

ДИФFUЗИЯ ПО СИСТЕМЕ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ С ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫМИ СКОРОСТЯМИ ПРЫЖКОВ

Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов*, В. Е. Шестопал

*Институт теоретической и экспериментальной физики
117259, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 30 апреля 1998 г.

Рассмотрены случайные блуждания в неупорядоченных средах с диполь-дипольными скоростями переходов. Длинновременная асимптотика процесса исследована на основе нового метода численного моделирования, включающего периодическое продолжение системы без периодического продолжения начального условия. Доказано, что длинновременная асимптотика имеет диффузионный характер. Изучена зависимость коэффициента диффузии от концентрации для простой кубической и гранецентрированной кубической решеток.

1. ВВЕДЕНИЕ

Случайные блуждания в неупорядоченных средах с диполь-дипольными скоростями переходов описывают разнообразные процессы миграции локализованных экситонов, исследуемые с помощью измерения деполяризации флуоресценции [1, 2], нестационарной селективной лазерной спектроскопии [3, 4] и метода четырехволнового смешения [5], а также процесс переноса спиновой поляризации [6].

Для расчета основных наблюдаемых в этих и близких к ним системах применялись разные теоретические [4, 7–18] и численные [8, 19, 20] подходы. В частности, в [11] был разработан метод исследования автокоррелятора на умеренно больших временах. Однако в решении наиболее важного вопроса о виде и параметрах асимптотики процесса на больших временах согласия в литературе не было. Прежде всего заметно различаются предлагающиеся до сих пор значения коэффициента диффузии. Сам диффузионный характер асимптотики, не вызывая сомнений у большинства исследователей, остается недоказанным аналитически.

В данной работе рассмотрен дипольный перенос по трехмерной неупорядоченной системе, образованной примесными центрами, случайно разбросанными в кристалле. Наше исследование основано на новом методе анализа асимптотики случайных блужданий в неупорядоченных средах с трансляционно-инвариантным распределением случайности среды [21]. Обоснование результатов включает многообразную проверку и повторные расчеты на ЭВМ при различных значениях параметров, которые убедительно подтверждают существенные качественные свойства асимптотики, однозначно (с ошибкой < 3%) показывая по меньшей мере два главных члена степенного разложения автокоррелятора по времени. Кроме того, метод успешно подтверждается в применении

* E-mail: stepanov@vitep5.itep.ru

к широкому классу асимптотически точно решаемых моделей случайных блужданий в неупорядоченных средах [22–24].

1.1. Изучаемый диполь-дипольный перенос возбуждений по неупорядоченной примеси описывается кинетическим уравнением

$$\dot{p}_{im} = - \sum_j (\nu_{ji} p_{im} - \nu_{ij} p_{jm}), \quad p_{im}(t=0) = \delta_{im}, \quad (1)$$

где i, j, m пробегает номера занятых примесью узлов правильной решетки L , $p_{jm}(t)$ — вероятность обнаружить блуждающий объект в момент t в узле с номером j , если сначала он находился в узле m .

В стандартной модели диполь-дипольного переноса

$$\nu_{i \neq j} = \frac{\nu_0 r_0^6}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^6}, \quad \nu_{ii} = 0, \quad (2)$$

где \mathbf{x}_j — радиус-вектор узла с номером j и ν_0 — скорость прыжка на минимальном расстоянии r_0 между узлами. Расположение примесных центров некоррелировано, а вероятность обнаружить примесь в произвольном узле решетки есть $c \leq 1$. В пределе малых концентраций $c \ll 1$, когда неупорядоченность среды проявляет себя наиболее сильно, характерный масштаб времени задается ферстеровской константой $\beta = (16/9)\pi^3(r_0^3/\Omega)^2 c^2 \nu_0$, где Ω — объем элементарной ячейки. Параметрически β совпадает со скоростью переноса на среднем расстоянии $\bar{r} = (\Omega/c)^{1/3}$ и определяется с помощью усреднения процесса распада по всем конфигурациям примеси:

$$\langle \exp(-t\bar{D}_i) \rangle = \exp[-\sqrt{\beta t}], \quad \bar{D}_i = \sum_j \nu_{ji},$$

где $c \rightarrow 0$, а величина βt конечна.

Общий метод исследования поведения одной из важнейших экспериментально наблюдаемых характеристик блужданий по неупорядоченной системе — пропагатора

$$\mathcal{P}_{xy}(t) = c^{-1} \sum_{ij} \langle p_{ij}(t) \delta_{xi} \delta_{yxj} \rangle, \quad (3)$$

т. е. усредненной по всем конфигурациям примеси вероятности обнаружить возбуждение в момент времени t в узле решетки \mathbf{x} , если первоначально оно было в узле \mathbf{y} , — был развит в [11]. Он состоит в разложении пропагатора по степеням $ct^{1/2}$. Кумулянтная версия этого разложения с учетом трех первых членов ряда дает хорошее описание существующих экспериментальных данных [1, 3, 4, 6] при $\beta t < 5$.

Основная нерешенная проблема — вид и параметры асимптотики $\mathcal{P}_{xy}(t \rightarrow \infty)$.

1.2. Чтобы более отчетливо представить некоторые трудности теоретического анализа системы (1) и лучше увидеть место обсуждаемой задачи в ряду иных проблем современной физики, приведем две формы записи пропагатора в виде функционального интеграла [12], каждая из которых основана на наиболее употребительных подходах к такого рода представлениям. Для этого удобно ввести представление чисел заполнения и переписать уравнение (1) как

$$\dot{P}_{xy} = - \sum_z (n_z \nu_{zx} n_x P_{xy} - n_x \nu_{xz} n_z P_{zy}), \quad P_{xy}(t=0) = \frac{n_y}{c} \delta_{xy}. \quad (4)$$

Здесь $P_{xy}(t)$ — вероятность найти возбуждение в узле решетки x , если вначале оно находилось в y , а n_x — число заполнения узла x донором, принимающее значения 0 и 1, причем $\langle n_x \rangle = c$, а $\mathcal{P}_{xy} = \langle P_{xy} \rangle$. Эквивалентность уравнений (1) и (4) становится очевидной, если в (4) исключить все нулевые компоненты, соответствующие пустым узлам. После учета того, что $n_x P_{xy} = P_{xy}$, уравнение (4) примет форму

$$\dot{P}_{xy} = - \sum_z (n_z \nu_{zx} P_{xy} - n_x \nu_{xz} P_{zy}). \quad (5)$$

Для анализа длинновременной асимптотики начальное условие к этому уравнению можно взять в виде $P_{xy}(t = 0) = \delta_{xy}$. Действительно, при этом возбуждение сначала помещают в произвольный узел решетки, затем оно перескакивает на ближайшие доноры и далее мигрирует по ним. Очевидно, что длинновременная асимптотика такого процесса совпадает с точной [12, 14]. Обозначив соответствующее решение через P_{xy}^1 , мы получаем

$$P^1 = \exp(-At), \quad A = \sum_z n_z A^z, \quad A_{xq}^z = \delta_{xq} \nu_{zq} - \delta_{zx} \nu_{xq}.$$

Представление «квантовомеханического» типа получается на основе естественного продолжения кинетического уравнения с решетки в сплошную среду и имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{xy}^1(t) = \langle P_{xy}^1(t) \rangle &= \int_{q(0)=x}^{q(1)=y} D\mathbf{p}(\tau) D\mathbf{q}(\tau) \times \\ &\times \exp \left[i \int_x^y \mathbf{p} d\mathbf{q} + c \int d^3z \left(\exp \left\{ -t \int_0^1 d\tau A^z(\mathbf{q}(\tau), \mathbf{p}(\tau)) \right\} - 1 \right) \right], \end{aligned} \quad (6)$$

где $c \ll 1$, функциональный интеграл понимается как предел конечнократных интегралов, отвечающих разбиениям промежутка времени при неограниченном измельчении этих разбиений, и функция $A^z(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ определяется из соотношения типа

$$\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} A^z(\mathbf{q}, \mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}(\mathbf{x}-\mathbf{q})} = A_{xq}^z = \nu_{zq} [\delta(\mathbf{x}-\mathbf{q}) - \delta(\mathbf{x}-\mathbf{z})]. \quad (7)$$

Одно из решений уравнения (7) есть $A^z(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \nu_{zq} [1 - \exp\{-i\mathbf{p}(\mathbf{z}-\mathbf{q})\}]$. Обсуждение других решений и обобщение представлений (6) и (7) содержится в [12].

Следующее представление лаплас-образа пропагатора использует интегрирование по двум семействам пар комплексно-сопряженных переменных: «обычным» переменным a_z^+ , a_z и грассмановым α_z^+ , α_z :

$$\begin{aligned} \dot{P}_{xy}^1(\lambda) = \left(\frac{1}{\lambda + A} \right)_{xy} &= \int_0^\infty dt \mathcal{P}_{xy}^1(t) e^{-\lambda t} = \int \prod_{z \in L} \frac{da_z^+ da_z d\alpha_z d\alpha_z^+}{2\pi} a_x a_y^+ \times \\ &\times \exp \left[-\lambda(a^+ a + \alpha^+ \alpha) + c \sum_{z \in L} (\exp\{-(a^+ A^z a + \alpha^+ A^z \alpha)\} - 1) \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь $c \ll 1$, бесконечнократный интеграл понимается как предел конечнократных интегралов, соответствующих переходу от решетки к конечному дискретному тору, а выражения типа $a^+ B a$ понимаются как $\sum_{xq} a_x^+ B_{xq} a_q$.

Заметим, что строгое доказательство сходимости интегралов в (6) и (8) не найдено, но, формально разложив подынтегральные выражения в степенные ряды по концентрации c и почленно вычислив коэффициенты, получим правильные в пределе непрерывной среды выражения.

Как видно из представления (6), наша задача выглядит сложнее проблемы полярона [25], а нелокальность и сингулярность действия выражены гораздо сильнее. Представление (8) превращает нашу задачу в проблему нелинейной нелокальной и непериодической теории поля с сильным взаимодействием, поскольку реальным параметром нелинейности является $c\lambda^{-1/2}$ [11, 12] и большим значениям t соответствует $\lambda \propto 1/t \rightarrow 0$.

Исследование асимптотики пропатора с помощью подобных представлений в других проблемах случайных блужданий в неупорядоченных средах может оказаться вполне успешным [23], однако для рассматриваемой в работе системы (1) такая техника до сих пор не принесла каких-либо заметных результатов. Поэтому естественно ожидать, что нахождение длинновременной асимптотики усредненного пропатора будет стимулировать развитие общей теории поля и функционального интегрирования, причем новые методы можно будет проверять на данной проблеме наряду с моделью Изинга и проблемой полярона, которые традиционно используются для этой цели.

1.3. Численное моделирование асимптотической стадии процесса затрудняется двумя обстоятельствами. Предыдущие попытки такого моделирования [8, 19, 20] не опирались на достаточно детальный теоретический прогноз выхода на асимптотическую стадию [10, 4]. Прежде всего, при моделировании не учитывались основные признаки наступления диффузионной стадии в таких системах, в частности, долгое время не принималось во внимание, что диффузии предшествует более медленный процесс (см. ниже (23)). Вторая причина состоит в том, что обычно используемая при моделировании замена бесконечной случайной среды на периодическую с периодически продолженным начальным условием [8, 19, 20] приводит к экспоненциальному характеру стремления автокоррелятора $\mathcal{P}_{00}(t)$ к стационарному значению, соответствующему равномерно заполненному состоянию. При таком способе моделирования случайных блужданий в неупорядоченных средах для обнаружения степенного (свойственного диффузии) хода асимптотики $\mathcal{P}_{00} \sim 1/(\beta t)^{3/2}$ необходимо «балансировать» между далекими и «слишком» далекими временами, предварительно с очень высокой точностью найдя спектральное разложение большой линейной системы. Что же касается высших поправок в асимптотическом разложении, то чувствительность к погрешностям метода здесь еще выше.

2. МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ

Наше исследование основывается на новом методе [21], предполагающем рассмотрение пространственно бесконечной системы. В случае простой кубической решетки она получается из псевдослучайной конфигурации примеси в кубе с центром в начале координат и ребром Rr_0 , имеющей cR^3 узлов, путем ее периодического продолжения на все пространство с периодом равным ребру. Аналогичным образом в случае

гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки псевдослучайная конфигурация набрасывалась в параллелепипеде с ребрами Ra_1, Ra_2, Ra_3 , где a_1, a_2, a_3 — векторы Браве ГЦК-решетки.

Введем в рассмотрение величины

$$\rho_j(\mathbf{k}, t) = \sum_m p_{jm}(t) \exp \{i(\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_j)\mathbf{k}\}, \quad (9)$$

где вектор \mathbf{k} пробегает зону Бриллюэна, соответствующую решетке L . Конфигурационные средние

$$\mathcal{P}(\mathbf{k}, t) = \langle \rho_i(\mathbf{k}, t) \rangle = \sum_y \exp \{-i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{y})\} \mathcal{P}_{xy}(t)$$

дают фурье-образ пропагатора и являются наблюдаемыми в экспериментах по четырехволновому смешению [5]. Из (1) следует, что

$$\dot{\rho}_i = - \sum_j [\nu_{ji}\rho_i - \nu_{ij} \exp \{i(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)\mathbf{k}\} \rho_j], \quad \rho_i(t=0) = 1. \quad (10)$$

При периодическом распределении примеси $\rho_i = \rho_m$, если $\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_m = R\mathbf{M}$, $\mathbf{M} \in L$. Действительно, согласно (10) ρ_i и ρ_m удовлетворяют тождественным уравнениям с одинаковыми начальными условиями и поэтому совпадают. Следовательно, уравнения (10) можно представить как

$$\dot{\rho}_i = -(A(\mathbf{k})\rho)_i = - \sum_{j=1}^N [W_{ji}(0)\rho_i - W_{ij}(\mathbf{k})\rho_j], \quad \rho_i(t=0) = 1, \quad (11)$$

где i, j теперь пробегает номера узлов в объеме периодичности и

$$W_{ij}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{M} \in L}' \nu_0 r_0^6 |\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i - \mathbf{M}R|^{-6} \exp \{i(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i - \mathbf{M}R)\mathbf{k}\}, \quad (12)$$

где \sum' означает суммирование по всем \mathbf{M} , для которых $|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i - \mathbf{M}R| \neq 0$.

Отметим, что идея рассмотрения периодической случайной среды предлагалась в [16] для решения одномерной модели с переносом к ближайшему соседу и использовалась в [17] при изучении диффузии в случае слабого беспорядка в пространстве произвольной размерности. В этих работах анализировались не ρ_i , а величины типа

$$Q_x(y) = \sum_M P_{x+RM,y}, \quad S_x(y) = \sum_M (\mathbf{x} + \mathbf{M}R) P_{x+\mathbf{M}R,y}.$$

Для них получались замкнутые уравнения, с помощью которых определялся тензор диффузии.

Для замены пропагатора $\mathcal{P}(\mathbf{k}, t)$ удобно выбрать

$$P(\mathbf{k}, t | N) = \sum_i \rho_i(\mathbf{k}, t) / \sum_i 1. \quad (13)$$

Величину $P(\mathbf{k}, t | N)$ можно рассматривать 1) как фурье-образ пропагатора, усредненный по всем конфигурациям, получающимся из заданной переменными (в объеме

периодичности) узла, первоначально содержащего возбуждение, и 2) как проекцию ρ_i на главный собственный вектор оператора $A(\mathbf{0})$. Чтобы пояснить первое утверждение, заметим, что генератор (1) симметричен, $p_{im} = p_{mi}$, а потому индекс i в величине ρ_i можно рассматривать как номер узла, в котором первоначально находилось возбуждение, блуждающее по той же самой примеси. Отметим, что в случае несимметричного трансляционно-инвариантного в среднем переноса (когда $\nu_{ij} \neq \nu_{ji}$) можно исследовать сопряженное к (1) уравнение и определить $\tilde{\rho}_i$ с помощью суммы не по правому, как в (9), а по левому индексу. При этом среднее арифметическое компонент $\tilde{\rho}_i$ будет точным средним по всем конфигурациям, отличающимся друг от друга начальным узлом.

2.1. Матричные элементы оператора $A(\mathbf{k})$ (11), определяемые формулами (12), удобно исследовать с помощью метода Пуассона—Эвальда [23]. Это дает полное представление об аналитических свойствах генератора при малых значениях $|\mathbf{k}|$ и позволяет быстро вычислять элементы с высокой точностью.

Преобразуем (12):

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{M} \in L} |\mathbf{x} - \mathbf{MR}|^{-6} \exp \{i(\mathbf{x} - \mathbf{MR})\mathbf{k}\} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{M} \in L} \int_0^{\infty} d\tau \tau^2 \exp \{-\tau(\mathbf{x} - \mathbf{MR})^2 + i(\mathbf{x} - \mathbf{MR})\mathbf{k}\} = \\ &= \frac{1}{2} \left(\int_0^{\tau_0} + \int_{\tau_0}^{\infty} \right) d\tau \sum_{\mathbf{M} \in L} \tau^2 \exp \{-\tau(\mathbf{x} - \mathbf{MR})^2 + i(\mathbf{x} - \mathbf{MR})\mathbf{k}\}, \end{aligned} \quad (14)$$

где $\tau_0 > 0$, затем применим под знаком интеграла по конечной области преобразование Пуассона:

$$\sum_{\mathbf{M} \in L} \exp \{i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{MR}) - \tau(\mathbf{x} - \mathbf{MR})^2\} = \frac{1}{V_{per}} \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^{3/2} \sum_{\mathbf{g} \in G} \exp \left\{ -\frac{(\mathbf{g} + \mathbf{k})^2}{4\tau} + i\mathbf{g}\mathbf{x} \right\},$$

где G — обратная к L решетка, V_{per} — объем параллелепипеда периодичности.

Поскольку далее нас будут интересовать лишь значения $R > 10$, $kr_0 < 2\pi/R$, выбрав в (14) величину $\tau_0 r_0^2 \approx 0.01$, мы можем оставить в полученной в результате преобразования Пуассона сумме для нашего матричного элемента лишь член с $g = 0$, что дает

$$\begin{aligned} W_{ij}(\mathbf{k}) &= \nu_0 r_0^6 \left\{ \sum_{\mathbf{M} \in L} \exp \{-\tau_0(\mathbf{x} - \mathbf{MR})^2 + i(\mathbf{x} - \mathbf{MR})\mathbf{k}\} \times \right. \\ &\times \left[\frac{\tau_0^2}{2(\mathbf{x} - \mathbf{MR})^2} + \frac{\tau_0}{[(\mathbf{x} - \mathbf{MR})^2]^2} + \frac{1}{[(\mathbf{x} - \mathbf{MR})^2]^3} \right] + \frac{\pi^{3/2}}{2R^3 \Omega} \int_0^{\tau_0} d\tau \tau^{1/2} \exp \left(-\frac{\mathbf{k}^2}{4\tau} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (15)$$

где $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$. При выбранном значении τ_0 отброшенная сумма

$$\sum_{\mathbf{g} \neq 0} \frac{\pi^{3/2} r_0^6}{V_{per}} \int_0^{\tau_0} \tau^{1/2} \exp \left\{ -\frac{(\mathbf{g} + \mathbf{k})^2}{4\tau} + i\mathbf{g}\mathbf{x} \right\} d\tau$$

оценивается по модулю сверху выражением

$$\frac{\pi^{3/2} r_0^3}{1000 V_{per}} \sum_{\mathbf{g} \neq 0} \exp \left[-25 \left(g r_0 - \frac{2\pi}{R} \right)^2 \right] < 10^{-16}$$

и не влияет на результаты вычислений. Неаналитический при малых $|\mathbf{k}|$ вклад в матричный элемент определяется интегралом

$$\frac{\pi^{3/2}}{2} \int_0^{\tau_0} d\tau \tau^{1/2} \exp\left(-\frac{\mathbf{k}^2}{4\tau}\right) = \frac{\pi^2}{12} |\mathbf{k}|^3 + \phi(\mathbf{k}), \tag{16}$$

где

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{\pi^{3/2} |\mathbf{k}|^3}{8} \left[\frac{\alpha^{-3/2} \exp(-\alpha)}{3} - \frac{2\alpha^{-1/2} \exp(-\alpha)}{3} - \frac{4}{3} \int_0^{\sqrt{\alpha}} d\sigma \exp(-\sigma^2) \right], \quad \alpha = \frac{\mathbf{k}^2}{4\tau_0}$$

является аналитической по \mathbf{k} функцией вплоть до членов $\sim k^4$.

2.2. Проведем более детальный анализ уравнения (11) при малых значениях $|\mathbf{k}|$ с помощью теории возмущений.

Генератор уравнения (11) обладает следующими легко проверяемыми свойствами:

- 1) $A_{ij}(\mathbf{k})^* = A_{ji}(\mathbf{k}) = A_{ij}(-\mathbf{k});$
- 2) $A_{ii}(\mathbf{0}) > 0, \quad A_{i\neq j}(\mathbf{0}) < 0, \quad \sum_i A_{ij}(\mathbf{0}) = 0;$
- 3) $\sum_{ij} \bar{\rho}_i A_{ij}(\mathbf{k}) \rho_j = \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{M \in L} \frac{|\rho_i \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}_i) - \rho_j \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_j + R\mathbf{M})\}|^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j - R\mathbf{M}|^6}.$

Отсюда следует, что генератор $A_{ij}(\mathbf{k})$ самосопряжен, оператор $A(\mathbf{0})$ является генератором связанной цепи Маркова и его минимальное собственное значение (равное нулю) простое. Поэтому при малых $|\mathbf{k}|$ минимальное собственное значение $A(\mathbf{k})$ также оказывается простым. Отвечающий минимальному собственному значению оператора $A(\mathbf{0})$ собственный вектор стоит в начальных условиях уравнения (11) и при малых $|\mathbf{k}|$ мало отличается от главного собственного вектора $A(\mathbf{k})$. При $\mathbf{k} = \mathbf{g}/R$, где \mathbf{g} — вектор обратной решетки, генератор неотрицателен и нуль является его простым собственным значением. При всех других (вещественных) значениях \mathbf{k} оператор положителен.

Для более детального анализа представим величину (13) в виде

$$P(\mathbf{k}, t|N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \rho_i = \langle \bar{\mathbf{0}} | \exp[-A(\mathbf{k})t] | \bar{\mathbf{0}} \rangle, \tag{17}$$

где $\langle i | \bar{\mathbf{0}} \rangle = 1/\sqrt{N}$.

Используя спектральное разложение эрмитова оператора $A(\mathbf{k})$, получаем

$$P(\mathbf{k}, t|N) = \sum_{\mu=0}^{N-1} |\langle \mu | \bar{\mathbf{0}} \rangle|^2 \exp[-a_\mu(\mathbf{k})t], \quad A(\mathbf{k})|\mu\rangle = a_\mu(\mathbf{k})|\mu\rangle. \tag{18}$$

Низшее собственное значение $a_0(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0})$ единственно, а $|\langle \mathbf{0} | \bar{\mathbf{0}} \rangle|^2 = 1 + O(k^2)$. Вводя проекционные операторы $\pi = |\bar{\mathbf{0}}\rangle\langle \bar{\mathbf{0}}|$ и $\bar{\pi} = 1 - \pi$, получаем

$$a_0(\mathbf{k}) = \langle \bar{0} | A(\mathbf{k}) | \bar{0} \rangle + \langle \bar{0} | A(\mathbf{k}) \bar{\pi} \frac{1}{a_0(\mathbf{k}) - \bar{\pi} A(\mathbf{k}) \bar{\pi}} \bar{\pi} A(\mathbf{k}) | \bar{0} \rangle. \quad (19)$$

Первый неаналитический член в разложении оператора $A(\mathbf{k})$ порядка $|\mathbf{k}|^3$ (см. (16)). Так как резольвента конечна при малых $|\mathbf{k}|$ и $a_0(\mathbf{k})$ — четная функция \mathbf{k} , член $\sim |\mathbf{k}|^3$ в разложении $a_0(\mathbf{k})$ полностью определяется первым слагаемым в (19). Отсюда следует, что

$$a_0(\mathbf{k}) = D_{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta - \sigma k^3 + O(k^4) = \bar{a}_0(\mathbf{k}) + O(k^4), \quad (20)$$

где $\sigma = (\pi^2/12)c(\tau_0^6/\Omega)\nu_0$.

Тензор диффузии удобно представить в форме

$$D_{\alpha\beta} = (\kappa_{\alpha\beta}/6)\bar{r}^2\beta. \quad (21)$$

При $N \rightarrow \infty$ в силу изотропии системы $D_{\alpha\beta} \rightarrow D\delta_{\alpha\beta}$, а $\kappa_{\alpha\beta} \rightarrow \kappa\delta_{\alpha\beta}$.

Отметим, что точное знание второго слагаемого в правой части (20) обеспечивает точное соотношение между двумя главными членами асимптотического разложения автокоррелятора $\mathcal{P}_{00}(t)$.

Учитывая, что

$$A_{ij} \left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{g}}{R} \right) = \exp \left(-\frac{i\mathbf{g}\mathbf{x}_i}{R} \right) A_{ij}(\mathbf{k}) \exp \left(\frac{i\mathbf{g}\mathbf{x}_j}{R} \right),$$

где \mathbf{g} — произвольный вектор обратной решетки, для пропагатора можно получить представление

$$\begin{aligned} P_{x0} &= \frac{1}{V_B} \int_B d^3k \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) P(\mathbf{k}, t|N) = \frac{1}{V_B N} \int_B d^3k \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \sum_{ij} (\exp[-tA(\mathbf{k})])_{ij} = \\ &= \frac{1}{V_B N} \sum_{\mathbf{r}} \int_{B_{\mathbf{r}}} d^3k \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \sum_{ij} (\exp[-tA(\mathbf{k})])_{ij} = \\ &= \frac{1}{V_B N} \sum_{\mathbf{r}} \int_{B_{\mathbf{r}}} d^3k \exp \left\{ i\mathbf{x} \left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{g}}{R} \right) \right\} \sum_{ij} \exp \left\{ \frac{i\mathbf{g}(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)}{R} \right\} (\exp[-tA(\mathbf{k})])_{ij} = \\ &= \frac{R^3}{V_B N} \int_{B_0} d^3k \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \sum_{ij} (\exp[-tA(\mathbf{k})])_{ij} \delta_{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i + \mathbf{x}_j, 0}. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь B обозначает зону Бриллюэна объемом $V_B = (2\pi)^3/\Omega$, соответствующую исходной решетке, $B_{\mathbf{r}}$ — зону Бриллюэна с центром в \mathbf{g}/R , соответствующую ячейке равной параллелепипеду периодичности, \mathbf{g}/R пробегает R^3 узлов параллелепипеда периодичности в обратной решетке, при этом сдвиги $B_{\mathbf{r}}$ зоны B_0 на всевозможные векторы \mathbf{g}/R правильно заполняют большую зону B .

Из (22) видно, что предлагаемый нами формализм обладает таким важным достоинством обычно применяемого в зонной теории преобразования Фурье (т. е. по левой координате на решетке с шагом R) как малая область интегрирования по \mathbf{k} в представлении пропагатора.

При расчете старших членов степенной по $1/t$ асимптотики автокоррелятора достаточно учесть только главные собственные значения $A(\mathbf{k})$ при малых k . В результате

$$\begin{aligned}
 P_{00}(t \rightarrow +\infty) &= \frac{1}{V_{BC}} \int_{B_0} d^3k \text{Tr}(\exp[-tA(\mathbf{k})]) \approx \frac{1}{V_{BC}} \int_{B_0} d^3k \exp[-ta_0(\mathbf{k})] = \\
 &= \frac{\Omega}{c} \left[(4\pi Dt)^{-3/2} + \sigma(2\pi^2 D^3 t^2)^{-1} + O(t^{-5/2}) \right]; \tag{23}
 \end{aligned}$$

Тем самым подтверждается связь между двумя старшими членами разложения больших времен (см. [10, 4, 14]), которая характерна для диполь-дипольного взаимодействия при самых различных распределениях случайности среды. Это прямо указывает на то, что диффузионной стадии процесса непосредственно предшествует стадия более медленного убывания автокорреляционной функции и на окончательной стадии график автокоррелятора приближается к своей асимптотике сверху.

3. ПРОВЕРКА МЕТОДА НА ТОЧНО РЕШАЕМЫХ МОДЕЛЯХ

Мы проверили все стадии применения предложенного подхода к исследованию (и моделированию) случайных блужданий в неупорядоченных средах на широком классе асимптотически точно решаемых моделей с пространственно неограниченным переносом [22–24].

Для определенности остановимся на модели изотропных случайных прыжков, в которой пропагатор определяется уравнением вида [23]:

$$\dot{P}_{xy} = - \sum_z (\nu_{zx} \xi_x P_{xy} - \nu_{xz} \xi_z P_{zy}), \quad P_{xy}(t=0) = \delta_{xy}, \tag{24}$$

где x, y, z пробегает всю простую кубическую решетку L , $\nu_{xz} = \nu_{zx} = \nu_{z-x,0}$, $\nu_{00} = 0$, $\sum_x \nu_{x0} x^2 < +\infty$, а $\{\xi_x\}$ — набор независимых положительных одинаково распределенных случайных величин с достаточным числом конечных обратных моментов.

Рассмотрим периодическую систему, оставляя величины ξ_x независимыми, когда x пробегает узлы куба V с центром в нуле и ребром Rr_0 , и для любого вектора $y \in L$, полагая $\xi_{x-Ry} = \xi_x$.

По аналогии с (9) вводим в рассмотрение величины

$$\rho_x(\mathbf{k}, t) = \sum_y P_{xy}(t) \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{y} - \mathbf{x})\}, \tag{25}$$

причем $\rho_{x-Ry} = \rho_x$ и справедлива конечная система уравнений

$$\dot{\rho}_x = -(A(\mathbf{k})\xi\rho)_x = - \sum_{z \in V} [W_{zx}(0)\xi_x \rho_x - W_{xz}(\mathbf{k})\xi_z \rho_z], \quad \rho_x(\mathbf{k}, t=0) = 1, \tag{26}$$

где теперь x, z пробегает все узлы куба периодичности и

$$W_{xz}(\mathbf{k}) = \sum_{M \in L} \nu_{z, x+MR} \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{z} - \mathbf{x} - M\mathbf{R})\}. \tag{27}$$

Вместо $P(\mathbf{k}, t|N)$ (см. (17)) теперь удобно рассмотреть

$$\hat{P}(\mathbf{k}, t) \equiv \langle 0 | \exp[-A\xi t] \frac{\kappa_0}{\xi} | 0 \rangle = \langle 0 | \sqrt{\frac{\kappa_0}{\xi}} \exp[-\sqrt{\xi} A \sqrt{\xi} t] \sqrt{\frac{\kappa_0}{\xi}} | 0 \rangle, \tag{28}$$

где

$$\langle x|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad \frac{1}{\kappa_0} = \frac{1}{N} \sum_{x \in V} \frac{1}{\xi_x}, \quad N = R^3.$$

Минимальное собственное значение оператора $\sqrt{\xi} A \sqrt{\xi}$ определяется выражением, совпадающим с (19), при замене $\langle i|\bar{0}\rangle \rightarrow \langle x|\bar{0}\rangle = \sqrt{\kappa_0/(\xi N)}$ и $A \rightarrow \sqrt{\xi} A \sqrt{\xi}$. Отметим, что второе слагаемое из (19) теперь имеет четвертый порядок по \mathbf{k} и не дает вклада в коэффициент диффузии. Из первого слагаемого находим

$$D = \kappa_0 D_0, \quad D_0 = \frac{1}{6} \sum_x x^2 \nu_x, \quad (29)$$

D_0 — коэффициент диффузии на правильной решетке. Этот ответ при больших N прекрасно согласуется с полученным в [23] выражением для коэффициента диффузии

$$D = \kappa D_0, \quad 1/\kappa = \langle 1/\xi_0 \rangle,$$

где $\langle \dots \rangle$ — среднее по ансамблю. А это означает, что пределы $N \rightarrow \infty$ и $t \rightarrow \infty$ в данной модели перестановочны, и что относительная точность определения D по формулам (29) составляет величину порядка $1/\sqrt{N}$. Аналогично перестановочность этих пределов доказывается и для всех моделей, рассмотренных в [24]. Проверка численного алгоритма решения системы (26) была проведена на модели изотропных случайных прыжков с $\nu_{xz} \sim |x-z|^{-6}$ и равномерно распределенным ξ , причем $\langle 1/\xi \rangle \approx 10/\langle \xi \rangle$. Именно такое соотношение между $\langle \bar{D}_i \rangle$ и $\langle 1/\bar{D}_i \rangle$ в задаче (1) реализуется при $c \approx 3\%$. Численное решение уравнений (26) приводит к значению коэффициента диффузии, совпадающему с (29) с точностью 10^{-5} . Данное число характеризует погрешность вычислений на фиксированной реализации $\{\xi_x\}$ и служит оценкой аналогичной погрешности в исследуемой системе (1) на заданной конфигурации примеси, поскольку ниже мы используем тот же алгоритм численного расчета. Статистический разброс коэффициента диффузии в модели изотропных случайных прыжков определяется распределением $\{\xi_x\}$ (см. (28)), а в реальной системе (1) — числом узлов N в объеме периодичности и концентрацией c . Он значительно больше погрешности численного алгоритма, и поэтому далее эта погрешность не обсуждается.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Перенос в нашей основной системе (1) не удастся исследовать чисто аналитически с той же полнотой, как в модели изотропных случайных прыжков.

Мы провели численное моделирование миграции на основе (11). На рис. 1 и 2 представлены результаты расчета $P(\mathbf{k}, t|N)$ на простой и гранецентрированной кубических решетках, где каждая линия соответствует одной конфигурации примеси. Из графиков видно, что при больших t величина $-\ln P(\mathbf{k}, t|N)/\beta t$ стремится к конечному положительному значению. Точно такое же поведение фурье-образа пропагатора наблюдалось при всех рассматриваемых N от 200 до 2700 и при всех концентрациях независимо от типа решетки. Таким образом, при $\beta t \gg 1$

$$P(\mathbf{k}, t|N) = a \exp[-\omega(\mathbf{k})t + \sigma k^3 t], \quad (30)$$

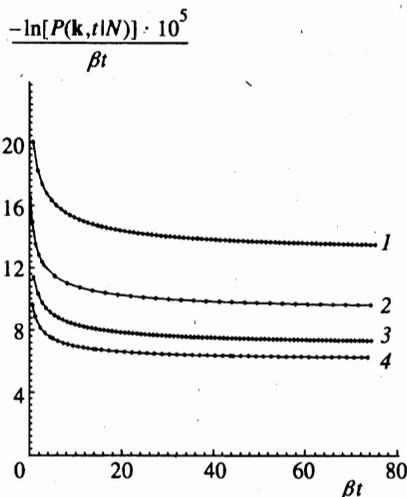


Рис. 1

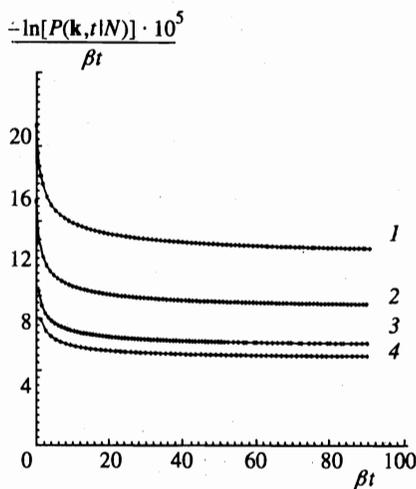


Рис. 2

Рис. 1. Зависимость фурье-образа пропагатора от времени для простой кубической решетки: 1 — число узлов в объеме периодичности $N = 240$, концентрация $c = 0.03$, $\mathbf{k} = (\pi/200)(0, 1, 0)$; 2 — $N = 1350$, $c = 0.05$, $\mathbf{k} = (\pi/200)(0, 0, 1)$; 3 — $N = 640$, $c = 0.08$, $\mathbf{k} = (\pi/200)(1, 0, 0)$; 4 — $N = 1970$, $c = 0.1$, $\mathbf{k} = (\pi/200)(0, 0, 1)$

Рис. 2. Зависимость фурье-образа пропагатора от времени для ГЦК-решетки: 1 — число узлов в объеме периодичности $N = 240$, концентрация $c = 0.03$, $\mathbf{k} = (\pi/200)(0, 1, 0)$; 2 — $N = 780$, $c = 0.05$, $\mathbf{k} = (\pi/200)(0, 0, 1)$; 3 — $N = 640$, $c = 0.08$, $\mathbf{k} = (\pi/200)(1, 0, 0)$; 4 — $N = 1760$, $c = 0.1$, $\mathbf{k} = (\pi/200)(0, 0, 1)$

где коэффициент σ известен точно (см. (20)).

На рис. 3 представлена зависимость $\omega(\mathbf{k})$ для одной конфигурации примесей при $\beta t \approx 40$. Аналогичное поведение $\omega(\mathbf{k})$ наблюдалось при различных конфигурациях примесей независимо от концентрации и типа решетки. При $N \rightarrow \infty$ в силу изотропии системы ω зависит от $|\mathbf{k}|$. Численные расчеты подтверждают отсутствие регулярной зависимости ω от направления вектора \mathbf{k} . Сохраняя постоянным направление вектора \mathbf{k} , изменяем его длину и аппроксимируем полученные значения $\omega(\mathbf{k})$ по методу наименьших квадратов выражением $\omega(\mathbf{k}) = Dk^2 + \alpha k^4 = \beta[(\kappa/6)(k\bar{r})^2 + \alpha_1(k\bar{r})^4]$. Члены порядка $o(k^4)$ отброшены, так как рассматриваются малые \mathbf{k} : $k\bar{r} \sim 0.05$. Получаем $\kappa = 0.3101(2)$, $\alpha_1 = -0.0102(2)$. Таким образом, видно, что при $\beta t \sim 40$ поведение системы аппроксимируется выражением $P(\mathbf{k}, t|N) = a \exp[(-Dk^2 + \sigma k^3 + O(k^4))t]$, где члены $\sim k^4$ могут быть опущены в пределах точности вычисления коэффициента диффузии. Далее до $\beta t \sim 1000$ коэффициент диффузии D монотонно уменьшается, оставаясь в пределах 3% от его значения при $\beta t = 40$ и в пределах 0.5% от значения при $\beta t = 80$. Асимптотика больших времен исследовалась для разных концентраций от $c = 1\%$ до $c = 90\%$. При каждом значении c мы рассматривали от трех до пяти различных псевдослучайных конфигураций примесных узлов и усредняли по ним полученные значения κ . Результаты представлены на рис. 4. Аналогичное исследование зависимости κ от концентрации было проведено и для ГЦК-решетки (рис. 5). При больших $c \rightarrow 1$ значение κ , как видно на рис. 4, 5, стремится к известному значению $\kappa(c = 1)$: для простой

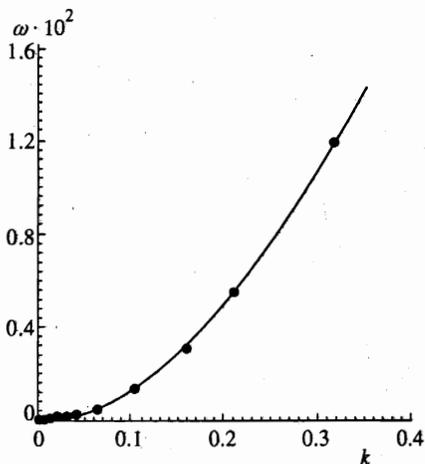


Рис. 3. Зависимость ω от $|k|$ (точки) и ее аппроксимация по методу наименьших квадратов (непрерывная линия); $N = 1800$, $c = 0.1$

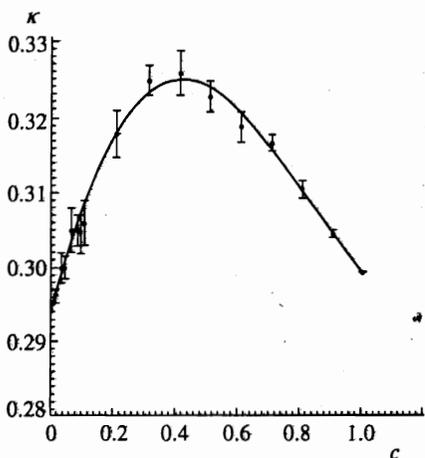


Рис. 4

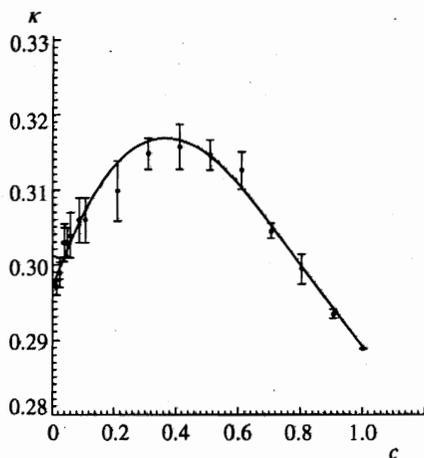


Рис. 5

Рис. 4. Зависимость κ от концентрации и ее аппроксимация полиномом третьей степени. Решетка простая кубическая

Рис. 5. Зависимость κ от концентрации и ее аппроксимация полиномом третьей степени. Решетка гранецентрированная кубическая

кубической решетки $\kappa(c = 1) = 0.2999$, для ГЦК-решетки $\kappa(c = 1) = 0.2895$.

Мы построили приближение $\kappa = \kappa(c = 1) + (\kappa_1 + \kappa_2 c + \kappa_3 c^2)(1 - c)$ методом наименьших квадратов и для простой кубической решетки получили $\kappa_1 = -0.0050(6)$, $\kappa_2 = 0.164(4)$, $\kappa_3 = -0.11(4)$. Величина $\kappa_0 = \kappa(c = 1) + \kappa_1 = 0.2949(6)$ соответствует коэффициенту диффузии при концентрации $c \rightarrow 0$.

Для ГЦК-решетки $\kappa_1 = 0.0066(7)$, $\kappa_2 = 0.132(4)$, $\kappa_3 = -0.09(4)$. В данном случае $\kappa_0 = \kappa(c = 1) + \kappa_1 = 0.2961(7)$, что в пределах ошибки совпадает со значением κ_0 на простой решетке. Для проверки независимости κ от типа решетки при малых кон-

центрациях было проведено исследование процесса случайных блужданий на решетке алмаза. Для данной решетки $\kappa(c = 1) = 0.3299$ существенно отличается от значения κ_0 . Было получено, что при малых концентрациях в пределах ошибок вычислений величина κ имеет то же значение, что и для простой кубической и ГЦК-решеток. Такое совпадение должно наблюдаться, так как при малых концентрациях среднее расстояние между примесями \bar{r} много больше r_0 и асимптотика процесса миграции вообще не должна зависеть от типа решетки [11].

4.1. Для ускорения расчетов мы применяли аппроксимацию

$$P(\mathbf{k}, t|N) = \exp[-\bar{a}_0(\mathbf{k})(t + b/\beta)] + (\bar{r}\mathbf{k})^2 f \exp(-a_1 t), \quad a_1 = (2\pi/R)^2 D\kappa', \quad (31)$$

где b, f, κ' — константы, имеющие конечные пределы при $c \rightarrow 0, k \rightarrow 0$. Это уменьшало время расчетов примерно на треть.

Для контроля коэффициент диффузии определялся также и третьим способом с еще более быстрой сходимостью, который связан с соотношением

$$\bar{A}(\mathbf{k}) = \sum_{ij} \rho_i^* A_{ij}(\mathbf{k}) \rho_j / \sum_i |\rho_i|^2 \rightarrow \bar{a}_0(\mathbf{k}) \quad \text{при } t \rightarrow \infty. \quad (32)$$

Действительно, используя спектральное разложение, имеем

$$\bar{A}(\mathbf{k}) = \frac{\langle \rho | A(\mathbf{k}) | \rho \rangle}{\langle \rho | \rho \rangle} = \frac{\sum_{\mu} |\langle \bar{0} | \mu \rangle|^2 a_{\mu}(\mathbf{k}) \exp[-2a_{\mu}(\mathbf{k})t]}{\sum_{\mu} |\langle \bar{0} | \mu \rangle|^2 \exp[-2a_{\mu}(\mathbf{k})t]}. \quad (33)$$

Таким образом, большая скорость сходимости обусловлена вдвое большими показателями экспонент. А именно: вычисляемое на основе (32) значение коэффициента диффузии D стабилизируется с погрешностью менее 3% уже при $\beta t = 20$ и менее 0.5% при $\beta t = 40$.

4.2. При численном моделировании использовались экстраполяционные процедуры решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений типа классического метода Адамса [26]. При этом, выбирая квадратурные формулы с учетом заведомой положительности спектра генератора $A(\mathbf{k})$, мы смогли заметно увеличить шаг интегрирования без опасения вычислительной неустойчивости, которая была бы практически неизбежна при наличии иных, кроме положительных, собственных значений.

Рассматривались формулы вида

$$\rho(t + 4h) \approx (a + phA)\rho(t) + (b + qhA)\rho(t + h) + (c + rhA)\rho(t + 2h) + (d + shA)\rho(t + 3h),$$

$$p = -3(b + d)/8 - c/3, \quad q = (64 - 19b - 32c - 27d)/24, \quad r = (-32 + 5b - 8c - 27d)/24,$$

$$s = (64 - b - 9d)/24,$$

где

$$a = -f_1 f_2 f_3, \quad b = f_1 f_2 f_3 + f_1 f_2 + f_2 f_3 + f_3 f_1,$$

$$c = -(f_1 + f_2 + f_3 + f_1 f_2 + f_2 f_3 + f_3 f_1), \quad d = f_1 + f_2 + f_3 + 1$$

или

$$a = -f_1(f_2 + f_3^2), \quad b = (f_1 + 1)(f_2 + 2f_3 + f_3^2),$$

$$c = -[f_1 + f_2 + f_3^2 + 2(1 + f_1)f_3], \quad d = f_1 + 1 + 2f_3.$$

В первом случае $0 < f_1, f_2, f_3 < 1$, во втором действительные величины f_1, f_2, f_3 выбираются так, чтобы выполнялись условия $0 < f_1, f_3 < 1$ и $f_1^2 + f_2^2 < 1$.

По сравнению со стандартной четырехточечной процедурой Адамса, более равномерно учитывающей всевозможные знаки собственных чисел генератора линейной (или линеаризованной) системы, шаг интегрирования в случае системы (11) допускает четырехкратное увеличение.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Предложенный метод адекватно моделирует неупорядоченную систему (1), пока диффузионный радиус $r_D = \sqrt{6Dt}$ удовлетворяет условию

$$\varepsilon_D = (2r_D/R)^2 = 4\kappa\beta t/N^{2/3} < 1. \quad (34)$$

В противоположном пределе, при $\varepsilon_D > 1$, мы имеем модель переноса по кристаллу со сложной большой элементарной ячейкой, содержащей N атомов. При малых $\kappa t_0 \leq 0.1 \cdot 2\pi/R$ значение κ , вычисленное согласно (30), стабилизируется с точностью 3% при всех $\beta t \geq 40$ и $N \geq 150$ и монотонно изменяется при увеличении t . При наибольших использованных $N \approx 2700$ критерий (34) выполнен до $\beta t_{max} \approx 160$. Из этого следует, что в нашей основной проблеме (1), (3), как и в случае точно решаемых моделей [23, 24], равенство пределов

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} D(t, N) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} D(t, N) [= D]$$

справедливо по крайней мере с погрешностью $< 3\%$ и асимптотика больших времен в рассматриваемой системе является диффузионной.

Отметим, что асимптотическая стадия для $\mathcal{P}(k, t)$ наступает при значительно меньших временах, чем для автокоррелятора $\mathcal{P}_{00}(t)$. Это свойство реализуется как во всех известных методах теоретического анализа [14, 18], так и при численном моделировании, что позволяет ограничиться сравнительно малыми значениями $N \approx 500$ для получения результатов с достаточной точностью.

Сравнение полученной выше величины $\kappa_0 = 0.2954(5)$ с имеющимися в литературе значениями коэффициента диффузии в диполь-дипольной неупорядоченной системе (1) свидетельствует, что наиболее близкое к найденному нами значение предложено в теории GAF [9]: $\kappa_{GAF} = 0.315$. Модификация [13, 14] теории GAF (развитая, в частности, для обобщения теории на одномерные и двумерные системы) приводит к $\kappa_0 = \kappa_D = 0.186$, хотя здесь нужно отметить эвристический, а не математический характер предложенного видоизменения, равно как и самой теории GAF. Полуфеноменологическая теория [10, 14] использует для расчета D формулу Шера—Лэкса [7] и дает $\kappa_0 = \kappa_{SL} = 0.373$. Авторы статьи [15] получили $\kappa_0 = \kappa_{GJ} = 0.49$.

К настоящему времени выполнены две экспериментальные работы, результаты которых имеют отношение к исследованию длинновременного поведения пропагатора. В первой из них [4] было доказано существование «переколебания», которое мы обсудили выше как следствие соотношения (23), но измерения во временной области, необходимой для определения коэффициента диффузии D , не проводились, а при обработке результатов было использовано значение $\kappa_0 = \kappa_{SL}$. Таким образом, на основе работы [4] можно лишь сделать вывод, что это значение κ_0 не противоречит ее результатам. Напротив, работа [5] была направлена на измерение D , и ее результат соответствует $\kappa_0 = \kappa_{GKM} = 0.147(23)$, что при правильном учете члена σk^3 из (20) дает $\bar{\kappa}_{GKM} = 0.168(26)$ [13, 14]. Поправка на дипольную анизотропию скоростей переходов увеличивает это число до $\bar{\kappa}_{GKM} = 0.187(29)$ [13, 14]. Подчеркнем, однако, что в эксперименте [5] недостаточно исследована зависимость результатов от волнового вектора \mathbf{k} (что отмечали и сами авторы), и поэтому расхождение данного значения с результатами наших расчетов указывает на необходимость новых более точных и последовательных измерений.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Кратко охарактеризуем основные черты метода, на основе которого мы провели исследование асимптотик процессов случайных блужданий в неупорядоченных средах.

Получаемые для периодических конфигураций случайных сред конечные системы (11) и (26) при малых значениях $|\mathbf{k}|$ дают основные сведения об асимптотическом поведении на больших временах, что вытекает из следующих соображений.

1. Система (11), получаемая из (1) преобразованием Фурье на периодической конфигурации примеси, описывает процесс на бесконечной конфигурации с возбуждением, первоначально локализованном на одном узле. Это освобождает от необходимости останавливать процесс до выхода на (несуществующую) границу, с чем сталкиваются при замене бесконечной конфигурации кубом или при периодическом продолжении коррелятора p_{ij} [19, 20]. Следующая из конечности линейной системы (11) экспоненциальная асимптотика величины ρ_i — аналога фурье-образа коррелятора — не является теперь нежелательной и при надежной оценке вклада остальной части спектра отвечает существу дела. Для выявления асимптотического поведения процесса требуется выяснить характер зависимости главного собственного числа генератора $A(\mathbf{k})$ от \mathbf{k} при малых значениях $|\mathbf{k}|$.

2. Имея возможность ограничиться для получения асимптотики больших времен малыми значениями параметра $|\mathbf{k}|$, мы тем самым значительно ускоряем вычисления, поскольку начальный вектор (11) — это главный собственный вектор генератора $A(\mathbf{k} = 0)$. Существенно, что $A(\mathbf{k} = 0)$, будучи симметричным генератором неприводимой цепи Маркова, обладает единственным наименьшим собственным значением, равным нулю, а при $\mathbf{k} \neq 0$ оператор $A(\mathbf{k})$ эрмитов и положителен.

3. Неограниченное во времени продолжение вычислений даже при накоплении ошибок вычисления и округления в нормировке вектора ρ_i в остальном лишь уточняет предельный вид этого вектора — собственного вектора генератора — и соответствующее ему при $t \rightarrow +\infty$ главное собственное значение.

4. Время расчета параметров асимптотики больших времен сокращается, если аппроксимировать $P(\mathbf{k}, t | N)$ с помощью суммы двух экспонент (см. (31)) или, что за-

метно эффективнее, учитывать стремление величины $\rho^+ A\rho/\rho^+ \rho$ (см. (32)) к главному собственному значению генератора (11).

5. Важнейшее свойство, которое следует проверять при расчетах подобного вида, — нечувствительность к границам периодичности, т. е. установление того обстоятельства, что асимптотическая стадия отчетливо видна на временах, когда возбуждение еще достаточно далеко от границ куба.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 96-15-96416 и 97-01-00714).

Литература

1. C. R. Gochanour and M. D. Fayer, *J. Phys. Chem.* **85**, 1989 (1981).
2. D. E. Hart, P. A. Anfinrud, and W. S. Struve, *J. Chem. Phys.* **86**, 2689 (1987).
3. М. Х. Ашуров, Т. Т. Басиев, А. И. Бурштейн и др., *Письма в ЖЭТФ* **40**, 98 (1984).
4. В. П. Гапонцев, Ф. С. Джепаров, Н. С. Платонов, В. Е. Шестопап, *Письма в ЖЭТФ* **41**, 460 (1985).
5. L. Gómez-Jahn, J. Kasinsky, and R. J. D. Miller, *Chem. Phys. Lett.* **125**, 500 (1986).
6. Ю. Г. Абов, М. И. Булгаков, С. П. Боровлев и др., *ЖЭТФ* **99**, 962 (1991).
7. H. Scher and M. Lax, *Phys. Rev. B* **7**, 4491, 4502 (1973).
8. W. Y. Ching, D. I. Huber, and B. Barnet, *Phys. Rev. B* **17**, 5025 (1978).
9. C. R. Gochanour, H. C. Andersen, and M. D. Fayer, *J. Chem. Phys.* **70**, 4254 (1979).
10. Ф. С. Джепаров, *Радиоспектроскопия (Пермь)* **13**, 135 (1980).
11. Ф. С. Джепаров, В. С. Смелов, В. Е. Шестопап, *Письма в ЖЭТФ* **32**, 51 (1980).
12. Ф. С. Джепаров, В. Е. Шестопап, *Изв. Вузов, физ.* **30(6)**, 77 (1987).
13. Ф. С. Джепаров, *Письма в ЖЭТФ* **52**, 894 (1990).
14. Ф. С. Джепаров, *ЖЭТФ* **99**, 982 (1991).
15. M. Goldman and J. Jacquinot, *J. de Phys.* **43**, 1049 (1982).
16. B. Derrida, *J. Stat. Phys.* **31**, 433 (1983).
17. B. Derrida and J. M. Luck, *Phys. Rev. B* **28**, 7183 (1983).
18. J.-P. Bouchaud and A. George, *Phys. Rep.* **195**, 127 (1990).
19. S. K. Lyo, *Phys. Rev. B* **20**, 1297 (1979).
20. О. К. Алимов, М. Х. Ашуров, Т. Т. Басиев и др., *Труды ИОФАН* **9**, 60 (1987).
21. Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов, К. Н. Нечаев В. Е. Шестопап, *Письма в ЖЭТФ* **62**, 639 (1995).
22. P. J. H. Denteneer and M. H. Ernst, *Phys. Rev. B* **29**, 1755 (1984).
23. Ф. С. Джепаров, В. Е. Шестопап, *ТМФ* **94**, 496 (1993).
24. Ф. С. Джепаров, В. Е. Шестопап, *Письма в ЖЭТФ* **60**, 178 (1994).
25. Р. Фейнман, *Статистическая механика*, Мир, Москва (1978).
26. Э. Хайрер, С. Нерсетт, Г. Ваннер, *Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи*, Мир, Москва (1990).