ЖЭТФ, 2019, том 155, вып. 1, стр. 184–188

СКЕЙЛИНГ В ПРОБЛЕМЕ ЗАХВАТА ДИФФУНДИРУЮЩИХ ЧАСТИЦ НА ПОГЛОЩАЮЩИЕ ЛОВУШКИ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В. Е. Архинчеев *

Laboratory of Applied Physics, Advanced Institute of Materials Science, Ton Duc Thang University
700000, Ho Chi Minh City, Vietnam

Faculty of Applied Sciences, Ton Duc Thang University
700000, Ho Chi Minh City, Vietnam

Поступила в редакцию 1 июля 2018 г.,
после переработки 15 августа 2018 г.
Принята к публикации 22 августа 2018 г.

Исследована асимптотика вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками в электрическом поле. Асимптотическое поведение вероятности выживания при анизотропной диффузии исследовано в двух случаях: на малых временах в приближении эффективной среды и на больших временах во флуктуационной области. Показано, что в обоих случаях описание можно представить в скейлинговом виде.

DOI: 10.1134/S0044451019010152

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема диффузии частиц в средах с поглощающими ловушками изучалась во многих работах [1–3]. Было показано, что в приближении эффективной среды вероятность выживания диффундирующих частиц равна [3]

$$W(t, c) \propto W_0 \exp(-Dtc^2). \qquad (1)$$

Здесь D — коэффициент диффузии, c — концентрация ловушек в одномерном случае. Соответственно, возникает характерное время диффузии, на расстоянии порядка среднего расстояния между ловушками: $t_c = 1/Dc^2$. В работах [4, 5] подробно исследовался случай захвата на поглощающие ловушки случайно распределенных в пространстве диффундирующих частиц на больших временах вне приближения эффективной среды. Было показано, что в пределе больших времен $t \gg t_c = 1/Dc^2$ приближение эффективной среды неприменимо и вероятность выживания частиц определяется существованием достаточно больших областей, свободных от ловушек. Другими словами, на больших временах вероятность определяется флуктуациями плотности поглощающих ловушек и носит экспоненциальный характер:

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

Проблема диффузии в средах со случайно распределенными ловушками также является классической моделью для диффузионно-контролируемых химических реакций [6–9] и изучалась во многих работах [10, 11].

Впервые проблема диффузии частиц в средах с поглощающими ловушками в электрических полях изучалась в работах [12] и [13]. Было установлено экспоненциальное убывание, соответствующее приближению эффективной среды в электрическом поле:

$$\overline{W}(t; E) \propto \overline{W}(t; 0) \exp\left(-\frac{v^2 t}{4D}\right). \qquad (3)$$

Далее, в работе [14] был исследован многомерный случай. Авторы утверждали, что постоянный дрейф ведет к асимптотически-экспоненциальному убыва-

* E-mail: valeriy.arkhincheev@tdtu.edu.vn

нию в пределе больших времен с линейным по электрическому полю множителем в экспоненте:

$$\overline{W}(t;E) \propto \overline{W}(t;0)\exp\left(-\frac{v^2t}{4D} - \pi cvt\right). \qquad (4)$$

В работах [15, 16] утверждалось, что электрическое поле приводит к «фазовому переходу» — переходу от локализации в области с ловушками к дрейфовому поведению с увеличением электрического поля — и, согласно их результатам, существует критическое значение электрического поля, ниже которого дрейфовая скорость равна нулю, а выше — возникает ненулевая скорость.

В настоящей работе продолжено исследование нового механизма переноса частиц, обусловленного дрейфом частиц [17]. При включении электрического поля в проблему диффузии с поглощающими ловушками дополнительно возникает новое характерное время — «полевое» время; на временах порядка «полевого» времени дрейфовое смещение сравнивается с диффузионным: $v^2t_E^2 \propto Dt_E$, а на временах, больших по сравнению с «полевым», дрейф частиц становится доминирующим:

$$t_E = \frac{D}{v^2}. \qquad (5)$$

Соответственно, временные асимптотики вероятности выживания частиц, диффундирующих в средах с ловушками, будут определяться соотношением времен t_c и t_E. Будет показано, что именно дрейфовый механизм будет определять временную асимптотику вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками как в приближении эффективной среды, так и во флуктуационной области.

2. ПРИБЛИЖЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ СРЕДЫ В ПРОБЛЕМЕ ДИФФУЗИИ В СРЕДАХ С ЛОВУШКАМИ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Напомним коротко известные результаты. Согласно работам [4, 5] строится решение стандартного уравнения диффузии,

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial x^2}, \qquad (6)$$

со следующими начальными и граничными условиями:

$$W(x,0) = \frac{1-c}{L}, \quad W(x_i,t) = W(x_{i+1},t) = 0. \qquad (7)$$

Здесь L — длина цепочки, x_i, x_{i+1} — координаты поглощающих ловушек. Решение уравнения диффузии с поглощающими граничными условиями имеет вид

$$W(x,t) = \frac{4}{L}\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left\{-\frac{1}{2}Dk_n^2t\right\} \times \times \frac{\sin\left(k_n(x-x_i)\right)}{k_nl_i}, \qquad (8)$$

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:

$$\overline{W}(t) = \sum_i \overline{W}_i = \sum_i \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} W(x,t)\,dx. \qquad (9)$$

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).

Электрическое поле в задачу диффузии в средах с поглощающими ловушками вводится стандартным образом как анизотропия вдоль направления электрического поля и в противоположном направлении. Соответственно уравнение диффузии в электрическом поле примет вид

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial t^2} - v\frac{\partial W(x,t)}{\partial x}. \qquad (10)$$

Здесь $v = \mu E$ — дрейфовая скорость частиц в электрическом поле E, μ — подвижность частицы. Начальные и граничные условия ставим аналогично сформулированным выше условиям (7). Соответственно, по-прежнему ищем решение в виде

$$W(x,t;E) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\varphi_n\exp(-E_nt). \qquad (11)$$

При этом выражение для собственных функций меняется:

$$\varphi_n = \exp\left(\frac{v(x-x_i)}{2D}\right)\sin\left(k_n(x-x_i)\right), \qquad (12)$$

а собственные значения определяются выражением

$$E_n = Dk_n^2 + \frac{v^2}{4D}. \qquad (13)$$

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

$$\overline{W}(t;E) \propto \exp\left(-\frac{v^2 t}{4D}\right). \qquad (14)$$

Интересно отметить, что в приближении эффективной среды согласно (1) и (14) вероятность выживания частиц в средах с ловушками оказывается равной

$$W(t;c) \propto W_0 \exp\left(-\frac{t}{t_c} - \frac{t}{4t_E}\right) \propto \propto W_0 \exp\left(-\frac{t}{t_c}\left[1 + \left(\frac{qE}{2kTc}\right)^2\right]\right). \qquad (15)$$

В случае слабых электрических полей, когда $qE/ckT \ll 1$ (электрический потенциал на расстоянии порядка среднего расстояния между ловушками меньше kT), или на временах $t_c \ll t_E$ временная асимптотика вероятности выживания частиц зависит только от захвата на ловушки — см. формулу (1).

В сильных электрических полях $qE/ckT \gg 1$, что соответствует обратному соотношению между временами $t_c \gg t_E$, основной вклад во временную зависимость вероятности выживания определяется «полевым временем» — см. формулу (15).

Введя параметры $x = t/t_c$, $y = t/t_E$, представим результаты (15) в скейлинговом виде:

$$\ln\left(\frac{W_0}{W(x;y)}\right) \propto x f\left(\frac{y}{x}\right) = \begin{cases} x, & y/x \ll 1, \\ y, & 1 \ll y/x. \end{cases} \qquad (16)$$

3. УЧЕТ ФЛУКТУАЦИЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ПОГЛОЩАЮЩИХ ЛОВУШЕК, В ТОМ ЧИСЛЕ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

На больших временах асимптотика вероятности выживания частиц, диффундирующих в среде с ловушками, определяется флуктуациями концентрации ловушек, т. е. областями, свободными от ловушек из-за флуктуаций. В этих областях частицы будут выживать дольше всех, и именно наличие этих областей и определяет временные асимптотики вероятности выживания частиц в средах с ловушками.

Согласно методу, развитому в работе [4], необходимо усреднить полученное выше выражение (11) по случайному расположению ловушек. (В нашей работе оно принято в пуассоновском виде.) Таким образом, асимптотический вид решения во флуктуационной области определяется следующим выражением (см. также формулу из Приложения 1 работы [6]):

$$W(t;E) \approx \approx \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \exp\left(-D\frac{\pi^2(2n+1)^2}{l^2}t - \frac{vl}{4D} - cl\right) dl, \qquad (17)$$

где интеграл соответствует усреднению по расстоянию между примесями.

Далее асимптотический экспоненциальный вид решений будем искать методом перевала. Согласно (17) перевальные точки определяются из уравнения

$$D\frac{\pi^2(2n+1)^2}{l^2}t + \frac{vl}{4D} + cl = 0. \qquad (18)$$

В общем случае значение перевальной точки определяется выражением

$$l = \sqrt[3]{\frac{\pi^2 Dt}{c + v/4D}}. \qquad (19)$$

В этом выражении с учетом известного соотношения Эйнштейна $\mu\kappa T = qD$ и возникает указанный выше энергетический параметр (5):

$$l = \sqrt[3]{\frac{\pi^2 Dt}{c + qE/4kT}}. \qquad (20)$$

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

$$W(t;E) \propto \propto W_0 \exp\left(-\frac{3\pi^{1/2}}{2}\left(Dtc^2\left[1 + \frac{qE}{4ckT}\right]^2\right)^{1/3}\right). \qquad (21)$$

Полученный результат аналогичен результату, установленному в приближении эффективной среды, т. е. представи́м в виде суммы двух экспонент:

$$W(t;c) \propto \propto W_0 \exp\left(-C\left(\frac{t}{t_c}\right)^{1/3} - C_3\left(\frac{t}{t_E}\right)^{1/3}\right). \qquad (22)$$

Используя ранее введенные параметры $x = t/t_c$, $y = t/t_E$, результат (22) можно представить в скейлинговом виде:

$$\ln\left(\frac{W_0}{W(x;y)}\right) \propto x^{1/3} g\left(\frac{y}{x}\right) = \left\{ \begin{array}{ll} x^{1/3}, & y/x \ll 1, \\ y^{1/3}, & y/x \gg 1. \end{array} \right. \qquad (23)$$

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обсудим полученные результаты. Как следует из выражений (15) и (22), на больших масштабах и/или в сильном электрическом поле вероятность выживания частиц при поглощении на ловушки на больших временах определяется новым механизмом — дрейфом частиц под действием электрического поля, что описывается соответствующим членом в экспоненте. Этот механизм становится существенным, когда на длине порядка среднего расстояния между ловушками электрический потенциал становится порядка kT: $qE/c \sim kT$. Как следствие, возникает новое асимптотическое поведение, обусловленное действием электрического поля. (Отметим, что аналогичный параметр возникает и в задачах с аномальной диффузией Леви, где наблюдается нелинейное поведение [18,19].)

Поскольку полученные временные закономерности определяются новым параметром — «полевой длиной» $L_E = kT/qE$ — и связанным с ним «полевым временем» $t_E = L_E^2/D$, полученные выражения в силу автомодельности диффузионных процессов [20,21] могут быть представлены в скейлинговом виде [22,23], см. формулы (16) и (23). Представление в скейлинговом виде делает полученные результаты более наглядными и более понятными физически, на наш взгляд.

Подчеркнем также, что дрейфовый механизм определяет временную асимптотику выживания частиц в сильных электрических полях как в области, где работает приближение среднего поля, так и во флуктуационной области. Соответственно, и скейлинговое описание описывает временные асимптотики вероятности выживания также в обеих областях. Напомним, что обычно скейлинговый подход используется при переходе во флуктуационную область.

Необходимо отметить, что полученные выше формулы, описывающие влияние электрического поля на захват заряженных частиц ловушками, не учитывают экранировку электрического поля. Это возможно, поскольку долговременные асимптотики вероятности выживания диффундирующих частиц определяются областями, свободными от ловушек вследствие флуктуаций. Поскольку эти области не содержат ловушек, невозможен захват заряженных частиц и, как следствие, невозможно изменение электрического поля из-за экранировки в этих областях, возникших вследствие флуктуаций концентраций ловушек. Поэтому по крайней мере долговременные асимптотики будут описываться формулой (22), полученной для однородного электрического поля.

Кроме того, полученные результаты будут правильными в приближении как малых концентраций диффундирующих частиц, так и малых концентраций ловушек, когда влияние захваченных заряженных частиц не будет значительно менять величину электрического поля.

Тем не менее вопрос об изменении величины локального электрического поля вследствие экранировки электрического поля представляется важным и требует дальнейших исследований.

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. Б. Я. Балагуров, В. Г. Вакс, ЖЭТФ **65**, 1600 (1973).
5. Б. Я. Балагуров, В. Г. Вакс, ЖЭТФ **65**, 1939 (1973).
6. M. Donsker and S. Varadhan, Comm. Pure Appl. Math. **28**, 525 (1975).
7. M. Donsker and S. Varadhan, Comm. Pure Appl. Math. **32**, 721 (1979).
8. F. Benitez, C. Duclut, H. Chaté, B. Delamotte, I. Dornic, and M. A. Muñoz, Phys. Rev. Lett. **117**, 100601 (2016).
9. Sang Bub Lee, In Chan Kim, C. A. Miller, and S. Torquato, Phys. Rev. B **39**, 11833 (1989).
10. I. Fouxon and M. Holzner, Phys. Rev. E **94**, 022132 (2016).
11. N. Felekidis, A. Melianas, and M. Kemerink, Phys. Rev. B **94**, 035205 (2016).

12. P. Grassberger and I. Procaccia, Phys. Rev. A **26**, 3686 (1982).

13. B. Movaghar, B. Pohlmann, and D. Würtz, Phys. Rev. A **29**, 1568 (1984).

14. V. Mehra and P. Grassberger, Physica D **168**, 244 (2002).

15. D. Ioffe and Y. Velenik, Comm. Math. Phys. **313**, 209 (2012).

16. E. Agliari et al., New J. Phys. **14**, 063027 (2012).

17. В. Е. Архинчеев, ЖЭТФ **67**, 518 (2017).

18. В. Е. Архинчеев, Письма в ЖЭТФ **67**, 518 (1998).

19. В. Е. Архинчеев, AIP Conf. Proc. **553**, 231 (2001); http://dx.doi.org/10.1063/1.1358189.

20. Я. Б. Зельдович, А. Д. Мышкис, *Элементы математической физики*, Наука, Москва (1973).

21. Л. И. Седов, *Методы подобия и размерности в механике*, Наука, Москва (1977).

22. P.-G. de Gennes, *Scaling Concepts in Polymer Physics*, Cornell Univ. Press (1979).

23. L. P. Kadanoff, *Statistical Physics*: *Statics, Dynamics and Renormalization*, World Sci. (2000).