ЖЭТФ, 1999, том 115, вып. 3, стр. 1016–1023

О ДРЕЙФЕ ПРИ СЛУЧАЙНОМ БЛУЖДАНИИ ПО САМОПОДОБНЫМ КЛАСТЕРАМ

*В. Е. Архинчеев**

Бурятский научный центр
Сибирского отделения Российской академии наук
670047, Улан-Удэ, Россия

Поступила в редакцию 2 июня 1998 г.,
после переработки 28 августа 1998 г.

Исследована связь между диффузией и проводимостью при блуждании частицы посредством прыжков Леви. Показано, что из-за необычного характера прыжков Леви подвижность частицы оказывается нелинейной функцией электрического поля в сколь угодно слабых полях. Рассмотрен переход к обычной диффузии путем введения конечного смещения на каждом шаге.

1. ВВЕДЕНИЕ

Классическая диффузия, когда диффундирующая частица блуждает только по ближайшим соседям, достаточно хорошо изучена, и разработаны различные методы ее исследований. Менее известными и исследованными являются случайные блуждания, когда броуновские частицы диффундируют не только по ближайшим соседям. К такому классу диффузионных задач относятся случайные блуждания посредством прыжков Леви. Особенностью прыжков Леви является возможность частицы на каждом шаге смещаться на сколь угодно большие расстояния, так что среднеквадратичное смещение за единичный промежуток времени оказывается бесконечным [1]. Численное моделирование диффузии посредством прыжков Леви показало, что посещенные во время диффузии точки объединяются в кластеры, хорошо разделенные в пространстве. При более подробном рассмотрении оказывается, что каждый из кластеров, в свою очередь, состоит из совокупности кластеров. Таким образом, образуется иерархическая структура из самоподобных кластеров [2]. Следовательно, диффузия Леви представляет случайное блуждание по самоподобным кластерам. Функция распределения вероятности в фурье-представлении имеет вид

$$P(k,t) = \exp(-A|k|^{\mu}t), \tag{1}$$

где A и μ — положительные величины, $1 < \mu < 2$. Такие распределения называются распределениями Леви. Более подробно о полетах Леви см. также в [3].

Исследование диффузии Леви представляет как самостоятельный интерес — микроскопическая модель с необычной диффузией, — так и в связи с возможным приложением к задачам прыжковой проводимости в неупорядоченных средах [4], когда вероятность совершить прыжок и его длина не скоррелированы между собой.

* E-mail: varkin@bsc.buriatia.ru

Целью настоящей работы является исследование связи между диффузией и проводимостью при диффузии Леви. В случае обычной диффузии и линейного отклика (закона Ома) она известна как соотношение Эйнштейна. Однако, каким оно будет в общем случае, заранее не очевидно. Ниже проведено обобщение на случай прыжков Леви и показано, что при диффузии Леви дрейфовая скорость частицы оказывается нелинейной функцией электрического поля:

$$V \propto E^{\mu-1}. \tag{2}$$

Подчеркнем, что эта нелинейность имеет место в сколь угодно слабых полях и является следствием необычного характера диффузии. Степень нелинейности описывается критическим индексом μ прыжков Леви. Иными словами, закон Ома (линейный отклик на поле) является следствием обычного характера диффузии, при ином характере диффузии — при прыжках Леви — закон Ома не выполняется. Наиболее наглядно это видно, когда наряду с прыжками Леви частица может также диффундировать обычным образом. Тогда в соответствии с двумя предельными способами поведения для случайного блуждания скорость частицы также имеет два асимптотических режима: линейный и нелинейный. Дана скэйлинговая интерпретация полученных результатов. Частично результаты данной статьи были опубликованы в коротком сообщении [5].

Нелинейность функции (2) можно также пояснить следующим образом. Из уравнения (1) с учетом полевого тока в обычном виде легко получить уравнение для диффузии по самоподобным кластерам в электрическом поле в виде уравнения непрерывности:

$$\left[\partial/\partial t + \left(A|k|^{\mu} + ikV\right)\right] N(k,t) = 0. \tag{3}$$

Здесь $N(k,t)$ — плотность диффундирующих частиц в фурье-представлении, ток имеет диффузионную и полевую составляющие, полевой ток $J = NV$ имеет обычный вид.

Далее воспользуемся известными рассуждениями Эйнштейна. В равновесии диффузионный ток J_d компенсируется полевым J_f, а функция распределения должна иметь больцмановский вид:

$$\begin{aligned} &J_d + J_f = 0, \\ &N = \exp(-U/kT), \end{aligned} \tag{4}$$

где U — потенциальная энергия.

Воспользовавшись определением производной дробного порядка в виде ряда [6],

$$|k|^{\mu} = \lim_{\varepsilon\to 0}(\Delta^2+\varepsilon)^{\mu} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{\mu}\left(\frac{\Delta}{\varepsilon}\right)^n, \tag{5}$$

получим общее выражение для дрейфовой скорости:

$$\mathbf{V} = \exp\left(\frac{U}{kT}\right)\lim_{\varepsilon\to 0}(\Delta^2+\varepsilon)^{(\mu-2)/4}\nabla\exp\left(-\frac{U}{kT}\right). \tag{6}$$

Для однородного электрического поля $U = -qEx$ получим результат (2).

2. ДИСКРЕТНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРЫЖКОВ ЛЕВИ

Рассмотрим одномерный дискретный аналог прыжков Леви [1]. Обозначим вероятность частицы оказаться на l-ом узле после n шагов через $P_n(l)$, а распределение вероятности прыжков по длинам — через $f(l)$:

$$P_{n+1}(l) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f(l-m)P_n(m). \tag{7}$$

В качестве функции $f(l)$ выберем

$$f(l) = \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n}(\delta_{l,-b^n} + \delta_{l,b^n}), \tag{8}$$

где $\delta_{n,m}$ — символ Кронекера. Тогда структурная функция для такого случайного блуждания есть

$$\lambda(k) = \int f(l)\exp(ikl)dl = \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n}\cos(kb^n). \tag{9}$$

Заметим также, что структурная функция $\lambda(k)$ удовлетворяет функциональному уравнению

$$\lambda(k) = a\lambda(kb) + \cos k. \tag{10}$$

Следовательно, при $k \to 0$ она должна вести себя степенным образом с показателем $\mu = \ln a/\ln b$. Неаналитическое поведение вида $|k|^\mu$ при $k \to 0$ с показателем μ можно получить посредством преобразования Меллина или с помощью формулы суммирования рядов Пуассона. Подробнее см. в [1].

Введем в рассмотрение случайного блуждания по самоподобным кластерам анизотропию. В силу специфики прыжков Леви частица за один шаг может смещаться на любое расстояние b^n, поэтому малая анизотропия $1+\alpha$ с $\alpha = qEs/kT$ при смещении на малое расстояние s оказывается экспоненциально большой на больших расстояниях b^n. Поскольку при каждом шаге диффундирующая частица покидает узел, сумма вероятностей движения по полю, W_+, и против поля, W_-, должна равняться единице: $W_+ + W_- = 1$. Отсюда получим выражения для вероятностей движения по полю и против поля:

$$W_\pm = (1\pm\alpha)^{b^n} \Big/ \left[(1+\alpha)^{b^n} + (1-\alpha)^{b^n}\right]. \tag{11}$$

Следовательно, структурная функция $\lambda(k;E)$ при диффузии посредством прыжков Леви в электрическом поле имеет вид

$$2\lambda(k;E) = \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n}\left[\cos(kb^n) + i\sin(kb^n)(W_+ - W_-)\right]. \tag{12}$$

Как и при обычной диффузии, второе слагаемое при $k \to 0$ содержит дрейфовую скорость:

$$V = i\frac{\partial\lambda(k;E)}{\partial t}\bigg|_{k\to 0} = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{b}{a}\right)^n \frac{(1+\alpha)^{b^n} - (1-\alpha)^{b^n}}{(1+\alpha)^{b^n} + (1-\alpha)^{b^n}} \approx \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{b}{a}\right)^n \operatorname{th}(\alpha b^n). \tag{13}$$

Легко также видеть, что дрейфовая скорость удовлетворяет функциональному уравнению:

$$V(\alpha) = \frac{b}{a} V(\alpha b) + \operatorname{cth} \alpha. \tag{14}$$

Следовательно, в сколь угодно слабых полях скорость должна зависеть от электрического поля степенным образом с показателем $\mu - 1$. Для точного вычисления воспользуемся формулой Пуассона:

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) = \frac{1}{2} f(0) + \int_{0}^{\infty} f(t) dt + 2 \sum_{m=1}^{\infty} f(t) \cos(2\pi m t).$$

В нашем случае

$$f(t) = (b/a)^t \operatorname{th}(\alpha b^t).$$

Сделав замены $t' = t \ln b$ и $z = \exp t'$, получим $f(z) = z^{-\mu} \operatorname{th}(\alpha z)$. Следовательно,

$$V(\alpha) = \frac{\alpha}{2} + \alpha^{\mu-1} \left[\sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{1}^{\infty} \operatorname{th}(z) z^{-\gamma_m} dz + \int_{0}^{\alpha} \operatorname{th}(z) z^{-\gamma_m} dz \right], \tag{15}$$

где $\gamma_m = \mu + 2\pi m i / \ln b$.

Нетрудно видеть, что второе слагаемое в скобках в (15) мало по сравнению с первым по параметру α. Таким образом, в сколь угодно слабых электрических полях получаем для скорости нелинейную по электрическому полю зависимость (2). Отметим также, что как неаналитическое поведение структурной функции при $k \to 0$, так и нелинейная зависимость скорости от электрического поля в сколь угодно слабых полях являются асимптотическими.

3. КОНТИНУАЛЬНЫЙ ПРЕДЕЛ ПРЫЖКОВ ЛЕВИ

Рассмотрим непрерывное распределение по длинам прыжков и найдем скорость частицы в электрическом поле в этом случае. При прыжках Леви в континуальном пределе функция распределения по длинам имеет степенной вид

$$f(L) \propto 1/L^{\mu+1} \tag{16}$$

и вероятность частицы оказаться в точке x после n шагов определяется интегральным уравнением

$$P_{n+1}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{P_n(y) \partial y}{|x-y|^{\mu+1}}. \tag{17}$$

После несложных преобразований его можно представить в виде

$$P_{n+1}(x) = \int_{0}^{\infty} [P_n(x+y) + P_n(x-y)] \frac{\partial y}{|x-y|^{\mu+1}}. \tag{18}$$

Введем в рассмотрение анизотропию при блуждании со степенным распределением по длинам прыжков по аналогии с дискретным случаем (11) с заменой длины b^n на $|x-y|$. Используя (11) в континуальном пределе и (18), нетрудно получить уравнение для плотности частиц в электрическом поле:

$$P_{n+1}(x) = \int_0^\infty \frac{\left[(1+\alpha)^t P_n(x+y) + (1-\alpha)^t P_n(x-y)\right] dy}{\left[(1+\alpha)^t + (1-\alpha)^t\right] |x-y|^{\mu+1}}. \tag{19}$$

Разложив функции $P_n(x \pm y)$ в ряд Тейлора и выделив четные и нечетные степени t, получим

$$P_{n+1}(x) = \int_0^\infty \sum_{m=0}^\infty \frac{\partial^{2m} P_n(x)}{\partial x^{2m}} \frac{y^{2m} dy}{|x-y|^{\mu+1}} + \\ + \int_0^\infty \sum_{m=0}^\infty \frac{\partial^{2m+1} P_n(x)}{\partial x^{2m+1}} \frac{y^{2m+1}\left[(1+\alpha)^t - (1-\alpha)^t\right] \partial y}{\left[(1+\alpha)^t + (1-\alpha)^t\right] |x-y|^{\mu+1}}. \tag{20}$$

Первое слагаемое в правой части уравнения (20) соответствует диффузионному вкладу, а второе содержит вклад от полевого тока. Соответственно, получим выражение для полевого тока:

$$J \propto \int_0^\infty \sum_{m=0}^\infty \frac{\partial^{2m} P_n(x)}{\partial x^{2m}} y^{2m-\mu}\, \mathrm{th}(\alpha y) \partial y. \tag{21}$$

Введя переменную $z = \alpha y$ и приведя выражение (21) к безразмерному виду, получим в сколь угодно слабых полях $\alpha \to 0$ искомую нелинейную зависимость тока от поля (2).

4. ПЕРЕХОД ОТ ОБЫЧНОЙ ДИФФУЗИИ К ДИФФУЗИИ ЛЕВИ

Ниже наряду с прыжками Леви также будет учтена обычная диффузия и рассмотрен переход к линейной зависимости скорости от электрического поля вследствие обычной диффузии. Наиболее просто это сделать путем введения конечной длины прыжка ξ на каждом шаге. Получится случайное блуждание, в котором обычная диффузия перемежается прыжками Леви. Однако из-за суперлинейной зависимости среднеквадратичного смещения от времени для диффузии Леви на малых масштабах (временах) основной вклад в случайное блуждание будет давать обычная диффузия, и только на больших временах смещение будет определяться в основном прыжками Леви. Соответственно, функция распределения прыжков по длинам будет иметь вид

$$f(l) = \sum_{n=0}^\infty a^{-n} \left[\delta_{l,-(b^n+\xi)} + \delta_{l,(b^n+\xi)}\right]. \tag{22}$$

Следовательно, структурная функция $\lambda(k,\xi)$ будет равна:

$$\lambda(k,\xi) = \sum_{n=0}^\infty a^{-n} \cos(kb^n + k\xi). \tag{23}$$

В пределе малых длин $b \to 0$ она переходит в выражение, соответствующее обычной диффузии:

$$\lim_{b\to 0} \lambda(k,\xi) = (a-l)\cos(k\xi)/a. \tag{24}$$

Анизотропия случайного блуждания вводится вышеописанным способом с заменой длины прыжка b^n на величину $b^n + \xi$. Таким образом, структурная функция $\lambda(k,\xi;\alpha)$ в электрическом поле при конечной длине прыжков имеет вид

$$\lambda(k,\xi;\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} a^{-n}\left[\cos(kb^n + k\xi) + i\sin(kb^n + k\xi)(W_+ - W_-)\right]. \tag{25}$$

Соответственно, для скорости получим выражение

$$V = i\frac{\partial\lambda(k;E)}{\partial t}\bigg|_{k\to 0} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{b^n+\xi}{a^n}\,\mathrm{th}(\alpha b^n + \alpha\xi). \tag{26}$$

Суммирование проведем методом Пуассона. Нетрудно видеть, что скорость оказывается нелинейной по полю (2) в сколь угодно слабых полях ($qE\xi/kT \ll 1$) и линейной в достаточно сильных полях ($qE\xi/kT \gg 1$):

$$V \propto E\xi^{2-\mu}. \tag{27}$$

Таким образом, скорость частицы в электрическом поле имеет два асимптотических предела в соответствии с двумя режимами диффузии: прыжки Леви и обычная диффузия.

Полученный результат для подвижности частиц η можно представить в скэйлинговом виде

$$\eta \propto \xi^{2-\mu} f(qE\xi/kT), \tag{28}$$

где скэйлинговая функция $f(x)$ имеет следующие асимптотики:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x \ll 1, \\ x^{\mu-2}, & x \gg 1. \end{cases} \tag{29}$$

На малых масштабах, где преобладает обычная диффузия ($L_E \ll \xi$), подвижность частиц зависит только от длины однородности ξ, на больших масштабах, где основными являются прыжки Леви ($L_E \gg \xi$), подвижность перестает зависеть от длины однородности и становится функцией полевого размера L_E с тем же показателем. Другими словами, в таких полях подвижность «забывает» о масштабе однородности и начинает нелинейным образом зависеть от электрического поля.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследованию нелинейных свойств неоднородных материалов посвящено значительное количество теоретических и экспериментальных работ [7–12]. Как правило, в теоретических работах используется разложение тока по степеням электрического поля с учетом кубической нелинейности:

$$J = \sigma E + \chi |E|^2 E + \ldots \tag{30}$$

Полученные нами результаты существенно отличаются от результатов этих исследований. В рамках микроскопической модели диффузии Леви показано, что при прыжках Леви ток оказывается существенно нелинейной функцией электрического поля из-за необычного характера диффузии в пространстве, т. е. нет вообще линейного члена в разложении тока по полю (30). Рассмотрен переход от обычной диффузии к прыжкам Леви путем введения конечной длины смещения ξ на каждом шаге. Показано, что в задаче возникает новый параметр $qE\xi/kT$, величина которого и определяет нелинейное или линейное поведение подвижности частиц. Другими словами, в задачах диффузии в электрическом поле возникает новая длина L_E, которая задается внешним полем [13]:

$$L_E = kT/qE. \tag{31}$$

Чтобы понять смысл этой величины рассмотрим обычное случайное блуждание во внешнем электрическом поле. Мысленно разобьем среду на блоки порядка длины L_E и проследим поведение частицы внутри блока. С вероятностью порядка единицы частица выйдет из блока такого размера по полю, а против поля не пойдет. Другими словами, на размерах L_E направленное движение начинает преобладать над диффузионным. Это дает возможность оценить скорость частицы:

$$V = L_E/t_E, \tag{32}$$

где t_E — время диффузионного смещения на длину L_E. При обычной диффузии $t_E = L_E^2/D$, и снова получим известный результат Эйнштейна:

$$V = q^2DE/kT. \tag{33}$$

В случае прыжков Леви эти же оценки приводят к результату (2) и при наличии двух диффузионных пределов к формуле (29). Ранее зависимость вида (29) была предсказана в рамках феноменологического описания аномальной диффузии на перколяционных кластерах в приближении эффективной среды [6]. В качестве размера однородности выступал корреляционный радиус перколяционных кластеров. Отметим также, что аномальная диффузия на перколяционных кластерах в отличие от прыжков Леви носит сублинейный характер, поэтому при смешанном случайном блуждании (аномальная + обычная диффузия) основной вклад на малых временах вносит аномальная, а на больших — обычная. Попытка обнаружить нелинейность путем численного моделирования дрейфа на кластерах не удалась [14], поскольку само электрическое поле в неоднородных средах в искомой области полей индуцирует ловушки. Ими оказываются участки токовых путей, направленные против электрического поля. Поэтому вопрос о нелинейной зависимости скорости от электрического поля вследствие аномального характера диффузии оставался открытым. В данной работе нелинейная зависимость скорости от электрического поля впервые установлена для модели диффузии посредством прыжков Леви. Кроме того, вывод о нелинейном поведении скорости вследствие необычного характера зависимости (2) был недавно подтвержден при численном моделировании дрейфа частиц при диффузии Леви [15].

Что касается экспериментальных результатов, то имеется достаточно много работ, где наблюдалась нелинейная степенная зависимость тока в неоднородных материалах с показателями близкими к индексу аномальной диффузии и этому давались различные объяснения (см., например, [11, 12]). На наш взгляд, нелинейное поведение действительно должно наблюдаться, и существует универсальное объяснение нелинейного поведения вследствие аномального характера случайного блуждания в неоднородных средах. Однако вопрос сопоставления с экспериментальными результатами требует дальнейшего исследования.

Данная работа инициирована многочисленными интересными дискуссиями с Э. Г. Батыевым и Э. М. Баскиным. Автор также выражает признательность А. А. Снарскому за любезно предоставленные оттиски.

Литература

1. B. D. Hughes, M. F. Shlesinger, and E. W. Montroll, Proc. Natl. Acad. Sci. (USA) **78**, 3287 (1981).
2. B. Mandelbrot, *Fractals: Form, Chance and Dimension*, Freeman, San-Francisco (1977).
3. G. Zumofen and J. Klafter, Physica D **69**, 436 (1993); Phys. Rev. E **47**, 851 (1993).
4. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, *Электронные свойства легированных полупроводников*, Наука, Москва (1979)
5. В. Е. Архинчеев, Письма в ЖЭТФ **67**, 518 (1998).
6. V. E. Arkhincheev, E. M. Baskin, and E. G. Batyev, J. Non-Cryst. Sol. **90**, 21 (1987).
7. R. Blumenfeld and D. J. Bergman, Phys. Rev. B **43**, 13682 (1991). P. M. Hui, Phys. Rev. B **49**, 15344 (1994).
8. А. А. Снарский, С. И. Буда, ЖТФ **68**(6), 5 (1998).
9. А. М. Сатанин, В. В. Скузоваткин, С. В. Хорьков, ЖЭТФ **112**, 643 (1997).
10. А. М. Дыхне, В. В. Зосимов, С. А. Рыбак, ДАН **345**, 467 (1995).
11. H. Overhoff and W. Beyer, Phil. Mag. B **43**, 433 (1981).
12. J. Benjamin, C. Adkins, and J. van Cleve, J. Phys. C **17**, 559 (1981).
13. Э. Г. Батыев, частное сообщение (1987).
14. В. Е. Архинчеев, Э. М. Баскин, ЖЭТФ **100**, 292 (1991).
15. V. E. Arkhincheev and A. V. Nomoev, submitted to Physica A (1998).