе через $\langle \mathbf{x}^2 \rangle_t^0$ и $\langle \mathbf{y}^2 \rangle_t^0$. Функции $J_{d-d'}(\mathbf{k}, \mathbf{y}_0 = 0, \omega)$ вычислялись в ряде работ [3, 8] (см. также [7]). Используя эти результаты и переходя в t -представление, получим

$$\langle \mathbf{x}^2 \rangle_t^0 = W_V z_x t + \frac{\Delta W_0 z_x}{W_V} \begin{cases} W_V t e^{-2W_V t} [I_0(2W_V t) + I_1(2W_V t)], & d - d' = 1, \quad (13) \\ \frac{1}{4\pi} [\ln(W_V t) + C + 6 \ln 2], & d - d' = 2, \quad (14) \\ m_{d-d'}, & d - d' > 2, \quad (15) \\ \langle \mathbf{y}^2 \rangle_t^0 = W_V z_y t, & \quad (16) \end{cases}$$

где $I_0(x)$, $I_1(x)$ — модифицированные функции Бесселя; C — постоянная Эйлера; m — константа, зависящая от параметра $d-d'$ (см. [7, 8]).

Формулы (13) и (16) точные, а (14) и (15) асимптотически точны при $W_V t \gg 1$. На больших временах ($t \gg W_V^{-1}$) выражение (13) принимает вид

$$\langle \mathbf{x}^2 \rangle_t^0 |_{d-d'=1} = W_V z_x t + \frac{\Delta W_0 z_x}{W_V} \sqrt{W_V t / \pi} (1 - O(1/W_V t)). \quad (17)$$

Из (13)–(16) следует, что растущий вклад в величину $\langle \mathbf{x}^2 \rangle_t^0$ дадут лишь те дефекты, для которых $d-d' \leq 2$. Этот факт тесно связан с тем, что случайные блуждания возвратны на узлы дефекта при $d-d' \leq 2$ и невозвратны при $d-d' > 2$.

Если дефект неупорядочен, то для нахождения $\langle\langle \mathbf{x}^2 \rangle\rangle_\omega$ в выражение (10) следует подставить функцию $W_E(\omega)$, вычисленную с помощью условия самосогласования (9). Конкретные расчеты в рамках описанного выше формализма представлены в следующем разделе.

3. Неупорядоченный интерфейс в трехмерной решетке

Ниже мы рассмотрим случайные блуждания по узлам трехмерной решетки, содержащей двумерный неупорядоченный дефект (интерфейс). Узлы решетки имеют координаты $\mathbf{r}=(x_1, x_2, x_3)$, а дефект представляет собой слой узлов с $x_3=0$. В принятых выше обозначениях $\mathbf{r} \equiv (\mathbf{x}, y)$, $\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2)$, $\mathbf{y} \equiv x_3 \mathbf{e}_3$. Подобная решеточная модель, но не содержащая беспорядка, использовалась в работе [9] для анализа диффузии по границам зерен и свободной поверхности. В нашем случае вероятность перехода между узлами интерфейса $W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}')$ является случайной величиной. В рамках такой модели можно исследовать диффузионные процессы в би-кристалле с неупорядоченной границей раздела. При специальных углах разворота кристаллитов неупорядоченность может быть вызвана хаотическим расположением примесей, адсорбированных граничной областью. При отклонении от специальных углов разориентации беспорядок возникает как результат нерегулярного расположения дислокаций несоответствия (и примесей). Модель также позволяет описывать диффузию частиц по шероховатой поверхности.

Условие самосогласования, задающее эффективную вероятность перехода W между узлами неупорядоченного интерфейса, есть частный случай общего условия (9), которое в безразмерных переменных имеет вид

$$\left\langle \frac{\alpha + 1 - \tilde{W}'}{1 - 2M_{d, \varepsilon}(\alpha, \tilde{\omega})(\alpha + 1 - \tilde{W}')} \right\rangle = 0, \quad (18)$$

где

$$\alpha = (W_E - W_V)/W_V \equiv \Delta W_E/W_V, \quad \tilde{\omega} = \omega/W_V, \quad \tilde{W}' = W'/W_V, \quad \varepsilon = d - d',$$

$$M_{d, \varepsilon}(\alpha, \tilde{\omega}) = \frac{1}{2} (\langle 0, 0 | - \langle \mathbf{z}_x, 0 | \hat{H}_E^{-1}(\alpha, \tilde{\omega}) (| 0, 0 \rangle - | \mathbf{z}_x, 0 \rangle). \quad (19)$$

В нашем случае $d=3, \varepsilon=1$.

Рассмотрим интерфейс, в котором имеются два сорта связей, т. е. случайные вероятности перехода между узлами интерфейса распределены с плотностью

$$p(W') = p\delta(W' - W_1) + (1-p)\delta(W' - W_2), \quad (20)$$

где p — доля связей с вероятностью перехода W_1 , а $(1-p)$ — с вероятностью W_2 . Используя (18) и (20), получим

$$1 + \alpha - p\tilde{W}_1 - (1-p)\tilde{W}_2 + 2M_{s, 1}(\alpha, \tilde{\omega}) [(1+\alpha)(\tilde{W}_1 + \tilde{W}_2) - \tilde{W}_1\tilde{W}_2 - (1+\alpha)^2] = 0, \quad (21)$$

где $\tilde{W}_i = W_i/W_V$. Уравнение (21) явно задает α как функцию p и $\tilde{\omega}$. Матричный элемент приводится к виду [7]

$$M_{d, \varepsilon}(\alpha, \tilde{\omega}) = \frac{1}{(2\pi)^{d-\varepsilon}} \int_{\text{ЗБ}} \frac{d\mathbf{k} \left(1 - z_x^{-1} \sum_{\delta_x} e^{i\mathbf{k}\delta_x} \right)}{J_\varepsilon^{-1}(\mathbf{k}, \tilde{\omega}) + \alpha \left(z_x - \sum_{\delta_x} e^{i\mathbf{k}\delta_x} \right)}, \quad (22)$$

где

$$J_\varepsilon(\mathbf{k}, \tilde{\omega}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{n(x) dx}{1 + [\tilde{\omega} + z_x - \sum_{\delta_x} e^{i\mathbf{k}\delta_x}] / z_y - x},$$

$$n(x) = \frac{1}{(2\pi)^\varepsilon} \int_{\text{ЗБ}} \delta \left(x - z_y^{-1} \sum_{\delta_y} e^{i\mathbf{q}\delta_y} \right) d\mathbf{q}. \quad (23)$$

Для практических расчетов удобно аппроксимировать плотность состояний (23) выражением

$$n(x) = \frac{\Gamma(d' + 1)}{\sqrt{\pi} \Gamma(d'/2)} (1 - x^2)^{d'/2 - 1}, \quad (24)$$

которое обеспечивает нужное поведение на краю зоны и дает правильные сингулярности функций $J_\epsilon(\mathbf{k}=0, \bar{\omega})$ при $\bar{\omega} \rightarrow 0$. Выражение (24) использовалось в работе [8] при исследовании случайных блужданий на трехмерной неупорядоченной решетке. С помощью соотношений (22)–(24) запишем функцию $M_{3,1}(\alpha, \bar{\omega})$ в виде

$$M_{3,1}(\alpha, \bar{\omega}) = \frac{1}{2} \int_0^2 \frac{\xi d\xi}{[(\bar{\omega} + z_x \xi)^2 + 4(\bar{\omega} + z_x \xi)]^{1/2} + z_x \alpha \xi}. \quad (25)$$

Интеграл в (25) можно вычислить точно, а затем разложить в ряд по степеням $\bar{\omega}$ при $\bar{\omega} \rightarrow 0$ (большие времена) или по степеням $\bar{\omega}^{-1}$ при $\bar{\omega} \rightarrow \infty$ (малые времена).

Вначале рассмотрим долговременное поведение частицы на решетке. Из (25) получим

$$M_{3,1}(\alpha, \bar{\omega}) = M_{3,1}(\alpha, \bar{\omega}=0) + \varphi_1(\alpha) \bar{\omega} + \varphi_2(\alpha) \bar{\omega}^2 \ln \bar{\omega} + \dots, \quad (26)$$

где φ_1, φ_2 — трансцендентные функции, конкретный вид которых в дальнейшем несуществен. Статическое слагаемое вычисляется элементарно

$$M_{3,1}(\alpha, \bar{\omega}=0) = \frac{1}{4(\alpha^2 - 1)} \left\{ \alpha - \frac{\sqrt{6}}{2} - \frac{\alpha^2 + 1}{\alpha^2 - 1} (\psi(1) - \psi(\alpha)) \right\}, \quad (27)$$

где

$$\psi(\alpha) = \frac{\alpha}{\alpha^2 + 1} \ln(\sqrt{3} + \alpha\sqrt{2}).$$

Сначала вычислим статический параметр α ($\bar{\omega}=0$), а вопрос о поправках, зависящих от $\bar{\omega}$, рассмотрим позднее. Чтобы найти α ($\bar{\omega}=0$), следует подставить функцию $M_{3,1}(\alpha, \bar{\omega}=0)$ в (21) и разрешить полученное уравнение относительно α . Проще всего построить график $p=p(\alpha)$, а затем найти обратную зависимость.

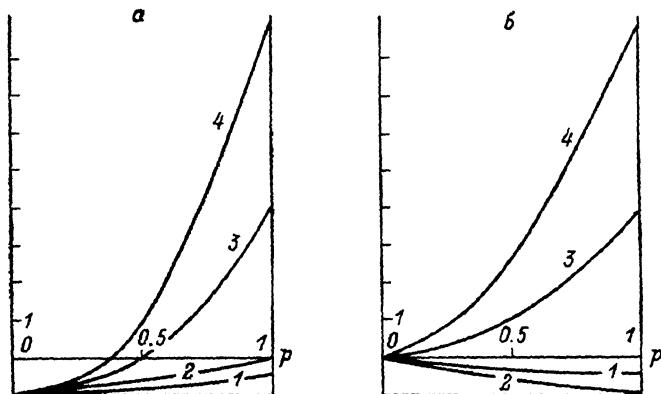
Рассмотрим два частных случая: а) \bar{W}_1^a произвольна, $\bar{W}_2^a=0$; б) \bar{W}_1^a произвольна, $\bar{W}_2^a=1$. В первом случае происходит разрыв связей (их доля составляет $1-p$) в плоскости интерфейса. Во втором случае некоторые связи с единичной относительной вероятностью перехода заменены на связи с произвольной величиной \bar{W}_1^a и доля таких связей равна p . Очевидно, что в случае $\bar{W}_2^a=1$ и $\bar{W}_1^a=0$ варианты «а» и «б» совпадают с точностью до замены $p \leftrightarrow 1-p$. На рисунках приведены графики зависимостей $\alpha = \alpha(p, \bar{\omega}=0, \bar{W}_2^a=0)$ (а) и $\alpha = \alpha(p, \bar{\omega}=0, \bar{W}_2^a=1)$ (б) при различных \bar{W}_1^a, \bar{W}_2^a , построенные с помощью соотношений (21) и (27). Кривые 2 на рисунке, а, б описывают относительную эффективную вероятность перехода между узлами двумерной перколяционной сетки (задача связей), помещенной в трехмерную упорядоченную матрицу. В отличие от свободной двумерной сетки в нашей системе не наблюдается перколяционный переход, так как не могут образовываться полностью изолированные кластеры из узлов интерфейса. В том случае, когда кластер не связан с другими непосредственно в плоскости интерфейса, остаются неразорванные пути блужданий, проходящие по матрице. Это позволяет частице осуществлять переходы между кластерами интерфейса при любых $p \in (0, 1]$.

Если построить графики в переменных $(\alpha/\bar{W}_1^a, p)$, то легко заметить, что в пределе $\bar{W}_1^a \rightarrow \infty$ ($W_v \rightarrow 0$) получается обычная для приближения эффективной среды перколяционная зависимость $\alpha = \alpha(p)$ с точным значением критической концентрации «хороших» связей $p_c=1/2$.

Зависимости, приведенные на рисунках, показывают, что при малых p влияние «хороших» связей (с $\bar{W}_1^a, \bar{W}_2^a \gg 1$) на эффективную вероятность перехода незначительно и в то же время α существенно зависит от p при

$p \rightarrow 1$. Это означает, что интерфейс вносит заметный вклад в диффузионное смещение частицы лишь при $p > p_c$, т. е. когда образовался бесконечный кластер из «хороших» связей.

До сих пор мы рассматривали статический случай ($\bar{\omega}=0$). Теперь проанализируем поведение α при малых $\bar{\omega}$ (большие времена). Из (25) следует, что функция $M_{3,1}(\alpha, \bar{\omega})$ аналитична во всей области определения ($\alpha \geq -1, \bar{\omega} > 0$). Это позволяет разложить $M_{3,1}(\alpha, \bar{\omega})$ в двойной ряд Тейлора в окрестности точки $(\alpha_0, \bar{\omega}=0)$. Подставляя такое разложение в условие самосогласования (21), легко показать, что функция $\alpha = \alpha(p, \bar{\omega})$



Относительная эффективная вероятность перехода между узлами интерфейса в зависимости от доли связей с вероятностью перехода \bar{W}_1 .

$$\alpha - \bar{W}_2^{\alpha} = 0, \quad \beta - \bar{W}_2^{\beta} = 1, \quad 1 - \bar{W}_1^{\alpha, \beta} = 0.5; \quad 2 - \bar{W}_1^{\alpha} = 1, \quad \bar{W}_1^{\beta} = 0; \quad 3 - \bar{W}_1^{\alpha, \beta} = 5; \quad 4 - \bar{W}_1^{\alpha, \beta} = 10.$$

аналитична при любых конечных значениях α_0 из области определения. Таким образом, при малых $\bar{\omega}$

$$\alpha(p, \bar{\omega}) = \alpha(p, \bar{\omega}=0) + A(p)\bar{\omega} + \dots$$

т. е.

$$\Delta W_E(p, \omega \rightarrow 0) = \Delta W_E(p, \omega=0) + A(p)\omega + \dots \quad (28)$$

Вычислим среднеквадратичное смещение частицы в плоскости интерфейса $\langle x^2 \rangle$. Разложение (28) следует подставить в соответствующее выражение для $\langle x^2 \rangle_{\omega}$ (см. (10))

$$\langle x^2 \rangle_{\omega} = \frac{4W_V}{\omega^2} + \frac{4\Delta W_E(\omega)}{\omega \sqrt{\omega(\omega + 4W_V)}} \quad (29)$$

Из (28) и (29) следует, что растущий вклад в величину $\langle x^2 \rangle_t$ даст лишь $\Delta W_E(p, \bar{\omega}=0)$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_t &= 4W_V t + 4\Delta W_E(p, \omega=0) t e^{-2W_V t} [I_0(2W_V t) + I_1(2W_V t)] + \\ &+ 4A(p) e^{-2W_V t} I_0(2W_V t) + \dots \Big|_{t \gg W_V^{-1}} = 4W_V t + 4\Delta W_E(p, \omega=0) \times \\ &\times \sqrt{t/\pi W_V} (1 - 1/16W_V t) + 2A(p) \sqrt{t/\pi W_V} - o(t^{-3/2}). \end{aligned} \quad (30)$$

Таким образом, поправка $A(p)\omega$ к статическому параметру $\Delta W_E(p, \omega=0)$ и слагаемые более высокого порядка по ω , входящие в (28), не влияют на долговременную асимптотику момента $\langle x^2 \rangle$.

Исследуем функцию $\alpha(p, \bar{\omega})$ при $\bar{\omega} \rightarrow \infty$ (малые времена). В этом случае из (21) и (25) получим

$$\alpha = \langle \bar{W} \rangle - 1 - \frac{2}{\bar{\omega}} [\langle \bar{W} \rangle^2 - \langle \bar{W}^2 \rangle] + o(\bar{\omega}^{-2}), \quad (31)$$

где $\langle \tilde{W} \rangle = p \tilde{W}_1 + (1-p) \tilde{W}_2$ для бимодального распределения. Эффективная вероятность перехода между узлами интерфейса дается выражением

$$W_E(p, \omega \rightarrow \infty) = \langle W \rangle - \frac{2}{\omega} [\langle W^2 \rangle - \langle W \rangle^2] + o(\omega^{-2}). \quad (32)$$

Соотношение (32) отражает тот факт, что W_E на малых временах определяется вероятностью первого прыжка.

Для $\langle x^2 \rangle_{t \rightarrow 0}$ из (29) и (32) получаем следующий результат:

$$\langle x^2 \rangle_{t \rightarrow 0} = 4 \langle W \rangle t - o(t^2). \quad (33)$$

Соотношения (31)–(33) справедливы для произвольного распределения случайных вероятностей перехода между узлами дефекта.

4. Обсуждение результатов

Выше рассмотрены случайные блуждания частицы на d -мерной решетке с d' -мерным диагонально неупорядоченным дефектом. Сначала проанализируем условие самосогласования (см. (9), (18)). Оно имеет ту же структуру, что и для однородно-неупорядоченных систем, однако матричный элемент, фигурирующий в (9) и (18), более сложен. В частности, он не определяется только лишь диагональным матричным элементом, как это имеет место для неупорядоченных систем, занимающих все пространство. Детальные вычисления, относящиеся к этому вопросу, приведены в [7].

Приведем некоторые утверждения, касающиеся аналитических свойств функции $W_E(\omega)$ при различных частотах. Как показано в разделе 3, для неупорядоченного интерфейса эффективная вероятность перехода $W_E(\omega)$ аналитична в точке $\omega=0$ при перколяционном распределении $\rho(W')$. В результате только статическое значение $W_E(\omega=0)$ дает вклад в долговременную асимптотику среднеквадратичного смещения частицы в плоскости интерфейса (см. (30)). Утверждение о несущественности частотных поправок (при $\omega \rightarrow 0$) к статической эффективной вероятности перехода справедливо и при любом неперколяционном распределении вероятностей $\rho(W')$, т. е. исключая нулевую вероятность перехода между узлами. В этом случае в области интерфейса заведомо не происходит геометрический фазовый переход и не образуются изолированные кластеры. В итоге функция $W_E(\omega)$ не имеет особенностей при изменении доли тех или иных связей.

Поведение частицы, стартующей с узла интерфейса, на малых временах ($\omega \rightarrow \infty$) описывается выражением (33), причем можно показать, что $W_E(\omega \rightarrow \infty) = \langle W \rangle + o(\omega^{-1})$ не только для бимодального распределения, но и для всякого иного. Это следует из асимптотического представления $M_{d,s}(\alpha, \omega \rightarrow \infty) \rightarrow (z_s \alpha)^{-1}$ [7] и условия самосогласования (18).

В настоящей работе подробно рассмотрено дискретное распределение случайных вероятностей перехода (20). Определенный интерес представляют также гладкие распределения, например непрерывное распределение высот потенциальных барьеров между соседними узлами. В частности, для одномерного дефекта (дислокации) в трехмерной решетке не сложно получить следующий результат [7]:

$$W_E = W_0 \exp \left[-\frac{1}{\theta} \left(\langle E \rangle + \frac{\sigma^2}{2\theta} \right) \right] (1 - o(W_V/W'(\langle E \rangle))), \quad (34)$$

если вероятность перехода между соседними узлами дефекта описывается аррениусовской зависимостью

$$W' = W_0 \exp(-E/\theta),$$

а случайные высоты потенциальных барьеров распределены по Гауссу со средним значением $\langle E \rangle$ и дисперсией σ^2 . При этом полагаем $\langle E \rangle \gg \sigma$, чтобы обрезать функцию распределения в области отрицательных энер-

гий. Из (34) следует, что эффективная энергия активации диффузии повышается с понижением температуры. Можно показать, что аналогичным свойством обладает и неупорядоченный пнтерфейс [7]. Дело в том, что при низких температурах большую роль играют участки дефекта, обладающие низкой диффузионной проницаемостью (высокая энергия активации) и лимитирующие скорость расплывания частицы. С ростом температуры роль низкопроводящих связей снижается, так как их проницаемость сильнее зависит от Θ , нежели проницаемость «хороших» связей.

Если диффузионная проницаемость матрицы стремится к нулю, то рассматриваемая в работе d -мерная система вырождается в d' -мерную неупорядоченную решетку. Легко показать, что в пределе $W_V \rightarrow 0$ ($\alpha \rightarrow \infty$) условие самосогласования (18) принимает вид, характерный для d' -мерной системы [7].

В заключение сделаем некоторые замечания по поводу точности приближения эффективной среды, использованного в настоящей работе. Напомним, что для вычисления долговременной асимптотики среднеквадратичного смещения $\langle\langle x^2 \rangle\rangle$ (10) достаточно знать лишь статическую эффективную вероятность перехода между узлами пнтерфейса. В то же время в работе [3] показано, что приближение эффективной среды для однородно-неупорядоченных систем позволяет получить по крайней мере два точных слагаемых в низкочастотном разложении функции $W_E(\omega)$. При этом учитываются все траектории блужданий, кроме самопересекающихся на каждом узле [10]. Вес таких самопересекающихся траекторий невелик, чем и объясняется достаточно высокая точность приближения [3, 10]. В нашем случае область неупорядоченности (дефект) имеет низкую размерность по сравнению с упорядоченной матрицей, поэтому вклад всюду самопересекающихся на дефекте траекторий будет еще меньше. Следовательно, точность приближения эффективной среды в нашем случае должна быть не хуже (скорее, лучше), чем для однородно-неупорядоченных сред.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Alexander S., Bernasconi J., Schneider W. R., Orbach R. // Rev. Mod. Phys. 1981. V. 53. N 2. P. 175—198.
- [2] Böttger H., Bryksin V. V. // Phys. St. Sol. (b). 1982. V. 113. N 1. P. 9—49.
- [3] Haus J. W., Kehr K. W. // Phys. Rep. 1987. V. 150. N 5/6. P. 263—416.
- [4] Odagaki T., Lax M. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. N 9. P. 5284—5294.
- [5] Webman I. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. N 21. P. 1496—1499.
- [6] Kirkpatrick S. // Rev. Mod. Phys. 1973. V. 45. N 4. P. 574—588.
- [7] Брановицкий И. С., Кохтев С. А. // Препринт МИФИ № 023-89. М., 1989. 24 с.
- [8] Odagaki T., Lax M., Puri A. // Phys. Rev. B. 1983. V. 28. N 5. P. 2755—2765.
- [9] Benoist P., Martin G. // Thin Sol. Films. 1975. V. 25. N 2. P. 181—197.
- [10] Овчинников А. А., Пронин К. А. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 3. С. 921—936.

Московский инженерно-физический институт
Москва

Поступило в Редакцию
24 марта 1989 г.
В окончательной редакции
23 августа 1989 г.