

# ФИЗИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ ДРОБНО-ФРАКТАЛЬНЫХ АСИМПТОТИК ДИСПЕРСИОННОГО ТРАНСПОРТА В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СРЕДАХ

*В. Е. Архинчев\**

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

Поступила в редакцию 14 июля 2008 г.,  
после переработки 11 марта 2009 г.

Исследована задача дрейфа частиц в системах с аномальной диффузией. Установлены физические механизмы степенных фрактальных асимптотик в дисперсионном транспорте и физический смысл характерного времени смены асимптотик. Показано, что долговременные дробно-фрактальные асимптотики подвижности частиц в субдиффузионных задачах, соответствующие поведению переходных токов в неупорядоченных системах, т. е. имеющие разные степенные асимптотики на малых и больших временах, обусловлены захватом в ловушки (ребра гребешковой структуры).

PACS: 05.60.-k, 05.60.Cd

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к исследованиям стохастического транспорта в неупорядоченных системах обусловлен, в первую очередь, особенностями переноса в неупорядоченных системах. Одним из наиболее известных примеров необычного поведения транспорта в классических неупорядоченных системах является изменение характера стохастического диффузионного транспорта, а именно, степенная субдиффузионная зависимость от времени среднеквадратичного смещения случайных блужданий на перколяционных кластерах [1–3]:

$$\langle x^2(t) \rangle \propto t^{2/d_w}. \quad (1)$$

Здесь  $d_w$  — критический индекс аномальной диффузии ( $d_w > 2$ ). В работах [4–6] было показано, что для описания аномального стохастического транспорта необходимо использовать математический аппарат устойчивых распределений негауссового вида, а также аппарат производных и интегралов дробного порядка. В частности, были предложены эффективные диффузионные уравнения дробного порядка по времени [7, 8]. В работе [9] в рамках гребешковой модели было выведено уравнение диффузии с дроб-

ной производной по времени порядка  $1/2$ , описывающее диффузию вдоль оси гребешковой структуры. Дальнейшие обобщения и приложения метода уравнений дробного порядка к задачам транспорта были сделаны в работах [10, 11]. Обобщение закона Фика на случай аномальных субдиффузионных процессов было получено в работе [12].

Другой особенностью переноса в неупорядоченных средах является необычное поведение переходных токов в неупорядоченных (аморфных, сильно легированных и др.) полупроводниках. Обычно во «времяпролетных» экспериментах по определению дрейфовой подвижности носителей заряда электроны или дырки генерируются посредством лазерного импульса в образце. К электродам, прикрепленным к образцу, прикладывается электрическое поле, существенно превышающее поле неравновесных носителей. В однородных материалах носители формируют прямоугольный импульс фототока на временах, меньших времени пролета. Однако в неупорядоченных полупроводниках переходный ток  $J(t)$  носит существенно иной характер, а именно, состоит из двух степенных асимптотик [13–15]:

$$J(t) \propto \begin{cases} J_0 t^{-1+\alpha}, & t \ll T_f, \\ J_0 t^{-1-\alpha}, & t \gg T_f. \end{cases} \quad (2)$$

\*E-mail: varkhin@mail.ru

Здесь  $T_f$  — характерное время смены асимптотики, зависящее от приложенного электрического поля,  $\alpha$  — критический индекс переходных токов,  $\alpha < 1$ . Экспериментально установлено, что время  $T_f$  зависит как от длины образца  $L$ , так и от приложенного напряжения  $U$ :

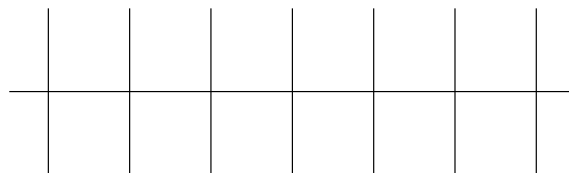
$$T_f \propto \left(\frac{L}{U}\right)^{1/\alpha}. \quad (3)$$

Необходимость исследования задач с аномальной диффузией обусловлена также и различными приложениями. Так, наряду с исследованиями переходных токов в последнее время интенсивно исследуется тепло- и массоперенос в живых организмах, включая и механизмы роста раковых клеток. Эти исследования проводятся, в том числе, и с использованием гребешковой модели, см. работы [16–18].

В недавней работе [19] был выполнен анализ экспериментальных данных по переходным токам в различных неупорядоченных материалах и был сделан вывод об универсальности дробно-фрактального поведения переходных токов, которая в свою очередь обусловлена автомодельностью переходных процессов. На основе принципа автомодельности был развит феноменологический подход, в рамках которого и были выведены кинетические уравнения дробного порядка по времени. Тем не менее, важные вопросы о физических механизмах, приводящих к степенному фрактальному поведению и последующему изменению асимптотики, так же как и вопрос о появлении характерного времени смены асимптотик, которое зависит от приложенного поля, остаются открытыми.

Целью настоящей работы является установление физических механизмов степенных фрактальных асимптотик в рамках гребешковой модели перколяционных кластеров. Показано, что дробно-степенное или фрактальное поведение переходных токов связано с аномальным характером диффузии в неупорядоченных средах, а именно, с наличием ловушек в неупорядоченных средах, на которые попадают движущиеся под действием электрического поля частицы. При этом внешнее электрическое поле влияет на степень заполнения этих ловушек, поэтому и возникает характерное время смены асимптотик, зависящее от электрического поля.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 кратко обсуждается гребешковая модель. В рамках модели выведено эффективное уравнение дробного порядка, построено решение для диффузии вдоль оси гребешковой структуры. Выведено эффективное уравнение диффузии для анизотропной диффузии



Гребешковая модель: ось и ребра, прикрепленные к оси структуры

зии в многомерном случае. В разд. 3 исследован дрейф частиц в электрическом поле. Установлено, что наличие ловушек для диффундирующих частиц в неупорядоченных средах приводит к тому, что эффективная подвижность частиц зависит от времени степенным образом аналогично временным асимптотикам переходных токов в неупорядоченных средах. В Заключении дано краткое обсуждение полученных результатов и их сравнение с результатами, полученными ранее.

## 2. ДИФфузия в модели ГРЕБЕШКОВОЙ СТРУКТУРЫ и ОБОБЩЕННЫЙ ЗАКОН ФИКА

Напомним коротко структуру гребешковой модели. Впервые она была введена для описания субдиффузии на перколяционных кластерах [20, 21]. Она состоит из хорошо проводящей оси (аналог скелета перколяционного кластера) и ребер, прикрепленных к оси — см. рисунок. Особенность диффузии в гребешковой структуре состоит в возможности смещения по  $x$ -направлению только вдоль оси структуры (при  $y = 0$ ). Это означает, что коэффициент диффузии  $D_{xx}$  отличен от нуля только при  $y = 0$ :

$$D_{xx} = D_1 \delta(y), \quad (4)$$

т. е.  $x$ -компонента диффузионного тока равна

$$J_x = -D_{xx} \frac{\partial N}{\partial x}. \quad (5)$$

Диффузия вдоль осей структуры носит обычный характер:  $D_{yy} = D_2$ . Следовательно, случайные блуждания на гребешковой структуре описываются тензором диффузии

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} D_1 \delta(y) & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Используя закон Фика для диффузионного тока,

$$\mathbf{J}_d = -\hat{D} \nabla N,$$

с тензором диффузии (6), получим диффузионное уравнение

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - D_1 \delta(y) \frac{\partial^2}{\partial x^2} - D_1 \delta(y) - D_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) G(x, y, t) = \delta(x) \delta(y) \delta(t). \quad (7)$$

Здесь  $G(x, y, t)$  — функция Грина уравнения диффузии, в качестве начальных данных используется точечный источник  $\delta(x) \delta(y) \delta(t)$ . Для дальнейшего удобства сделаем преобразование Лапласа по времени и преобразование Фурье по  $x$ -координате:

$$\left[s + D_1 k^2 \delta(y) - D_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right] \hat{G}(s, k, y) = \delta(y). \quad (8)$$

Здесь  $\hat{G}(s, k, y)$  — преобразованная по времени и координате функция Грина уравнения диффузии. Решение уравнения (8) с сингулярным коэффициентом будем искать в виде

$$\hat{G}(s, k, y) = g(s, k) \exp(-\lambda|y|), \quad (9)$$

где  $\lambda$  — неизвестный параметр, а  $g(s, k)$  — неизвестная функция, которые необходимо определить. Подставляя решение (9) в уравнение (8), получим регулярное выражение и выражение с сингулярным коэффициентом  $\delta(y)$ :

$$\begin{aligned} [s - D_2 \lambda^2] \hat{G}(s, k, y) &= 0, \\ [D_1 k^2 + 2\lambda D_2] \delta(y) g(s, k, y) &= \delta(y). \end{aligned} \quad (10)$$

Из первого уравнения мы определим значение параметра  $\lambda$ , а из второго уравнения (10) найдем выражение для функции  $g(s, k)$ :

$$\lambda = \sqrt{\frac{s}{D_2}}, \quad g(s, k) = \frac{1}{2D_2 \lambda + D_1 k^2}. \quad (11)$$

Чтобы получить обобщенное уравнение диффузии в двумерном случае, рассмотрим подробнее решение (9). Сделаем фурье-преобразование этого решения по координате  $y$ :

$$\hat{G}(s, k_x, k_y) = \frac{2\lambda}{(2D_2 \lambda + D_1 k_x^2)(\lambda^2 + k_y^2)}. \quad (12)$$

Соответственно получим следующее уравнение диффузии для анизотропных случайных блужданий на гребешковой структуре для плотности диффундирующих частиц  $\rho(s, k_x, k_y)$ :

$$\left[(2D_2 \lambda_y + D_1 k_x^2) \left(\frac{\lambda}{2} + \frac{k_y^2}{2\lambda}\right)\right] \rho(s, k_x, k_y) = 0. \quad (13)$$

Пренебрегая в полученном уравнении произведением  $k_x^2 k_y^2$  (это возможно на больших масштабах), получим следующее эффективное диффузионное уравнение:

$$\left(s + D_1 k_x^2 \sqrt{\frac{s}{D_2}} + D_2 k_y^2\right) \rho(s, k_x, k_y) \approx 0. \quad (14)$$

Возвращаясь в обычное представление в координатах  $x, y, t$ , получим эффективное уравнение диффузии в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{D_1}{2\sqrt{D_2}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} - D_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \rho(t, x, y) = 0. \quad (15)$$

Представляя уравнение диффузии в виде стандартного уравнения непрерывности,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0, \quad (16)$$

получим операторное выражение для эффективного тензора диффузии в обобщенном законе Фика:

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} \frac{D_1}{2\sqrt{D_2}} \frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Таким образом, показано, что в задачах с аномальной субдиффузией закон Фика существенно модифицируется. Во-первых, коэффициент диффузии становится тензором, во-вторых, компоненты тензора диффузии приобретают операторный вид. В связи с существенным изменением закона Фика возникает вопрос о поведении подвижности частиц в постоянном электрическом поле.

### 3. ДИСПЕРСИОННЫЙ ТРАНСПОРТ В ГРЕБЕШКОВОЙ СТРУКТУРЕ С АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИЕЙ

Чтобы исследовать вопрос о подвижности частиц в задачах с аномальной субдиффузией ниже в настоящем параграфе рассмотрим перенос носителей заряда в гребешковой структуре под действием электрического поля  $E$ . Как и раньше, предположим, что дрейф вдоль  $x$ -направления возможен только при  $y = 0$ :

$$\mu_{xx} = \mu_1 \delta(y), \quad (18)$$

т. е.  $x$ -компонента диффузионного тока равна

$$J_x = q \rho \mu_1 \delta(y) E_x. \quad (19)$$

Здесь  $q$  — заряд носителей тока,  $\rho$  — концентрация носителей. Дрейф вдоль ребер структур носит обычный характер:  $V_y = \mu_{yy} E_y$  ( $\mu_{yy} = \mu_2$ ). Следовательно, дрейф частиц под действием электрического поля описывается тензором подвижности:

$$\mu_{ij} = \begin{pmatrix} \mu_1 \delta(y) & 0 \\ 0 & \mu_2 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Соответственно получим уравнение для диффузии по гребешковой структуре в электрическом поле:

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} - \left( D_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \mu_1 E_x \frac{\partial}{\partial x} \right) \delta(y) - \left( D_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \mu_2 E_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] G(x, y, t; E) = \delta(x) \delta(y) \delta(t), \quad (21)$$

где  $G(x, y, t; E)$  — функция Грина диффузионного уравнения в электрическом поле. Повторяя приведенные выше рассуждения, получим новые уравнения для параметра  $\lambda$ :

$$s - D_2 \lambda^2 + \mu_2 E_y \lambda \theta(y) = 0, \quad (22)$$

где

$$\theta(y) = \begin{cases} 1, & \text{если } y > 0, \\ -1, & \text{если } y < 0, \end{cases}$$

— единичная функция Хэвисайда.

Таким образом, для верхней (+) и нижней (−) полуплоскостей получаем разные значения параметра  $\lambda$ :

$$\lambda^\pm = \sqrt{\frac{s}{D_2} + \left( \frac{\mu_2 E_y}{D_2} \right)^2} \pm \frac{\mu_2 E_y}{D_2}, \quad (23)$$

и выражение для функции  $g$ :

$$g(s, k, E) = \frac{1}{2D_2(\lambda^+ + \lambda^-) + D_1 k^2 + ik_x \mu_1 E_x}. \quad (24)$$

Совершая обратное фурье-преобразование по координате  $y$ , получим

$$G(s, k_x, k_y; E) = (\lambda^+ + \lambda^-) \times (2D_2(\lambda^+ + \lambda^-) + D_1 k_x^2 + ik_x \mu_1 E_x)^{-1} \times (\lambda^+ \lambda^- + ik_y(\lambda^+ - \lambda^-) + k_y^2)^{-1}. \quad (25)$$

В результате имеем следующее эффективное диффузионное уравнение для концентрации частиц во внешнем электрическом поле:

$$\left( s + (D_1 k_x^2 + ik_x \mu_1 E_x) \sqrt{\frac{(s/D_2)^2}{s/D_2 + (V_y/2D_2)^2}} + D_2 k_y^2 + ik_y \mu_2 E_y \right) \rho(s, k_x, k_y; E) \approx 0. \quad (26)$$

Таким образом, при включении электрического поля получаем, что лапласовский образ  $x$ -компоненты эффективной подвижности равен

$$\mu_{xx}^e(s) = \frac{\mu_1}{2\sqrt{D_2}} \frac{s}{\sqrt{s + V_y^2/4D_2}}. \quad (27)$$

Полученный результат означает, что эффективная подвижность частиц вдоль оси структуры  $\mu_{xx}^e$  меняется со временем и зависит также от поперечной компоненты поля  $E_y$ :

$$\begin{aligned} \mu_{xx}^e(t) &= \frac{\mu_1}{2\sqrt{D_2}} \int \frac{s \exp(st) ds}{\sqrt{s + V_y^2/4D_2}} = \\ &= \frac{\mu_1}{2\sqrt{D_2}} \frac{\exp(-t/t_{Ey})}{\sqrt{t^3}} f\left(\frac{t}{t_{Ey}}\right). \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь  $t_{Ey} = 4D_2/V_y^2$  — время, определяемое  $y$ -компонентой электрического поля  $E_y$  вдоль ребер гребешковой структуры, функция  $f(z) = 1 + 2z$  имеет следующие предельные значения:

$$f(z) = \begin{cases} 1, & \text{если } z \ll 1, \\ 2z, & \text{если } z \gg 1. \end{cases}$$

Компонента  $\mu_{yy}^e = \mu_2$  имеет обычный вид. Следовательно, эффективная подвижность на гребешковой структуре имеет тензорный вид:

$$\mu^e = \begin{pmatrix} \mu_{xx}(t) & 0 \\ 0 & \mu_{yy} \end{pmatrix}. \quad (29)$$

Зависимость  $x$ -компоненты эффективной подвижности от  $t$  связана с изменением характера диффузии от обычного к субдиффузионному за счет тупиков или «мертвых концов» на токонесящих путях.

Необходимо отметить, что установленная выше временная зависимость эффективной подвижности  $\mu_{xx}^e(t)$  соответствует дисперсионному транспорту с известными асимптотиками переходных токов в неупорядоченных и аморфных системах [13–15] — см. формулу (2). Экспоненциальное уменьшение обусловлено эффективным уменьшением числа частиц на оси структуры (снос под действием поля). В исследованном нами случае  $T_f$  — характерное время смены асимптотики, зависящее от приложенного электрического поля, — соответствует времени диффузии вдоль ребер  $t_{Ey} = 4D_2/V_y^2$  на расстояние порядка «полевой длины»  $L_E = kT/qE$ . Значение критического индекса равно  $\alpha = 1/2$ .

## 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, показано, что аномальное случайное блуждание на гребешковой структуре в асимптотическом пределе больших времен (больших масштабов) описывается эффективными диффузионными уравнениями, содержащими помимо обычных пространственных производных также и производные по времени дробного порядка. Иными словами, эффективный тензор диффузии в законе Фика приобретает операторный вид — см. формулу (17). Такое необычное представление для тензора диффузии связано с аномальным субдиффузионным характером случайных блужданий на гребешковой структуре. Наши результаты существенно отличаются от результатов работ [23, 24], в которых исследование аномальных случайных блужданий на гребешковой структуре основано на использовании коэффициента диффузии, зависящего как от координат, так и от времени степенным образом. Этот подход, впервые предложенный в работе [25], на наш взгляд представляется неточным, поскольку нарушает симметрию и однородность среды — появляются сингулярные точки, связанные с началом блуждания, в которых коэффициент диффузии обращается в бесконечность. Авторы считают, что усреднение по ансамблю начальных точек и времен блужданий снимает это возражение, но мы полагаем, что симметрия должна исходно содержаться в эффективных уравнениях, а не привносится извне путем дополнительного усреднения.

В связи с существенным изменением закона Фика возникает также вопрос о подвижности части в электрическом поле. В статье исследован дрейф на гребешковой структуре. Показано, что из-за аномального характера диффузии и вследствие захвата в ловушки подвижность частиц убывает со временем степенным образом с двумя характерными асимптотиками. Как уже отмечалось выше, такая временная зависимость эффективной подвижности  $\mu_{xx}^e(t)$  соответствует асимптотическому поведению переходных токов в неупорядоченных и аморфных системах. Полученный на основании исследования дрейфа в системах с аномальной диффузией результат (28) позволяет понять общий механизм возникновения переходных токов в неупорядоченных и аморфных системах. Степенные асимптотики переходных токов обусловлены наличием ловушек или тупиков на токонесящих путях в этих системах. (В гребешковой модели они моделируются ребрами, прикрепленными к одномерному скелету модели.) Необходимо подчеркнуть, что в реальных неупоря-

доченных системах перколяционного типа всегда есть ловушки для носителей заряда. В качестве ловушек выступают как тупики или «мертвые концы» на токонесящих путях, так и участки проводящих путей, направленных против направления электрического поля. При этом степень заполнения этих ловушек регулируется включением внешнего электрического поля. В очень слабых электрических полях частицы уходят в ловушки и почти с той же вероятностью возвращаются, в более сильных полях возврат частиц из ловушек становится затруднительным. Это и приводит к различным временным асимптотикам переходных токов. Отсюда же возникает и зависимость переходного времени  $T_f$  от электрического поля.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 08-02-98010).

## ЛИТЕРАТУРА

1. M. B. Isichenko, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 961 (1992).
2. J. Klafter and R. Metzler, *Phys. Rep.* **339**, 1 (2000).
3. R. Metzler and J. Klafter, *Adv. Chem. Phys.* **116**, 223 (2001).
4. S. G. Samko, A. A. Kilbas, and O. I. Marichev, *Fractional Integrals and Derivatives. Theory and Applications*, Gordond and Breach, Amsterdam (1993).
5. *Applications of Fractional Calculus in Physics*, ed. by R. Hilfer, World Sci. (2000).
6. В. В. Учайкин, *ЖЭТФ* **97**, 810 (2003).
7. R. Nigmatullin, *Phys. Stat. Sol.* **133**, 425 (1986).
8. Р. Р. Нигматуллин, *ТМФ* **90**, 354 (1992).
9. В. Е. Архинчеев, Э. М. Баскин, *ЖЭТФ* **73**, 161 (1991).
10. К. В. Чукбар, *ЖЭТФ* **109**, 1335 (1996).
11. В. Ю. Забурдаев, К. В. Чукбар, *ЖЭТФ* **121**, 299 (2002).
12. В. Е. Архинчеев, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 580 (2007).
13. И. П. Звягин, *Кинетические явления в неупорядоченных системах*, Изд-во МГУ, Москва (1984).
14. H. Scher and E. W. Montroll, *Phys. Rev. B* **12**, 2445 (1975).
15. A. K. Joncher, *Universal Relaxation Law*, Chelsea Dielectric Press, London (1996).

16. E. Baskin and A. Iomin, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 120603 (2004).
17. A. Iomin and E. Baskin, *Phys. Rev. E* **71**, 061101 (2005).
18. A. Iomin, *J. Phys.* **7**, 57 (2005).
19. В. В. Учайкин, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 584 (2007).
20. S. White and M. Varma, *J. Phys. A* **17**, 2995 (1984).
21. G. Weiss and S. Havlin, *Physica A* **134**, 474 (1986).
22. I. M. Sokolov, *Phys. Rev. E* **63**, 011104 (2000).
23. D. Campos, V. Mander, and J. Fort, *Phys. Rev. E* **69**, 031115 (2004).
24. S. Sellers and J. A. Barker, *Phys. Rev. E* **74**, 061103 (2006).
25. B. O'Shaughnessy and I. Procaccia, *Phys. Rev. A* **32**, 3073 (1985).