

ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ ПРЫЖКОВОЙ ДИФФУЗИИ В ОГРАНИЧЕННЫХ СЛУЧАЙНО РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ ОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

А. И. Онипко, Л. И. Гальчук

В случае прыжкового механизма движения найдено точное выражение для конфигурационного среднего коэффициента диффузии в цепочке конечной длины с хаотическим распределением разорванных связей (*bond-percolation model*) (или непроницаемых барьеров), определяющее зависимость прыжковой проводимости от частоты, концентрации разорванных связей (барьеров), а также длины цепочки, без каких-либо ограничений на параметры рассматриваемых моделей. Проведенное исследование расширяет круг немногочисленных точных результатов относительно свойств ограниченных неупорядоченных систем, которые могут быть использованы для проверки приближенных методов, обычно привлекаемых для описания обусловленных беспорядком свойств, а в некоторых случаях и для непосредственного сравнения с данными эксперимента. Возможности приложения полученных результатов обсуждаются в работе.

1. Модели одномерных неупорядоченных систем давно привлекают внимание исследователей в связи с возможностью получения точных результатов, которые служат в качестве опорных при изучении свойств, обусловленных беспорядком. Теоретическая и практическая значимость точно решаемых моделей неупорядоченных систем не раз подчеркивалась [1–3].

Полученные к настоящему времени результаты касаются, как правило, бесконечных систем, теоретический анализ которых по известным причинам существенно проще, чем конечных. В частности, в рамках проблемы прыжкового переноса в неупорядоченных системах, в [4] получено точное решение для вероятности выживания частицы, совершающей случайные блуждания в цепочке с хаотическим распределением ловушек. Прыжковая диффузия, описывающая эволюцию электронного возбуждения в бесконечной цепочке со случайным распределением разрывов связей, рассматривалась в [5, 6]. В этой же системе исследовалась прыжковая частотно зависимая проводимость [7, 8].

Несмотря на простоту указанных моделей беспорядка, их изучение представляет не только теоретический интерес. Например, в [9] показано, что радиационные повреждения вызывают разрывы связей в направлении максимальной проводимости квазиодномерных материалов. В этой связи решение задачи о движении заряда по узлам цепочки со случайным чередованием целых и разорванных связей (рис. 1а) может быть использовано для моделирования частотно зависимой прыжковой проводимости. Целесообразно рассматривать также аналог разупорядочения по связям — цепочку со случайным распределением испорченных узлов (рис. 1б). Задача о прыжковой диффузии в такой системе актуальна, например, в связи с исследованием некогерентного энергопереноса в квазиодномерных кристаллах, в частности, в дейтерированных кристаллах тетрахлорбензола, d_2 -ТСВ. Дейтерозамещенные молекулы в ТСВ при низких температурах играют роль энергетических барье-

ров для триплетных экситонов, разделяющих молекулярные цепочки, по которым происходит перенос энергии триплетного возбуждения, на почти изолированные друг от друга отрезки — линейные кластеры из молекул основного вещества (см. обзор [10] и ссылки в нем). При некогерентном механизме переноса (зоны триплетных экситонов в кристаллах ТСВ $\sim 1 \text{ см}^{-1}$) в модели непроницаемых барьеров (нулевое приближение по параметру W'/W , см. рис. 1б) диффузия по цепочке с испорченными узлами и разрывами связей качественно идентична, но не одинакова буквально.

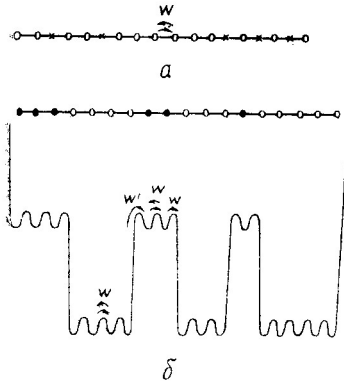


Рис. 1. Модели ограниченных двухкомпонентных неупорядоченных систем: *a* — цепочка со случайным распределением целых (сплошная линия) и разорванных (линия с крестиком) связей. Вероятность прыжка между узлами, соединенными связью (линия с крестиком), равна нулю; *б* — цепочка со случайным распределением узлов типа *A* (светлые кружки) и типа *B* (черные кружки) („испорченных“). В целях наглядности изображен энергетический профиль в предположении термоактивированного движения квазичастицы по узлам молекулярной двухкомпонентной цепочки

Как видно, модели беспорядка, представленные на рис. 1а, б, в известной степени передают наиболее характерные черты реальных неупорядоченных объектов, примеры которых можно продолжить. В рамках этих моделей далее определяется коэффициент прыжковой диффузии. Подчеркнем, что аналогичная задача, но в случае бесконечных систем, рассмотрена в [7, 8], причем результаты [7] ошибочны, на что указано в [8], однако и в работе Одагаки и Лэкса, которую мы цитируем, содержатся некоторые неточности. Полученное ниже решение содержит, разумеется, в качестве частного случая, и результаты [8].

2. Стохастический марковский процесс случайных блужданий, отождествляемый здесь с прыжковым переносом, можно описывать в терминах условной вероятности $\tilde{\rho}_{r,r_0}(t)$, определяющей вероятность обнаружения частицы на узле r в момент времени t , если при $t=0$ она находилась на узле r_0 . В пространстве образов Лапласа $\rho_{r,r_0}(s)$ удовлетворяет уравнениям баланса

$$s \rho_{r,r_0}(s) = \delta_{r,r_0} + W_{r+1,r} \rho_{r+1,r_0}(s) + W_{r-1,r} \rho_{r-1,r_0}(s) - (W_{r,r+1} + W_{r,r-1}) \rho_{r,r_0}(s), \quad (1)$$

где для цепочки из N узлов $r=1, 2, \dots, N$, $W_{r,r'} (|r-r'|=1, W_{1,0}=W_{N,N+1}=0)$ — вероятности прыжков в единицу времени между соседними узлами цепочки.

В случае прыжкового механизма движения обобщенный коэффициент диффузии имеет вид [11]

$$D_N(\omega) = -\frac{1}{2} \omega^2 a^2 \sum_{r,r_0=1}^N (r-r_0)^2 \rho_{r,r_0}(i\omega) f_{r_0}, \quad (2)$$

где a — постоянная одномерной решетки, f_{r_0} — функция начального равновесного распределения невзаимодействующих частиц по цепочке. Соотно-

шением (2) в линейном приближении по внешнему возмущению определяется прыжковая проводимость на частоте ω : $\sigma_N(\omega) (=n_e e^2/kT)D_N(\omega)$ [12, 13]; n_e – плотность носителей заряда e , kT – тепловая энергия.

В неупорядоченной системе вероятности прыжков $W_{r,r'}$ являются случайными величинами, так что физический интерес представляет вычисление конфигурационного среднего для коэффициента диффузии (2). Рассмотрим вначале цепочку со случайным распределением N_A целых и N_B разорванных связей в цепочке из N узлов ($N_A + N_B = N - 1$). Позиции различных связей считаются равновероятными и занятыми разорванной (целой) связью с вероятностью $N_B/(N - 1) = c(1 - c)$. Поскольку движение частицы в любом из кластеров, образованных последовательностью целых связей, независимо от других, то, введя величину $p_{N_A N_B}(n)$ – полное число кластеров из n целых связей во всех возможных неэквивалентных конфигурациях из N_A целых и N_B разорванных связей, конфигурационное среднее $\langle D_N(\omega) \rangle$ можно записать в виде

$$\langle D_N(\omega) \rangle = \binom{N-1}{N_B}^{-1} \sum_{n=1}^{N_A} D_{n+1}(\omega) p_{N_A N_B}(n), \quad (3)$$

где $D_{n+1}(\omega)$ – коэффициент диффузии в кластере из $n+1$ узлов (n связей), определенный (2), если $f_{r_0} = N^{-1}$, суммирование по r, r_0 ведется от 1 до $n+1$, а $\rho_{r, r_0}(s)$ есть решение (1) для регулярной цепочки из $n+1$ узлов, между которыми частица совершает прыжки с одинаковой вероятностью W . Соответствующее выражение для кластерного значения коэффициента диффузии получено в [8]

$$D_n(\omega) = a^2 W n N^{-1} \left[1 - n^{-1} (1 + 2\bar{s}^{-1})^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{1 + z_{-}^2(\bar{s})} - \frac{1}{1 + z_{+}^2(\bar{s})} \right) \right], \quad (4)$$

где $\bar{s} = s/2W$, $z_{\pm}(\bar{s}) = 1 + \bar{s} \pm (\bar{s}^2 + 2\bar{s})^{\frac{1}{2}}$, $s = i\omega$. Число $p_{N_A N_B}(n)$ при $N_B \neq 0$ равно

$$p_{N_A N_B}(n) = \sum_{q_0, q_1, \dots, q_{N_B}=0}^{\infty} \delta_{N_B} \sum_{i=0}^{N_A} q_i \sum_{i=0}^{N_B} \delta_{q_i, n}, \quad (5)$$

так как $\sum_{i=0}^{N_B} \delta_{q_i, n}$ есть количество кластеров из n целых связей в произвольно выбранной конфигурации, $q_i \in [0, N_A]$, а суммирование по всем возможным неэквивалентным конфигурациям в (5) обеспечивается соблюдением условия $\sum_{i=0}^{N_B} q_i = N_A$. Суммирование в (5) легко провести, используя интегральное представление для δ -функции Кронекера

$$\begin{aligned} p_{N_A N_B}(n) &= \frac{N_B + 1}{4\pi^2} \int_{|z|=1+0} dz \int_{|z'|=1+0} dz' \frac{z^{-(N_A+1)} z'^{-(n+1)}}{(1-z)^{N_B} (zz'-1)} = \\ &= \frac{(N_B+1)(N-n-2)!}{(N_B-1)!(N_A-n)!}. \end{aligned} \quad (6)$$

Формулами (3), (4), (6) полностью определяется точное значение конфигурационного среднего для обобщенного коэффициента диффузии в цепочке произвольной длины со случайным распределением разрывов связей. В асимптотическом пределе (3) переходит в выражение конфигурационного среднего, использованного в [8]

$$\langle D_\infty(\omega) \rangle = c^2 \sum_{n=1}^{\infty} (ND_n(\omega))(1-c)^{n-1}. \quad (7)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ c = \text{const}}} \binom{N-1}{N_B}^{-1} p_{N_A N_B}(n) &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ c = \text{const}}} \frac{N_A N_B^2}{N} \prod_{l=1}^{N_A-1} (N_A-l) \times \\ &\times \prod_{l=1}^{N-n-1} (N-n-l) \prod_{l=1}^{N-1} (N-l)^{-1} \times \\ &\times \prod_{l=1}^{N_A-n} (N_A+1-n-l)^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} c(1-c)^{n-1} \times \\ &\times \prod_{l=1}^{n-1} [1-lN^{-1}(1-c)^{-1}] \left(\prod_{l=1}^n (1-lN^{-1}) \right)^{-1} = c(1-c)^{n-1}, \end{aligned} \quad (8)$$

так что, заменяя предел суммирования в (3) на бесконечность, используя (8) и учитывая, что $D_1(\omega) = 0$, получим (7).

Совершенно аналогично можно определить конфигурационное среднее для коэффициента диффузии в модели непроницаемых барьеров $\langle D_N(\omega) \rangle_6$. В этом случае число кластеров из n узлов типа A (см. рис. 1б) во всех возможных неэквивалентных конфигурациях из N_A узлов типа A и N_B узлов типа B , $N_A + N_B = N$, равно

$$p_{N_A N_B}^6(n) = \frac{(N_B+1)(N-n-1)!}{(N_B-1)!(N_A-n)!} (1 - \delta_{N_B, 0}) + \delta_{N_B, 0} \delta_{n, N}, \quad (9)$$

соответственно

$$\langle D_N(\omega) \rangle_6 = \binom{N}{N_B}^{-1} \sum_{n=1}^{N_A} D_n(\omega) p_{N_A N_B}^6(n) \underset{N_B/N=c=\text{const}}{\underset{N \rightarrow \infty}{=}} \langle D_\infty(\omega) \rangle, \quad (10)$$

где c имеет смысл концентрации B узлов. При использовании (10) следует учесть, что в определении (2) для кластерного значения $D_n(\omega)$ $f_{r_0} = N_A^{-1}$.

Исходя из (3), (10), рассмотрим случаи больших ($\tilde{\omega} = \omega/W \gg 1$) и малых ($\tilde{\omega} \ll 1$) частот, для которых зависимость усредненного коэффициента диффузии от частоты, концентрации и размера неупорядоченной системы можно получить в явном виде. Кластерное значение $D_n(\omega)$ при $\omega \rightarrow 0$ равно

$$D_n(\omega) = a^2 W n f \left[\frac{n^2-1}{12} i \tilde{\omega} + \frac{n^4-1}{120} \tilde{\omega}^2 \right], \quad (11)$$

а при $\omega \rightarrow \infty$ разложение (4) по малому параметру $\tilde{\omega}^{-1}$ дает

$$D_n(\omega) = a^2 Wf [n-1 + 2i\tilde{\omega}^{-1} - 2\tilde{\omega}^{-2} - 2i\tilde{\omega}^{-1}(1+i\tilde{\omega}^{-1})\delta_{n,1} - 2\tilde{\omega}^{-2}\delta_{n,2}], \quad (12)$$

где $f = N^{-1}$ ($f = N_A^{-1}$) для цепочки со случайным распределением разрывов связей (непроницаемых барьеров). Отметим, что выражение при малых частотах совпадает с полученным в [8], но (12) отличается от формулы (11б) из [8]. Для приведенного в цитируемой работе высокочастотного предела очевидное условие $D_1(\omega) = 0$ не выполняется. Формула (11б) из [8] неверна и для $n=2$, в то же время слагаемые в (12) при $n=1,2$ также дают вклад в усредненное значение коэффициента диффузии порядка $\tilde{\omega}^{-1}$, $\tilde{\omega}^{-2}$, поэтому их учет существен.

Как видно из (3), (10) и (11), (12) нахождение конфигурационного среднего для $D_N(\omega)$ в низкочастотном и высокочастотном пределах сводится к вычислению первых пяти моментов

$$\mu^{(j)} = \sum_{n=1}^{N_A} n^j P_{N_A N_B}(n) \quad (13)$$

дискретного распределения

$$P_{N_A N_B}(n) = \frac{N_B(N_A-1)!(N-n-1)!}{(N-1)!(N_A-n)!}, \quad \sum_{n=1}^{N_A} P_{N_A N_B}(n) = 1, \quad (14)$$

имеющего смысл вероятности обнаружить кластер длины n , выраженной в числе узлов, из A элементов в случайной последовательности из N_A элементов типа A и N_B элементов типа B , $N_A + N_B = N$. Представляя фигурирующие в (14) факториалы через контурные интегралы, можем записать

$$\begin{aligned} \binom{N-1}{N_B} \mu^{(j)} &= -\frac{j!}{4\pi^2} \sum_{n=1}^{N_A} \int_{|z|<1} dz \int_{|z'|<1} dz' \frac{e^{zn}(1+z')^{N-n-1}}{z^{j+1}z'^{N_A-n+1}} = \\ &= \frac{j!}{2\pi^2} \int_{|z|<1} dz \sum_{k=0}^{N_A} \binom{N}{N_A-k} (e^z-1)^k z^{-j-1} = \\ &= \sum_{k=0}^j \binom{N}{N_A-k} \frac{j!}{(j-k)!} \frac{d^{j-k}}{dz^{j-k}} [(e^z-1)^k z^{-k}] \Big|_{z=0}. \end{aligned} \quad (15)$$

Учитывая теперь, что $z^{-1}(\exp(z)-1)$ является производящей функцией для чисел Стирлинга второго рода $\sigma_j^{(k)}$ [14],

$$\mu^{(j)} = \sum_{k=1}^j \frac{k! \sigma_j^{(k)}}{1-c-kN^{-1}} \prod_{l=1}^k \frac{1-c-lN^{-1}}{c+lN^{-1}}, \quad c = N_B N^{-1}, \quad (16)$$

или в явном виде

$$\begin{aligned}
 \mu^{(1)} &= (c + N^{-1})^{-1}, \quad \mu^{(2)} = (2 - c) [(c + N^{-1})(c + 2N^{-1})]^{-1}, \\
 \mu^{(3)} &= [6(1 - c) + c^2 - cN^{-1}] \prod_{l=1}^3 (c + lN^{-1})^{-1}, \\
 \mu^{(4)} &= [24 - 36c + 14c^2 - c^3 - 5cN^{-1}(2 - c)] \prod_{l=1}^4 (c + lN^{-1})^{-1}, \\
 \mu^{(5)} &= [120 - 240c + 150c^2 - 30c^3 + c^4 - cN^{-1}(90 - 90c + 16c^2) + \\
 &\quad + 4cN^{-3} + 11c^2N^{-2}] \prod_{l=1}^5 (c + lN^{-1})^{-1}, \\
 &\dots\dots\dots
 \end{aligned} \tag{17}$$

Выражение конфигурационного среднего $\langle D_N(\omega) \rangle_6$ через моменты (17) имеет вид

$$\begin{aligned}
 \text{Im} \langle \tilde{D}_N(\omega) \rangle_6 &\equiv \text{Im} \frac{\langle D_N(\omega) \rangle_6}{a^2 W} = \tilde{\omega} \frac{c + N^{-1}}{12} (\mu^{(3)} - \mu^{(1)}), \\
 \text{Re} \langle \tilde{D}_N(\omega) \rangle_6 &= \tilde{\omega}^2 \frac{c + N^{-1}}{120} (\mu^{(5)} - \mu^{(1)})
 \end{aligned} \tag{18}$$

при $\tilde{\omega} \ll 1$ и

$$\begin{aligned}
 \text{Im} \langle \tilde{D}_N(\omega) \rangle_6 &= 2\tilde{\omega}^{-1} (c + N^{-1}) \left(1 - \frac{c}{1 - N^{-1}} - \delta_{c,0} \delta_{N,1} \right), \\
 \text{Re} \langle \tilde{D}_N(\omega) \rangle_6 &= (c + N^{-1}) \left[\mu^{(1)} - 1 - 2\tilde{\omega}^{-2} \left(1 - \frac{c}{1 - N^{-1}} + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + c \frac{1 - c - N^{-1}}{(1 - N^{-1})(1 - 2N^{-1})} - \delta_{c,0} \delta_{N,1} + \delta_{c,0} \delta_{N,2} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{19}$$

при $\tilde{\omega} \gg 1$. Равенства (18), (19) получаются после подстановки (11), (12) в (10) с использованием определений (13), (14). Подставляя (11), (12) в (3), также легко можно найти и усредненный коэффициент диффузии в цепочке с разрывами связей. Его зависимость от ω , c , N качественно совпадает с $\langle D_N(\omega) \rangle_6$ и поэтому не приводится. Подчеркнем, однако, что $\langle D_N(\omega) \rangle$ равно $\langle D_N(\omega) \rangle_6$ только в пределе $N \rightarrow \infty$, $c = \text{const}$ (см. (7), (10)), в случае же конечных систем численные значения этих величин различны.

Обсудим полученные результаты. Характер частотной зависимости усредненного коэффициента диффузии в конечной и бесконечной цепочках оказался одинаковым: $\text{Im} \langle D_N(\omega) \rangle_6$ пропорциональна ω , ω^{-1} соответственно при $\omega \rightarrow 0$, $\omega \rightarrow \infty$ и является немонотонной функцией частоты с максимумом (см. рис. 2); $\text{Re} \langle D_N(\omega) \rangle \sim \omega^2$ при $\omega \rightarrow 0$, а при $\omega \rightarrow \infty$ эта функция стремится к постоянному пределу $a^2 W (1 - c - N^{-1})$. Примеры возможных количественных отличий на малых частотах представлены на рис. 3. Неожиданным, на наш взгляд, является заметное отклонение $\langle D_N(\omega) \rangle_6 / \langle D_\infty(\omega) \rangle$ от 1 во всем концентрационном интервале $0 < c < 1$ в длинных, $N \sim 10^2 \div 10^3$, цепочках. Интуитивное ожидание практического совпадения результатов, полученных для большой, но конечной системы, с асимптотической оценкой

по формуле (7) в данном случае не оправдано. Вместе с тем в высокочастотном пределе $\langle D_N(\omega) \rangle \approx \langle D_\infty(\omega) \rangle$, если только выполняется условие $N \gg 1$. Как видно из выражений для моментов (16), (17), количественное различие характеристик для конечных и бесконечных неупорядоченных систем непосредственно связано с порядком определяющих эту характеристику моментов.

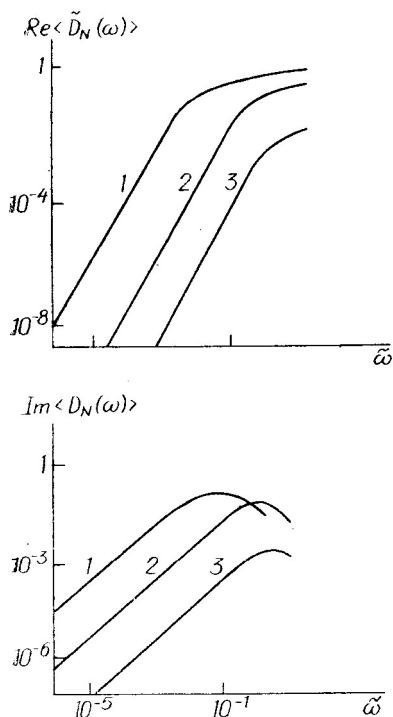


Рис. 2. Частотная зависимость усредненного коэффициента диффузии в двухкомпонентной цепочке с общим числом узлов $N=1000$ при $c=0,1; 0,5; 0,9$ (кр. 1, 2, 3 соответственно). Расчет проведен по формуле (10)

Наиболее значительно отклонение $\langle D_N(\omega) \rangle$ от $\langle D_\infty(\omega) \rangle$ при малых концентрациях (см. гистограммы рис. 3), причем в области значений $c \ll 1$, $\tilde{\omega} \ll 1$ концентрационные зависимости $\langle D_\infty(\omega) \rangle$ и $\langle D_N(\omega) \rangle$ качественно различны. Поведение $\langle D_\infty(\omega) \rangle$ в указанной области имеет критический характер

$$\tilde{\omega}^{-1} \text{Im} \langle \tilde{D}_\infty(\omega) \rangle \sim c^{-2}, \quad \tilde{\omega}^{-2} \text{Re} \langle \tilde{D}_\infty(\omega) \rangle \sim c^{-4}, \quad (20)$$

что легко увидеть из (18), (17) и было отмечено в [8]. В то же время концентрационная зависимость $\langle D_N(\omega) \rangle$ не имеет особенностей при $c \rightarrow 0$, поскольку $\lim_{c \rightarrow 0} \langle D_N(\omega) \rangle$ для сколь угодно больших, но конечных N должен совпадать с кластерным значением $D_N(\omega)$. Этому требованию, как видно, удовлетворяют выражения конфигурационного среднего (18), (19). Вследствие этого различие $\langle D_N(\omega) \rangle$ и $\langle D_\infty(\omega) \rangle$ при $c \ll 1$, $\tilde{\omega} \ll 1$ весьма существенно и проявляется в большом концентрационном интервале. В связи со сказанным уместно подчеркнуть условность критических индексов в (20), характери-

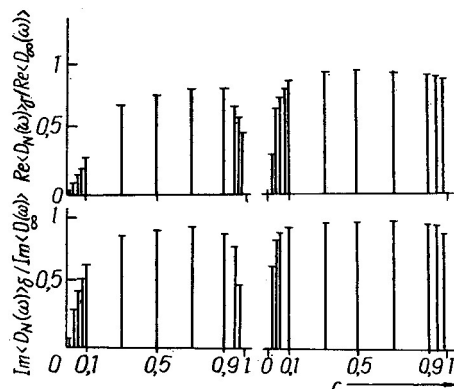


Рис. 3. Концентрационная зависимость отношения $\langle D_N(\omega) \rangle / \langle D_\infty(\omega) \rangle$ в области низких частот (формула (18))

зующих поведение системы вблизи перколяционного порога $c=0$, строго определенных только в случае бесконечных систем.

Таким образом, рассмотренная модель беспорядка в ограниченной системе дает возможность оценить корректность использования теоретических результатов, полученных для бесконечной системы, с целью описания реальных, всегда конечных, объектов. Отметим также важность выбора оптимальных размеров неупорядоченной системы для надежного моделирования ее свойств методами численного эксперимента. В этом смысле представленные результаты могут служить ориентирующими.

Использованная здесь методика вычисления конфигурационных средних для ограниченных неупорядоченных систем, основанная на переходе к усреднению по длинам кластеров, непосредственно применима для исследования идейно близких к рассмотренной модели беспорядка, например, спектральных характеристик коллективных возбуждений конечной цепочки со случайным распределением бесконечно тяжелых масс, и других. В указанных приложениях может быть эффективно использовано общее выражение для моментов (16) распределения кластеров по длинам (14), полученное, насколько нам известно, впервые.

Литература

1. Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А. Введение в теорию неупорядоченных систем. — М.: Наука, 1982. — 358 с.
2. Займан Дж. Модели беспорядка. — М.: Мир, 1982. — 591 с.
3. Alexander S. e. a. Excitation dynamics in random one-dimensional systems / Alexander S., Bernasconi J., Schneider W. R., Orbach R. — Rev. Mod. Phys., 1981, v. 53, No 2, p. 175.
4. Балагуров Б. Я., Вакс В. Г. О случайных блужданиях по решетке с ловушками. — ЖЭТФ, 1973, т. 65, № 5, с. 1939.
5. Alexander S., Bernasconi J., Orbach R. Spectral diffusion in a one-dimensional percolation model. — Phys. Rev., 1978, v. B17, No 11, p. 4311.
6. Heinrichs J., Kumar N. Spectral diffusion in random lattices. — Phys. Rev., 1979, v. B20, No 4, p. 1377.
7. Heinrichs J. Frequency dependent conductivity and mean square hopping displacement in a one-dimensional percolation model. — Phys. Rev., 1980, v. B22, No 6, p. 3093.
8. Odagaki T., Lax M. Hopping conductivity of a one-dimensional bond-percolation model. — Phys. Rev. Lett., 1980, v. 45, No 10, p. 847.
9. Zuppiroli L. e. a. Irradiation effects in quasy-one-dimensional organic conductors: the evidence of a transverse fixed-range phonon-assisted hopping / Zuppiroli L., Bouffard S., Bechgaard K., Hilti B., Mayer C. W. — Phys. Rev., 1980, v. B22, No 12, p. 6035.
10. Fayer M. D. Exciton coherence. — In: Spectroscopy and excitation dynamics of condensed molecular systems / Ed. by V. M. Agranovich and L. R. M. Hochstrasser. North-Holland Publishing Company, 1983, v. 4, p. 185.
11. Scher H., Lax M. Stochastic transport in a disordered solid. 1. Theory. — Phys. Rev., 1973, v. B7, No 10, p. 4491.
12. Kubo R. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. 1. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems. — J. Phys. Soc. Jap., 1957, v. 12, No 6, p. 570.
13. Lax M. Generalized mobility theory. — Phys. Rev., 1958, v. 109, No 6, p. 1921.
14. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган — М.: Наука, 1979. — 830 с.

**APRIBOTOSE ATSITIKTINAI NETVARKIOSE VIENMATĖSE SISTEMOSE
VYKSTANČIOS ŠUOLINĖS DIFUZIJOS TIKSLIAI SPRENDŽIAMO
MODELIAI**

A. Onipka, L. Galčiuk

Reziümė

Nagrinėjant šuolinį dalelių judėjimą baigtinio ilgio grandinėje su betvarkiai pasiskirsčiusiais nutrauktais ryšiais (arba nelaidžiais barjeriais) rasta, kad suvidurkinto pagal konfigūracijas difuzijos koeficiento priklausomybė nuo dažnio yra tokia pati, kaip ir begalinėje grandinėje. Pažymėtina, kad ilgas, tačiau baigtines ($N \sim 10^2 - 10^4$) grandinės atitinkantis santykis $\langle D_N(\omega) \rangle_6 / \langle D_\infty(\omega) \rangle$ visame nutrauktų ryšių koncentracijų intervale $0 < c < 1$ nukrypsta nuo vieneto (3 pav.). Didžiausias nukrypimas rastas, kai $c \ll 1$ ir $\omega \ll 1$. Pateiktą vidurkinimo pagal konfigūracijas metodiką (16) galima tiesiogiai naudoti ir apribotų netvarkių grandinių spektrinėms charakteristikoms tirti.

Ukrainos TSR Mokslų Akademijos
Teorinės fizikos institutas

**EXACTLY SOLVABLE MODELS OF HOPPING DIFFUSION IN FINITE ONE-
DIMENSIONAL RANDOMLY DISORDERED SYSTEMS**

A. I. Onipko, L. I. Galchuk

Summary

An exact expression of the hopping diffusion coefficient in finite chains with randomly distributed broken bonds or impermeable barriers is obtained. The concentration and frequency dependencies of the diffusion with the help of models are studied, and some applications of the results to real disordered systems are discussed.

Institute of Theoretical Physics,
Academy of Sciences of Ukrainian SSR