ՀՏԴ 621.039.341:539.12

Ա.Կ. ՔԱԼԱՇՅԱՆ

ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ՏՐՎԱԾ ԽՏՈՒԹՅԱՄԲ ՄԻՋԱՎԱՅՐՈՒՄ ՄԱՍՆԻԿԻ ԴԻՖՈՒԶԻԱՆ

(Վանաձոր)

Հետազոտվում է միաչափ ցանցում (ID) մասնիկի դիֆուզիան՝ որպես դասական լոկալացման մոդել: Նման տեսական մոդելը կարող է բնութագրել ամորֆ նյութերը: Միաչափ ցանցը ներկայացնում է գծորեն միմյանց հետ կապված հարմոնիկ օսցիլյատորների համակարգ՝ տարբեր ω հաճախություններով: Այս տիպի դիֆուզիան նկարագրվում է մեծ ալիքային երկարություններով վիճակների խտությամբ: Ցույց է տրվում, որ այս դեպքում վիճակների տրված $\rho(\omega)$ խտությամբ դիֆուզիան նորմալ չէ (անոմալ է) ρ–ի ω-ից տրված աստիճանային կախվածության և մեծ ժամանակահատվածների դեպքում: Թվային մեթոդով լուծվում է Լանժևինի ընդհանրացված հավասարումը (ԼԸՀ)՝ տրված սկզբնական պայմաններով, և հաշվարկվում են մասնիկի կոորդինատի երկրորդ սկզբնական մոմենտը և արագության կոռելյացիոն ֆունկցիան: Հաշվարկը կատարվում ե Լապլասի հակադարձ թվային ձևափոխությամբ՝ ըստ Տալբոտի ալգորիթմի: Այս մոդելը նկարագրում է մասնիկի դասական լոկալացումը 1D (միաչափ) ըստ տարածության կարգավորված համակարգում: Ոչ կարգավորված լինելը հասկացվում է օսցիլյատորների հաճախության (ω) պատահական լինելով՝ ըստ տրված հավանականային խտության: Փոխելով վիճակների խտության $\rho(\omega)\sim\omega^{-\mu}$ աստիճանային կախվածությունը, ստացվում է տարբեր տիպի դիֆուզիոն երևույթ: Թվայնորեն ցույց է տրվում, որ մասնիկի արագության կոռելացիոն ֆունկցիան ունի բացասական ճյուղ և նկարագրվում է $C_v(t)\sim t^{-(1+\mu)}$ ժամանակային կախվածությամբ $(\mu > 0)$:

Առանցքային բառեր. լոկալացում, չկարգավորված համակարգ, միաչափ ցանց, կոռելյացիա:

Ներածություն. Մասնիկի դասական լոկալացման խնդիրը եղել է հետազոտության կենտրոնում երկար ժամանակ: Անդերսոնն իր հոդվածում ցույց է տվել միաչափ համակարգում սպինային դիֆուզիայի բացակայությունը [1]:

Այլ հեղինակներ [2] ցույց են տվել, որ լայն տիրույթով հիշողությունից չի բխում անոմալ դիֆուզիայի անհրաժեշտությունը: Ըստ նրանց՝ դիֆուզիան դասակարգելու համար անհրաժեշտ է իմանալ $\chi(z)$ ֆունկցիայի վարքը $z \to 0$ սահմանում, քանի որ $\rho(\omega \to 0)$ վիճակների խտությամբ մոտավորությունը որոշում է դիֆուզիայի տիպը, որտեղ $\chi(z)$ ֆունկցիան հիշողության կեռնելն է:

Նմանատիպ խնդիր է քննարկվել [3] և [4] աշխատանքներում: [5]-ում քննարկվում է գծորեն կապված հարմոնիկ օսցիլյատորների դասական մոդելը՝ պարբերական ու ֆիքսված սահմանային պայմաններով, և վերլուծաբար գտնվել են արագության ու տեղափոխության կոռելյացիոն ֆունկցիաները: Ֆիքսված սահմանային պայմանների առկայությամբ այս մեծությունները (N → ∞) թերմոդինամիկական սահմանային դեպքում ունեն հետևյալ տեսքը.

$$\langle \mathrm{v}_j(t)\mathrm{v}_j(0)\rangle = \frac{k_B T}{2m}[J_0(2\omega t) - J_{4j}(2\omega t)] \tag{1}$$

$$\langle \boldsymbol{x_j(t)x_j(0)}\rangle = \frac{\boldsymbol{k_B T}}{\boldsymbol{2m\omega^2}}[\boldsymbol{j} - \frac{\boldsymbol{\omega t}}{\boldsymbol{2m\omega^2}}\sum_{n=0}^{\infty} \boldsymbol{J_{2n+1}(2\omega t)} + \boldsymbol{J_{2n+3}(2\omega t)} - $$
$$-\boldsymbol{J_{2n+4j+1}(2\omega t)} - \boldsymbol{J_{2n+4j+3}(2\omega t)} + \frac{\boldsymbol{4j}}{\boldsymbol{\omega t}}\boldsymbol{J_{2n+4j+2}(2\omega t)}]], \tag{2}$$

որտեղ J_n –ը Բեսսելի n կարգի ֆունկցիաներն են, $\mathrm{v_j}(t)$ և $\mathrm{x_j}(t)$-ն՝ j-րդ օսցիլյատորի դաշտում մասնիկի արագության և դիրքի ֆունկցիաները համապատասխանաբար: Դիֆուզիայի հաստատունը[6] հետևյալն է.

$$D_j = \lim_{t\to\infty}[\frac{k_B T}{2\omega^2 \boldsymbol{t}} j] = 0, \tag{3}$$

որտեղ $\omega = \sqrt{\frac{\mathrm{k}}{\mathrm{m}}}$ –ն օսցիլյատորի հաճախությունն է:

[7]-ում քննարկվում է չկարգավորված ցանցի կոռելացված հանգույցների դաշտում էլեկտրոնի տարածումը ω-ի պատահական արժեքների դեպքում: Դիտարկվում է էլեկտրոնային քվանտային դիֆուզիայի և լոկալացման քվանտային մեխանիկական պրոցեսը: Լոկալացման ոչ կոռելացված անկարգավորվածության դեպքում մասնիկի դիրքի քառակուսու միջին արժեքը հաստատուն է ($\langle \mathrm{x}^2(t)\rangle \sim \mathrm{const} \sim \xi^2$), որտեղ ξ-ն լոկալացման երկարությունն է: Քննարկվում է կոռելացված չկարգավորված դեպքը, երբ լոկալացումն արտահայտվում է աստիճանային ֆունկցիայով. $\langle \mathrm{x}^2(t)\rangle \sim \mathrm{t}^{\alpha}$ երբ $\mathrm{t} \to \infty$), որտեղ α<1: Ցանցում կոռելյացիաները կարող են լինել, օրինակ, ֆոնոնները և այլն: Ցույց է տրվում, որ լոկալացման երկարությունը (ξ) և վիճակների խտությունը տարամիտում են, երբ $|E| = 0$ ($\rho(\mathrm{E}) \sim \mathrm{E}^{-\mu}, \mu > 0$), որը նշանակում է մասնիկի լոկալացում (կապված վիճակներ) մասնիկի $|E|$=0-ի շրջակայքով էներգիաների դեպքում: Էներգիայի այլ արժեքների դեպքում վիճակների խտությունը ($\rho(\mathrm{E})$) նվազում է աստիճանային ֆունկցիայի վարքով: Էլեկտրոնային փաթեթի լայնացումը տարածության մեջ հետևյալն է[8].

$$\langle [x(t) - x(0)]^2\rangle = \sum_n [n - n_0]^2\, |\psi_n(t)|^2, \tag{4}$$

որտեղ *n-ը* նկարագրում է մասնիկի դիրքը: Սկզբնական պայմանը հետևյալն է. $\psi_n(t = 0) = \delta_{nn_0}$. $|\psi_n(t)|$-ն հավանականությունն է այն բանի, որ էլեկտրոնը գտնվում է ցանցի n-րդ հանգույցում ժամանակի t պահին:

[6]-ում քննարկվում է դասական դիֆուզիայի երևույթը, երբ մասնիկի վիճակների խտությունը մոտավորապես հաստատուն է՝ $\rho(\mathrm{E}) \sim const$: Դիտարկվում է նորմալ դիֆուզիայի երևույթը, և ցույց է տրվում, որ դիֆուզիան սկզբունքորեն նկարագրվում է վիճակների խտությամբ մասնիկի ալիքի մեծ երկարությունների դեպքում:

Դայսոնը [5] դիտարկել է միաչափ կապված հարմոնիկ օսցիլյատորների դեպքը: Հեղինակը ճշգրիտ կերպով հաշվարկել է բնութագրական հաճախականությունների խտությունը (այս դեպքում՝ վիճակների խտությունը) միաչափ անվերջ շղթայի համար, որը շղթայի ֆոնոնային մոդելն է:

Սույն աշխատանքում դիտարկվում է մասնիկի սաբդիֆուզիայի երևույթը կամ, այլ կերպ ասած, մասնիկի դասական լոկալացումը (տեղայնացումը): Մասնիկը փոխազդում է արտաքին (դիսիպացիոն) միջավայրի հետ, որը հանդիսանում է հարմոնիկ օսցիլյատորների միաչափ համակարգ՝ μ-ի հետևյալ արժեքների դեպքում՝ $0 < \mu < 1$: Վիճակների խտության համար դիտարկվում է $\rho(\mathrm{E}) \sim \mathrm{E}^{-\mu}$ մոտավորությունը:

Լանժևինի ընդհանրացված մեթոդը: Դիտարկենք հարմոնիկ օսցիլյատորներից կազմված միաչափ համակարգ: Մասնիկի շարժման համիլտոնյանը այսպիսի համակարգում լավ հայտնի է: Մոդելավորելով համակարգը ըստ [6]-ի՝ $\mathbf{v}(\mathbf{t})$ ֆիզիկական մեծության համար հայտնի Լանժևինի ընդհանրացված մեթոդը (ԼԸՀ) արտահայտենք՝

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \mathrm{v}(t) \\ m\frac{d\mathrm{v}(t)}{dt} = -\frac{dV(x,t)}{dx} - m\int_0^t \chi(t-\xi)\mathrm{v}(\xi)d\xi + F(t), \end{cases} \tag{5}$$

որտեղ $x(t)$ և $p(t) = mv(t)$ մեծությունները մասնիկի կոորդինատն ու շարժման քանակն են համապատասխանաբար, $V(x,t)$–ն՝ արտաքին դաշտի պոտենցիալը, m-ը՝ մասնիկի զանգվածը, $\chi(t)$ և $F(t)$ մեծությունները՝ հիշողության կեռնելը և աղմուկը համակարգում համապատասխանաբար:

Դիտարկելով թերմոդինամիկական $(\mathrm{N} \to \infty)$ սահմանը, աղմուկի համար կարելի գրել.

$$F(t) = \int_0^\infty A(\omega)\cos[\omega t + \phi(\omega)]\,d\omega, \tag{6}$$

որտեղ $A(\omega)$ աստիճանային սպեկտրն է, իսկ $\phi(\omega)$-ն՝ պատահական ֆունկցիա տրված հավանականային խտությամբ՝ $0 \le \phi(\omega) \le 2\pi$: Ըստ ֆլուկտուացիոն – դիսիպացիոն հարաբերության՝

$$\langle F(t)F(0)\rangle = mk_BT\chi(t), \tag{7}$$

որտեղ՝

$$x(t) = \int_0^\infty \rho(\omega)\cos(\omega t)d\omega, \tag{8}$$

որտեղ $\rho(\omega) = A^2(\omega)/2mk_BT$-ն դիսիպացիոն-ջերմային միջավայրի (հարմոնիկ աղմուկ) վիճակների խտությունն է: Դիֆուզիայի հաստատունը [7].

$$D = \lim_{t\to\infty}\frac{\langle x^2(t)\rangle}{2t} = \int_0^\infty C_v(t)dt, \tag{9}$$

որտեղ $C_v(t) \equiv \frac{\langle v(t)v(0)\rangle}{<v^2(0)>}$ և *x(t)*-ն արագության ստացիոնար կոռելյացիոն ֆունկցիան և մասնիկի դիրքն են համապատասխանաբար: Մեծ ժամանակահատվածների համար՝

$$\lim_{t\to\infty}\langle x^2(t)\rangle \sim t^\alpha : \tag{10}$$

Դիֆուզիայի հաստատունը՝

$$D = \begin{cases} \infty, 1 < \alpha < 2, \textit{գերդիֆուզիա} \\ 0, 0 < \alpha < 1\,, \textit{սաբդիֆուզիա} \\ \textit{վերջավոր}, \alpha = 1, \textit{նորմալ} \end{cases}$$

α = 2 դեպքը պարզապես ազատ շարժման դեպքն է:

(6) արտահայտությունը բազմապատկենք $v(0)$-ով և կատարենք անսամբլային միջինացում և հաշվի առնելով, որ $\langle F(t)v(0)\rangle = \langle F(t)\rangle\langle v(0)\rangle = 0$ ($\langle F(t)\rangle = 0$), կստանանք հետևյալ հավասարումը.

$$m\frac{d}{dt}C_v(t) = -\frac{1}{\langle v^2(0)\rangle}\langle\frac{d[V(x,t)]}{dx}v(0)\rangle - m\int_0^t \chi(t-\xi)\,C_v(\xi)d\xi : \tag{11}$$

Այժմ անհրաժեշտ է լուծել (11) հավասարումը $C_v(t)$-ի նկատմամբ: Կատարենք Լապլասի ձևափոխություն t-ի նկատմամբ. կստացվի.

$$C_v(s) \equiv \frac{mC_v(0) - L\left[\frac{1}{\langle v^2(0)\rangle}\langle\frac{d[V(x,t)]}{dx}v(0)\rangle\right]}{ms + m\hat{\chi}(s)}, \tag{12}$$

where L[f]–ը f-ի Լապլասյան ձևափոխություն է: Կրկին հիշեցնենք, որ <…> նշանակումը վերաբերում է անսամբլային միջինացմանը՝ ըստ պատահական ելքերի: Օրինակ, արտաքին դաշտի տարածական և ժամանակային $V(x,t) \equiv A\cos(\omega_0 t)$ պարզագույն կախվածության դեպքում ունենք.

$$C_v(s) \equiv \frac{mC_v(0) - \frac{A}{\langle v^2(0)\rangle}\frac{s}{s^2+\omega_0^2}\langle v(0)\rangle}{ms + m\hat{\chi}(s)}, \tag{13}$$

(13) արտահայտության մեջ ենթադրել ենք, որ արտաքին դաշտի $[\cos(\omega_0 t)]$ ժամանակային կախվածության մասը կոռելացված չէ $v(0)$-ի հետ, և անսամբլեային միջինացումը կատարվում է միայն $v(0)$-ի համար: Այնուհետև հակադարձ Լապլասյան ձևափոխության ենք ենթարկում $C_v(s)$ ֆունկցիան՝ ստանալու $C_v(t)$ մեծությունը, որը օգտակար է դասական դիֆուզիայի պրոցեսը և համակարգի այլ ֆիզիկական հատկությունները նկարագրելու համար: Մնում է հասկանալ ջերմային միջավայրի $\chi(t)$ հիշողության ֆիզիկական կողմերը՝ կախված համապատասխան նյութերի հատկություններից:

Վիճակների խտությունը $\rho(\omega) = B\omega^{-\mu}(0 < \mu < 1)$ է, որտեղ B-ն հաստատուն պարամետր է: Վիճակների խտությունն այստեղ հասկացվում է որպես ջերմային միջավայրի միավոր էներգիային համապատասխանող վիճակների թիվը: Տեղադրելով $\rho(\omega)$ արտահայտությունը (8)-ում, ունենք՝

$$\chi(t) = \frac{\Gamma(1-\mu)\sin\left[\frac{\pi\mu}{2}\right]}{t^{1-\mu}}: \tag{14}$$

(14) արտահայտությունից՝

$$\hat{\chi}(s) = \frac{\Gamma(1-\mu)\Gamma(\mu)\sin\left[\frac{\pi\mu}{2}\right]}{s^{\mu}}, \tag{15}$$

որտեղ $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1}\, e^{-t} dt$-ն Էյլերի գամմա ֆունկցիան է: Լապլասի ձևափոխության ենթարկելով (9) արտահայտությունը, դիֆուզիայի հաստատունի համար ունենք.

$$D = \hat{C}_v(0) = \frac{\hat{C}_v(0)}{\chi(0)}: \tag{16}$$

Այսինքն՝ $\hat{\chi}(0)$-ն նկարագրում է դիֆուզիայի հաստատունը վերջավոր $\hat{C}_v(0)$-ի համար: Լապլասի ձևափոխության ենթարկելով (8) արտահայտությունը, ունենք՝

$$\hat{\chi}(0) = \lim_{s\to\infty} \int_0^\infty \rho(\omega) \frac{s}{s^2+\omega^2} d\omega = \frac{\pi}{2}\rho(0): \tag{17}$$

Հետևաբար, մեծ ալիքային երկարությունների ($\omega \to 0$)-ի դեպքում, տրված աղմուկի (պատահական ֆլուկտուացիաների) համար վիճակների $\rho(\omega)$ խտությունը նկարագրում է դիֆուզիայի պրոցեսը և մասնիկի դիրքի (կոորդինատի) քառակուսու միջին արժեքը: (9) հավասարումից ունենք.

$$D \sim t^{\alpha-1}: \tag{18}$$

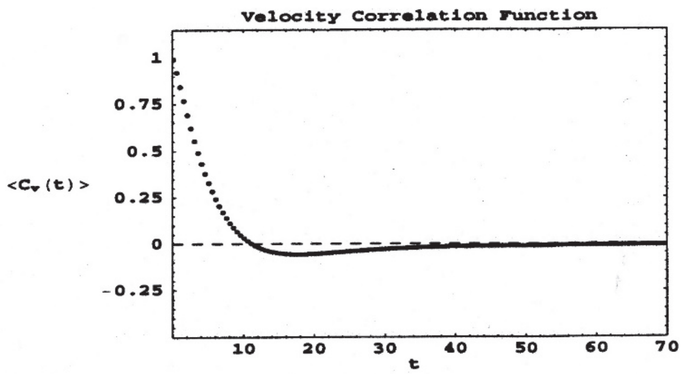
(16) և (18) արտահայտություններից հետևում է, որ $\alpha = 1 - \mu$: Այսինքն՝ μ-ի արժեքը փոխելով՝ կարող ենք ղեկավարել դիֆուզիայի պրոցեսը:

Վերոհիշյալ հաշվարկները կատարվում են α-ի $0 < \alpha < 1$ արժեքների, այսինքն՝ սաբդիֆուզիայի համար: Մասնիկի տեղափոխության քառակուսու միջին արժեքը, ստացիոնար $C_v(t)$ կոռելյացիոն ֆունկցիայի դեպքում, ըստ Գրին-Կուբո [6] բանաձևի՝ x(0)=0 սկզբնական պայմանի դեպքում տրվում է այսպես.

$$\langle \boldsymbol{x^2(t)} \rangle = \mathbf{2}\langle \mathbf{v^2}(0) \rangle \int_{\mathbf{0}}^{\mathbf{t}} \boldsymbol{dt'} \int_{\mathbf{0}}^{\boldsymbol{t'}} \boldsymbol{dt''}\, C_{\mathbf{v}}(\boldsymbol{t''}) = \mathbf{2}\langle \mathbf{v^2}(0) \rangle \int_{\mathbf{0}}^{\mathbf{t}} (\boldsymbol{t} - \boldsymbol{\tau}) C_{\mathbf{v}}(\boldsymbol{\tau}) \boldsymbol{d\tau}. \quad (19)$$

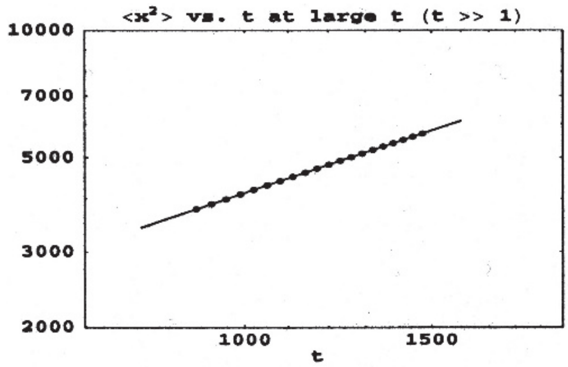
Արդյունքները: Մեծություններից մեկը, որ հաշվարկվել է, մասնիկի դիրքի երկրորդ մոմենտն է ($\langle \mathbf{x^2(t)} \rangle$), որը, այսպես ասած, «իներցիայի մոմենտն» է: Կատարելով թվային հաշվարկներ, ստանում ենք մի շարք ֆիզիկական մեծությունների մոտավոր թվային արժեքները, որոնք ներկայացվում են գրաֆիկորեն:

Նկ. 1-ում ցույց է տրված արագության կոռելյացիոն ֆունկցիան: Ինչպես երևում է գրաֆիկից, երբ $t \to \infty$ $C_v(t) \to 0$, այսինքն՝ երկար ժամանակ հետո և՛ $v(t)$, և՛ $v(0)$ մեծությունները դառնում են ոչ կոռելացված($\lim\limits_{t\to+\infty} < v(t) >= 0$):



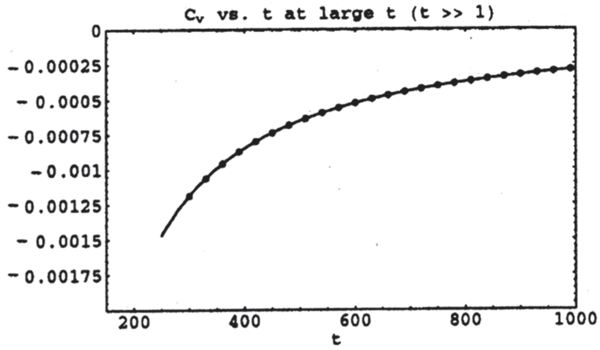
Նկ. 1. Արագության կոռելյացիայի կախվածությունը ժամանակից

Նկ. 2-ում պատկերված է մասնիկի դիրքի երկրորդ մոմենտի ժամանակային կախվածությունը:



Նկ. 2. Մասնիկի կոորդինատի երկրորդ մոմենտի կախվածությունը ժամանակից

Կատարելով ոչ գծային ինտերպոլյացիա, արագության կոռելյացիոն ֆունկցիան կունենա $C_v(t) \sim -t^{1.1733573}$ վարքը մեծ ժամանակահատվածների դեպքում, ինչպես ներկայացված է նկ. 3-ում գրաֆիկորեն:



Նկ. 3. Մասնիկի արագության կոռելյացիայի ժամանակային կախվածությունը (t>>1) դեպքում

Սա այն մասնավոր դեպքն է, երբ $\mu = \frac{1}{6}$ և $\langle x^2(t) \rangle \sim t^{0.8346404}$ Այսինքն՝ $0 < \alpha \simeq 0.8346404 < 1$: Հետևաբար, պրոցեսը սաբդիֆուզիա է (դիֆուզիայի հաստատունը՝ D<<1): Ընդհանուր առմամբ ունենք $\langle x^2(t) \rangle \sim t^{2H}$, երբ $t \to \infty$

$$\lim_{t \to +\infty} C_v(t) \sim -\frac{1}{t^{\delta}}, \tag{20}$$

որտեղ $1 < \delta \simeq 1.1733573 < 2$, և $\delta = 2 - 2H$ արտահայտությունը բավարարված է:

Եթե $\mu = \frac{4}{5}$, ապա թվային արդյունքները հետևյալն են. $\alpha \simeq 0.1999973$, $H \simeq 0.0999987$, $\delta = 1.7998445$, որոնց դեպքում արագության կոռելյացիոն ֆունկցիան ցույց է տրված նկ.3-ում:

Եզրակացություն. Մոդելավորվում է դիֆուզիոն պրոցեսը միաչափ տարածության մեջ տրված ջերմային միջավայրի համար, և նկարագրվում սաբ-դիֆուզիան: Արտաքին ջերմային միջավայրը մոդելավորվում է յուրաքանչյուր հանգույցում պատահական պոտենցիալով (disordered potential): Համակարգի համար արտաքին դաշտի բացակայության ($\mathbf{V(x,t)=0}$) դեպքում է կատարվել պարզագույն հաշվարկը:

Միջավայրի վիճակների տրված խտության դեպքում արագության պրոյեկցիայի կոռելյացիոն ֆունկցիայի համար, ստացվել է բացասական տիրույթ, մասնիկը փոխում է իր շարժման ուղղությունը(հետ է վերադառնում և կապվում որևէ հանգույցի հետ), և տեղի է ունենում $< x^2(t) >$ դանդաղ ժամանակային աճ, որոնք որոշակի գաղափար են տալիս լոկալացման վերաբերյալ: Արտաքին դաշտի առկայության դեպքը որպես չկարգավորված ըստ տարածության պոտենցիալով դաշտ՝ կներկայացվի հաջորդ հոդվածում, որը որպես մոդել կարող է կիրառվել որոշ խառնուրդային կիսահաղորդիչներում, հաշվի առնելով մասնիկի ցրումը ֆոնոնային գազում՝ որպես ջերմային միջավայր, և հատկապես այս մեթոդի կիրառությունը բարդ փոխազդեցությունների դեպքում: Նույն խնդրի քվանտային նկարագրությունը համեմատաբար ճշգրիտ համիլտոնյանների [9] համար կներկայացվի այլ աշխատանքում որպես նմանակային մոդելավորում:

ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ՑԱՆԿ

1. **Anderson P.W.** //Phys. Rev. E, -1958. –Vol. 109, N 6.–P. 1492-1497.
2. **Morgado R., Oliviera F.A., Batrouni G.G., Hamsen A.** // Physics Letters A 1980, -Vol. 89, N 10. –P. 1560-1566.
3. **Florencio J.Jr. and Howard L.M.** // Phys. Rev. A. - 1985. - Vol. 31, N 5.–P. 1458-1464.
4. **Evangelou S.N. and Katsanos D.E.** //Physics Letters A. -1992. – 164. – P. 456-464.
5. **Freeman J.D.** //Phys. Rev. -1953. - Vol. 92. –P. 1331-1337.
6. **Kubo R.** //Rep. Prog. Phys. -1966. -Vol. 29, N 8. –P. 255-263.
7. **Howard L.M.** //Phys. Rev. B. - 1982. - Vol. 26, N 5. –P.319-328.
8. **Лифшиц Е.М.** // ЖЭТФ.- 1955. Vol. -29 (94). –С.1-5.
9. **Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.** Методы квантовой теории поля в статистической физике.- М.: Физматгиз, 1962.- 444 с.

А.К. КАЛАШЯН

ДИФФУЗИЯ ЧАСТИЦЫ В СРЕДЕ С ДАННОЙ ПЛОТНОСТЬЮ СОСТОЯНИЙ

Исследуется диффузия частицы в одномерной решетке (1D) в качестве модели классической локализации. С помощью такой теоретической модели можно описать аморфные тела. Одномерная решетка представляет собой линейно связанную систему гармонических осцилляторов с разной частотой ω. Такая диффузия описывается плотностью состояний с большими волновыми длинами. Показано, что в этом случае диффузия с данной плотностью состояний $\rho(\omega)$ не является нормальной (является аномальной) при данной зависимости ρ от ω и длительном времени. Численным методом решается обобщенное уравнение Ланжевина (ОУЛ) с данными начальными условиями и вычисляются второй начальный момент координаты частицы и корреляционная функция скорости. Расчёт выполняется по алгоритму Талбота с обратным численным преобразованием Лапласа. Данная модель описывает классическую локализацию частицы в 1D (одномерной) регулированной системе в пространстве. Под нерегулированностью подразумевается случайность частоты ω осцилляторов по данной плотности вероятности. С изменением степенной зависимости $\rho(\omega)\sim\omega^{-\mu}$ плотности состояний получаются разные диффузионные явления. Численно показывается, что корреляционная функция скорости частицы имеет отрицательную ветвь и описывается временной зависимостью $C_v(t)\sim t^{-(1+\mu)}$ $(\mu > 0)$.

Ключевые слова: локализация, нерегулированная система, одномерная решётка, корреляция.

A.K. KALASHYAN

THE PARTICLE DIFFUSION IN THE MEDIUM WITH A GIVEN DENSITY OF STATES

The particle diffusion in a one-dimensional (1D) lattice as a model of classical localization is studied. This kind of model can describe amorphous bodies. A one-dimensional lattice is a linearly connected system of harmonic oscillators with different ω frequencies. This kind of diffusion is described by the density of states of long wavelengths. This kind of diffusion of a given density of states is shown to be abnormal in the case of the dependence on a long time. The general Langevin equation (GLE) can be solved numerically in order to find the second moment of the coordinate x and the correlation function of the velocity for the given initial conditions. The calculation is done by Laplace inverse transformation according to the Talbot algorithm. This model describes the classical 1D (one-dimensional) localization of the particle in the ordered system in space. Here irregularity means that the frequencies ω of the oscillations by their values are random according to the given density function of probability. Different diffusion processes are obtained by changing the power dependence $\rho(\omega)\sim\omega^{-\mu}$ of density of states. It is shown numerically that the correlation function of the velocity of the particle has a negative tail and is described by $C_v(t)\sim t^{-(1+\mu)}$ time dependence $(\mu > 0)$.

Keywords: localization, non-ordered system, one-dimensional lattice, correlation.