

УДК 539.22

©1995

## НАПРЯЖЕНИЕ ПРОБОЯ В ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ СИСТЕМАХ

*В.В.Новиков, О.П.Познанский*

Одесский политехнический институт

(Поступила в Редакцию 31 марта 1994 г.

В окончательной редакции 16 августа 1994 г.)

В рамках фрактальной геометрии проанализированы проводимость и напряжение пробоя перколяционного кластера. Предложен ренормгрупповой метод для исследования проводимости и пробоя случайных фракталов. Найдены фрактальная размерность, критические индексы проводимости и напряжения пробоя вблизи неподвижной точки.

Одной из обобщенных моделей случайного роста является модель диэлектрического пробоя (ДП). При ДП в материале выделяют диэлектрическую и проводящую фазы. Эти фазы разделены динамической границей, имеющей стохастическую форму. Динамика границы зависит от скорости роста «пробитых частиц» на периметре кластера. Физические уравнения, описывающие проводящую фазу, имеют вид

$$\operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0, \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sigma(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Учитывая потенциальность полей, соотношения (1) могут быть записаны как

$$\operatorname{div} (\sigma(\mathbf{r})\nabla\varphi(\mathbf{r})) = 0, \quad (2)$$

где  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$  — плотность тока, вызванного градиентом потенциала электрического поля  $\nabla\varphi(\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\varphi(\mathbf{r}))$ ;  $\sigma(\mathbf{r})$  — локальная проводимость;  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ ,  $\sigma(\mathbf{r})$  — случайные функции координаты  $\mathbf{r}$ . Краевая задача дополняется граничными условиями

$$\varphi|_{\Gamma} = \text{const}, \quad (3)$$

где  $\Gamma$  — граница.

Если идеализировать ситуацию и отказаться от сложной картины процессов рождения, уничтожения и переноса зарядов, то можно принять предположение, что всюду в проводящей фазе плотность заряда отлична от нуля на поверхности раздела и пропорциональна напряженности поля в диэлектрике на границе раздела. Начальная малая флуктуация полевой переменной может усиливаться детерминированно до образования кластера из «пробитых частиц», связывающего противоположные электроды. В разделе 1 мы рассмотрим предложенную модель ДП.

## 1. Описание модели

Для решения поставленной задачи воспользуемся плоской решетчатой  $Z^d$ -моделью [1,2] ( $d$  — топологическая размерность пространства). При этом проводящей фазе соответствует  $S$ -структура, а диэлектрической — ее дополнение  $Z^d/S$ . На каждом шаге пробоя размеры  $S$ -структуры возрастают на единицу до тех пор, пока она не достигнет электродов, образуя при этом связанную конфигурацию. Записывая уравнение (2) для дискретной системы точек плоской квадратной решетки, получим

$$\nabla(\sigma(\mathbf{r})\nabla\varphi(\mathbf{r})) = \sum_j g_{ij}(\varphi_i - \varphi_j), \quad (4)$$

где  $i, j$  — ближайшие соседи в  $Z^d/S$ ,

$$g_{ij} = \begin{cases} \sigma, & \mathbf{r} \in Z^d/S, \\ \lambda\sigma, & \mathbf{r} \in S. \end{cases}$$

где  $\lambda \gg 1$ ,  $d = 2$ .

До пробоя проводимость  $\sigma$  разбросана на квадратной решетке с функцией плотности распределения

$$f(\sigma) = (1-p)\delta(\sigma) + p\delta(\sigma - \sigma_0), \quad (5)$$

где  $p$  — концентрация резисторов с проводимостью  $\sigma_0$ ,  $1-p$  — концентрация резисторов с нулевой проводимостью,  $\delta(x)$  —  $\delta$ -функция.

Элементарный процесс перехода из одной фазы в другую моделируется необратимыми характеристиками проводимости. Предположим, что постоянное напряжение  $\varphi_i - \varphi_j$  приложено к резистору, причем оно меньше некоторого критического  $V_c$ ,  $\sigma$  — проводимость резистора. Когда  $\varphi_i - \varphi_j$  превосходит  $V_c$ , то проводимость повышается до  $\lambda\sigma$  ( $\lambda \gg 1$ ). После пробоя резистор сохраняет проводимость независимо от величины приложенного напряжения.

Уравнения (4) образуют систему линейных уравнений для  $\varphi_i$  и могут быть решены численно. Эволюция такой системы уравнений задается по следующему алгоритму [2]:

- 1) для каждой связи квадратной сетки задается проводимость  $\sigma$ , согласно функции плотности распределения (5);
- 2) на противоположных электродах задается граничное условие (3);
- 3) решается уравнение (4) и находятся  $\varphi_i$ ;
- 4) до пробоя определяется проводимость системы;
- 5) проверяется каждая проводящая связь (за исключением уже разрушенных пробоем): если выполняется условие пробоя  $(\varphi_i - \varphi_j) > V_c$ , то проводится замена  $g_{ij} = \sigma$  на  $g_{ij} = \lambda\sigma$ ;
- 6) останавливается процесс, если электроды связаны «пробитым кластером», в противном случае изменяется граничное условие так, чтобы на одном из резисторов выполнялось условие пробоя, и делается переход к пункту 3).

Граничное напряжение, при котором впервые образовался «пробитый кластер», назовем напряжением пробоя заданной элементарной ячейки. Усредняя по различным реализациям функции плотности распределения (5), получим среднее напряжение пробоя.

## 2. Ренормгрупповой подход в проблеме ДП

В этом разделе мы обсудим основную концепцию ренормгруппового преобразования и использования его для оценки эффективных проводимостей и напряжений пробоя микронеоднородной среды, моделируемой на двумерной квадратной решетке.

Рассмотрим двухфазную микронеоднородную среду на квадратной плоской решетке  $l \times l$ . Одна ее фаза имеет проводимость  $\sigma_0$  и концентрацию  $p_0$ , другая фаза имеет нулевую проводимость и концентрацию  $1-p_0$ . Плотность вероятности распределения проводимостей на ячейке  $l \times l$  определяется соотношением (5). Репрезентативную группу таких ячеек можно рассматривать как первый блок построения решетки на следующем этапе ренормировки (рис. 1). Такую группу ячеек назовем ренормализационным кластером [3].

Сущность ренормализационной процедуры заключается в замене изначально неоднородной ячейки на эквивалентную однородную с определенными эффективными свойствами. Это достигается путем последовательных усреднений на масштабах ренормализационного кластера. В результате таких преобразований значение размера кластера  $\xi_n$  на  $n$ -м шаге соотносится с размером кластера  $\xi_{n+1}$  на  $n+1$  шаге как  $\xi_n = \xi_{n+1}/l$ , где  $l$  — размер затравочной ячейки. При этом неупорядоченность ячейки сохраняется на каждом шаге ренормировки для масштабов  $l \ll \xi \ll L$ , где  $l$  — масштаб затравочной ячейки,  $L$  — наибольший масштаб, на котором свойства решетки не зависят от номера итерации. Тогда на каждом шаге итерации функция плотности распределения приобретает вид

$$f_n(\sigma) = (1 - p_n)\delta(\sigma) + p_n\delta(\sigma - \sigma_n), \quad (6)$$

где  $\sigma_n$  — значение проводимости на  $n$ -м шаге, а  $p_n$  изменяется, согласно ренормализационному преобразованию, как

$$p_n = R(p_{n-1}). \quad (7)$$

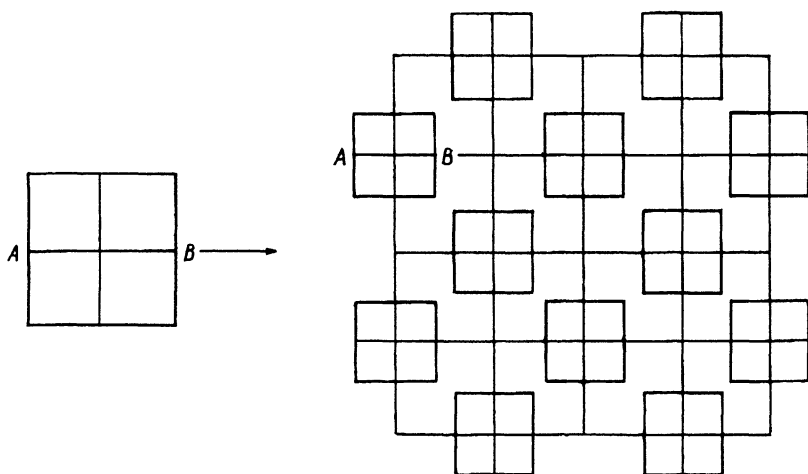


Рис. 1. Первый шаг при построении ренормируемой ячейки.

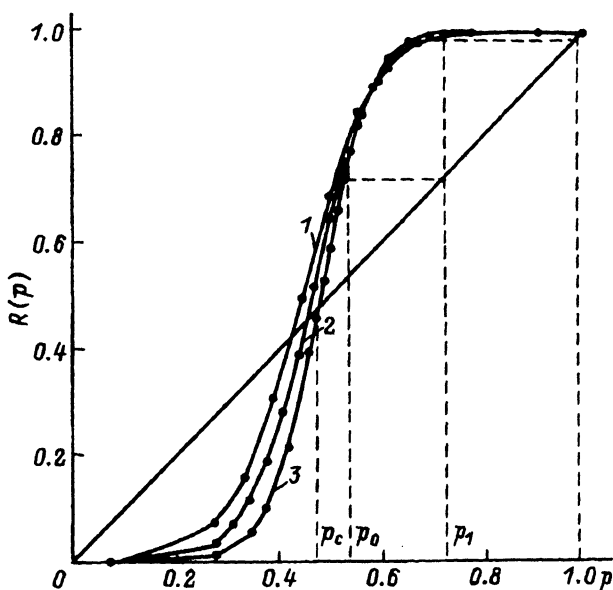


Рис. 2.  $R$ -функция для ячеек размерами  $3 \times 3$  (1),  $4 \times 4$  (2),  $5 \times 5$  (3).

Функция  $R(p)$  определяется как отношение числа конфигураций, связывающих противоположные грани решетки, к общему числу разбросов проводящих связей с концентрацией  $p$  и непроводящих связей с концентрацией  $1-p$ . Иными словами, функция  $R(p)$  — это вероятность образования связанной конфигурации на данной решетке  $l \times l$  при заданной концентрации  $p$ .

На практике эта функция определяется методами Монте-Карло [4]. Задается определенная концентрация  $p$  проводящих связей и  $1-p$  непроводящих связей. Затем проводятся их разбросы и определяется вероятность образования конфигурации, связывающей противоположные грани решетки. Концентрация  $p$  изменяется в пределах  $(0-1)$ .

Процедура ренормировки концентрации  $p$  проводится следующим образом. Задается затравочное значение  $p_0$ , для него определяется значение функции  $R(p_0)$ . На следующем шаге ренормировки — концентрация проводящих связей  $p_1 = R(p_0)$  и для этой новой концентрации определяется  $R(p_1)$  и т.д. Процесс повторяется до тех пор, пока ренормировка  $p_n$  зависит от шага итерационной процедуры. Схематически это изображено на рис. 2.

Одновременно с изменением концентрации проводящих связей ренормируется проводимость и напряжение пробоя. При затравочном значении  $p_0$  находилась средняя проводимость  $\sigma_0$ , которая при ренормированной концентрации  $p_1 = R(p_0)$  (на следующем шаге итерации) определяет эффективное значение проводимости связи. Новая средняя проводимость при концентрации  $p_1$  зависит от проводимости на предыдущем шаге и от масштаба ренормируемой ячейки, т.е.  $\sigma_1 = G(\sigma_0(p_0), l)$ . Тогда в общем виде ренормировку проводимости можно записать как

$$\sigma_n = G(\sigma_{n-1}(p_{n-1}), l). \quad (8)$$

Ясно, что после  $n \rightarrow \infty$  шагов размер ренормируемого кластера стремится к бесконечности ( $\xi \rightarrow \infty$ ) и  $\xi \gg L$ , ренормируемая величина уже не зависит от шага итерации, и тогда процесс ренормировки заканчивается. На этой стадии ячейка однородна и функция распределения имеет вид  $f(\sigma) = \delta(\sigma - \sigma_{\text{эф}})$ , где  $\sigma_{\text{эф}}$  — эффективная проводимость перколяционной системы с затравочной концентрацией проводящей фазы  $p_0$ . Точку, в которой эффективные характеристики не зависят от номера итерации, назовем неподвижной точкой ренормализационного преобразования.

Для оценки напряжения пробоя на каждом шаге ренормгруппы по алгоритму из раздела 1 определялось эффективное напряжение пробоя, и на следующем шаге кроме значения эффективной проводимости  $\sigma_n$  каждой связи приписывалось значение напряжения пробоя  $V_c^n$ . Процесс ренормировки напряжения с шагом итерации продолжался до тех пор, пока значение  $V_c^n$  не переставало зависеть от шага итерации. Это изображено на рис. 3 для различных затравочных концентраций  $p$ .

Нами рассматривались затравочные ячейки размерами  $3 \times 3$ ,  $4 \times 4$ ,  $5 \times 5$ . При ренормировке они постепенно наращиваются, и уже в неподвижной точке представляют собой решетки значительно большего размера. На рис. 1 показана такая решетка после первого шага ренормировки.

### 3. Результаты расчетов

В результате последовательных усреднений по масштабам для различных затравочных ячеек  $l \times l$  была получена функция плотности вероятности протекания  $R(p)$  на данной ячейке при заданной концентрации  $p$  проводящих связей. На рис. 2 представлены эти функции для затра-

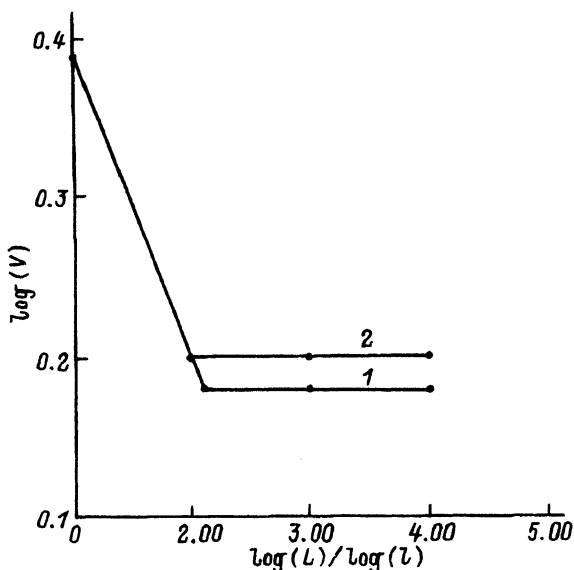


Рис. 3. Зависимость эффективного напряжения пробоя от шага ренормализационной процедуры при концентрациях  $p - p_c$  0.001 (1), 0.01 (2).

вочных ячеек  $3 \times 3$ ,  $4 \times 4$ ,  $5 \times 5$ . Точки пересечения этих функций с биссектрисой определяют неподвижные точки  $(0, p_c, 1)$  ренормализационной процедуры для заданной решетки  $l \times l$  [3]. Вблизи неподвижной точки  $p_c$  определяется фрактальная размерность перколяционного кластера как

$$d_f = \frac{\Delta \ln N}{\Delta \ln L}, \quad (9)$$

где  $N$  — число проводящих связей,  $L$  — масштаб ячейки. Значения  $p_c$  и  $d_f$  для различных ячеек представлены в табл. 1. При увеличении размера ячейки ( $l > 9$ ) геометрические характеристики моделируемой микро неоднородной системы совпадают с характеристиками перколяционного кластера ( $p_c = 0.5$ ,  $d_f = 1.89$  [4]).

Таблица 1

Геометрические характеристики перколяционной решетки

Модель, $l \times l$	$p_c$	$d_f$
$3 \times 3$	0.4267	1.62
$4 \times 4$	0.4536	1.68
$5 \times 5$	0.4680	1.73

Напряжение пробоя в окрестности порога протекания имеет следующую асимптотику:  $V_c \propto L^{d_p}$ , где  $d_p$  — критический индекс изменения с масштабом напряжения пробоя. На рис. 3 изображена данная зависимость в логарифмическом масштабе. Зависимость напряжения пробоя от концентрации определяется по соотношению [5]

$$t_p = \Delta \ln(V_c) / \Delta \ln(p - p_c), \quad (10)$$

где  $t_p$  — критический индекс, определяющий асимптотическое поведение напряжения пробоя от концентрации вида  $v_c \propto (p - p_c)^{t_p}$ . Аналогичные зависимости определяют скейлинговое поведение проводимости вблизи порога  $p_c$ , характеризующееся индексом  $t$ . В табл. 2 приведены критические индексы для различных моделей  $l \times l$ . С увеличением размера ренормируемой ячейки критический индекс для проводимости стремится к значению, определенному другими методами ( $t = 1.23$  [5]).

Итак, разработан алгоритм определения напряжения пробоя для неупорядоченных перколяционных кластеров. Исследованы скейлин-

Таблица 2

Критические индексы проводимости и напряжения пробоя

Модель, $l \times l$	$t$	$t_p$
$3 \times 3$	1.355	1.185
$4 \times 4$	1.284	1.102
$5 \times 5$	1.236	1.082

говое поведение напряжения пробоя и проводимость в окрестности порога протекания. Показано, что критические индексы для напряжения пробоя и проводимости различны.

#### Список литературы

- [1] Niemeyer L., Pietronero L., Wiesmann H. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 52. P. 1033–1041.
- [2] Takayasu H. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. P. 1099–1102.
- [3] Reynolds P., Stanley H., Klein W. // Phys. Rev. B. 1980. V. 21. N 13. P. 1223–1236.
- [4] Stauffer D. // Introduction to percolation theory. Taylor & Francis. London and Philadelphia, 1985.
- [5] Ottino J., Shah N. // Cham. Eng. Sci. 1986. V. 41. N 2. P. 283–295.