

Учреждение Российской Академии наук  
Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН

---

*На правах рукописи*

Любшин Дмитрий Сергеевич

**Однокластерные перколяционные системы  
и модели гранулированных металлов**

Специальность 01.04.02 — Теоретическая физика

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Черноголовка – 2009

Работа выполнена в Институте теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской Академии Наук.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук  
Иоселевич А. С.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук  
Гантмахер В. Ф.

доктор физико-математических наук  
Щур Л. Н.

Ведущая организация: Российский научный центр “Курчатовский институт”

Защита состоится 25 декабря 2009 года в \_\_\_\_\_ часов на заседании Диссертационного совета Д 002.207.01 при Институте теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН по адресу: 142432, Московская обл., Ногинский р-н, пос. Черноголовка, Институт физики твердого тела РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН.

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» ноября 2009 г.

Ученый секретарь  
Диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук

Гриневич П. Г.

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Модели перколяционного типа широко используются для описания самых разных физических систем. В стандартной постановке задачи имеется пространственная структура (решетка), узлы или связи которой могут находиться в двух состояниях (занятом и свободном, проводящем и изолирующем и т. п.) Для обычной (“некоррелированной”) перколяции эти события считаются имеющими вероятности  $p$  и  $1 - p$  соответственно и независимыми для различных узлов, в более специфичных случаях вес приписывается конфигурации в целом и зависит от деталей взаимодействия. Соседние узлы объединяются в кластеры, свойства которых и изучаются; как правило, в таких системах при конечном значении плотности  $p = p_c$  происходит фазовый переход, параметром порядка для которого служит плотность  $P_\infty$  (единственного) бесконечного кластера в системе: при  $p < p_c$  она обращается в нуль. Вместе с плотностью бесконечного кластера в точке  $p_c$  обращаются в нуль и такие характеристики как проводимость и упругость, а в системе остаются только конечные кластеры.

Однако во многих физических моделях образование конечных кластеров невозможно в принципе, и система в любой момент представляет собой один бесконечный кластер (будем называть их однокластерными моделями). В качестве примера можно привести процесс образования гранулированного металла за посредством последовательного выжигания неметаллических гранул исходной матрицы – образующиеся изолированные конечные кластеры сразу же приходят в движение и прилипают к бесконечному кластеру, сохраняя связность системы. Обычный перколяционный переход (по  $P_\infty$ ) в таких моделях отсутствует, но возможны “топологические” фазовые переходы, при которых в силу геометрических причин обращаются в нуль макроскопические проводимость и упругость – в этих эффектах участвуют не все узлы бесконечного кластера, а только его подмножество (остов, backbone). В стандартной перколяции плотность остова  $P_B$  обращается в нуль одновременно с  $P_\infty$ , но в однокластерной задаче могут реализовываться как сценарий с

фазовым переходом по  $P_V$ , так и сценарий с  $P_V > 0$  при всех достижимых концентрациях.

При всей их естественности вопрос о топологическом переходе в “типичной” однокластерной модели и задача описания фаз такой системы являются новыми. Отдаленные аналогии можно провести со статьями Н. Eugene Stanley о многосвязных подструктурах критического бесконечного кластера (не имеющих прямой макроскопической интерпретации).

Помимо гранулированных металлов, комплексов полимерных цепей и им подобных систем поставщиком связанных случайных конфигураций частиц являются также разнообразные задачи об агрегации: в финальном состоянии система представляет собой один кластер. В отдельных случаях результаты об однокластерных системах могут быть проинтерпретированы в их терминах, в частности, упомянутая выше модель образования гранулированного металла принадлежит однопараметрическому семейству, в которое входит стандартная задача кластер-кластерной агрегации (cluster-cluster aggregation).

В третьей главе диссертации исследуется проводимость смеси металлических и изолирующих гранул несколько ниже порога перколяции по металлическим гранулам в режиме квантового туннелирования и с учетом кулоновской блокады. Актуальность такой постановки задачи определяется появлением в последние годы гранулированных систем с характерным размером зерна порядка 10 нм, где оказываются важными существенно квантовые эффекты. Найденные режимы температурной зависимости проводимости в принципе могут быть проверены экспериментально.

**Цель работы.** В работе преследовались следующие цели:

1. Изучение однокластерных перколяционных моделей как класса: перечисление возможных фаз таких систем, типов их критического поведения и степень универсальности последних.
2. Исследование конкретных однокластерных систем, представляющих самостоятельный интерес (“burning-and-sticking”, SRBP – точные опреде-

ления моделей см. в разделе “основное содержание работы”). Построение эффективных алгоритмов численного моделирования однокластерных систем.

3. Выяснение критерия, позволяющего для конкретной системы предсказать наличие или отсутствие в ней основного топологического фазового перехода (обращения плотности остова в нуль).
4. Изучение свойств проводимости смеси из металлических и изолирующих гранул ниже точки перколяции (в туннельном режиме) с учетом эффекта кулоновской блокады.

**Научная новизна** диссертационной работы заключается в следующих оригинальных результатах, которые выносятся на защиту:

1. Показано, что в простейшей однокластерной модели самовосстанавливающихся связей (SRBP) при конечной концентрации связей  $p_c$  происходит топологический фазовый переход, при котором плотность остова  $P_B$  обращается в нуль ( $p_{\text{tree}} < p_c < 1$ , где  $p_{\text{tree}}$  – наименьшая достижимая плотность). Система является точно решаемой в том смысле, что критическая концентрация  $p_c$  и оба независимых критических индекса  $\beta$  (определяемый как  $P_B \sim (p - p_c)^\beta$  при  $p - p_c \ll 1$ ) и  $\nu$  (являющийся аналогом индекса корреляционной длины) могут быть выражены через критические характеристики стандартной некоррелированной перколяционной задачи.
2. Доказано, что фаза низкой плотности ( $p_{\text{tree}} < p < p_c$ ) в модели SRBP, являясь плотной (ее массовая размерность  $D = d$  совпадает с размерностью пространства), характеризуется фрактальным поведением ряда метрических свойств – в частности, евклидов индекс  $d_{\min}$  (определяемый как  $\ell \sim R^{d_{\min}}$  при  $R \gg 1$ , где  $\ell$  – химическое, а  $R$  – евклидово расстояние между двумя узлами системы) имеет во всем диапазоне  $p_{\text{tree}} < p < p_c$  постоянное значение  $d_{\min} > 1$ . Фактически в этом диапазоне  $d_{\min} = d_{\text{MST}}$ , где  $d_{\text{MST}}$  – стандартный евклидов индекс

для минимального решеточного остовного дерева, при  $d = 2$  равный  $d_{\text{MST}} = 1.22(1)$ .

3. Численными методами исследовано поведение плотности остова и корреляционной длины в модели самовосстанавливающихся узлов (SRSP), а также в гибридных моделях, непрерывно интерполирующих между SRBP и SRSP. Установлено, что все такие модели испытывают переход SRBP-типа и имеют конечную область существования древесной фазы. Критические индексы в этих моделях оказываются близкими по величине, но точной универсальности нет: индекс  $\beta_B$  непрерывно зависит от параметра смешивания моделей, изменяясь в диапазоне от  $\beta_B(\text{SRBP}) = 0.4757(10)$  до  $\beta_B(\text{SRSP}) = 0.463(2)$ . При этом различий в индексах  $\nu$  и  $d_{\text{min}}$  (в фазе низкой плотности и в критической точке) для моделей этого семейства в пределах точности расчета обнаружено не было.
4. Показано, что в модели образования гранулированного металла посредством последовательного выжигания неметаллических гранул (“burning-and-sticking”, BS) отсутствует топологический фазовый переход: плотность остова  $P_B$  остается ненулевой при сколь угодно низкой концентрации  $x$  узлов системы. Несмотря на быстрый рост корреляционной длины  $\xi$  (определяемой, скажем, как среднеквадратичный радиус лакун в системе), масса остова демонстрирует правильную зависимость от размера системы  $M_B \sim L^d$  до самых малых доступных значений концентрации  $x$ , соответствующую асимптотике  $P_B \sim x^{\beta_B}$  с индексом  $\beta_B = 2.85(15)$ .

При этом структура остова при низких плотностях кардинально отличается от низкоплотного остова обычной перколяционной системы: если в последнем существенным образом присутствуют циклы всех длин, а масса в терминах стандартной картины nodes-links-blobs сосредоточена в блоках (blobs), то в остове модели BS при малых  $x$  присутствуют только очень короткие и очень длинные циклы, а масса сосредоточена

в связях (links).

5. Определены и численно исследованы модели, реализующие непрерывную однопараметрическую интерполяцию между BS и SRSP. Установлено, что при сколь угодно малой примеси BS-механизма система приобретает качественные свойства модели “burning-and-sticking”: фазовый переход отсутствует, плотность остова отлична от нуля во всем диапазоне  $0 < x < 1$  и имеет степенное поведение вблизи  $P_B \sim x^{\beta_B}$  вблизи  $x = 0$ . При этом индекс  $\beta_B$  непрерывно зависит от параметра смешивания  $Q$ :  $\beta_B(Q = 1) = \beta_B(BS) = 2.85(15)$ ,  $\beta_B(Q = 0.5) = 3.4(1)$ ,  $\beta_B(Q = 0.25) = 4.2(1)$ . . . Таким образом, поведение BS-типа является устойчивым и неуниверсальным.
6. Сформулирован критерий, позволяющий предсказать наличие или отсутствие топологического фазового перехода в однокластерной модели: системы, в которых эволюционный процесс обеспечивает строго монотонное уменьшение остова, испытывают переход, а системы со сколь угодно слабыми механизмами восстановления остова (backbone reinforcement) всегда сохраняют ненулевую плотность остова.
7. Механизм действия слабых процессов восстановления остова численно продемонстрирован на примере модели с самовосстановлением двух связей (SR2BP) и непрерывного семейства ее гибридов с SRBP. Установлено, что для всех рассмотренных гибридных моделей качественное поведение наследуется от чистого случая SRB2P (т.е. фазовый переход отсутствует). На основании этих результатов сделан также вывод о том, что “решеточные резонансы” (приклеивания по числу точек, сильно превышающему размерность  $d$ ) в модели BS не имеют определяющего значения.
8. Исследована проводимость неупорядоченной системы из металлических и изолирующих гранул несколько ниже порога перколяции по металлическим гранулам, когда проводимость определяется туннелированием носителей через изолирующие гранулы. В этом случае при понижении

температуры кластеры, образованные малым количеством проводящих гранул, подвергаются кулоновской блокаде. Сформулирована адекватная этой ситуации модель перколяции по узлам, следующим за ближайшими, и исключенными малыми кластерами; численно и аналитически показано, что проводимость  $\sigma$  такой системы степенным образом зависит от размера  $n$  исключенных кластеров:  $\sigma \sim n^{-\theta}$ , причем для индекса  $\theta$  найдено точное в любой размерности  $d$  выражение через стандартные перколяционные индексы. Соответственно, на фазовой  $x - T$  диаграмме идентифицированы две области с нетривиальной степенной зависимостью проводимости от температуры  $\sigma \sim T^\Theta$ ,  $\sigma \sim T^{\Theta'}$  и получены выражения для индексов  $\Theta$ ,  $\Theta'$ .

**Научная и практическая ценность.** Полученные в диссертации результаты позволяют эффективно предсказывать “топологические” свойства широкого класса задач перколяционного типа, возникающих в результате построения моделей реальных систем. Подробно изложенные в тексте численные алгоритмы могут быть перенесены на моделирование сходных по природе объектов. Результаты диссертации могут быть использованы в материаловедении (в частности, при изучении перспектив создания твердых структур низкой плотности).

**Апробация работы.** Результаты, изложенные в диссертации, докладывались на международных конференциях “Landau Days 2004” и “Landau Days 2009” в Черногловке, а также на семинарах Института Теоретической Физики им. Л. Д. Ландау РАН.

**Публикации.** По материалам диссертации опубликовано четыре печатных работы.

**Объем и структура диссертации.** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы.

## Основное содержание работы

Во **введении** очерчен круг рассматриваемых вопросов, даны центральные определения, приведены основные положения, выносимые на защиту.

Ниже под однокластерной перколяционной системой мы будем понимать задачу коррелированной перколяции, в которой несвязные конфигурации имеют нулевую вероятность. Как правило, будем считать, что однокластерная модель задана алгоритмически, т.е. задан эволюционный закон перехода от связной конфигурации  $K$  к некоторой случайной связной конфигурации  $K'$  с меньшим числом занятых узлов (открытых связей), а под средними по ансамблю понимаются средние по срезам стартующих с полной решетки эволюционных траекторий, сделанным при фиксированной концентрации узлов (связей).

Висячим концом (dangling end) в бесконечном кластере будем называть конечное связное множество узлов (связей), которое может быть отделено от остальной части кластера посредством удаления одного узла (одной связи).

Остов (backbone) проще всего определить как результат удаления из бесконечного кластера всех висячих концов. Остов является максимальным двусвязным подграфом бесконечного кластера.

Блоком (block) называется любой двусвязный подграф в системе.

**Первая глава** посвящена монотонным однокластерным моделям, в которых не принадлежащие остову в некоторый момент узел или связь не могут принадлежать остову ни в какой более поздний момент времени эволюционного процесса. Простейшим примером такой системы является задача самовосстанавливающихся связей (SRBP, self-repairing bond percolation). Она определяемая итерированием следующего процесса (начальная конфигурация – все связи решетки открыты):

В системе случайно выбирается открытая связь. Если ее удаление не приводит к нарушению связности на множестве всех *узлов* системы, то связь удаляется, в противном случае остается на месте.

Достижимыми в такой конфигурации являются концентрации  $p_{\text{tree}} \leq p \leq 1$ ,

где  $p_{\text{tree}} = 2/z$  – концентрация связей, при которой система представляет собой дерево и дальнейшее удаление связей невозможно (здесь  $z$  – координационное число решетки). Численное моделирование такой системы на двумерной квадратной решетке показывает, что при  $p = p_c \approx 0.549 > p_{\text{tree}}$  в системе происходит фазовый переход, при котором плотность остова  $P_B$  обращается в нуль; поведение  $P_B$  и корреляционной длины (определенной как среднеквадратичный радиус *конечного* блока) вблизи  $p_c$  определяет критические индексы  $\beta_B$  и  $\nu$ :

$$P_B \sim (p - p_c)^{\beta_B}, \quad \xi \sim (p - p_c)^{-\nu}. \quad (1)$$

Найдено точное отображение модели SRBP на модель стандартной перколяции, позволяющее выразить характеристики топологического перехода через характеристики обычного:

$$p_c = p_c^{\text{perc}} + n_c^{\text{perc}}, \quad \beta_B = \beta_B^{\text{perc}}, \quad \nu = \nu^{\text{perc}}, \quad (2)$$

где величины с индексом *perc* определяются формулами вида (1) в задаче обычной перколяции (при этом  $\xi$  – обычная корр. длина), а  $n_c^{\text{perc}}$  – плотность числа кластеров точно в критической точке. В частности, для квадратной решетки в  $d = 2$  измерениях

$$p_c = \frac{3\sqrt{3} - 3}{4} = 0.54904\dots, \quad \beta_B = 0.4757(10), \quad \nu = 4/3. \quad (3)$$

Высокоплотная ( $p > p_c$ ) фаза по качественным характеристикам не отличается от надкритического бесконечного кластера обычной перколяции. В тоже время низкоплотная ( $p_{\text{tree}} < p < p_c$ ) фаза является *квазидеревом*: функция распределения размеров блоков имеет в ней экспоненциальную асимптотику, так что величина типичного блока при фиксированном  $p < p_c$  ограничена сверху зависящей от  $p$  константой; сами блоки объединены в древесную (ациклическую) структуру, на больших масштабах обладающую свойствами терминального состояния  $p = p_{\text{tree}}$  (см. рис. 1). Квазидерево является плотным фракталом: его массовая размерность равна  $d$  (в него входят все узлы системы), но его евклидов показатель  $d_{\text{min}} > 1$ . (Корректное

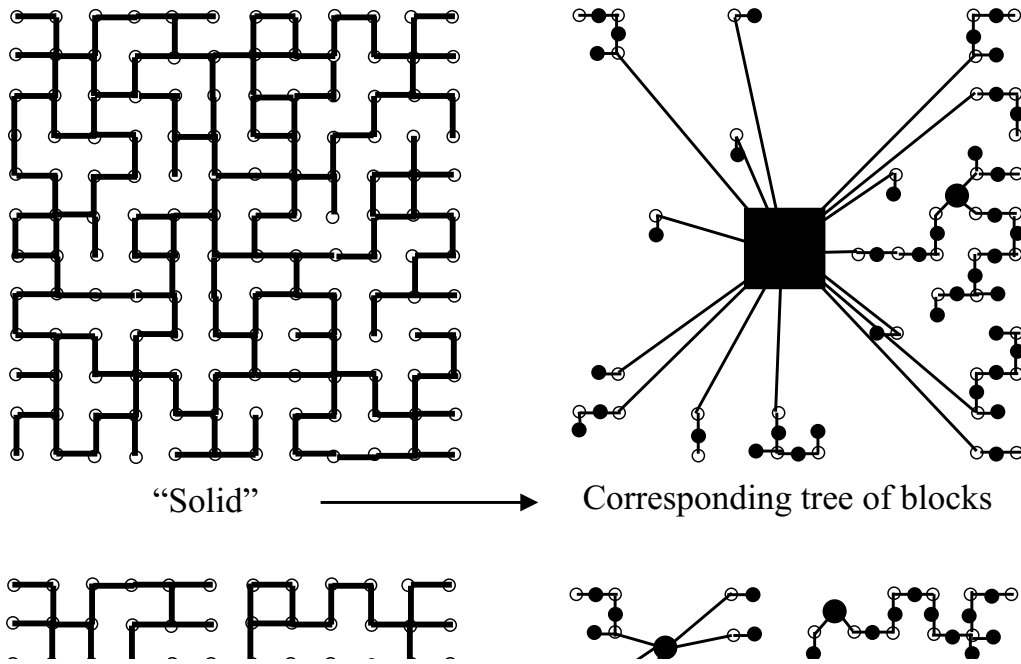


Рис. 1: Структура дерева блоков в плотной и квазидревесной фазах модели SRBP на квадратной решетке.

определение  $d_{\min}$  для древесных структур таково: среднее евклидово расстояние  $\langle R \rangle$  от случайной выделенной точки до точек, находящихся от нее на минимальном расстоянии  $\ell$  шагов по ребрам кластера, имеет асимптотику  $\langle R \rangle \sim \ell^{1/d_{\min}}$  при  $\ell \rightarrow \infty$ .) Численно и аналитически показано, что показатель  $d_{\min}$  остается постоянным во всем диапазоне  $p_{\text{tree}} \leq p < p_c$  – его значение совпадает с соответствующим показателем для ансамбля минимальных остовных деревьев (minimum spanning trees, MST) на рассматриваемой ре-

шетке. Таким образом, для двумерной квадратной решетки

$$d_{\min} = \begin{cases} 1 & \text{при } p_c < p \leq 1, \\ d_{\min}^{\text{perc}} = 1.13(1) & \text{при } p = p_c, \\ d_{\min}^{\text{MST}} = 1.22(1) & \text{при } p_{\text{tree}} \leq p < p_c. \end{cases}$$

По аналогии с моделью SRBP можно определить модель самовосстанавливающихся узлов (SRSP, self-repairing site percolation). Она задается следующим эволюционным процессом (начальное состояние – все узлы решетки заняты):

В системе случайно выбирается занятый узел. Если его удаление не приводит к нарушению связности на множестве *занятых* узлов системы, то выбранный узел удаляется, в противном случае остается на месте.

Достижимыми в такой задаче являются все концентрации диапазона  $0 \leq x \leq 1$ . Прямое численное моделирование показывает, что при  $x = x_c = 0.608(1)$  в модели SRSP происходит фазовый переход, полностью аналогичный переходу в модели SRBP, причем критические индексы  $\beta_B$  и  $\nu$  численно очень близки к индексам (3).

Для выяснения вопроса о степени универсальности перехода модели SRBP и SRSP были включены в однопараметрическое семейство смешанных перколяционных задач (в которых как узлы, так и связи могут быть открытыми или закрытыми). В модели со значением параметра  $Q$  ( $0 \leq Q \leq 1$ ) эволюционный процесс задается следующим образом:

1. С вероятностью  $Q$  переходим к шагу 2, с вероятностью  $1 - Q$  к шагу 3.
2. В системе выбирается случайный открытый узел. Если его удаление не приводит к нарушению связности на множестве открытых узлов системы, то узел удаляется вместе со всеми инцидентными ему связями. Переходим к шагу 1.
3. В системе выбирается случайная открытая связь. Если ее удаление не

приводит к нарушению связности на множестве открытых узлов системы, то связь удаляется. Переходим к шагу 1.

При  $Q = 0$  имеем модель SRBP, при  $Q = 1$  – модель SRSP. Для нескольких значений  $Q$  были проведены обширные численные симуляции с целью точного определения индексов  $\beta_B$  и  $\nu$  по описанной ниже схеме. На фрагменте квадратной решетки размера  $L \times (L + 1)$  задавались открытые граничные условия на одной паре противоположных ребер и замкнутые (внешние контакты) на другой паре (bus-bar geometry). Удаление узлов и связей продолжалось до потери связности между парой внешних контактов. В достигнутой конфигурации вычислялась масса остова  $M$  как сумма масс двусвязных компонент, содержащих внешние контакты, и фиксировалась концентрация связей  $p$ . После сбора достаточной статистики фрактальная размерность критического остова  $d_B$  определялась из скейлингового соотношения  $\langle M \rangle \sim L^{d_B}$ , а индекс  $\nu$  – из соотношения  $\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle^{1/2} \sim L^{-1/\nu}$ . Индекс  $\beta_B$  после этого можно найти из стандартного соотношения

$$d_B = d - \beta_B/\nu. \quad (4)$$

Использовался алгоритм со структурой union-find для связности плакетов (точек дуальной решетки), позволяющий проводить эволюционный шаг гибридной модели за время  $O(1)$  в среднем (в пренебрежении откликом обратной функции Аккермана от единицы). Таким образом, время генерации критической конфигурации составляло  $O(L^2)$  и не сильно превосходило время генерации критической конфигурации в задаче обычной перколяции. Наиболее обширная статистика была собрана для случаев  $Q = 1$ ,  $Q = 0.5$  и контрольного значения  $Q = 0$  (порядка  $10^6 - 10^7$  реализаций для  $L=64, 128, 192, 256, 384$ ).

В независимом численном эксперименте были найдены евклидовы индексы  $d_{\min}$  и  $d'_{\min}$  для модели SRSP в квазидревесной фазе и в критической точке соответственно. Как и ранее, индекс  $d_{\min}$  в этом случае имеет постоянное значение во всем диапазоне концентраций низкоплотной фазы.

Результаты вычислений собраны с первых двух строк следующей таблицы.

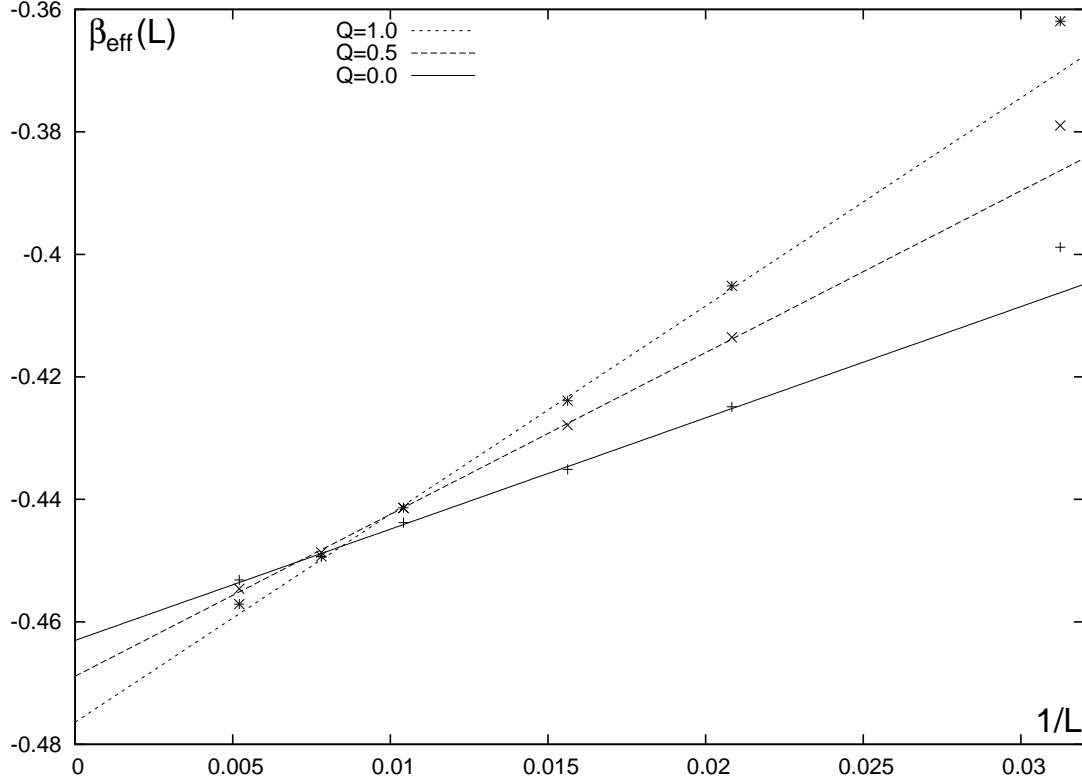


Рис. 2: Эффективное значение индекса  $\beta_B$  как функция  $1/L$  в гибридных SRBP-SRSP моделях с  $Q=0, 0.5, 1$ .

$Q$	$p_c$	$\beta_B$	$\nu$	$d_{\min}$	$d'_{\min}$
1	0.373116(1)	0.463(2)	1.337(8)	1.226(12)	1.136(10)
0.5	0.420476(1)	0.468(2)	1.333(5)	—	—
0	$(3/4)(\sqrt{3} - 1)$	0.4757(10)	4/3	1.22(1)	1.13(1)

Третья строка, относящаяся к модели SRBP, содержит данные по модели стандартной перколяции (результат для  $\beta_B(SRBP)$  принадлежит Грассбергеру). На рис. 2 приведена зависимость эффективного значения индекса  $\beta_B^{\text{eff}}(L)$ , пересчитанного по формуле (4) из эффективной фрактальной размерности:

$$d_B^{\text{eff}}(L) = \frac{\log[\langle M \rangle(aL)] - \log[\langle M \rangle(L)]}{\log a}$$

(скейлинговый параметр  $a = 3/2$ ).

Можно сделать вывод о том, что топологический фазовый переход не является полностью универсальным: индекс  $\beta_B$  различен для задач SRSP и SRBP и является непрерывной функцией параметра гибридизации  $Q$ . Хотя амплитуда его изменений невелика, удачный характер поправок, связанных

с конечностью размера системы  $L$ , позволяет установить неуниверсальность индекса  $\beta_B$  без вычисления частных его значений по отдельности (не проводя экстраполяции к  $L = \infty$  на рис. 2), что повышает надежность результата. В то же время различий в значениях критических индексов  $\nu$ ,  $d_{\min}$ ,  $d'_{\min}$  в пределах достигнутой точности установить не удалось.

Таким образом, в рассмотренных монотонных моделях топологический переход неизменно происходит, но его критические характеристики не являются универсальными.

Во **второй главе** исследуются немонотонные однокластерные задачи, в которых эволюционный процесс допускает усиление остова (backbone reinforcement) как результат алгоритмического шага. Центральное место отведено модели “burning and sticking” (BS), описывающей процесс образования гранулированного металла. Начальным состоянием является заполненная решетка узлов, а эволюционный процесс таков:

1. Из конфигурации удаляется случайный узел.
2. Если в системе нет конечных кластеров, то переходим к шагу 1.
3. Случайно выбираем конечный кластер и решеточное направление; баллистически перемещаем выбранный кластер в этом направлении до тех пор, пока он не войдет в контакт с другим кластером системы. Переходим к шагу 2.

Результат численного моделирования двумерной системы на квадратной решетке приведен на рис. 3. Топологический фазовый переход в системе отсутствует, и макроскопические проводимость и упругость отличны от нуля при сколь угодно малых концентрациях. При  $x \ll 1$  плотность остова  $P_B \sim x_B^\beta$  с  $\beta_B = 2.85(15)$ . Не изменится качественная картина и в случае не баллистического, а диффузного дрейфа на третьем шаге эволюционного процесса.

Геометрические характеристики остова при низких плотностях в модели BS кардинально отличаются от характеристик “слабого” (близкого к критическому) остова в задаче обычной перколяции. Если в последнем доминиру-

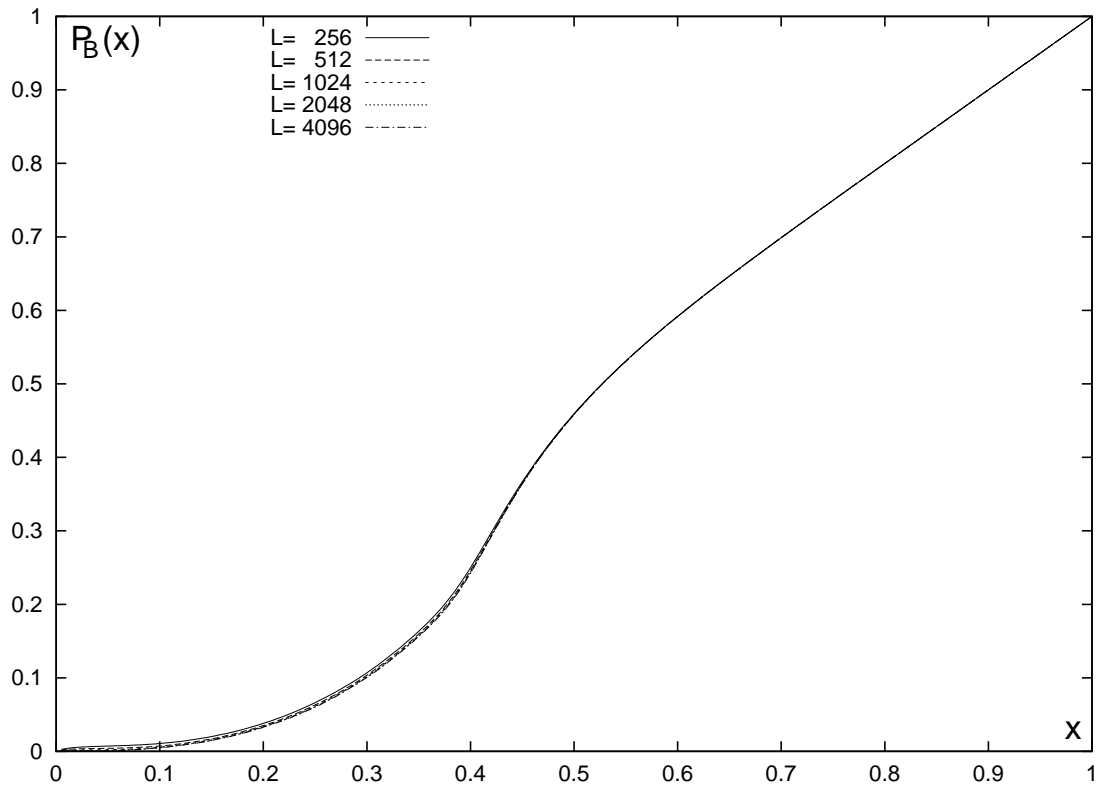


Рис. 3: Плотность остова в модели BS как функция концентрации узлов. Кривые, соответствующие размерам системы  $L \leq 512$ , практически совпадают.

ют плотные массивные двусвязные образования (blobs), то масса BS-остова сосредоточена в одномерных цепочках узлов (links в обычной терминологии), образующих только очень большие (размера порядка максимальной ячейки в остове) и очень малые (размера порядка единицы) циклы. Происходит также разделение масштабов: коррелятор плотность-плотность и характерный размер ячейки остова задают две существенно различных длины в системе.

Для выяснения вопроса о том, какой из типов поведения является устойчивым, модели SRSP и BS были включены в однопараметрическое семейство со следующим законом эволюции ( $0 \leq Q \leq 1$  – произвольный параметр):

1. С вероятностью  $Q$  переходим к шагу 2, с вероятностью  $1 - Q$  переходим к шагу 3.
2. Удаляем случайно выбранный узел системы и баллистически смещаем кластеры до восстановления связности (шаг BS). Переходим к шагу 1.

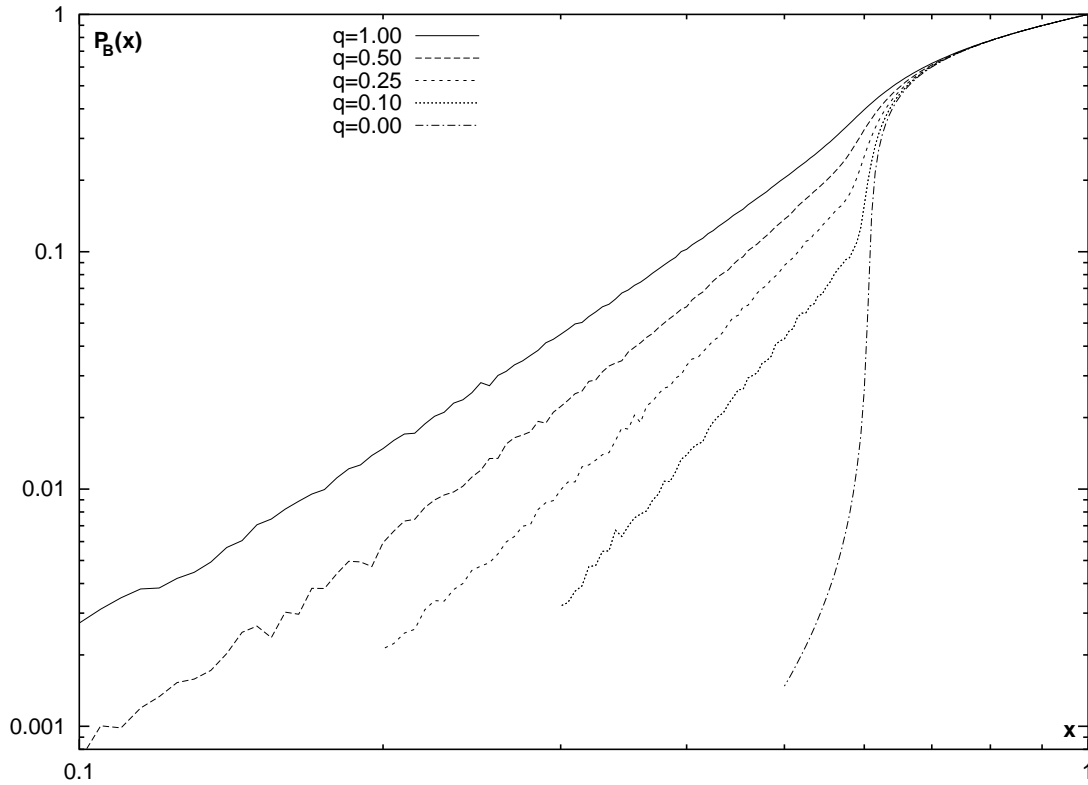


Рис. 4: Плотность остова для BS-SRSP гибридов как функция концентрации узлов (двойной логарифмический масштаб).

3. Случайным образом выбираем узел из числа тех, удаление которых не нарушает связности остальной системы, и удаляем его (шаг SRSP). Переходим к шагу 1.

Результаты моделирования показывают, что топологический фазовый переход происходит только при  $Q = 0$  (чистая модель SRSP). Зависимость плотности остова от концентрации для различных значений  $Q$  приведена на рис. 4. Индекс  $\beta_B$  является непрерывной функцией параметра смешивания  $Q$ :

$Q$	1	0.5	0.25	0.1
$\beta_B$	2.85(15)	3.4(1)	4.2(1)	5.2(1)

Таким образом, тип поведения модели BS устойчив, но полностью не универсален. Топологический фазовый переход разрушается сколь угодно редкими процессами усиления остова (приклеивания конечного кластера к остову системы по двум или более точкам).

Для прояснения роли слабого усиления остова, а также для доказательства нечувствительности BS-модели к решеточным артефактам (соизмеримость расстояний повышает среднее число точек приклейки кластера по сравнению с “геометрической” величиной  $d$ ) удобно рассмотреть следующую систему.

В модели с самовосстановлением двух связей (SR2BP) исходной конфигурацией является решетка, все связи на которой открыты, а элементарный эволюционный шаг имеет вид

Из системы удаляется случайно выбранная связь. Если в результате удаления обращовался изолированный кластер, то случайным образом восстанавливаются *две* связи, соединяющие этот кластер с узлами остальной части системы.

Аналогично предыдущему определяется и однопараметрическое семейство SRBP-SR2BP гибридов: на каждом шаге с вероятностью  $Q$  используется SR2BP-алгоритм, а с вероятностью  $1 - Q$  – SRBP-алгоритм удаления узла. При  $d = 2$  восстановление двух связей играет роль приклеивания отделившегося кластера “in place” по числу точек общего положения  $d$ . Численное моделирование показывает, что топологический фазовый переход имеет место только при  $Q = 0$  (в чистой модели SRBP). Зависимость плотности остова от концентрации для различных значений  $Q$  приведена на рис. 5.

На основании всех изложенных выше результатов можно сформулировать следующие утверждения. При наличии в однокластерной модели сколь угодно слабого механизма восстановления остова топологический фазовый переход не происходит и система сохраняет конечные значения макроскопических параметров (проводимости и упругости) при сколь угодно низких концентрациях; критические индексы при этом не универсальны. В модели без механизмов усиления остова всегда происходит топологический фазовый переход, с точки зрения свойств остова близкий к “сдвинутому” обычному перколяционному переходу; критические характеристики в этом случае также не универсальны.

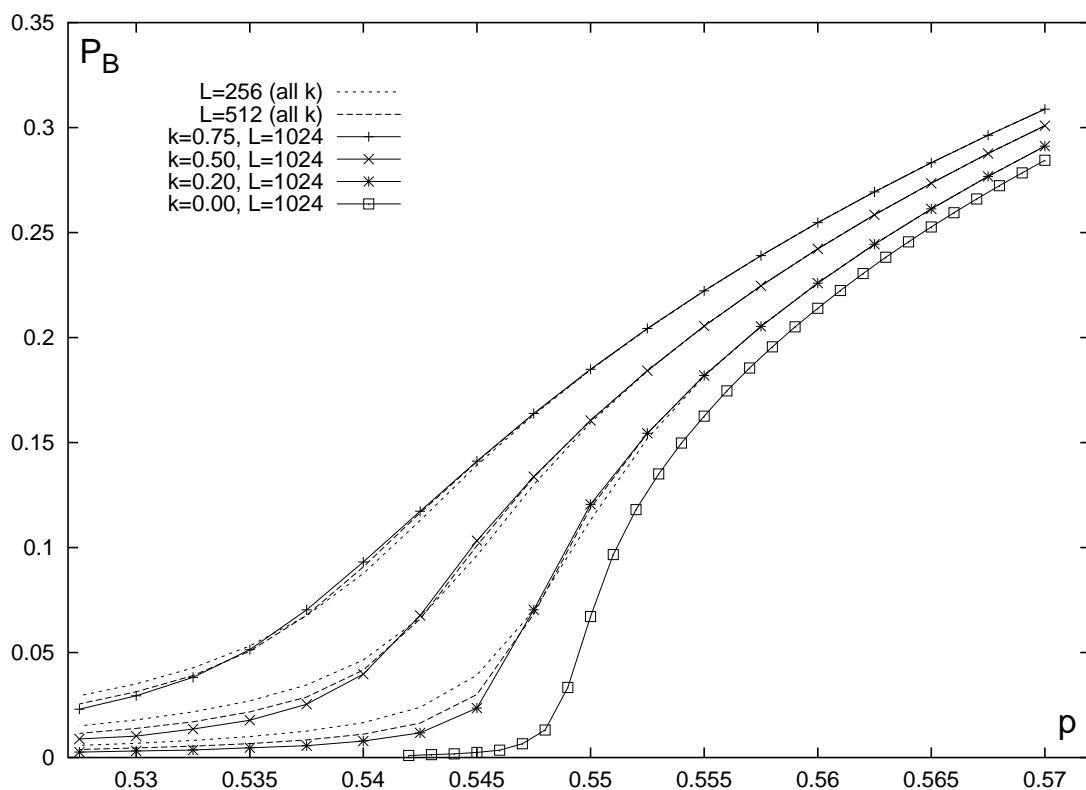


Рис. 5: Плотность остова для SRBP-SR2BP гибридов как функция концентрации узлов (семейства кривых соответствуют различным значениям параметра смешивания  $Q$ , внутри семейства кривые соответствуют различным размерам системы  $L$ ).

Качественно этот эффект можно интерпретировать так. Вблизи точки топологического фазового перехода размер лакун (в двумерном случае – связанных компонент на дуальной решетке) расходится, и случайно выбранная отсутствующая в системе связь замыкает цикл расходящейся в среднем длины. Восстановление такой связи создает в системе большой цикл, и редкость подобных событий всегда можно компенсировать, достаточно близко подойдя к точке перехода. Такое поведение не является, конечно, априори единственно возможным – справедливость этой картины есть содержательный результат.

В **третьей главе** рассмотрена задача о проводимости неупорядоченной смеси проводящих и изолирующих гранул несколько ниже порога перколяции по проводящим гранулам. Будем считать, что собственный кондактанс металлической гранулы очень велик, а безразмерный кондактанс контакта между двумя соседними металлическими гранулами равен  $G \gg 1$ . Если по-

ложить кондактанс  $g$  системы из одной изолирующей гранулы, граничащей с двумя металлическими, равным нулю, то проводимость ниже точки перколяции также обратится в нуль; содержательная задача возникает, если считать  $g$  малым, но конечным:  $g \ll 1$ . Выбор модели зависит от природы величины  $g$ .

Если гранулы достаточно велики или температура  $T$  достаточно высока, то кондактанс  $g$  имеет активационное происхождение,  $g \sim e^{-W/T}$  с некоторой характерной энергией активации  $W$ . При этом кондактанс цепочки из  $n$  изолирующих гранул равен  $g_n = g/n$ , и вся система адекватно описывается обычной перколяционной задачей о решетке из резисторов  $g$  и  $G$ . Согласно известным формулам, при этом

$$\sigma \sim \begin{cases} g(x_c - x)^{-s}, & \Delta \ll x_c - x \ll 1, \\ g^{\mu/(\mu+s)} G^{s/(\mu+s)}, & |x_c - x| \lesssim \Delta, \\ G(x - x_c)^\mu, & \Delta \ll x - x_c \ll 1, \end{cases} \quad (5)$$

где  $\Delta = (g/G)^{1/(\mu+s)}$  – ширина кроссовера, а  $s$  и  $\mu$  – универсальные критические индексы для систем “сверхпроводник-проводник” и “проводник-изолятор” соответственно.

Иначе обстоит дело, если кондактанс  $g$  имеет туннельное происхождение. В этом случае  $g_n \sim g^n$ , и проводимость мостов из более чем одной изолирующей гранулы сильно подавлена. Естественно ожидать (и численный счет подтверждает это предположение), что при этом в области  $\Delta \ll x_c - x \ll 1$  по-прежнему  $\sigma(x, T) = \sigma_0(x, T) \sim g(x_c - x)^{-s}$ , лишь с меньшей константой пропорциональности. Однако температурная зависимость проводимости теперь обусловлена иным механизмом – кулоновской блокадой малых металлических кластеров.

Если энергия зарядки отдельной металлической гранулы равна  $E_1 \sim e^2/a$ , где  $a$  – размер гранулы, то энергия зарядки кластера из  $n$  гранул есть  $E_n \sim E_1 n^{-(\nu+s)/\nu d_f}$ . При температуре  $T$  кластеры размеров  $n \lesssim \tilde{n} = (E_1/T)^{\nu d_f/(\nu+s)}$  оказываются эффективно заблокированными и должны быть исключены из проводящей подсистемы.

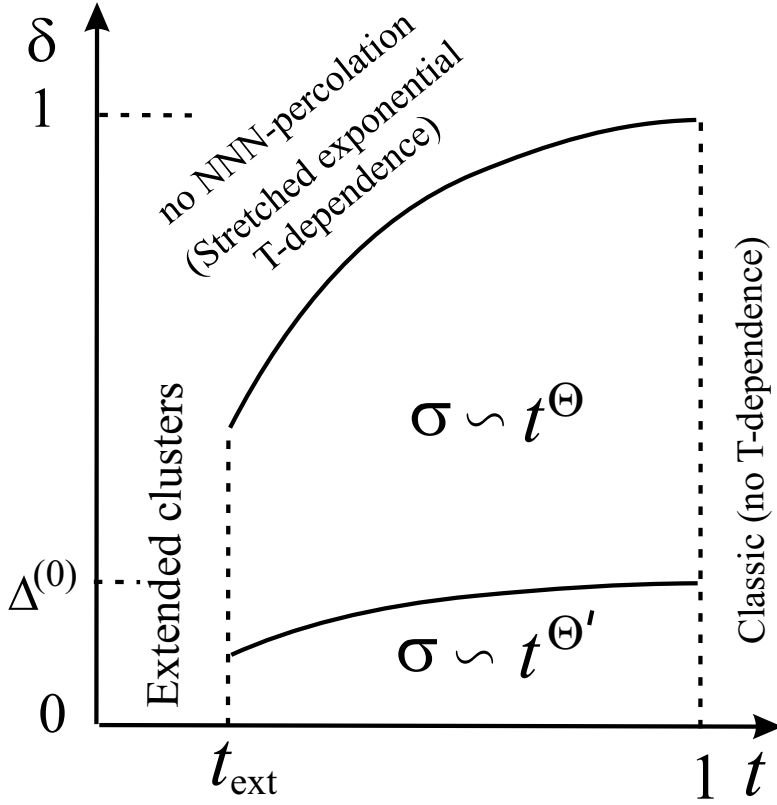


Рис. 6: Участок фазовой диаграммы системы, температурная зависимость на котором определяется кулоновскими эффектами. По осям отложены  $\delta = x_c - x$  и  $t = T/E_1$ , область неэквивипотенциальных проводящих кластеров отделена линией  $t_{\text{ext}} = G^{(\nu+s)/[(2-d)\nu+\mu]} \ll 1$ , нижняя кроссоверная граница задается формулой  $\delta \sim t^{2/(\nu+s)}$ , верхняя –  $\delta \sim \Delta t^{\Theta/(\mu+s)}$ .

Помимо энергии зарядки, металлический кластер размера  $n$  характеризуется также собственным кондактансом  $G_n \sim Gn^{-(2-d+\mu/\nu)/d_f}$ . При  $n \ll n_{\text{ext}} = G^{d_f/(2-d+\mu/n\nu)}$  имеем  $G_n \gg 1$ : такие кластеры могут считаться точечными (эквивипотенциальными) объектами. В работе рассмотрен случай  $\tilde{n} \ll n_{\text{ext}}$ , что эквивалентно условию

$$T/E_1 \gg G^{(\nu+s)/[(2-d)\nu+\mu]}.$$

В такой ситуации эквивипотенциальные кластеры из металлических гранул оказываются в условиях задачи перколяции по вторым ближайшим соседям (next-nearest-neighbor, NNN), причем кластеры размеров  $n < \tilde{n}$  исключаются из системы. Проводимость существенным образом зависит от размера исключенных кластеров:  $\sigma \sim n^{-\theta}$ , где  $\theta$  – некоторый новый критический индекс. Показано, что он может быть выражен через известные показатели

как

$$\theta = \frac{(d-2)\nu + s - 1}{\nu d_f}.$$

Переходя от геометрических характеристик к физическим, получаем из второй и третьей строк (5) две области нетривиальной температурной зависимости  $\sigma \sim T^\theta$ ,  $\sigma \sim T^{\Theta'}$  на фазовой диаграмме системы (рис. 6), где

$$\Theta = \frac{d_f \nu \theta}{\nu + s} \quad \Theta' = \Theta \frac{\mu}{\mu + s}.$$

Конкретные значения индексов в двух и трех измерениях таковы:

$d$	$\theta$	$\Theta$	$\Theta'$
2	0.123	0.14	0.07
3	0.28	0.38	0.28

В **заключении** сформулированы основные результаты работы.

**Основное содержание диссертации** изложено в следующих статьях:

1. A. S. Ioselevich and D. S. Lyubshin, “Phase transition in a self-repairing random network”, Письма в ЖЭТФ, т. **79**, стр. 286–290 (2004).
2. A. S. Ioselevich and D. S. Lyubshin, “Universality and non-universality in behavior of self-repairing random networks”, Письма в ЖЭТФ, т. **89**, стр. 486–490 (2009).
3. A. S. Ioselevich and D. S. Lyubshin, “Burning-and-sticking model for a porous material: suppression of the topological phase transition due to the backbone reinforcement effect”, Письма в ЖЭТФ, т. **89**, стр. 612–617 (2009).
4. A. S. Ioselevich and D. S. Lyubshin, “Percolation with excluded small clusters and Coulomb blockade in a granular system”, Письма в ЖЭТФ, т. **90**, стр. 746–752 (2009).