ЖЭТФ, 2017, том 151, вып. 2, стр. 322–325

ВЛИЯНИЕ ДРЕЙФА НА ВРЕМЕННУЮ АСИМПТОТИКУ ВЕРОЯТНОСТИ ВЫЖИВАНИЯ ЧАСТИЦ В СРЕДАХ С ПОГЛОЩАЮЩИМИ ЛОВУШКАМИ

В. Е. Архинчеев [*]

Бурятский государственный университет
670000, Улан-Удэ, Россия

ФГБНУ Бурятский НИИСХ ФАНО России
670045, Улан-Удэ, Россия

Поступила в редакцию 22 апреля 2016 г.

Установлена новая асимптотика вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками. Она обусловлена дрейфовым механизмом переноса частиц в средах с ловушками. Показано, что на достаточно больших временах именно этот дрейфовый механизм определяет новое временное поведение вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками.

DOI: 10.7868/S0044451017020109

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема диффузии частиц в средах с поглощающими ловушками изучалась во многих работах [1–3]. Интерес обусловлен как различными приложениями, так и аналогией с проблемой плотности состояний в неупорядоченных средах [4], а также возможными новыми особенностями в транспорте частиц [5].

В работе [6] подробно исследовался случай захвата на поглощающие ловушки диффундирующих частиц, случайно распределенных в пространстве. Было показано, что вероятность выживания частиц определяется существованием достаточно больших областей, свободных от ловушек. Другими словами, на больших временах $t \gg 1/Dc^2$ (где D — коэффициент диффузии, c — концентрация ловушек в одномерном случае) вероятность определяется флуктуациями плотности поглощающих ловушек и носит экспоненциальный характер:

$$W(t;c) \sim \left(\frac{Dtc^2}{3\pi}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{3\pi^{1/2}(Dtc^2)^{1/3}}{2}\right). \quad (1)$$

В настоящей работе рассмотрен дополнительный механизм переноса частиц, обусловленный дрейфом частиц. Показано, что на достаточно больших временах именно этот механизм будет определять временную асимптотику вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками. Необходимо отметить, что в проблеме диффузии с поглощающими ловушками при включении электрического поля также дополнительно возникают два новых параметра.

Первый из параметров — это «полевое» время, т. е. время, при котором дрейфовое смещение сравнивается с диффузионным: $v^2t_E^2 \propto Dt_E$, при этом на временах, больших по сравнению с «полевым», дрейф частиц становится доминирующим:

$$t_E = \frac{D}{v^2}. \quad (2)$$

Второй, энергетический параметр соответствует времени, когда на длине порядка среднего расстояния между примесями электрический потенциал становится сравнимым с температурой:

$$\alpha = \frac{qE}{kTc}. \quad (3)$$

Возникновение температуры обусловлено классической больцмановской статистикой. В соответствии с новыми параметрами в достаточно сильных полях и возникает новое асимптотическое поведение для вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками.

[*] E-mail: varkhin@mail.ru

2. ДИФФУЗИЯ В СРЕДАХ С ЛОВУШКАМИ

Кратко изложим основные рассуждения по проблеме диффузии в средах с ловушками, приводящие к результату (1). Согласно работе [6] строится решение стандартного уравнения диффузии

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial x^2} \qquad (4)$$

со следующими начальными и граничными условиями:

$$W(x,0) = \frac{1-c}{L}, \quad W(x_i,t) = W(x_{i+1},t) = 0. \qquad (5)$$

Здесь L — длина цепочки, x_i и x_{i+1} — координаты поглощающих ловушек. Решение имеет вид

$$W(x,t) = \frac{4}{L}\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2}\,Dk_n^2 t\right\}\frac{\sin\left(k_n(x-x_i)\right)}{k_n l_i}, \qquad (6)$$

где

$$k_n = \frac{(2n+1)\pi}{l_i}, \quad l_i = |x_i - x_{i+1}|.$$

Искомая величина — вероятность выживания $\overline{W}(t)$ — равна среднему значению:

$$\overline{W}(t) = \sum_i \overline{W}_i = \sum_i \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} W(x,t)\,dx. \qquad (7)$$

Для случайного пуассоновского распределения ловушек $f(l) = c\exp(-cl)$, где $c = N/L$, l — расстояние между ловушками, получим на больших временах описанный выше результат (1).

3. ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ВЕРОЯТНОСТЬ ВЫЖИВАНИЯ В СРЕДАХ С ЛОВУШКАМИ

3.1. Приближение среднего поля

Включим электрическое поле в задачу диффузии в средах с поглощающими ловушками стандартным образом. Соответственно уравнение диффузии в электрическом поле примет вид

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial t^2} - v\frac{\partial W(x,t)}{\partial x}. \qquad (8)$$

Здесь $v = \mu E$ — дрейфовая скорость частиц в электрическом поле E, μ — подвижность частицы.

Начальные и граничные условия ставим аналогично сформулированным выше условиям (5). Соответственно, по-прежнему ищем решение в виде

$$W(x,t;E) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\varphi_n \exp(-E_n t), \qquad (9)$$

где собственные функции равны

$$\varphi_n = \exp\left(\frac{v(x-x_i)}{2D}\right)\sin\left(k_n(x-x_i)\right) \qquad (10)$$

и собственные значения определяются выражением

$$E_n = Dk_n^2 + \frac{v^2}{4D}. \qquad (11)$$

Соответственно, на больших временах $t \gg t_E$ получим экспоненциальное убывание за счет дрейфа частиц на поглощающие ловушки под действием электрического поля, отвечающее приближению среднего поля:

$$\overline{W}(t;E) \propto \exp\left(-\frac{v^2 t}{4D}\right). \qquad (12)$$

3.2. Учет флуктуаций концентрации поглощающих ловушек и влияния электрического поля на флуктуационный механизм

Согласно результату (9) и формуле (A.11) из Приложения асимптотический вид решения определяется следующим выражением:

$$W(t;E) \approx \exp\left(-\frac{v^2}{4D}\,t\right) \times$$
$$\times \sum_{n=0}^{\infty}\int\limits_0^{\infty} \exp\left(-D\frac{\pi^2(2n+1)^2}{l^2}\,t - \frac{vl}{4D} - cl\right) dl, \qquad (13)$$

где интеграл соответствует усреднению по расстоянию между примесями. Асимптотический экспоненциальный вид решений будем искать методом перевала. Согласно (13) перевальные точки определяются из уравнения

$$D\frac{\pi^2(2n+1)^2}{l^2}\,t + \frac{vl}{4D} + cl = 0. \qquad (14)$$

В случае слабых полей (или малых масштабов), $vl/D \ll 1$, получим известный результат: вероятность выживания определяется флуктуациями концентрации поглощающих ловушек, другими словами, наличием областей большого размера, свободных от ловушек, см. выражение (1).

В обратном предельном случае сильных полей, $vl/D \gg 1$, возникает новое асимптотическое поведение:

$$D\frac{\pi^2(2n+1)^2}{l^2}\,t + \frac{vl}{4D} \approx 0. \qquad (15)$$

В общем случае значение перевальной точки определяется выражением

$$l = \sqrt[3]{\frac{\pi^2 Dt}{c + v/4D}}\,. \tag{16}$$

В этом выражении с учетом известного соотношения Эйнштейна: $\mu\kappa T = qD$, и возникает указанный выше энергетический параметр (3):

$$l = \sqrt[3]{\frac{\pi^2 Dt}{c + qE/4kT}}\,.$$

Соответственно, асимптотическое решение в перевальной точке, обусловленное дрейфовым механизмом, будет иметь вид

$$W(t;E) \propto W_0 \exp\left(-\frac{v^2}{4D}\,t - \frac{3\pi^{1/2}}{2} \times \right. \\ \left. \times \left(Dtc^2 \left[1 + \frac{qE}{4ckT} \right]^2 \right)^{1/3} \right). \tag{17}$$

Обсудим полученные результаты. Как следует из выражения (17), на больших масштабах и/или в сильном электрическом поле вероятность выживания частиц при поглощении ловушками на больших временах определяется новым механизмом — дрейфом частиц под действием электрического поля, что описывается первым членом в показателе экспоненты, а также наряду с флуктуациями концентрации дрейфом на расстояние порядка среднего расстояния между поглощающими ловушками, который описывается вторым членом в экспоненциальном множителе.

Соответственно, когда на длине порядка среднего расстояния между ловушками электрический потенциал становится порядка kT: $qE \sim kTc$, то имеет место новое асимптотическое поведение, обусловленное действием электрического поля. Отметим, что аналогичный параметр возникает и в задачах с аномальной диффузией Леви, где наблюдается нелинейное поведение [7, 8].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта № 3484 Министерства образования и науки РФ.

Автор выражает благодарность рецензенту, указавшему на необходимость существенной переработки статьи, что позволило улучшить результаты статьи.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Вычисление нормировочных множителей

Для нахождения нормировочных множителей проведем необходимые вычисления:

$$\overline{W}(t;E) = \sum_i \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} W(x,0;E)\,dx = \\ = \sum_i \sum_{n=0}^{\infty} A \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \exp\left(-\frac{v(x-x_i)}{2D} \right) \times \\ \times \sin\left(k_n(x-x_i)\right)\,dx. \tag{A.1}$$

Вначале необходимо определить интеграл на конечном промежутке между примесями:

$$\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \exp\left(-\frac{v(x-x_i)}{2D} \right) \sin\left(k_n(x-x_i)\right)\,dx = \frac{k_n + \exp\left(\frac{vl_i}{2D}\right)\left(\frac{v}{2D}\sin(k_n l_i) + k_n\cos(k_n l_i)\right)}{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + k_n^2}. \tag{A.2}$$

Далее выполним точное суммирование:

$$\sum_{n=0}^{\infty} A \frac{k_n + \exp\left(\frac{vl_i}{2D}\right)\left(\frac{v}{2D}\sin(k_n l_i) + k_n\cos(k_n l_i)\right)}{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + k_n^2} = \frac{1-c}{L}. \tag{A.3}$$

Это суммирование разбивается на три операции:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{k_n}{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + k_n^2} = C_1, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin(k_n l_i)}{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + k_n^2} = C_2, \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{k_n\cos(k_n l_i)}{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + k_n^2} = C_3. \tag{A.4}$$

Проведем оценку постоянных коэффициентов C_i. Вначале вычислим асимптотически первую сумму. Согласно [9], стр. 54:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{k_n}{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + k_n^2} = \frac{l_i}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{(2n+1)^2 + \left(\frac{vl_i}{2D\pi}\right)^2} =$$

$$= \frac{l_i}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k}{(k)^2 + \left(\frac{vl_i}{2D\pi}\right)^2} \approx$$

$$\approx \frac{l_i}{2} \exp\left(-\frac{vl_i}{4D}\right) = C_1. \quad (A.5)$$

Вычислим вторую сумму. Поскольку $k_n l_i = \pi(1+2m)$, имеем $\sin(k_n l_i) = 0$ и, следовательно, $C_2 = 0$.

Аналогичным образом может быть вычислена третья сумма. С учетом сказанного выше эта сумма может быть преобразована к виду

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{k_n (-1)^{(1+2n)}}{\left(\frac{v}{2D}\right)^2 + k_n^2} = C_3. \quad (A.6)$$

После окончательных преобразований получим следующее выражение:

$$\frac{l_i}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{(1+2n)}(2n+1)}{(2n+1)^2 + \left(\frac{vl_i}{2D\pi}\right)^2} = C_3. \quad (A.7)$$

В свою очередь, согласно [9], стр. 54:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k k}{k^2 + a^2} = \frac{\pi}{2} \frac{\mathrm{sh}(\pi a/2)}{\mathrm{sh}(\pi a)}. \quad (A.8)$$

Таким образом, получим асимптотическое выражение:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k k}{k^2 + a^2} \propto \frac{\pi}{2} \exp\left(-\frac{\pi}{2} a\right) \propto$$

$$\propto \frac{\pi}{2} \exp\left(-\frac{vl_i}{4D}\right). \quad (A.9)$$

Следовательно, общий нормировочный множитель A определяется соотношением

$$A\left[\frac{l_i}{2} \exp\left(\frac{vl_i}{4D}\right) + \frac{l_i}{2} \exp\left(\frac{vl_i}{4D}\right)\right] \approx \frac{1-c}{L}. \quad (A.10)$$

Однако основной вклад в нормировку дает экспоненциальный множитель $\exp(vl_i/4D)$. Поэтому для асимптотического вычисления интегралов достаточно ограничиться именно этим множителем:

$$A \propto \exp\left(-\frac{vl_i}{4D}\right). \quad (A.11)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. E. W. Montroll and G. H. Weiss, J. Math. Phys. **6**, 167 (1965).
2. А. А. Овчинников, А. А. Белый, Теор. эксп. химия **2**, 405 (1966).
3. Г. В. Рязанов, ТМФ **10**, 271 (1972).
4. И. М. Лифшиц, УФН **83**, 617 (1964).
5. Б. Я. Балагуров, В. Г. Вакс, ЖЭТФ **65**, 1600 (1973) [Sov. Phys. JETP **38**, 799 (1974)].
6. Б. Я. Балагуров, В. Г. Вакс, ЖЭТФ **65**, 1939 (1973).
7. В. Е. Архинчеев, Письма в ЖЭТФ **67**, 518 (1998).
8. В. Е. Архинчеев, AIP Conf. Proc. **553**, 231 (2001); http://dx.doi.org/10.1063/1.1358189.
9. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм и произведений*, Физматгиз, Москва (1963).