

## СУБДИФфуЗИЯ В ЗАВИСЯЩЕМ ОТ ВРЕМЕНИ СИЛОВОМ ПОЛЕ

*В. П. Шкилев\**

*Институт химии поверхности Национальной академии наук Украины  
03164, Киев, Украина*

Поступила в редакцию 2 августа 2011 г.

В рамках модели случайных барьеров с использованием приближения среднего поля выведено уравнение, описывающее субдиффузию частиц во внешнем силовом поле, изменяющемся со временем. Выведенное уравнение предсказывает зависимость проводимости от частоты и в этом отношении согласуется с экспериментом. Показано, что отклик системы на внешнее возмущение существенным образом зависит от структуры неоднородной среды.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В последние несколько десятилетий пристальное внимание уделяется теоретическому изучению субдиффузионного движения частиц, наблюдаемого в неупорядоченных средах [1–4]. Важное значение с точки зрения практических приложений имеет вывод макроскопических уравнений, описывающих различные физико-химические процессы, контролируемые субдиффузией. Несмотря на существенный прогресс в этой области, остаются нерешенными некоторые принципиальные вопросы. Один из таких вопросов — какой вид должно иметь уравнение субдиффузионного переноса, если диффундирующие частицы подвергаются действию зависящего от времени силового поля. Имеется ряд работ, посвященных рассмотрению этой проблемы [5–11]. К настоящему времени установлено, что в рамках модели случайных блужданий с непрерывным временем (СБНВ) правильное уравнение линейного отклика имеет следующий вид [7–10]:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = K_\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{1-\alpha} \rho(x, t) - \mu_\alpha \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) D^{1-\alpha} \rho(x, t)]. \quad (1)$$

Здесь  $K_\alpha$  — обобщенный коэффициент диффузии,  $\mu_\alpha$  — обобщенная подвижность,  $F(x, t)$  — сила. Символ  $D^{1-\alpha}$  обозначает дробную производную Римана–Лиувилля:

\*E-mail: shkilev@ukr.net

$$D^{1-\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{1-\alpha}} d\tau, \quad (2)$$

где  $\alpha$  — параметр, удовлетворяющий условиям  $0 < \alpha < 1$ .

Из уравнения (1) следует, что отклик частиц на периодическое возмущение с нулевым средним будет асимптотически затухать [5], другими словами, это уравнение предсказывает независящую от частоты нулевую проводимость среды. Однако эксперименты показывают, что проводимость неупорядоченных сред с аномальной диффузией отлична от нуля, причем она существенно зависит от частоты приложенного возмущения [12–14].

Неспособность модели СБНВ описывать зависимость проводимости от частоты объясняется тем, что в отсутствие внешнего поля в этой модели скачки частиц во всех направлениях равновероятны [15]. Чтобы получить частотную зависимость, необходимо использовать модель, содержащую корреляции [15]. В данной работе уравнение субдиффузионного переноса выводится в рамках модели случайных барьеров, являющейся простейшей моделью с корреляциями. Полученное с использованием приближения среднего поля уравнение

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{h^2}{2} \int_0^t \Theta(t-\tau) \times \left[ \frac{\partial^2 \rho(x, \tau)}{\partial x^2} - \frac{1}{kT} \frac{\partial F(x, \tau) \rho(x, \tau)}{\partial x} \right] d\tau \quad (3)$$

при подходящем выборе функции памяти  $\Theta(t)$  может количественно описывать экспериментальные зависимости проводимости от частоты.

Частным случаем уравнения (3) является уравнение

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = D^{1-\alpha} \left[ K_\alpha \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} - \mu_\alpha \frac{\partial F(x, t) \rho(x, t)}{\partial x} \right], \quad (4)$$

которое отличается от уравнения (1) расположением оператора дробной производной. В некоторых работах данное уравнение использовалось *ad hoc* при решении конкретных задач [16, 17], однако авторы работ [6, 7] в результате анализа, проведенного в рамках модели СБНВ, пришли к заключению, что оно лишено физического смысла. Такая же оценка этого уравнения содержится в работе [8]. В работе [9] это уравнение было выведено в рамках модели СБНВ, но в ходе вывода было использовано сомнительное предположение, что при совершении диффузионного скачка частица реагирует не на силу, действующую на нее в момент скачка, а на силу, действовавшую на нее в начале периода ожидания, предшествующего скачку. Предложенный в настоящей работе вывод уравнения (4) показывает, что его правильная интерпретация возможна в рамках модели, содержащей корреляции.

## 2. ВЫВОД УРАВНЕНИЯ СУВДИФФУЗИОННОГО ПЕРЕНОСА В РАМКАХ МОДЕЛИ СЛУЧАЙНЫХ БАРЬЕРОВ

Для простоты будем рассматривать одномерный случай, хотя все рассуждения без существенных изменений могут быть перенесены и на случаи других размерностей. Если скачки совершаются только в близлежащие узлы, то в одномерной решеточной модели основное кинетическое уравнение запишется следующим образом:

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = W_{n,n-1} P_{n-1}(t) - W_{n-1,n} P_n(t) + W_{n,n+1} P_{n+1}(t) - W_{n+1,n} P_n(t). \quad (5)$$

Здесь  $P_n(t)$  — вероятность того, что в момент времени  $t$  частица находится в узле  $n$ ;  $W_{n-1,n}$  — скорость перехода из узла  $n$  в узел  $n-1$ . Модель случайных барьеров характеризуется симметрией скоростей переходов:  $W_{n-1,n} = W_{n,n-1} = \Gamma_n$ . Будем рассматривать «классический» случай, когда скачки являются термически активированными:

$$\Gamma_n = \nu_0 \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right),$$

где  $E_n$  — высота энергетического барьера, расположенного между узлами  $n$  и  $n-1$ . Энергии  $E_n$  предполагаются одинаково распределенными независимыми случайными величинами.

При наличии внешнего силового поля скорости переходов в уравнении (5) изменяются. Если расстояние между узлами равно  $h$  и если потенциальные барьеры располагаются посередине между узлами, то скорость перехода из узла  $n$  в узел  $n-1$  выразится как

$$W_{n-1,n} = \Gamma_n \exp\left(\frac{U(x_n) - U(x_n - 0.5h)}{kT}\right), \quad (6)$$

где  $U$  — потенциал внешнего поля,  $x_n$  — координата  $n$ -го узла. Скорость перехода из узла  $n-1$  в узел  $n$  запишется аналогично:

$$W_{n,n-1} = \Gamma_n \exp\left(\frac{U(x_{n-1}) - U(x_{n-1} + 0.5h)}{kT}\right). \quad (7)$$

В приближении линейного отклика соотношения (6), (7) приводятся к виду

$$W_{n-1,n} = \Gamma_n (1 - \gamma F_n), \quad (8)$$

$$W_{n,n-1} = \Gamma_n (1 + \gamma F_{n-1}), \quad (9)$$

где  $\gamma = h/2kT$ ,

$$F_n = -\frac{\partial U}{\partial x}(x_n)$$

— значение силы в точке  $x_n$ . Подставляя эти и аналогичные им выражения в уравнение (5), получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_n}{\partial t} = & \Gamma_n (P_{n-1} - P_n) + \Gamma_{n+1} (P_{n+1} - P_n) + \\ & + \gamma [\Gamma_n (F_{n-1} P_{n-1} + F_n P_n) - \\ & - \Gamma_{n+1} (F_{n+1} P_{n+1} + F_n P_n)]. \quad (10) \end{aligned}$$

Теперь нужно усреднить это уравнение. Обычно в аналогичной ситуации целью усреднения считается нахождение зависящей от частоты проводимости. Однако знания проводимости недостаточно для решения задач с произвольными начальными и граничными условиями. Для этого необходимо иметь уравнение, которому должна удовлетворять усредненная вероятность. Именно вывод такого уравнения является целью данной работы.

Поскольку выполнить усреднение строго не удается, необходимо вводить приближение. При вычислении проводимости обычно используют специально приспособленное для этой цели приближение эф-

фективной среды. Но получить усредненное уравнение с помощью этого приближения не удастся, поэтому приходится прибегать к более простому и более грубому приближению. В данной работе используется способ усреднения, ранее примененный в рамках модели случайных ловушек в работах [18, 19]. Суть этого способа состоит в том, что вся совокупность конфигураций разбивается на части и усреднение проводится по каждой части конфигураций отдельно. В результате получается система уравнений относительно парциальных вероятностей. Общая вероятность при этом представляется в виде суммы парциальных вероятностей. В отсутствие внешнего поля этот способ усреднения дает такой же результат, как и приближение Хартри, являющееся простейшим нетривиальным приближением. Преимущество этого способа усреднения состоит в том, что его можно использовать и в тех случаях, когда приближение Хартри не применимо, в частности, при наличии изменяющегося со временем силового поля.

Предположим, что энергия  $E_n$  может принимать дискретный ряд значений  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N$ <sup>1)</sup>. Выделим кластер, состоящий из узла  $n$ , расположенного в точке  $x$ , и двух барьеров  $E_n$  и  $E_{n+1}$ , отделяющих этот узел от соседних узлов. Усредним уравнение (10) по таким конфигурациям, для которых один из двух барьеров равен  $\varepsilon_i$ , а другой —  $\varepsilon_j$ . Средние значения произведений, фигурирующих в этом уравнении, представим в виде произведений средних значений множителей. Среднее значение вероятности в точке  $x$  обозначим через  $\rho_{ij}(x)$ , средние значения вероятности в соседних узлах заменим эффективными значениями  $\rho(x-h)$  и  $\rho(x+h)$ . Поскольку частоты  $\Gamma_n$  и  $\Gamma_{n+1}$  принимают два значения  $\nu_0 \exp(-\varepsilon_i/kT)$  и  $\nu_0 \exp(-\varepsilon_j/kT)$  с одинаковыми вероятностями, их средние значения будут равны  $\nu_{ij}/2$ , где

$$\nu_{ij} = \nu_0 \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT}\right) + \nu_0 \exp\left(-\frac{\varepsilon_j}{kT}\right). \quad (11)$$

Таким образом, усредненное уравнение, соответствующее кластеру с энергиями  $\varepsilon_i$  и  $\varepsilon_j$ , будет иметь вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{ij}(x, t)}{\partial t} = & -\nu_{ij} \rho_{ij}(x, t) + \\ & + \frac{\nu_{ij}}{2} [\rho(x-h, t) + \rho(x+h, t)] + \\ & + \frac{\nu_{ij}}{2} \gamma [F(x-h, t) \rho(x-h, t) - \\ & - F(x+h, t) \rho(x+h, t)]. \quad (12) \end{aligned}$$

Для упрощения обозначений пронумеруем все типы кластеров целыми числами от 1 до  $M = N^2$ . Тогда вместо двух индексов  $i$  и  $j$  будем иметь один:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i(x, t)}{\partial t} = & -\nu_i \rho_i(x, t) + \\ & + \frac{\nu_i}{2} [\rho(x-h, t) + \rho(x+h, t)] + \\ & + \frac{\nu_i}{2} \gamma [F(x-h, t) \rho(x-h, t) - \\ & - F(x+h, t) \rho(x+h, t)], \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (13) \end{aligned}$$

Разлагая функции  $\rho(x \pm h)$  и  $F(x \pm h) \rho(x \pm h)$  в ряды в окрестности точки  $x$  и удерживая в разложениях члены до второго порядка, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i(x, t)}{\partial t} = & -\nu_i \rho_i(x, t) + \\ & + \nu_i G(x, t), \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad (14) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} G(x, t) = & \rho(x, t) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} - \\ & - \frac{h^2}{2kT} \frac{\partial F(x, t) \rho(x, t)}{\partial x}. \quad (15) \end{aligned}$$

Условие самосогласованности модели состоит в равенстве эффективной вероятности и вероятности, усредненной по всем типам кластеров:

$$\rho = \sum_{i=1}^M \alpha_i \rho_i. \quad (16)$$

Здесь  $\alpha_i$  — доля кластеров  $i$ -го типа.

Умножая уравнения (14) на  $\alpha_i$  и суммируя по  $i$ , получим уравнение для усредненной вероятности:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = - \sum_{i=1}^M \alpha_i \nu_i \rho_i(x, t) + \bar{\nu} G(x, t), \quad (17)$$

где

$$\bar{\nu} = \sum_{i=1}^M \alpha_i \nu_i.$$

Чтобы исключить из уравнения (17) величины  $\rho_i(x, t)$ , совершим преобразование Лапласа в форме

$$f(s) = \int_0^\infty \exp(-st) f(t) dt$$

<sup>1)</sup> В рассматриваемой модели число различных значений энергии будет конечным, поскольку в элементарном физическом объеме (наименьшем объеме, усреднение по которому совпадает с усреднением по ансамблю) содержится конечное число узлов и конечное число барьеров. (Существование элементарного физического объема предполагается при переходе от уравнений с пространственными разностями к дифференциальным уравнениям.) Непрерывные распределения энергий могут использоваться только в качестве аппроксимации дискретных распределений.

над уравнениями (14) и (17). В результате получим

$$s\rho_i(x, s) - \rho^0(x) = -\nu_i\rho_i(x, s) + \nu_i G(x, s), \quad i = 1, 2, \dots, M, \quad (18)$$

$$s\rho(x, s) - \rho^0(x) = -\sum_{i=1}^N \alpha_i \nu_i \rho_i(x, s) + \bar{\nu} G(x, s), \quad (19)$$

где  $\rho^0(x)$  — значение вероятности в начальный момент времени. Оно будет одинаковым для всех типов кластеров, как при случайном распределении частиц, так и при равновесном распределении (это видно из уравнения (14)). Из уравнения (18) находим

$$\rho_i(x, s) = \frac{1}{s + \nu_i} \rho^0(x) + \frac{\nu_i}{s + \nu_i} G(x, s), \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (20)$$

Используя это соотношение, получаем

$$\begin{aligned} \bar{\nu} G(x, s) - \sum_{i=1}^M \alpha_i \nu_i \rho_i(x, s) &= \\ &= -\psi(s)\rho^0(x) + s\psi(s)G(x, s), \end{aligned} \quad (21)$$

где

$$\psi(s) = \sum_{i=1}^M \frac{\alpha_i \nu_i}{s + \nu_i}. \quad (22)$$

Умножение равенства (20) на  $\alpha_i$  и суммирование дает

$$\rho(x, s) = \frac{1 - \psi(s)}{s} \rho^0(x) + \psi(s)G(x, s). \quad (23)$$

Отсюда с использованием соотношения (15) находим, что

$$\begin{aligned} \rho(x, s) &= \frac{\rho^0(x)}{s} + \frac{\psi(s)}{1 - \psi(s)} \frac{h^2}{2} \times \\ &\times \left\{ \frac{\partial^2 \rho(x, s)}{\partial x^2} - \frac{1}{kT} \frac{\partial}{\partial x} L[F(x, t)\rho(x, t)] \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь  $L[F(x, t)\rho(x, t)]$  обозначает преобразование Лапласа выражения, заключенного в квадратные скобки. Подставляя выражения (21) и (24) в (19), приходим к уравнению относительно функции  $\rho(x, s)$ :

$$\begin{aligned} s\rho(x, s) - \rho^0(x) &= \frac{h^2}{2} \Theta(s) \times \\ &\times \left\{ \frac{\partial^2 \rho(x, s)}{\partial x^2} - \frac{1}{kT} \frac{\partial}{\partial x} L[F(x, t)\rho(x, t)] \right\}, \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$\Theta(s) = \frac{s\psi(s)}{1 - \psi(s)}$$

— функция памяти. Совершая обратное преобразование Лапласа, получаем окончательно

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} &= \frac{h^2}{2} \int_0^t \Theta(t - \tau) \times \\ &\times \left\{ \frac{\partial^2 \rho(x, \tau)}{\partial x^2} - \frac{1}{kT} \frac{\partial F(x, \tau)\rho(x, \tau)}{\partial x} \right\} d\tau. \end{aligned} \quad (26)$$

### 3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПРОВОДИМОСТИ

Если к образцу приложено однородное, изменяющееся по гармоническому закону электрическое поле

$$E = E_0 \exp(i\omega t), \quad (27)$$

то в пределе больших времен электрический ток также будет изменяться по гармоническому закону с той же частотой:

$$j = \sigma(\omega) E_0 \exp(i\omega t). \quad (28)$$

Используя определение плотности тока как произведения заряда частицы  $q$  на концентрацию частиц  $n$  и на среднюю скорость частиц  $V$ , представим удельную проводимость в виде

$$\sigma(\omega) = \frac{qnV}{E_0 \exp(i\omega t)}. \quad (29)$$

Среднюю скорость найдем с помощью уравнения (26), подставляя в него выражение для силы

$$F(t) = qE_0 \exp(i\omega t), \quad (30)$$

умножая на  $x$  и интегрируя по  $x$  от  $-\infty$  до  $\infty$ . Предполагая, что на бесконечности вероятность обращается в нуль вместе со своей первой производной, и учитывая, что вероятность нормирована на единицу, находим

$$\begin{aligned} V &= \frac{h^2 q E_0}{2kT} \int_0^t \Theta(t - \tau) \exp(i\omega \tau) d\tau = \\ &= \frac{h^2 q E_0 \exp(i\omega t)}{2kT} \int_0^t \Theta(\tau) \exp(-i\omega \tau) d\tau. \end{aligned} \quad (31)$$

В пределе больших времен последний интеграл равен преобразованию Лапласа функции  $\Theta(t)$  при переменной Лапласа  $s = i\omega$ . Таким образом, получаем следующее выражение для удельной проводимости:

$$\sigma(\omega) = \frac{h^2 q^2 n}{2kT} \frac{i\omega \psi(i\omega)}{1 - \psi(i\omega)}. \quad (32)$$

Ранее это выражение другим способом было получено в работе [20]. В этой работе использовалась флуктуационно-диссипационная теорема, которая связывает проводимость с автокорреляционной функцией скорости в состоянии равновесия в отсутствие внешнего поля. Авторы выразили автокорреляционную функцию через среднеквадратичное смещение частиц, а среднеквадратичное смещение вычислили в рамках модели СБНВ. При этом использовался тот факт, что в отсутствие внешнего поля модель случайных блужданий в неоднородной среде формально эквивалентна модели СБНВ. Функция  $\psi(t)$  в этой модели имеет смысл функции распределения времени ожидания. В работе [13] авторы предложили способ приближенного вычисления этой функции, приводящий к выражению

$$\psi(t) = \left\langle \sum_i W_i \exp \left( -t \sum_i W_i \right) \right\rangle. \quad (33)$$

Здесь суммирование ведется по всем параллельным каналам, через которые может уменьшаться вероятность заполнения некоторого узла. Усреднение проводится по всем возможным значениям этой суммы.

В работах [21, 22] было показано, что приближение (33) эквивалентно приближению Хартри. С другой стороны, сравнение выражений (33) и (22) показывает, что использованный в данной работе способ усреднения приводит к тому же самому результату и, следовательно, тоже эквивалентен приближению Хартри.

Соотношения (32), (33) использовались для вычисления проводимости в работах [13, 23]. В работе [13] было показано, что при определенных, достаточно реалистичных предположениях относительно скоростей переходов эти соотношения вполне удовлетворительно описывают экспериментальные данные. В работе [23] был использован феноменологический подход к нахождению функции  $\psi$ . В качестве распределения частоты  $\nu_i$  в соотношении (22) было взято не дискретное распределение  $\alpha_i$ , а непрерывное распределение

$$\alpha(\nu) = \frac{1}{\ln \nu_{max} - \ln \nu_{min}} \frac{1}{\nu}, \quad \nu_{min} < \nu < \nu_{max}. \quad (34)$$

Было показано, что такая простая модель также способна количественно описывать экспериментальные данные. Это означает, что, если распределение (34) использовать для нахождения функции памяти, фигурирующей в уравнении (26), то это уравнение будет согласовано с результатами экспериментов по зависимости проводимости от частоты.

Хотя подход, предложенный в работах [13, 20] позволяет получить выражение для проводимости, он ничего не говорит о том, какой модели неоднородной среды соответствует это выражение. Изначально предполагалось, что, поскольку любая модель неоднородности в результате конфигурационного усреднения сводится к модели СБНВ, оно должно быть справедливо для любой модели. Однако впоследствии выяснилось, что это не так (смотри дискуссию в работах [15, 21, 24, 25]). Выражение (32) справедливо лишь для такой модели, в которой случайное распределение частиц по различным участкам неоднородности одновременно является и равновесным распределением. Единственной такой моделью является модель случайных барьеров.

#### 4. ОТКЛИК НА ВНЕШНЕЕ ВОЗМУЩЕНИЕ В ВИДЕ ПРЯМОУГОЛЬНОГО ИМПУЛЬСА

Использованный в данной работе способ усреднения ранее использовался в работах [18, 19] в рамках модели случайных ловушек. Хотя субдиффузия в зависящем от времени силовом поле в этих работах не рассматривалась, соответствующий переносной член легко может быть включен в полученные там уравнения. Уравнение, аналогичное уравнению (26), в рамках модели случайных ловушек будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^t \Theta(t - \tau) \rho(x, \tau) d\tau - \frac{1}{kT} \frac{\partial}{\partial x} \left[ F(x, t) \int_0^t \Theta(t - \tau) \rho(x, \tau) d\tau \right] \right\}. \quad (35)$$

Функция памяти здесь имеет такой же вид, как и в модели случайных барьеров:

$$\Theta(s) = \frac{s\psi(s)}{1 - \psi(s)},$$

где

$$\psi(s) = \sum_{i=1}^M \frac{\alpha_i \nu_i}{s + \nu_i}$$

— функция распределения времени ожидания. В данном случае  $M$  — это число различных типов ловушек,  $\alpha_i$  — доля ловушек  $i$ -го типа,  $\nu_i$  — скорость, с которой частицы покидают ловушки  $i$ -го типа. Единственное отличие этого уравнения от уравнения (26) состоит в том, что сила располагается вне интеграла свертки. Отметим, что уравнение (1)

является частным случаем уравнения (35), соответствующим функции распределения времени ожидания вида

$$\psi(s) = \frac{1}{1 + (\tau_0 s)^\alpha}.$$

Сравним линейные отклики систем, описываемых уравнениями (35) и (26), на внешнее возмущение в виде прямоугольного импульса. Предположим, что сила величиной  $F$  включается в момент времени  $t_1$  и выключается в момент  $t_2$ . В качестве функции  $\psi(t)$  возьмем сумму двух экспонент:

$$\psi(t) = \alpha_1 \nu_1 \exp(-\nu_1 t) + \alpha_2 \nu_2 \exp(-\nu_2 t). \quad (36)$$

Соответствующая функция памяти запишется как

$$\Theta(t) = \frac{1}{\xi} \left[ a \delta(t) - \frac{a-1}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right], \quad (37)$$

где

$$\xi = \frac{\alpha_1}{\nu_1} + \frac{\alpha_2}{\nu_2}, \quad \tau = \frac{1}{\nu_1 \nu_2 \xi}, \quad a = \xi(\alpha_1 \nu_1 + \alpha_2 \nu_2).$$

Из этих выражений следует, что при фиксированном параметре  $\xi$  параметры  $\tau$  и  $a$  могут независимо изменяться соответственно в интервалах  $(0, \infty)$  и  $(1, \infty)$ . Подставляя выражения для силы и для функции памяти в уравнения (35) и (26), умножая на  $x$  и интегрируя по  $x$  от  $-\infty$  до  $\infty$ , найдем выражения для средней скорости частиц. В случае модели случайных ловушек получим

$$V_{trap}(t) = \frac{h^2 F}{2kT\xi} \times \begin{cases} 0, & t < t_1, \\ 1 + (a-1) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), & t_1 < t < t_2, \\ 0, & t > t_2. \end{cases} \quad (38)$$

В то же время в случае модели случайных барьеров будем иметь

$$V_{barr}(t) = \frac{h^2 F}{2kT\xi} \times \begin{cases} 0, & t < t_1, \\ 1 + (a-1) \exp\left(-\frac{t_1-t}{\tau}\right), & t_1 < t < t_2, \\ -(a-1) \left[ \exp\left(-\frac{t_2-t}{\tau}\right) - \exp\left(-\frac{t_1-t}{\tau}\right) \right], & t > t_2. \end{cases} \quad (39)$$

Сравнение выражений (38) и (39) показывает, что отклики двух систем отличаются качественно<sup>2)</sup>. В модели случайных ловушек отклик сосредоточен на том же временном интервале, что и сила, а в модели случайных барьеров отклик отличен от нуля и после прекращения действия силы. В модели случайных ловушек отклик имеет постоянный знак, а в модели случайных барьеров в момент времени  $t_2$  его знак меняется на противоположный. В модели случайных ловушек величина отклика и его форма зависят от момента времени  $t_1$ . В то же время в модели случайных барьеров отклик зависит только от разностей времен  $t - t_1$  и  $t - t_2$ , т. е. он инвариантен относительно сдвигов по времени.

Все эти различия легко объясняются. В модели случайных ловушек в отсутствие силы скачки частиц во всех направлениях равновероятны, поэтому после прекращения действия силы отклик исчезает. В модели случайных барьеров при включенной силе частицы будут скапливаться перед высокими барьерами, а после выключения силы будут смещаться в противоположном направлении, перескакивая через низкие барьеры. За счет этого возникает последствие с обратным знаком. В модели случайных ловушек отклик зависит от момента приложения силы из-за того, что в начальный момент времени частицы распределены по узлам разного типа случайным образом, а с течением времени стремятся распределиться равномерно. Поскольку их подвижность при случайном распределении более высока, отклик будет тем более сильным, чем раньше включается сила. В модели случайных барьеров случайное распределение одновременно является и равновесным, поэтому отклик не зависит от момента включения силы.

Приведенный пример показывает, что, хотя при выводе уравнений (36) и (26) использовалось довольно грубое приближение, эти уравнения правильно отражают свойства соответствующих им моделей случайных ловушек и случайных барьеров. С другой стороны, из этого примера видно, что отклик системы на внешнее возмущение существенным образом зависит от структуры неоднородной среды, поэтому таких простых моделей, как модель случайных ловушек и модель случайных барьеров, недостаточно для описания реальных неоднородных сред, в которых могут варьироваться как энергии узлов, так и энергии разделяющих их барьеров.

<sup>2)</sup> Аналогичные результаты для уравнений с дробными производными были получены в работах [26, 27].

## ЛИТЕРАТУРА

1. J.-P. Bouchaud and A. Georges, *Phys. Rep.* **195**, 127 (1990).
2. M. B. Isichenko, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 961 (1992).
3. *Anomalous Transport: Foundations and Applications*, ed. by R. Klages, G. Radons, and I. M. Sokolov, Wiley-VCH, Weinheim (2007).
4. V. Mendez, S. Fedotov, and Horsthemke, *Reaction-Transport Systems: Mesoscopic Foundation, Fronts, and Spatial Instabilities*, Springer-Verlag, Berlin (2010).
5. I. M. Sokolov and J. Klafter, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 140602 (2006).
6. E. Heinsalu, M. Patriarca, I. Goychuk, and P. Hanggi, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 120602 (2007).
7. E. Heinsalu, M. Patriarca, I. Goychuk, and P. Hanggi, *Phys. Rev. E* **79**, 041137 (2009).
8. S. Eule and R. Fridrich, arXiv:cond-mat/0902.2936.
9. B. I. Henry, T. A. M. Langlands, and P. Straka, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 170602 (2010).
10. А. И. Шушин, В. П. Сакун, *Хим. физика* **29**(2), 55 (2010).
11. M. Magdziarz, A. Weron, and J. Klafter, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 210601 (2008).
12. И. П. Звягин, *Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках*, Изд-во МГУ, Москва (1984).
13. H. Scher and M. Lax, *Phys. Rev. B* **7**, 4502 (1973).
14. D. L. Sidebottom, P. F. Green, and R. K. Brow, *Phys. Rev. B* **51**, 2770 (1995).
15. J. C. Dyre, *J. Non-Crist. Sol.* **135**, 219 (1991).
16. J.-L. Dejardin and J. Jadzyn, *J. Chem. Phys.* **123**, 174502 (2005).
17. M. Y. Yim and K. L. Liu, *Physica A* **369**, 329 (2006).
18. В. П. Шкилев, *ЖЭТФ* **135**, 403 (2009).
19. В. П. Шкилев, *ЖЭТФ* **136**, 984 (2009).
20. H. Scher and M. Lax, *Phys. Rev. B* **7**, 4491 (1973).
21. M. Lax and H. Scher, *Phys. Rev. Lett.* **39**, 751 (1977).
22. T. Odagaki and M. Lax, *Phys. Rev. B* **24**, 5284 (1981).
23. J. C. Dyre, *Phys. Lett. A* **108**, 457 (1985).
24. J. K. E. Tunaley, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 1037 (1974).
25. J. W. Haus and K. W. Kehr, *Phys. Rep.* **150**, 264 (1987).
26. I. M. Sokolov, A. Blumen, and J. Klafter, *Europhys. Lett.* **56**, 175 (2001).
27. I. M. Sokolov, A. Blumen, and J. Klafter, *Physica A* **302**, 208 (2001).