

ПОРОГИ ПРОТЕКАНИЯ РЕШЕТОЧНЫХ МОДЕЛЕЙ С КРУПНОМАСШТАБНЫМИ НЕОДНОРОДНОСТЯМИ

© А.Л.Корженевский

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия
(Поступила в Редакцию 3 июля 1996 г.)

Изучено положение порога протекания в модели кристалла с крупномасштабными неоднородностями и показано, что в отличие от стандартной континуальной перколяционной проблемы оно зависит от структуры кристаллической решетки.

Многочисленные исследования процессов переноса и фазовых переходов в ряде неупорядоченных материалов выявили существенную роль применения идей теории протекания для анализа их свойств [1]. Как известно, любая конкретная перколяционная модель определяется той или иной формулировкой условия связности («протекания») ее минимальных элементов, а также типом распределения совокупности этих элементов в пространстве. Выполнение условия связности элементов гарантирует совпадение в них значений изучаемых характеристик материала, что ведет к кластерной картине для рассматриваемой проблемы. На масштабах, меньших размера критических кластеров $r_p \sim a_0 |p - p_c|^{-\nu}$ (и, конечно, больших размера a_0 минимального элемента), эта картина является самоподобной, а на больших масштабах — эффективно однородной. При увеличении относительной доли объема кластеров p в образце система приближается к порогу протекания $p = p_c$, где возникает бесконечный кластер, а фрактальная геометрия существует на всех масштабах. Как следствие целый ряд физических характеристик неупорядоченной системы имеет особенности типа $|p - p_c|^{-\Delta_i}$, где $\Delta_i > 0$ — соответствующие критические индексы, значения которых были вычислены для перколяционных задач различных классов универсальности.

Поскольку аномалии физических свойств проявляются заметным образом лишь в относительно узкой окрестности порога протекания, то для того, чтобы оценить вероятность существования вклада перколяционных процессов в наблюдаемое аномальное поведение характеристик данного неупорядоченного вещества, важно в первую очередь знать возможное численное значение порога p_c . Хорошо известно, что оно неуниверсально, т.е. зависит как от конкретного типа правила связности, так и от пространственной структуры массива элементов модели. Лишь для сравнительно небольшого числа двумерных решеток, а также решеток Бете, известны точные значения порогов протекания [2]. Приближенное эмпирическое выражение существует для

порога $p_c(b)$ решеточной задачи связей [3]

$$zp_c(b) = d/(d-1), \quad (1)$$

где d — размерность пространства и z — число ближайших соседей. Для решеточной задачи узлов в свою очередь существует приближенный инвариант Шера и Заллена [4] со значениями $\theta_c = 0.45$ ($d = 2$) и $\theta_c = 0.15$ ($d = 3$), который позволяет довольно точно оценить порог протекания $p_c(s)$ по формуле

$$p_c(s) = \theta_c/\gamma, \quad (2)$$

где множитель γ — зависящий от решетки фактор («плотность упаковки»).

Кроме задач теории протекания на регулярных решетках в связи с решением проблемы вычисления низкотемпературной прыжковой проводимости легированных полупроводников и проводимости двухфазных композитов рассматривались перколяционные свойства систем хаотически расположенных в пространстве узлов, а также так называемая континуальная задача протекания. Для этих задач были найдены (опять, за немногими исключениями, численно) свои специфические, не совпадающие с решеточными вариантами проблемы, значения порогов протекания [1].

Указанные модели обычно рассматриваются как основные и простейшие, пригодные для многих обширных семейств пространственно неупорядоченных материалов. Известны также и некоторые другие относительно простые перколяционные модели, которые используются при анализе поведения более узких и специальных классов неупорядоченных сред, такие, как например, полихроматическое протекание [5], модель «швейцарского сыра» [6], протекание на цепях Вороного [7] или весьма экзотическая (по методу построения) модель протекания для песчаников, обладающая нулевым значением порога $p_c = 0$ [8]. В целом можно сказать, что детально изучались либо перколяционные модели с широкой областью применимости, либо модели, описывающие специфические, но физически важные неупорядоченные материалы, причем значения порогов протекания были установлены, как правило, численными методами.

В настоящей работе мы хотим обратить внимание на существование еще одного, не менее простого, чем вышеперечисленные, класса моделей теории протекания, который вполне естественным образом может появляться при описании свойств разупорядоченных кристаллов с крупномасштабными неоднородностями и для которого положение порога протекания может быть оценено аналитическим образом.

Рассмотрим кристалл, в котором дефекты создают либо случайное поле локальных значений порога протекания $p_c(\mathbf{r})$ с большим характерным масштабом $R_0 \gg a_0$, либо само поле концентраций дефектов $p(\mathbf{r})$ неоднородно и обладает таким масштабом. Сразу оговоримся, что оперировать понятием локальных значений полей $p_c(\mathbf{r})$ и $p(\mathbf{r})$ можно только при условии, что масштаб $R_0 \gg r_p$ — типичного размера перколяционных критических кластеров. Если для определенности считать в дальнейшем, что сильно флуктуирует именно поле концентраций $p(\mathbf{r})$, то это значит, что его дисперсия Δp_d должна быть относительно велика, $\Delta p_d \gg (a_0/R_0)^{1/\nu}$. При этом в зависимости от физики рассматрива-

емой задачи в качестве локального критерия протекания в дефектном кристалле можно принять стандартную решеточную модель узлов либо связей. Таким образом весь объем кристалла разбивается на блоки с характерным размером R_0 , внутри которых значения концентрации приближенно постоянны, но заметно флуктуируют от блока к блоку. Ясно, что для возникновения протекания через макрообъем образца необходимо выполнение двух требований: наличие протекания внутри части блоков, причем такой, что ее объемная доля настолько велика, чтобы обеспечить и макропротекание между блоками. Поскольку «протекшие» блоки распределены случайным образом, то их относительная доля, соответствующая макропорогу, совпадает с порогом протекания x_c континуальной перколяционной проблемы. Комбинируя указанные требования приходим к условию макропротекания образца в целом в виде

$$\int_0^1 Q(p_c, \bar{p}_c) dp_c \int_{p_c(\alpha)}^1 P(p, \bar{p}_*) dp = x_c \left\{ 1 + O \left[(a_0/R_0)^{1/\nu} \right] \right\}, \quad (3)$$

в котором первое интегрирование учитывает флуктуации порога протекания в блоках (которое неизбежно присутствуют в силу конечности блоков), а второе осуществляет подсчет доли блоков с концентрацией выше порога протекания $p_c(\alpha)$ ($\alpha = b, s$ и определяется (1) или (2)) на заданной решетке. В (3) конкретный вид функций распределения Q и P считается известным (например, это могут быть два гауссовых пика, центрированных вокруг средних значений \bar{p}_c и \bar{p}), а искомым является критическое среднее значение концентрации дефектов $\bar{p} = \bar{p}_*$.

В некоторых специальных случаях решение (3) очевидно. Так, если флуктуации локальных значений порога протекания $p_c(\mathbf{r})$ обусловлены исключительно конечностью блоков, а функция распределения $P(p, \bar{p})$ симметрична относительно среднего значения \bar{p} , то для двумерных задач с $x_c = 1/2$ сразу получаем, что $\bar{p}_* = \bar{p}_c$.¹ Для трехмерных задач при аналогичных условиях можно написать оценку на \bar{p}_* в виде $\bar{p}_* = \bar{p}_c - \xi \Delta p_d$, где ξ — численный фактор порядка единицы и подразумевается, что дисперсия $\Delta p_d \ll \bar{p}_c$. В общей же ситуации функциональная зависимость левой части (3) не позволяет, конечно, записать выражение для макропорога \bar{p}_* в явном виде, однако ясно, что оно зависит от значения порога протекания $p_c(\alpha)$ соответствующей решетки без крупномасштабных неоднородностей. Это обстоятельство резко отличает нашу модель от стандартной задачи континуального протекания, хотя последняя также может быть рассмотрена и на решетке с малым периодом $a_0 \ll R_0$ — корреляционного радиуса поля случайного потенциала $V(\mathbf{r})$. Тем не менее никакого противоречия здесь нет. Действительно, крупномасштабный случайный потенциал континуальной перколяционной модели строится обычно как свертка δ -коррелированного поля $f(\mathbf{r})$ «точечных» (реально с размером $a_0 \ll R_0$) дефектов [10]

$$V(\mathbf{r}) = \int K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') d^d \mathbf{r}',$$

¹ Учет наличия «красных» узлов [9], в которых $r_p \sim R_0$ и протекание осуществляется, грубо говоря, с вероятностью $1/2$, слегка повышает истинное положение порога на малую величину $\Delta x_c \sim (a_0/R_0)^{1/\nu} \ll x_c$.

$$(f(0)f(\mathbf{r})) \sim \delta(\mathbf{r}).$$

(4)

При этом предполагается, что ядро $K(\mathbf{r})$, резко убывает лишь начиная с масштабов порядка $R_0 \gg a_0$. Очевидно, что любая реализация поля $V(\mathbf{r})$ состоит из «больших» шаров, причем в силу «усредняющего» действия свертки в (4), внутреннее состояние каждого из них близко к однородному. Напротив, в кристалле с крупномасштабными неоднородностями концентрации всегда присутствует и мелкомасштабная неупорядоченность в расположении дефектов на решетке. Так как их связность определяется на масштабах порядка постоянной решетки a_0 то внутри блоков нашей модели формируется фрактальная (а не эвклидова) геометрия протекания, что и ведет к зависимости макропорога протекания \bar{p}_* от типа кристаллической решетки в отличие от стандартной континуальной проблемы.

В заключение кратко укажем на один из возможных физических механизмов появления модели кристалла с крупномасштабной неоднородностью концентрации дефектов $p(\mathbf{r})$. Помимо очевидной ситуации, когда неоднородность $p(\mathbf{r})$ просто обусловлена метастабильностью состояния, долгоживущего при достаточно низких температурах, возможно и равновесное неоднородное распределение концентрации дефектов в кристалле, уже содержащем топологические (дальнодействующие) дефекты. В частности, дислокации обычно создают в кристаллах крупномасштабные поля внутренних упругих напряжений [11]. Поскольку в равновесии химический потенциал не зависит от координат, то вклад в него флуктуаций концентрации точечных дефектов должен компенсировать неоднородность упругого вклада и, следовательно, иметь тот же набор характерных масштабов. Если условие связности дефектных кластеров (состоящих, например, из магнитных атомов) обеспечивается наличием ближайших соседей, то в простейшем случае существования только одного характерного масштаба упругих полей $R_0 \gg a_0$ приходим к рассмотренной выше модели для перколяционного фазового перехода на примесях. Отметим также, что вывод о зависимости положения макропорога протекания от типа решетки остается в силе и в общей ситуации, когда в дефектном кристалле имеется целый набор характерных масштабов неоднородности с $R_i \gg a_0$.

Работа поддержана грантом № 96-02-16893 Российского фонда фундаментальных исследований.

Список литературы

- [1] D. Stauffer. Introduction to percolation theory. Taylor and Francis. London (1985). 298 p.
- [2] M.F. Sykes, J.W. Essam. J. Math. Phys. 5, 1117 (1964).
- [3] S. Kirkpatrick. Rev. Mod. Phys. 45, 574 (1973).
- [4] H. Scher, R. Zallen. J. Chem. Phys. 53, 3759 (1970).
- [5] R. Zallen. Phys. Rev. B16, 1426 (1977).
- [6] B.I. Halperin, S. Feng, P.N. Sen. Phys. Rev. Lett. 54, 2391 (1985).
- [7] G.R. Jerauld, J.C. Hatfield, L.E. Scriven, H.T. Davis. J. Phys. A17, 1519 (1984).
- [8] S.A. Trugman, A. Weinrib. Phys. Rev. B31, 2974 (1985).
- [9] H.J. Herrmann, H.E. Stanley. Phys. Rev. Lett. 53, 1121 (1984).
- [10] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. Наука. М. (1979). 416 с.
- [11] Ж. Фридель. Дислокации. М. (1967). 643 с.