Письма в ЖЭТФ, том 66, вып.5, стр.362 - 365 © 1997г. 10 сентября

ГИБЕЛЬ БРОУНОВСКИХ ЧАСТИЦ НА СЛУЧАЙНО РАСПОЛОЖЕННЫХ ЛОВУШКАХ ПРИ АНИЗОТРОПНОЙ ДИФФУЗИИ

А.М.Бережковский[1),2)], *Ю.А.Махновский*[+2)], *А.А.Овчинников*[*]

Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я.Карпова 103064 Москва, Россия

[+]*Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН 117912 Москва, Россия*

[*]*Объединенный институт химической физики им. Н.М.Эмануэля РАН 117334 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 5 августа 1997 г.

Обсуждается влияние анизотропии диффузии на долговременную асимптотику вероятности выживания броуновской частицы среди случайно расположенных ловушек.

PACS: 05.40.+j, 82.20.Db

1. Задача о выживании броуновской частицы в среде со случайно расположенными ловушками возникает при рассмотрении различных явлений в физике и химии. На не слишком больших временах вероятность выживания удовлетворительно описывается теорией Смолуховского [1, 2], являющейся приближением среднего поля в данной задаче [3]. На больших временах это приближение отказывает. Асимптотика $t \to \infty$ точного решения была независимо получена рядом авторов [4–8]. Все они, по-существу, действовали в рамках идеологии, предложенной Лифшицем [9] для вычисления хвоста плотности состояний квантовой частицы в поле случайно расположенных рассеивателей. При рассмотрении предполагалось, что диффузия изотропна. Асимптотика вероятности выживания $S(t)$ частицы в d-мерном пространстве имеет вид [4-8]

$$-\ln S(t) \propto \left(c^{2/d} D t\right)^{d/(d+2)}, \tag{1}$$

где c — концентрация ловушек и D — коэффициент диффузии броуновской частицы. Для получения выражения (1) следует рассмотреть выживание частиц, рожденных в больших флуктуационных полостях, не содержащих ловушек. Если частица проводит все время t внутри такой полости, то она наверняка не погибнет. Как доля больших флуктуационных полостей, так и вероятность избежать выхода из полости за время t малы. Тем не менее, среди частиц, выживающих на больших временах, именно частицы, проведшие все время во флуктуационных полостях, составляют подавляющее большинство [4–8].

Целью настоящей работы является исследование влияния анизотропии диффузии на асимптотику вероятности выживания. Проведенный анализ показывает, как модифицируется выражение (1) *а*) при анизотропной диффузии

1) e-mail: berezh@cc.nifhi.ac.ru

2) Berezhkovskii A.M., Makhnovskii Yu.A.

(когда коэффициенты диффузии по всем направлениям конечны) и *б*) когда коэффициенты по некоторым направлениям обращаются в нуль и, по-существу, меняется пространственная размерность задачи.

2. Начнем с рассмотрения гибели броуновских частиц в трехмерном пространстве на сферических ловушках радиуса b в предельно анизотропной ситуации, когда диффузия происходит только вдоль оси x, а $D_y = D_z = 0$. Пусть L — амплитуда одномерной винеровской траектории броуновской частицы (сумма максимальных отклонений влево и вправо от точки старта за время наблюдения t). Вероятность выживания частицы, реализующей такую траекторию, равна доли конфигураций ловушек, при которых все ловушки расположены достаточно далеко от траектории. Иными словами, эта вероятность равна вероятности того, что в цилиндр радиуса b, окружающий траекторию, не попадает центр ни одной из ловушек. При пуассоновском распределении ловушек она равна $\exp(-\pi b^2 cL)$. Амплитуда L является случайной величиной. Вводя ее плотность вероятности $F(t|L)$, мы можем представить искомую вероятность выживания в виде

$$S(t) = \int_0^\infty \exp\left(-\pi b^2 cL\right) F(t|L)\ dL\,. \tag{2}$$

Используя результаты работы [10], можно убедиться в том, что выражение (2) представляет собой точное решение одномерной задачи, впервые полученное в работе [4], с эффективной одномерной концентрацией $\tilde{c}_1 = \pi c b^2$:

$$S(t) = \frac{4}{\pi^2} \int\limits_0^\infty \exp\left(-\frac{\pi^2 \tilde{c}_1^2 D_x t}{x^2}\right) \frac{x}{\operatorname{sh} x}\, dx\,, \tag{3}$$

Важная особенность одномерного случая состоит в том, что величины $\tilde{c}_1$, D_x и t образуют безразмерную комбинацию $\tilde{c}_1^2 D_x t$. Поэтому величина $(\tilde{c}_1^2 D_x)^{-1} = (\pi^2 b^4 c^2 D_x)^{-1}$ является естественным временным масштабом задачи. При $t < (\pi^2 b^4 c^2 D_x)^{-1}$ работает среднеполевое описание, тогда как при $t > (\pi^2 b^4 c^2 D_x)^{-1}$ вероятность выживания хорошо описывается асимптотикой (1) с $d = 1$ и $c = \tilde{c}_1$: $-\ln S(t) \propto (\tilde{c}_1 D_x t)^{1/3}$.

3. Если коэффициенты диффузии D_y и D_z отличны от нуля, но малы, выражение (3) для вероятности выживания применимо, пока время наблюдения t не слишком велико, а именно смещение в перпендикулярном направлении должно быть мало по сравнению с b, то есть при $t \ll b^2 D_\perp{}^{-1}$, где мы приняли, что $D_y = D_z = D_\perp$. Если $D_\perp \to 0$, выражение (3) применимо во всем временном интервале. Сравнение двух временных масштабов, $b^2 D_\perp{}^{-1}$ и $(\pi^2 b^4 c^2 D_x)^{-1}$, показывает, что отклонения от одномерного поведения $S(t)$ возникают после того,. как выражение (3) выходит на асимптотику (1) с $d = 1$ и $c = \tilde{c}_1$, если $D_\perp < D_x \Psi^2$, где $\Psi = 4\pi c b^3$ — объемная доля ловушек, которая предполагается малым параметром задачи, $\Psi \ll 1$. Если же, $D_\perp > D_x \Psi^2$, то отклонение от одномерного поведения $S(t)$ происходит на временах, где работает среднеполевое описание.

Для оценки асимптотики вероятности выживания при $D_\perp \neq 0$ мы заметим, что вероятности того, что амплитуды смещения по x и $r = \sqrt{y^2 + z^2}$ не превосходят, соответственно, L и R, равны $\exp(-a_1 D_x t/L^2)$ и $\exp(-a_2 D_\perp t/R^2)$, где a_1 и a_2 — численные коэффициенты, выражающиеся через первые нули соответствующих функций Бесселя [3]. Вероятность того, что цилиндр радиуса R и длины L не содержит ловушек, равна $\exp(-\pi R^2 cL)$. Частицы, рожденные в таком цилиндре и проведшие в нем все время, наверняка выживают. Таким образом, чтобы оценить долговременную асимптотику вероятности выживания нужно оптимизировать по L и R следующее выражение (произведение упоминавшихся выше вероятностей)

$$\exp\left\{-\left[\left(\frac{a_1 D_x}{L^2}+\frac{a_2 D_\perp}{R^2}\right)t+\pi R^2 cL\right]\right\}\equiv\exp\left[-f(L,R|t)\right]. \tag{4}$$

Варьируя $f(L,R|t)$ по L и R, мы получим систему уравнений

$$\begin{aligned}&-\frac{2a_1 D_x t}{L^3}+\pi cR^2=0\\&-\frac{a_2 D_\perp t}{R^3}+\pi cRL=0,\end{aligned} \tag{5}$$

из которой мы находим оптимальные значения L_t и R_t как функции времени:

$$L_t\propto\left(\frac{D_x^2}{cD_\perp}t\right)^{1/5},\qquad R_t\propto\left(\frac{D_\perp^{3/2}}{cD_x^{1/2}}t\right)^{1/5}. \tag{6}$$

Подставляя найденные оптимальные значения в $f(L,R|t)$, мы получаем интересующую нас асимптотику

$$-\ln S(t)\simeq f(L_t,R_t|t)\propto\left(c^{2/3}D_x^{1/3}D_\perp^{2/3}t\right)^{3/5}. \tag{7}$$

При изотропной диффузии ($D_x=D_\perp=D$) зависимость (7) переходит в известный результат (1), который в трехмерном случае имеет вид $-\ln S(t)\propto$ $\propto\left(c^{2/3}Dt\right)^{3/5}$.

Оценка (7) справедлива при условии, что оптимальные значения L_t и R_t велики по сравнению с b. По существу, это ограничение на времена, на которых оправдано применение асимптотики (7):

$$t\gg cb^5\max\left\{\frac{D_x{}^{1/2}}{D_\perp^{3/2}};\frac{D_\perp}{D_x^2}\right\}. \tag{8}$$

Если один из коэффициентов диффузии обращается в нуль, то зависимость (7) не реализуется. Например, если $D_\perp=0$, то задача является одномерной.

4. Проводя аналогичное рассмотрение в d-мерном случае, мы приходим к необходимости оптимизировать следующее выражение:

$$\exp\left\{-\left[a_1 t\left(\sum_{i=1}^{d}\frac{D_i}{L_i^2}\right)+c\left(\prod_{i=1}^{d}L_i\right)\right]\right\}\equiv\exp\left[-f\left(\{L_i\}|t\right)\right], \tag{9}$$

аналогичное выражению (4). Минимизируя $f(\{L_i\}|t)$ по всем L_i, $i=1,2,\ldots,d$, мы приходим к системе уравнений

$$\frac{\partial f}{\partial L_i}=-\frac{2a_1 D_i}{L_i^3}+\frac{c}{L_i}\left(\prod_{j=1}^{d}L_j\right)=0,\quad i=1,2,\ldots,d, \tag{10}$$

из которой мы находим оптимальные значения $L_{i,t}$:

$$L_{i,t} = \left[\frac{2DL_i^{(d+2)/2}t}{c\left(\prod_{j=1}^d D_j\right)^{1/2}} \right]^{1/(d+2)}, \quad i = 1, 2, \ldots, d. \tag{11}$$

Подставляя оптимальные значения в $f(\{L_i\}|t)$, мы получаем асимптотику вероятности выживания в виде

$$-\ln S(t) \simeq f(\{L_{i,t}\}|t) \propto \left[c^{2/d} \left(\prod_{j=1}^d D_j \right)^{1/d} t \right]^{d/(d+2)}. \tag{12}$$

Это выражение является обобщением зависимости (1) на случай анизотропной диффузии. Если диффузия изотропна, оба выражения совпадают. Оценка (12) справедлива, если все $L_{i,t}$ существенно превосходят размер ловушки, $L_{i,t} \gg \gg b, i = 1, 2, \ldots d$. Это имеет место на временах, удовлетворяющих неравенству

$$t \gg cb^{d+2} \max \left\{ \left[\frac{1}{D_1^{d+2}} \left(\prod_{j=1}^d D_j \right)^{1/2}, \frac{1}{D_2^{d+2}} \left(\prod_{j=1}^d D_j \right)^{1/2}, \ldots, \frac{1}{D_d^{d+2}} \left(\prod_{j=1}^d D_j \right)^{1/2} \right] \right\}. \tag{13}$$

Если хотя бы один из коэффициентов диффузии $D_i, i = 1, 2, \ldots d$, обращается в нуль, то асимптотика (12) не реализуется, так как размерность задачи в таком случае ниже размерности d-пространства.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 96-03-3218а и 97-03-33683а).

1. M. von Smoluchowski, Phys. Z. **17**, 557, 585 (1916). Перевод: А.Эйнштейн, М.Смолуховский, *Броуновское движение*, М.: ОНТИ, 1936, с. 332.
2. А.А.Овчинников, С.Ф.Тимашев, А.А.Белый, *Кинетика диффузионно-контролируемых химических процессов*, М.: Химия, 1986.
3. A.M.Berezhkovskii, Yu.A. Makhnovskii, and R.A.Suris, Chem. Phys. **137**, 41 (1989); J. Stat. Phys. **65**, 1025 (1991).
4. Б.Я.Балагуров, В.Г.Вакс, ЖЭТФ **65**, 1939 (1973).
5. M.D.Donsker and S.R.S.Varadhan, Comm. Pure Appl. Math. **28**, 525 (1975).
6. A.A.Ovchinnikov and Ya.B.Zeldovich, Chem. Phys. **28**, 215 (1978).
7. P.Grassberger and I.Procaccia, J. Chem. Phys. **77**, 6281 (1982).
8. R.F.Kayser and J.B.Hubbard, Phys. Rev. Lett. **51**, 79 (1983).
9. И.М.Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А.Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, М: Наука, 1982; И.М.Лифшиц, УФН **83**, 617 (1964); ЖЭТФ **44**, 1723 (1963).
10. A.M.Berezhkovskii, Yu.A.Makhnovskii, and G.E.Chudinov, Chem. Phys. Lett. **161**, 507 (1989).