Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. П. Фатеев, Метод когерентного потенциала для задачи диффузии на случайной решетке замещения, *ТМФ*, 2006, том 149, номер 2, 252–261

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf4232>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.82.47.9

26 апреля 2023 г., 07:57:55

© 2006 г.

М. П. Фатеев*

МЕТОД КОГЕРЕНТНОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ ЗАДАЧИ ДИФфуЗИИ НА СЛУЧАЙНОЙ РЕШЕТКЕ ЗАМЕЩЕНИЯ

На основе уравнения баланса рассмотрена задача диффузии на гиперрешетке со случайно распределенными недоступными узлами. С использованием диаграммных методов найдено самосогласованное выражение для конфигурационно-усредненной функции Грина в приближении когерентного потенциала. Показано, что указанный подход справедлив в широком диапазоне изменения концентраций доступных узлов. С помощью рассмотренного приближения найдена точная асимптотика для статического коэффициента диффузии при малой концентрации заблокированных узлов. Это позволяет с хорошей точностью оценивать пороги протекания для задачи диффузии со случайными узлами на произвольных гиперрешетках.

Ключевые слова: метод когерентного потенциала, функция Грина, диффузия, протекание, задача случайных узлов, диаграммные методы.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время возрос интерес к исследованию процессов переноса в неупорядоченных системах [1]. Задачи такого типа возникают при изучении прыжковой проводимости в примесных полупроводниках, переноса электронных возбуждений в органических соединениях, диффузии в сплавах и стеклах и т.д. Было показано, что в этом случае диффузия или прыжковая проводимость проявляют немарковское поведение [2], [3].

При исследовании процессов переноса на решетке со статическим беспорядком обычно рассматриваются две основные модели: задача случайных барьеров (связей) (ЗСБ) и задача случайных узлов (ЗСУ). В первом случае частота переходов $W_{nn'} = W_{n'n}$ зависит от состояния связи между узлами n и n' , по которым происходит переход. Во втором случае частота переходов $W_{nn'} = W_n$ определяется состоянием узла n , на который происходит прыжок (здесь мы не рассматриваем модель ловушек, где частота переходов определяется состоянием узла, из которого происходит прыжок). При этом обычно предполагается отсутствие корреляций в

*Национальный научный центр “Харьковский физико-технический институт”, Харьков, Украина. E-mail: mfateev@kipt.kharkov.ua

распределении случайных узлов или связей. ЗСБ широко используется при моделировании диффузии атомов в неупорядоченных средах, а ЗСУ – при исследовании процессов переноса электронных возбуждений и прыжковой проводимости по локализованным примесным центрам в полупроводниках и органических соединениях. Если частота прыжка имеет пороговый вид, то первая задача приводит к проблеме протекания по связям, а вторая – к протеканию по узлам. ЗСБ подробно исследована в пространстве произвольной размерности d с использованием метода когерентного потенциала (МКП) [4]. Этот метод дает разумные результаты при произвольном распределении случайных барьеров (в отсутствие корреляций), хорошо согласующиеся с результатами моделирования методом Монте-Карло [1]. Что касается ЗСУ, то в большинстве работ, посвященных данной проблеме, для решения этой задачи фактически рассматривалась ЗСБ. Например, в работах [2], [5] при исследовании прыжковой проводимости использовалось приближение диагональной функции Грина, что вместе с парным приближением приводит к ЗСБ. В работе [6] предложен метод “эффективной среды” для решения задачи протекания по узлам в пространстве путем замены ЗСУ на ЗСБ на некоторой эффективной решетке. Этот прием использовался и во многих других работах при рассмотрении прыжковой проводимости для малой концентрации примесей [7]. Причиной этого является то, что между этими моделями имеется много общего. Действительно, в решетке, имеющей случайные узлы, диффузия происходит по случайным связям, которые коррелируют друг с другом, если они имеют общий узел. Во многих случаях в статическом пределе такими корреляциями можно пренебречь, и мы приходим к ЗСБ. Вместе с тем хорошо известно, что эти модели могут иметь и существенно различные свойства. Например, порог протекания для ЗСБ определяется, главным образом, координационным числом решетки z (при рассмотрении протекания по ближайшим соседям), а для ЗСУ – параметром упаковки этой решетки. При этом ЗСУ в известном смысле оказывается более общей. Именно, ЗСБ можно всегда свести к ЗСУ на решетке иной геометрии [8].

Целью настоящей работы является попытка разработать новый алгоритм решения ЗСУ, который использует МКП – наиболее эффективное одноузельное приближение, известное в настоящее время. При этом мы сформулируем общий диаграммный метод нахождения коэффициента диффузии для ЗСУ, отличный от ЗСБ. ЗСУ будет рассмотрена на примере модели диффузии в гиперрешетке замещения размерности d с некоррелированным статическим беспорядком, характеризующимся наличием заблокированных узлов с концентрацией $(1 - c)$. Предполагается, что диффузия происходит путем прыжков между ближайшими незаблокированными узлами с постоянной частотой переходов W .

2. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ДИФфуЗИОННОЙ ФУНКЦИИ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЯ

Рассмотрим уравнение баланса в представлении чисел заполнения [9] для функции условной вероятности $P_{n/m}(t)$ – вероятности того, что в момент времени t ча-

стица окажется на узле n , если при $t = 0$ она была локализована на узле m :

$$sP_{n/m}(s) = c_n \delta_{nm} + \sum_{n'} (P_{n'/m} c_n - P_{n/m} c_{n'}) W_{nn'}. \quad (1)$$

Здесь $P_{n/m}(s)$ – лапласов образ функции $P_{n/m}(t)$, $W_{nn'} = W$ – частота перехода между ближайшими узлами n и n' , а c_n – случайная величина, характеризующая распределение доступных (незаблокированных) узлов:

$$c_n = \begin{cases} 1, & \text{если узел } n \text{ является доступным,} \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Поскольку предполагается отсутствие корреляции в распределении случайных узлов, для средних от произведения c_n имеем

$$\langle c_n \rangle = c, \quad \langle c_n c_n \rangle = c, \quad \langle c_n c_{n'} \rangle = c^2, \quad n \neq n', \quad (2)$$

и т.д. Уравнение (1) удобно представить в матричном представлении, используя формализм Дирака:

$${}_s\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{C}} + \hat{\mathbf{V}}\hat{\mathbf{P}}, \quad (3)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}} &= \sum_{n,n'} P_{n/n'} |n\rangle \langle n'|, \\ \hat{\mathbf{V}} &= \sum_{n,n'} c_n W_{nn'} (|n\rangle \langle n'| - |n'\rangle \langle n|) = \sum_n c_n \hat{\mathbf{v}}_n, \\ \hat{\mathbf{C}} &= \sum_n c_n |n\rangle \langle n| = \sum_n c_n \hat{\mathbf{p}}_n. \end{aligned}$$

Диффузионное уравнение (1) отличается от обычно используемых уравнений диффузии наличием случайного свободного члена, учитывающего невозможность размещения диффундирующей частицы в заблокированных узлах. Функция условной вероятности $P_{n/m}(s)$ удовлетворяет нормировочным условиям, следующим из закона сохранения полной вероятности:

$$\sum_n sP_{n/m}(s) = c_m, \quad \sum_m sP_{n/m}(s) = c_n. \quad (4)$$

Итерация уравнения (3) по свободному члену приводит к ряду

$$\hat{\mathbf{P}} = s^{-1} \sum_n c_n \hat{\mathbf{p}}_n + s^{-2} \sum_{n,n'} c_n c_{n'} \hat{\mathbf{v}}_n \hat{\mathbf{p}}_{n'} + s^{-3} \sum_{n,n',n''} c_n c_{n'} c_{n''} \hat{\mathbf{v}}_n \hat{\mathbf{v}}_{n'} \hat{\mathbf{p}}_{n''} + \dots \quad (5)$$

Усредним каждый член этого ряда по случайному распределению c_n согласно (2). Формально полученный ряд теории возмущений аналогичен рядам для решеточных моделей, используемым в теории неупорядоченных сплавов с диагональным беспорядком [10]. Для его анализа будем использовать метод кумулянтных разложений [11], [12]. При этом среднее от произведения любых случайных величин c_n

может быть разбито на сумму всевозможных произведений кумулянтных средних от этих величин [12]:

$$\langle c_n \rangle = \langle c_n \rangle^c, \quad \langle c_n c_{n'} \rangle = \langle c_n \rangle^c \langle c_{n'} \rangle^c + \langle c_n c_{n'} \rangle^c$$

и т.д. Результат усреднения удобно представить в графическом виде, как показано на рис. 1. Светлому кружку сопоставляется множитель $\hat{\mathbf{P}}_n$, черному – $\hat{\mathbf{v}}_n$. По

Рис. 1. Диаграммное представление конфигурационно-усредненной диффузионной функции $\widehat{\hat{\mathbf{P}}}$.

номерам различных точек происходит суммирование. Всем горизонтальным сплошным линиям соответствует множитель s^{-1} , пучок штриховых (примесных) линий, соединяющий m точек, обозначает кумулянтное среднее $Q_m(c)$ от m множителей:

$$Q_m(c) = \langle c_1 c_2 \dots c_m \rangle^c. \quad (6)$$

Из рис. 1 видно, что все диаграммы подразделяются на приводимые (которые можно разбить на две или более частей вертикальными сечениями, не пересекающими штриховые линии) и неприводимые. Обозначим через $\hat{\mathbf{S}}$ сумму всех неприводимых диаграмм, которые содержат светлый кружок. Эти диаграммы изображены на рис. 2. Сумму всех остальных диаграмм обозначим через $\hat{\mathbf{G}}$. Тогда

Рис. 2. Диаграммное представление функции $\hat{\mathbf{S}}$.

конфигурационно-усредненная диффузионная функция $\widehat{\hat{\mathbf{P}}} = \langle \hat{\mathbf{P}} \rangle$ имеет вид

$$\widehat{\hat{\mathbf{P}}} = \hat{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{G}}. \quad (7)$$

В свою очередь, класс диаграмм, относящихся к функции $\hat{\mathbf{G}}$, может быть разбит на класс неприводимых диаграмм, сумму которых обозначим через $\hat{\Pi}$ (массовый оператор), и класс приводимых диаграмм. Используя стандартную процедуру теории возмущений, легко получить уравнение Дайсона для функции $\hat{\mathbf{G}}$:

$$s \hat{\mathbf{G}} = \hat{\mathbf{I}} + \hat{\Pi} \hat{\mathbf{G}}, \quad (8)$$

где $\hat{\mathbf{I}}$ – единичный оператор в пространстве состояний $|n\rangle$. На рис. 3 изображены

Рис. 3. Диаграммное представление массового оператора $\hat{\mathbf{P}}$.

диаграммы, представляющие массовый оператор $\hat{\mathbf{P}}$. Как видно из (8), функция $\hat{\mathbf{G}}$ представляет собой функцию Грина. Эта функция описывает диффузию частицы, которая вначале помещается не на доступный узел, как в (1), а в произвольный узел решетки. Затем частица переходит на ближайшие незаблокированные узлы и далее диффундирует только по ним. Следовательно, статические коэффициенты диффузии, определяемые пропагаторами $\hat{\mathbf{P}}$ и $\hat{\mathbf{G}}$, совпадают. Функция $\hat{\mathbf{S}}$ учитывает корреляции, которые возникают из-за случайного распределения начальных условий в (3). Роль этой функции заключается в сокращении вклада диаграмм для диффузионной функции $\hat{\mathbf{P}}$, которые начинаются на заблокированных узлах. Данная функция отсутствует в ЗСБ, поскольку в этой модели все узлы решетки изначально считаются доступными. Рассмотренная диаграммная техника была впервые предложена в работе [2].

3. МЕТОД КОГЕРЕНТНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Точное суммирование диаграммных рядов для функций $\hat{\mathbf{P}}$ и $\hat{\mathbf{S}}$ невозможно. Однако можно провести частичное суммирование этих рядов путем учета только одночастичных диаграмм, в которых все узлы совпадают. Это приближение соответствует МКП [10], [12]. Используя формальное сходство ряда для диффузионной функции (5) с рядом теории возмущений для функции Грина в модели сплава с диагональным беспорядком, легко получить уравнения для операторов $\hat{\mathbf{P}}$ и $\hat{\mathbf{S}}$, которые соответствуют МКП для ЗСУ:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}} &= \sum_n \hat{\sigma}_n, & \hat{\sigma}_n &= c\hat{\mathbf{v}}_n + (\hat{\mathbf{v}}_n - \hat{\sigma}_n)\hat{\mathbf{G}}\hat{\sigma}_n, \\ \hat{\mathbf{S}} &= \sum_n \hat{\mathbf{s}}_n, & \hat{\mathbf{s}}_n &= c\hat{\mathbf{p}}_n + (\hat{\mathbf{v}}_n - \hat{\sigma}_n)\hat{\mathbf{G}}\hat{\mathbf{s}}_n.\end{aligned}\quad (9)$$

На языке диаграммной техники указанное приближение соответствует суммированию всех одночастичных диаграмм с заменой внутренних линий, соответствующих множителю s^{-1} , на линии, соответствующие полным функциям Грина $\hat{\mathbf{G}}$. В результате получается самосогласованная система зацепляющихся уравнений для матричных элементов операторов $\hat{\sigma}_n$ и $\hat{\mathbf{s}}_n$. В модели диффузии по ближайшим узлам на гиперрешетке общее выражение для операторов $\hat{\sigma}_n$ и $\hat{\mathbf{s}}_n$ в МКП имеет вид

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_n &= W\sigma_0(s) \sum_m \Delta_{n,m}^1 |m\rangle \langle m| + W\sigma_1(s) \sum_m \Delta_{n,m}^1 |n\rangle \langle m| + \\ &+ W\sigma_2(s) \sum_m \Delta_{n,l}^1 \Delta_{n,m}^1 \Delta_{l,m}^2 |l\rangle \langle m| + W\sigma_3(s) \sum_m \Delta_{n,l}^1 \Delta_{n,m}^1 \Delta_{l,m}^3 |l\rangle \langle m|, \\ \hat{\mathbf{s}}_n &= S_0 |n\rangle \langle n| + S_1 \sum_m \Delta_{n,m}^1 |m\rangle \langle n|,\end{aligned}\quad (10)$$

где $\Delta_{n,m}^\alpha$, $\alpha = 1, 2, 3$, – функции обрезания, ограничивающие суммирование по узлам решетки, α -й координационной сферой радиуса R_α :

$$\Delta_{n,m}^\alpha = \begin{cases} 1, & \text{если } |\vec{r}_n - \vec{r}_m| = R_\alpha, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Из выражений (10) следует, что величины S_0 , S_1 и σ_i , $i = 0, 1, 2, 3$, полностью определяют диффузионную функцию $\widehat{\mathbf{P}}$. В свою очередь, они не являются независимыми и удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} \sigma_0 + \sigma_1 + 2(d-1)\sigma_2 + \sigma_3 &= 0, \\ S_0 + zS_1 &= c, \end{aligned} \quad (11)$$

где $z = 2d$ – координационное число гиперрешетки размерности d . Следует отметить, что, в отличие от случая ЗСБ [4], выражение для оператора когерентного потенциала $\hat{\sigma}_n$ определяется тремя функциями σ_i , $i = 1, 2, 3$, описывающими частоты переходов в эффективной гиперрешетке между узлами, расположенными на расстояниях трех ближайших координационных радиусов R_α , $\alpha = 1, 2, 3$. Подставляя (10) в (9), с учетом (11) находим выражения для массового оператора $\widehat{\mathbf{\Pi}}$ и оператора $\widehat{\mathbf{S}}$ в МКП:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{S}} &= c\hat{\mathbf{I}} - zS_1(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{e}}_1), \\ \widehat{\mathbf{\Pi}} &= -zW[\sigma_1(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{e}}_1) + 2(d-1)\sigma_2(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{e}}_2) + \sigma_3(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{e}}_3)], \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$\hat{\mathbf{e}}_\alpha = \frac{1}{2d} \sum_{n,m} \Delta_{n,m}^\alpha |n\rangle \langle m|, \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

Переходя в k -представление, имеем

$$S(\vec{k}, s) = c - zS_1(s)(1 - \varepsilon_1(\vec{k})), \quad (13)$$

$$\Pi(\vec{k}, s) = -zW[\sigma_1(s)(1 - \varepsilon_1(\vec{k})) + 2(d-1)\sigma_2(s)(1 - \varepsilon_2(\vec{k})) + \sigma_3(s)(1 - \varepsilon_3(\vec{k}))], \quad (14)$$

где $\varepsilon_\alpha(\vec{k})$ – функция, определяющая закон дисперсии для α -й координационной сферы:

$$\varepsilon_\alpha(\vec{k}) = \frac{1}{2d} \sum_m \Delta_{n,m}^\alpha e^{i\vec{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)}.$$

Как видно из (14), функция Грина $G(\vec{k}, s)$ при $k \rightarrow 0$ имеет диффузионный полюс:

$$\begin{aligned} \Pi(\vec{k}, s) &= -Wa^2\vec{k}^2[\sigma_1(s) + 4(d-1)\sigma_2(s) + 4\sigma_3(s)], \\ S(\vec{k}, s) &= c - S_1(s)a^2\vec{k}^2. \end{aligned} \quad (15)$$

При этом конфигурационно-усредненная диффузионная функция $\overline{P}(\vec{k}, s)$ в k -представлении равна

$$\overline{P}(\vec{k}, s) = \frac{S(\vec{k}, s)}{s - \Pi(\vec{k}, s)}. \quad (16)$$

Это позволяет выразить полный коэффициент диффузии рассматриваемой задачи через независимые функции $\sigma_i(s)$, $i = 1, 2, 3$, и $S_1(s)$:

$$D(s) = -\frac{s^2}{z} \lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \frac{\hat{\Delta}_{\vec{k}} P(\vec{k}, s)}{c} = W a^2 [s S_1(s) + \sigma_1(s) + 4(d-1)\sigma_1(s) + 4\sigma_3(s)]. \quad (17)$$

Получим самосогласованные уравнения для набора когерентных потенциалов σ_i и функции S_1 в явном виде. Для этого подставим выражения (10) в уравнения (9) и вычислим матричные элементы соответствующих операторов между состояниями, определяемыми узлами решетки, лежащими на расстояниях трех ближайших координационных сфер. С учетом кубической симметрии решетки имеем

$$\begin{aligned} S_1 &= -\sigma_1(1 - \sigma_1)g_1, \\ \sigma_1 &= c + \sigma_1(1 - \sigma_1)(J_3 + 2(d-1)J_2 - 2dJ_3), \\ \sigma_2 &= -b_2(1 - \sigma_1) + \sigma_2(2b_2 - b_1 - b_3), \\ \sigma_3 &= -b_3(1 - \sigma_1) + 2(d-1)\sigma_2(b_3 - b_2) + \sigma_3(b_3 - b_1), \end{aligned} \quad (18)$$

где величины b_i , $i = 1, 2, 3$, в свою очередь, удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{(s/W)g_0 - 1}{z}, \\ b_2 &= (J_2 - J_1)\sigma_1 + (2J_2 - J_3)\sigma_2, \\ b_3 &= (J_3 - J_1)\sigma_1 + 2(d-1)(J_3 - J_2)\sigma_2 + J_3\sigma_3. \end{aligned} \quad (19)$$

Функции $J_\alpha(s, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$, $\alpha = 1, 2, 3$, определяются с помощью решеточных сумм:

$$\begin{aligned} J_\alpha(s) &= W(\langle n|\hat{G}|n\rangle - \Delta_{n,m}^\alpha \langle n|\hat{G}|m\rangle) = W \sum_{\vec{k}} \frac{1 - \varepsilon_\alpha(\vec{k})}{s - \Pi(\vec{k}, s)}, \\ g_1(s) &= W \Delta_{n,m}^1 \langle n|\hat{G}|m\rangle = W \sum_{\vec{k}} \frac{\varepsilon_1(\vec{k})}{s - \Pi(\vec{k}, s)}, \\ g_0(s) &= W \langle n|\hat{G}|n\rangle = W \sum_{\vec{k}} \frac{1}{s - \Pi(\vec{k}, s)}. \end{aligned} \quad (20)$$

В общем случае получается замкнутая система трансцендентных уравнений для набора когерентных потенциалов σ_i , которую можно решить только численными методами. Для того чтобы проанализировать характер получаемых решений, найдем асимптотику этих выражений в пределе $c \rightarrow 1$. Известно, что в МКП учитываются все члены разложения для массового оператора $\hat{\Pi}$ и соответственно оператора $\hat{\mathbf{S}}$ порядка $O(c(1-c))$. Тогда, удерживая в уравнениях (18) и (19) члены порядка $O(1-c)$, можно получить точную асимптотику коэффициента диффузии $D(s)$ при $c \rightarrow 1$ для ЗСУ. В результате имеем

$$\frac{D(s)}{W a^2} = 1 - (1-c) \left[\frac{1 + \bar{J}_3(s)}{1 - \bar{J}_3(s)} + B(s) + s \bar{g}_1(s) \right] + o(1-c), \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} B(s) &= \bar{J}_3(s) + 2(d-1)\bar{J}_2(s) - 2d\bar{J}_1(s), \\ \bar{J}_\alpha(s) &= W \sum_{\vec{k}} \frac{1 - \varepsilon_\alpha(\vec{k})}{s + zW(1 - \varepsilon_1(\vec{k}))}, \\ \bar{g}_1(s) &= W \sum_{\vec{k}} \frac{\varepsilon_1(\vec{k})}{s + zW(1 - \varepsilon_1(\vec{k}))}. \end{aligned}$$

Численный анализ показывает, что величиной $B(s)$ в выражении (21) можно пренебречь при $|s/W| \ll 1$ ($B(0) \leq 10^{-5}$ для $d = 2, 3$). В этом случае в статическом пределе ($s \rightarrow 0$) коэффициент диффузии удобно представить в виде

$$D(c) = \frac{1 + \bar{J}_3}{1 - \bar{J}_3}(c - c_p), \quad (22)$$

где $c_p = 2\bar{J}_3/(1 + \bar{J}_3)$.

Найденное выражение (22) совпадает с результатом работы [13], где рассматривалась задача диффузии меченого атома в мультикомпонентном сплаве, состоящем из нескольких сортов атомов, диффундирующих с различными скоростями по вакансионному механизму (динамический беспорядок). В предельном случае, когда все атомы с концентрацией $(1 - c)$ становятся неподвижными, а меченый атом диффундирует по вакансиям, было получено выражение (22). Величина $\bar{J}_3$ совпадает с известным выражением для среднего косинуса угла между направлениями последовательных прыжков вакансий при их диффузии в идеальной решетке [14]. Предполагая, что линейная зависимость (22) для коэффициента диффузии $D(c)$ имеет место для произвольной концентрации c , получаем порог протекания при концентрации доступных узлов, равной c_p [13].

4. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Следует отметить, что близкая к линейной зависимость коэффициента диффузии от концентрации с хорошей точностью подтверждается численными расчетами методом Монте-Карло практически для всех решеток как для ЗСУ, так и для ЗСБ. Лишь в непосредственной близости от порога протекания имеет место значительное отклонение от линейного закона, приводящее к различию реального порога протекания и порога протекания, получаемого с помощью линейной зависимости (22).

Для того чтобы проанализировать поведение статического коэффициента диффузии $D(c)$ в МКП при произвольной концентрации доступных узлов c , было выполнено численное интегрирование системы уравнений (18)–(20). Результаты расчетов сравнивались с результатами, полученными с помощью моделирования методом Монте-Карло для трехмерной кубической решетки. Результаты расчетов представлены на рис. 4. Из рисунка видно, что кривая, полученная с использованием МКП, значительно отклоняется от кривой, полученной методом Монте-Карло при концентрации доступных узлов $c \leq 0.6$. Она обрывается в точке $c \approx 0.54$, где исчезает сходимость численной процедуры нахождения решения уравнений (18), (19). Эта

Рис. 4. Зависимость статического коэффициента диффузии от концентрации доступных узлов: 1 – МКП, 2 – метод Монте-Карло, 3 – линейная зависимость (22).

точка соответствует пределу сходимости ряда для массового оператора в приближении МКП. При $c > 0.6$ обе кривые практически совпадают с линейной зависимостью вида (22). При увеличении размерности пространства область сходимости для массового оператора непрерывно увеличивается, а предел сходимости стремится к порогу протекания. Таким образом, можно заключить, что МКП достаточно хорошо описывает модель диффузии для ЗСУ в широком диапазоне изменения концентрации доступных узлов как для статического, так и для динамического режима. Однако при подходе к порогу протекания МКМ оказывается несостоятельным. Причиной этого является необходимость учета следующих членов разложения для диффузионной функции по концентрации доступных узлов вблизи порога протекания. Это приводит к выходу за рамки одноузельного приближения, что ведет к чрезвычайному усложнению диаграммных рядов и не позволяет получить замкнутые выражения для диффузионной функции. Использование результатов ЗСБ для описания диффузии в ЗСУ также имеет свои ограничения. Несмотря на то что статический коэффициент диффузии, полученный в рамках этой модели с помощью МКП, достаточно хорошо согласуется с линейной зависимостью вида (22) (в этой модели порог протекания равен $c_p = 1/d$ и не зависит от типа решетки), это приближение оказывается некорректным для описания динамических свойств ЗСУ. Это является следствием того, что в ЗСБ не учитываются корреляции в распределении случайных связей, характерных для ЗСУ. Поскольку на малых и средних временах такие корреляции вносят заметный вклад в диффузионную функцию, аппроксимация ЗСУ с помощью ЗСБ в этом случае оказывается некорректной.

Благодарности. Автор признателен Н. П. Лазареву за помощь при моделировании диффузии методом Монте-Карло.

Список литературы

- [1] J. W. Hausе, K. W. Kehr, *Phys. Rep.*, **150** (1987), 263.
- [2] В. В. Брыксин, Г. Ю. Яшин, *ФТТ*, **25** (1982), 3025.
- [3] Н. П. Лазарев, М. П. Фатеев, *ТМФ*, **89**:3 (1991), 465.
- [4] I. Webman, J. Klafter, *Phys. Rev. B*, **26** (1982), 5958.
- [5] R. F. Loring, H. C. Andersen, M. D. Fayer, *J. Chem. Phys.*, **80** (1984), 5731.
- [6] T. Odagaki, M. Lax, *Phys. Rev. B*, **36** (1987), 3851.
- [7] В. В. Брыксин, *ФТТ*, **26** (1984), 1362.
- [8] D. Stauffer, A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor and Francis, London, Washington DC, 1994.
- [9] Ф. С. Джепаров, А. А. Лундин, *ЖЭТФ*, **75** (1978), 1017.
- [10] R. J. Elliott, J. A. Krumhansl, P. L. Leath, *Rev. Mod. Phys.*, **46**:3 (1974), 465.
- [11] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan*, **17** (1962), 1100.
- [12] F. Yonezawa, T. Matsubara, *Progr. Theor. Phys. Suppl.*, **53** (1973), 1.
- [13] R. A. Tahir-Kheli, *Phys. Rev. B*, **28** (1983), 3049.
- [14] J. R. Manning, *Phys. Rev. B*, **4** (1971), 1111.

Поступила в редакцию 1.05.2006