Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

S. R. Gallyamov, S. A. Mel'chukov, On the critical indices in three-dimensional percolation in the problems of lattice points and solid spheres, *Vestn. Udmurtsk. Univ. Mat. Mekh. Komp. Nauki*, 2010, Issue 2, 67–80

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

<http://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 54.237.206.68

April 26, 2023, 10:48:51

УДК 531.19, 519.24

© С. Р. Галлямов, С. А. Мельчуков

О КРИТИЧЕСКИХ ИНДЕКСАХ В ТРЁХМЕРНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ
В ЗАДАЧАХ УЗЛОВ И ТВЁРДЫХ СФЕР

Рассмотрены трёхмерные задачи узлов для простой кубической решётки и твёрдых сфер, находящихся в хаотическом движении. Установлены дополнительные (к двухпоказательному скейлингу) соотношения между индексами: $2 - \alpha - \gamma = \nu$ (или $\nu d - \gamma = \nu$) и $\beta = -2\alpha$. Определены численные значения трёхмерных критических индексов: $\alpha = -2/11$, $\eta = 0$, $\beta = 4/11$, $\nu = 8/11$, $\gamma = 16/11$ и $\delta = 5$.

Ключевые слова: перколяция, критические индексы, твёрдые сферы.

Введение

Известно, что перколяционный переход, происходящий при критической концентрации x_c интересующей нас фазы, является геометрической моделью температурных фазовых переходов [1, 2], где переход от одной фазы к другой (изменение симметрии) происходит при критической температуре T_c . Например, ненулевая (при низких температурах) спонтанная намагниченность $M(T)$ при повышении температуры исчезает при критической температуре как $M(T) \propto |T - T_c|^\beta$, где β — критический индекс. С другой стороны, если магнитный момент на атом есть μ и их концентрация равна x , то $M(x) \propto (\mu/v_0)P(x)$, где v_0 — объём приходящийся на атом, а $P(x)$ — вероятность того, что случайно выбранный атом принадлежит бесконечному кластеру. Магнитные моменты атомов в бесконечном кластере ориентированы в одном направлении благодаря магнитному взаимодействию между соседними атомами. Теплоёмкость C_V вблизи T_c также выражается через критический индекс: $C_V \propto |T - T_c|^{-\alpha}$, где α — критический индекс теплоёмкости [3, 4, 5].

В перколяции $P(x)$ — это вероятность того, что случайно выбранный узел (связь) решётки принадлежит бесконечному кластеру [1, 2, 5, 6] и уменьшается до нуля при критической концентрации x_c как $P(x) \propto |x - x_c|^\beta$, то есть концентрация интересующей нас фазы x аналогична температуре T в температурном фазовом переходе, а критический индекс β универсален для температурного и геометрического фазовых переходов. Такую аналогию можно провести для магнитной восприимчивости вещества $\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma}$ и среднего размера конечных кластеров (mean cluster size) $S(x) \propto |x - x_c|^{-\gamma}$, радиуса корреляции $r \propto |T - T_c|^{-\nu}$ (тех же магнитных атомов) и линейного размера перколяционной решётки $L \propto |x - x_c|^{-\nu}$ и т. д. Гипотеза универсальности критических индексов α , β , γ , ν и других не является строго доказанной, но принято считать [1, 2, 5], что критические индексы для всех задач (в перколяции и температурных фазовых переходах) одинаковы для одной и той же размерности пространства.

Критические индексы и связь между ними введены в [2]–[7] и образуют так называемый *двухпоказательный скейлинг* [3, 5] для размерности пространства d :

$$\alpha = 2 - \nu d; \quad \nu d = 2\beta + \gamma; \quad \eta = 2 - \gamma/\nu; \quad \delta = 1 + \gamma/\beta, \quad (0.1)$$

где индексы δ и η вводятся для температурных фазовых переходов как [7]

$$P(\tau = 0, h) \propto h^{1/\delta} \quad \text{и} \quad G(T_c, r) \propto r^{-d+2-\eta} \quad (0.2)$$

здесь $\tau = T - T_c$, h — безразмерное поле, $G(T_c, r)$ — корреляционная функция.

Из четырех соотношений (0.1) следует, что для получения значений всех показателей достаточно знать два независимых индекса (например η и ν , но не η и δ) или один индекс

и связь между ними (или две связи). В данной работе мы будем называть условно *скейлингом первого порядка* (можно сказать «однопоказательный» скейлинг), если к (0.1) будет добавлена ещё одна связь между индексами, тогда для получения всех показателей достаточно знать лишь один индекс.

Если к соотношениям (0.1) будут получены ещё две связи, то система становится замкнутой и показатели легко вычисляются. Этот случай мы будем называть условно *скейлингом нулевого порядка* (или ещё короче *нуль-скейлингом*).

Из многочисленных работ в литературе, посвящённых нахождению численных значений критических индексов температурных фазовых переходов, отметим метод ренорм-групп (в реальном пространстве и в обратном пространстве или ϵ -разложение), получивший развитие от гипотезы подобия Каданова и Вилсона ([8], [9] а также [3] и [4]). Ренормализация даёт хорошее согласие с экспериментом для больших индексов (например γ и δ), но плохо согласуется с малыми индексами (например α , ν и β). Оказалось, что метод ренорм-группы в перколяции обладает серьезным недостатком — преобразование ренормализации не сохраняет связность между узлами: два узла, которые принадлежали до преобразования одному кластеру, могут принадлежать после преобразования к различным кластерам. Другими словами различные схемы ренормализации могут приводить к различным значениям критических индексов [2].

Нашей целью в данной работе было установление *двух* дополнительных соотношений к двухпоказательному скейлингу (1). В §1 в рамках ранее полученных нами ([10], [11]) перколяционных свойств (порог протекания, вероятность протекания и др.) двухфазной простой кубической решётки получено *первое* соотношение между индексами, которое позволило определить индексы η и δ . В §2 рассмотрена перколяционная задача твёрдых проводящих сфер, находящихся в хаотическом движении (равновесная перколяционная система твёрдых сфер). Решение этой задачи привело к асимптотике поведения энергии и теплоёмкости перколяционной равновесной системы твёрдых сфер и позволило установить второе соотношение и численные значения остальных индексов, входящих в двухпоказательный скейлинг (0.1). После выяснения в §2 того, что задача твёрдых сфер не поддаётся компьютерному моделированию, подтверждено возникновение соединяющего кластера при хаотическом движении твёрдых проводящих сфер в лабораторном эксперименте.

§ 1. Скейлинг первого порядка («однопоказательный» скейлинг)

Вероятность $P(x, L)$ того, что случайно выбранный узел принадлежит бесконечному кластеру, и вероятность $Q(x, L)$ того, что случайно выбранный узел принадлежит конечному кластеру, в сумме дают вероятность x обнаружения узла в проводящем состоянии [10]:

$$P(x, L) + Q(x, L) = x. \quad (1.1)$$

Для простой кубической решётки (далее ПК решётка) функцию $P(x, L)$ можно выразить через условную вероятность протекания $Y(x, L)$, которая в свою очередь выражается через размер решётки L [10],[11]:

$$P(x, L) = xY(x, L) = \frac{x}{1 + e^{-a_1(L)(x-x_{cL})}}, \quad (1.2)$$

здесь $a_1(L) = a_1(2)L/2$, а x_{cL} соответствует условию $Y(x_{cL}, L) = 1/2$ или $P(x_{cL}, L) = x_{cL}/2$ и выражается через размер решётки L и порог протекания x_c в трёхмерном случае [12]:

$$x_{cL} = x_c + B/L, \quad (1.3)$$

где B — константа, а значения $a_1(2)$ для ПК решётки размера $L = 2$, x_c и B даны в [11].

С другой стороны, как сказано выше, вероятность протекания для больших решёток ($L \rightarrow \infty$) вблизи критической точки x_c есть показательная зависимость с критическим показателем β :

$$P(x, L \rightarrow \infty) \propto |x - x_c|^\beta. \quad (1.4)$$

Продолжая рассмотрение ПК решётки, представим $Q(x, L \rightarrow \infty)$ также в виде показательной функции вблизи перехода.

Из (1.1) и (1.2) вероятность $Q(x_{cL}, L) = x_{cL}/2$ или с учётом (1.3):

$$Q(x_{cL}, L) = (x_c + B/L)/2. \quad (1.5)$$

Мы получили ожидаемый результат — вероятность обнаружения узла, принадлежащего *конечному кластеру*, с увеличением L вблизи критической точки убывает пропорционально обратной величине L :

$$Q(x, L) \propto 1/L, \quad (1.6)$$

так как конечные кластеры сливаются с соединяющим (бесконечным) кластером.

Рис. 1. Вероятность $Q(x, L)$ меняется нелинейно согласно (1.6) вблизи x_c . Точке пересечения функций $Q(x, L)$ соответствует порог протекания простой кубической решётки $x_c = 0,3116865$.

а) вблизи $x_c = 0,3116865$ вероятность $Q(x, L)$ меняется по (1.6) для $x = 0,315$ при линейном изменении L на $\Delta L = 50$. б) вблизи $x_c = 0,3116865$ вероятность $Q(x, L)$ меняется по (1.6) для $x = 0,312$ при линейном изменении L на $\Delta L = 500$. В случае б) $x = 0,312 < 0,315$. То есть для выполнения (1.6) увеличение L требует уменьшения x или это означает стремление $x \rightarrow x_c$.

На рис. 1а видно что, при фиксированном x вблизи $x_c = 0,3116865$ (порог протекания ПК решётки) вероятность $Q(x, L)$ меняется нелинейно согласно (1.6), например рис. 1а, для $x = 0,315$ при линейном изменении L на $\Delta L = 50$. На рис. 1б картина повторяется в другом масштабе: например, для $x = 0,312$ при линейном изменении L на $\Delta L = 500$ вероятность $Q(x, L)$ уменьшается также по (1.6).

Также рис. 1а и рис. 1б показывают, что для выполнения (1.6) увеличение L требует стремления $x \rightarrow x_c$.

Действительно, если ввести коэффициент пропорциональности $k(L)$, то для выполнения (1.6) значение x должно быть

$$x = x_{cL} + (2/a_1(2)L)\ln[(xL/k) - 1] \approx x_c + B/L + (2/a_1(2)L)\ln(L).$$

Вероятность $Q(x, L) < Q(x_c, L) \approx 0.25$, поэтому $0 < k(L) < 0.25L$ и при $L \rightarrow \infty$, $x \rightarrow x_c$, так как $L \ll \ln(L)$ при умеренных x/k (то есть даже если x/k порядка L^n , где $n \leq a_1(2)/2 \approx 6$ для ПК решётки размера $L_2 = 2$, а $x_c < x < 1$).

Согласно [13] для решётки с линейным размером L справедливы соотношения

$$|x - x_c|^{-\nu} \propto L \text{ и } |x_{cL} - x_c|^{-\nu} \propto L \text{ или } L \propto |x - x_c|^{-\nu} \text{ и } L \propto |x_{cL} - x_c|^{-\nu}. \quad (1.7)$$

Тогда (1.6) можно выразить через критический индекс ν как

$$Q(x, L) \propto |x - x_c|^\nu. \quad (1.8)$$

Найдём связь между тремя функциями: $Q(x, L)$, средним размером конечных кластеров $S(x, L)$ и числом конечных кластеров $\sum n_s(x, L)$.

Пусть $\sum n_s(x, L)$ — число кластеров размера s на узел решётки или функция распределения кластеров, тогда сумма по всем размерам s даёт число всех узлов, принадлежащих конечным кластерам на один узел или вероятность $Q(x, L)$ того, что случайно выбранный узел принадлежит конечному кластеру:

$$Q(x, L) = \sum_s s n_s(x, L). \quad (1.9)$$

Второй момент M_2 функции $n_s(x, L)$ представляет средний размер кластера $S(x, L)$ (среднее число узлов в конечном кластере) [6, 7], приходящийся на один узел решётки и выражается вблизи порога протекания x_c через критический индекс γ :

$$M_2 = S(x, L) = \frac{\sum s^2 n_s(x, L)}{\sum s n_s(x, L)} = \frac{\sum s n_s(x)}{\sum n_s(x)} \propto |x - x_c|^{-\gamma}, \quad (1.10)$$

а нулевой момент M_0 функции $n_s(x, L)$ есть среднее число кластеров на узел и выражается через критический индекс ν (или через α и γ) следующим образом. Число всех кластеров в объёме увеличивается с увеличением объёма, поэтому $\sum n_s(x, L) \propto V = L^d$ и с учётом (1.7)

$$M_0 = \sum n_s(x, L) \propto |x - x_c|^{-\nu d}, \quad (1.11)$$

или, имея в виду $\alpha = 2 - \nu d$ из (0.1):

$$\sum n_s(x, L) \propto |x - x_c|^{\alpha-2}. \quad (1.12)$$

Из (1.10) можно увидеть, что $S(x, L)$ и $\sum n_s(x, L)$ связаны с $Q(x, L)$ как:

$$S(x, L) = \frac{Q(x)}{\sum n_s(x)}, \quad (1.13)$$

то есть $Q(x, L)$ вблизи критической точки теперь можно выразить через ν и γ (или через α и γ):

$$Q(x, L) \propto |x - x_c|^{\nu d - \gamma} \quad \text{или} \quad Q(x, L) \propto |x - x_c|^{2 - \alpha - \gamma}. \quad (1.14)$$

Сравнивая с (1.8) получаем пятое соотношение к (0.1):

$$\nu d - \gamma = \nu \quad \text{или} \quad 2 - \alpha - \nu = \gamma. \quad (1.15)$$

Выше мы использовали выражения (1.2), (1.3) и др. для ПК решётки, то есть в трёхмерном случае в задаче узлов, тогда для размерности пространства $d = 3$ из (0.1) и (1.15) получаем (нижние индексы будут говорить о размерности пространства $d = 3$)

$$\nu_3 = 2\beta_3, \quad (1.16)$$

$$\alpha_3 = 2 - 6\beta_3, \quad (1.17)$$

$$\gamma_3 = 4\beta_3, \quad (1.18)$$

$$\delta_3 = 5, \quad (1.19)$$

$$\eta_3 = 0. \quad (1.20)$$

Эти соотношения для критических индексов получены из *двухпоказательного скейлинга* на основе связи $Q(x, L)$ с вероятностью протекания $P(x, L)$ в приближении линейной связи (1.3) и теперь требуется знание только одного индекса — β_3 .

Таким образом (0.1) и (1.15) представляют, как отмечено во введении, *скейлинг первого порядка*, который позволил определить численные значения показателей двух индексов δ_3 и η_3 . Как сказано выше знание δ и η ещё не позволяет определить входящие в (0.1) другие индексы. Для получения численных значений остальных показателей перейдём к рассмотрению *скейлинга нулевого порядка* (или *нуль-скейлинга*).

§ 2. Скейлинг нулевого порядка (нуль-скейлинг)

2.1 Точки «вблизи» критической

Как видно из (1.16), (1.17) и (1.18) для нуль-скейлинга достаточно определить показатель β_3 . Для его оценки применим формулу (1.4), в которой значения x_c и $x = x_{cL}$ должны соответствовать трёхмерной решётке. Используя известные из [14] значения x_{cL} и x_c для алмазной решётки и решётки централизованного тетраэдра (элементарная решётка алмаза [12]), а также $P(x_{cL}, L) = x_{cL}/2$, получим:

$$\beta_3 = \frac{\ln(x_{cL1}/x_{cL2})}{\ln((x_{cL1} - x_c)/(x_{cL2} - x_c))} = 0.3674, \quad (2.1)$$

где $x_c = 0.430308$ — порог протекания алмазной решётки, а $x_{cL1} = 0,72(6)$ и $x_{cL2} = 0,640572$ соответствуют элементарным решёткам централизованного тетраэдра и алмаза.

Оценка β_3 по (2.1) находится в превосходном согласии для 3d модели Гейзенберга (см. [15], в таблице 2 для кластерных алгоритмов Монте-Карло представлено два значения: $\beta_3 = 0,3639(35)$ и $\beta_3 = 0,362(4)$; для алгоритма Метрополиса $\beta_3 = 0,364(7)$; и два значения теории поля $\beta_3 = 0,368(4)$ и $\beta_3 = 0,366$). Подстановка β_3 из (2.1) в (1.16), (1.17) и (1.18) даёт следующие значения критических индексов:

$$\alpha_3 = -0,2044; \quad \gamma_3 = 1,4696; \quad \nu_3 = 0,7348; \quad (2.2)$$

здесь указана характерная для таблиц в [15] точность значений индексов.

Большой индекс $\delta_3 = 5$ и малые индексы $\eta_3 = 0$ и α_3 по (2.2) также согласуются с результатами 3d модели Гейзенберга в [15]. Отрицательное значение α_3 (подтверждается и в экспериментах в [16] таблица 3) в модели Гейзенберга (см. [15] α_3 в таблице 3 от $\alpha_3 = -0,21$ до $\alpha_3 = -0,17$) как и в (2.2) *устраняет расходимость теплоёмкости в критической точке*.

Результаты по (2.1) и по (2.2), дающие прекрасное согласование с методами Монте-Карло модели Гейзенберга, все же являются оценочными, так как они получены на основе x_{cL} алмазной решётки минимальных размеров *вдали* от критической точки x_c [14], тогда как (1.4) требует больших ($L \rightarrow \infty$) размеров решётки.

Индекс β_3 связан с ν_3 и γ_3 соотношением $\nu d = 2\beta + \gamma$ из (0.1) и эту связь мы использовали для получения (1.16)–(1.20), поэтому будем искать связь β_3 с α_3 *вблизи* критической точки x_c . Для этого выясним смысл понятия «вблизи» критической точки (или точки близкой к критической точке).

Для ПК решётки согласно (1.3) $x_{cL} \rightarrow x_c$, при $L \rightarrow \infty$. Другими словами, для больших, но конечных решёток в степенной зависимости

$$W(x) \propto |x - x_c|^I \quad (2.3)$$

можно считать $x = x_{cL}$ также как в [13]. В (2.3) I — это критический индекс, а W — перколяционное свойство системы. В [11] ширина перколяционного перехода Δx характеризуется как

$$\Delta x = 4/a_1(L), \quad (2.4)$$

где $a_1(L) \propto L$, то есть при $L \rightarrow \infty$ ширина перехода мала, поэтому внутри интервала Δx любое $x \approx x_{cL}$ с большой точностью.

Однако этой точности может не хватить, если нас интересуют отклонения от критических величин порядка 10^{-4} [17]. Поэтому, не нарушая общности описания d -мерных перколяционных систем, необходимо ввести ещё одну точку x для конечных систем, которая была бы ближе к критической, чем x_{cL} . Для этого будем использовать нескейлинговую функцию условной вероятности того, что выбранный с вероятностью x узел принадлежит соединяющему кластеру

из [10, 11, 14] в малой области Δx , то есть для больших L :

$$Y(x, L) = \frac{1}{1 + e^{-S(x, L)}}, \quad S(x, L) = \sum_{i=1}^n a_i(x^i - x_{cL}^i), \quad (2.5)$$

где L — характерный размер перколяционной системы из N узлов: $L = (N)^{1/d}$.

Рис. 2. При $x = x_{YL}$ будет выполняться равенство $Y(x_{YL}, L) = x_{YL}$, для примера использована ПК решётка размера $L = 2$.

При $x \approx x_{cL}$, сумму $S(x, L)$ можно представить одним слагаемым:

$$S(x, L) = \sum a_n(x^n - x_{cL}^n) = (x - x_{cL})(a_1 + a_2 2x_{cL} + \dots + a_{N-1}(N-1)x_{cL}^{N-2}) = A_L(x - x_{cL}), \quad (2.6)$$

то есть для того, чтобы задать функцию $Y(x, L)$ пока достаточно двух параметров A_L и x_{cL}

$$Y(x, L) = \frac{1}{1 + e^{-A_L(x - x_{cL})}}, \quad (2.7)$$

очевидно, для ПК решётки

$$A_L = a_1(L). \quad (2.8)$$

Покажем, что A_L и x_{cL} связаны между собой. Для этого введём ещё один параметр x_{YL} , такой, что в (2.7) при $x = x_{YL}$ будет выполняться равенство $Y(x_{YL}, L) = x_{YL}$ (для наглядности см. рис. 2 для $L = 2$):

$$Y(x_{YL}, L) = \frac{1}{1 + e^{-A_L(x_{YL} - x_{cL})}} = x_{YL}, \quad (2.9)$$

откуда x_{YL} может быть найдено решением нелинейного уравнения, например, для ПК решётки ($A_L = a_1(L) = a_1(2)L/2$):

$$x_{YL} = x_{cL} - (2/a_1(2)L) \ln\left(\frac{1}{x_{YL}} - 1\right), \quad (2.10)$$

из которого при выполнении (1.3) следует, что точка x_{YL} для конечных ПК решёток ближе к критической точке x_c , чем x_{cL} . Решением уравнения (2.10) для $L = 2$ ПК решётки найдено $x_{Y2} = 0,345995$, а для $L \gg 2$ результаты решения представлены графически (рис. 3), откуда видно, что $x_{YL} < x_{cL}$ и при $L \rightarrow \infty$, $x_{YL} \rightarrow x_c$. В дальнейшем нам важна асимптотика функции условной вероятности $Y(x, L)$ по (2.9), а значит и вероятности протекания $P(x, L)$, при введённой точке x_{YL} :

$$Y(x_{YL} \rightarrow x_c, L \rightarrow \infty) = x_c \quad \text{и} \quad P(x_{YL} \rightarrow x_c, L \rightarrow \infty) = xY(x, L) = x_c^2. \quad (2.11)$$

Рис. 3. Результаты решения уравнения (2.10) для $L \gg 2$ представлены графически. Точки x_{cL} поставлены после компьютерного эксперимента, изложенного в [11], где определяется $A_L = a_1(L)$, по которым и выставлены экспериментальные точки x_{YL} после решения уравнения (2.9).

Теплоёмкость системы выражается через индекс α как $C_V \propto |T - T_c|^{-\alpha}$ или, исходя из аналогии концентрации интересующей нас фазы x и температуры T , а также гипотезы универсальности

$$C_V \propto |x - x_c|^{-\alpha}. \quad (2.12)$$

Выразим энергию $E(x)$ перколяционной системы через концентрацию x интересующей нас фазы с целью нахождения теплоёмкости, а затем и связи β_3 с α_3 . Нам достаточно найти асимптотическое поведение $E(x)$ и $C_V(x)$. Для этого рассмотрим задачу твёрдых сфер, находящихся в хаотическом движении.

2.2 Энергия и теплоёмкость равновесной перколяционной системы твёрдых сфер

Пусть в ящике (рис. 4а) находится N проводящих шариков (в дальнейшем — сфер) в поле тяжести Земли ($\mathbf{g}$ направленно вниз на рис. 4 не показано). Сферы одинаковой массы m и одинакового объёма V_1 могут менять свою конфигурацию во времени под действием, например, мощного ультразвука (рис. 4б). Таким образом, можно получать случайное распределение сфер во времени и в пространстве, то есть в объёме ящика V_0 с долей их объёма x :

$$x = NV_1/V_0 \quad \text{или} \quad x \propto N, \quad (2.13)$$

где $V_0 = SH$, S — сечение и H — высота ящика.

Рис. 4. N проводящих шариков (твёрдых сфер) в ящике высотой $H = h + \Delta h$. а) Покоящиеся без внешнего воздействия N проводящих шариков в поле тяжести Земли ($\mathbf{g}$ направленно вниз, не показано). б) возникновение соединяющего кластера (также как и в решёточных задачах) под действием мощного ультразвука. По касающимся друг друга сферам (их центры обозначены точками) между электродами А и В (при подаче на них напряжения) пойдёт электрический ток.

Из (рис. 4б) видно, что в системе, представленной частицами одного сорта можно обнаружить (также как и в решёточных задачах) соединяющий кластер с мёртвыми концами и конечные кластеры, поэтому мы в каждый момент времени имеем дело с известной задачей твёрдых сфер в перколяции. Возникновение соединяющего кластера по касающимся друг друга сферам между электродами А и В (рис. 4б) при их случайном расположении в пространстве аналогично появлению соединяющего кластера в решёточных задачах, например, в задаче узлов для ПК решётки. Отличие от решёточной задачи состоит в том, что координаты центров сфер являются случайными числами и обычно используемый метод Монте-Карло сталкивается с рядом трудностей. Главная из них состоит в очень частом перекрытии вероятностей, отвечающих случайным конфигурациям. Перекрытие означает, что центры двух сфер оказываются на расстоянии меньшем их диаметра. Чем больше концентрация x , тем менее вероятно, что конфигурация реализована случайным выбором координат. При x близкой к критической величине, уже нет возможности поместить ещё одну частицу в систему, поскольку любое размещение отрицается [19]. Видимо, по этой причине в литературе нет (нами не обнаружены) работ(ы) по компьютерным экспериментам (моделированию) задачи твёрдых сфер в перколяции.

В связи с этим возникает вопрос: можно ли обнаружить соединяющий кластер при x близкой к критической величине в задаче твёрдых сфер и если да, то какова ширина перехода для N сфер? Обратимся к натурному (лабораторному) эксперименту.

2.3 Лабораторный эксперимент

Для того чтобы подтвердить появление соединяющего кластера в задаче твёрдых сфер, нами был проведён следующий лабораторный эксперимент. Принципиальная схема установки приведена на рис. 5. Над поверхностью ультразвукового излучателя 1 (который излучает ультразвуковые колебания за счёт пьезокерамических преобразователей 2 при подаче на них соответствующего напряжения от генератора 6) устанавливается цилиндрический толстостенный корпус 3 из органического стекла. В полость корпуса помещаются стальные шарики 4 (твёрдые сферы) диаметром $d = 2.25$ мм. Сверху по внутренней резьбе (М30 × 1,5) корпуса фиксируется высота H электрода 5. Ультразвуковой излучатель приводит в движение шарики, одна из случайных конфигураций которых образует соединяющий кластер (отмечены точками центры сфер). Тогда возникает электрический ток в замкнутом контуре э. д. с. E (источник постоянного тока) — соединяющий кластер — электрод 5 — делитель напряжения R_1 , R_2 — э. д. с. E . Частота тока f снимается частотомером 1 с резистора R_2 , соединённого с электродом 5. При этом контролируется частота ультразвука f_0 при помощи делителя напряжения R_3 , R_4 . Напряжения, подаваемые на вход частотомеров, соответствовали требуемому входному напряжению частотомера ≈ 1 В. Ультразвуковой излучатель был настроен на частоту $f_0 \approx 20$ кГц.

Рис. 5. Ультразвуковой излучатель приводит в движение шарики, одна из случайных конфигураций которых образует соединяющий кластер (отмечены точками центры сфер). 1 — ультразвуковой излучатель; 2 — пьезокерамический преобразователь; 3 — цилиндрический толстостенный корпус из органического стекла; 4 — стальные шарики; 5 — электрод; 6 — генератор. Высота электрода (на рис. 5 не показана) определяется как $H = h + \Delta h$ (см. рис. 4).

В экспериментах для данного числа шариков при уменьшении первоначального зазора Δh (это означает увеличение x , так как $H = h + \Delta h$, а $x = NV_1/S\Delta h$, здесь площадь $S = \pi D^2/4$ вычислялась по внутреннему диаметру резьбы $D = 28,5$ мм) частота f менялась от нуля до $f_{0,5} = f_0/2$. При частоте $f_{0,5}$ измеряли высоту $H_{0,5}$, то есть $x_{0,5}$. После достижения частоты $f_{0,5}$ (через время < 1 секунды частота $f_{0,5}$ становилась практически стабильной с малыми флуктуациями, позволяющими определить среднее значение) ультразвук отключали, при этом ток в замкнутом контуре исчезал. Дальнейшее уменьшение зазора происходило до появления постоянного тока в контуре (на рис. 5 миллиамперметр не показан), при этом измеряли высоту H_1 , которой соответствовала доля x_1 . Наличие постоянного тока в контуре говорило о том, что условная вероятность протекания $Y(x_1, L) = 1$ при доле x_1 .

Число шариков N в экспериментах менялось от 500 до 700 (применялись и шарики диаметра 5,96 мм, их число менялось от 50 до 70, но в этом случае флуктуации частоты $f_{0,5}$, как и следовало ожидать, были больше). Все геометрические размеры измерялись при помощи микрометра с точностью 0,01 мм.

Наличие переменного тока с какой-либо частотой электрического тока f между излучателем 1 и электродом 5 убедительно демонстрирует появление соединяющего кластера с этой же частотой в задаче твёрдых сфер.

В экспериментах было обнаружено, что перколяционный переход происходит в узком интервале $\Delta x = 2(x_1 - x_{0,5}) < 0,01$, слабо зависящий от числа шариков N . Величина x_1 стремится

(при $L \rightarrow \infty$) к значению 0,640, которое практически совпадает (0,637 в [1] и 0,6403 в [19]) со значением коэффициента укладки для случайного распределения твёрдых шаров. Убедившись на практике в возможности появления соединяющего кластера в задаче твёрдых сфер, вернёмся к энергии и теплоёмкости.

Будем считать, что любая случайная конфигурация (за счёт ультразвука, причём диссипацией энергии ультразвука пренебрегаем) большого количества N сфер в заданном объёме V_0 соответствует равновесному состоянию двухфазной системы, для которой проводящую фазу образуют сферы, а непроводящая фаза соответствует пустому пространству вне сфер. Тогда x по (2.13) есть концентрация интересующей нас фазы.

Пренебрегая потенциальной энергией взаимодействия между сферами, мы рассматриваем идеальную систему невзаимодействующих сфер, хаотическому движению которых соответствует температура Θ . Если ультразвук выключен, то движение сфер прекращается и $\Theta = 0$. Это означает, что перколяционные эффекты (образование соединяющего кластера, конечных кластеров и т.п.) в системе из твёрдых сфер (в поле $\mathbf{g}$) в заданном объёме V_0 можно наблюдать только в динамике.

Пусть гамильтониан системы представлен её энергией $E(x)$:

$$E(x) = \sum_i (mgz_i + mv_i^2/2), \quad (2.14)$$

где mgz_i — потенциальная энергия центра i -ой сферы, нормированная на нуль относительно уровня $z = H/2$, а $v_i^2 = \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i$ — квадрат вектора скорости $\mathbf{v}_i$. Считая, что равновесному распределению N сфер в объёме ящика соответствует равномерное распределение, получим $\sum mgz_i = 0$, так как одинаковые по величине, но разные по знаку z_i будут встречаться одинаково часто. Поэтому энергия системы в (2.14) есть сумма кинетических энергий N невзаимодействующих сфер или сумма средних значений кинетической энергии ϵ , приходящейся на сферу:

$$E(x) = \sum \epsilon_i = N\epsilon. \quad (2.15)$$

В динамическом равновесии N твердых сфер одну из сфер можно считать находящейся в контакте с тепловым резервуаром, образованном остальными $N - 1$ сферами. Так как возможное значение энергии одной сферы $\epsilon_r = mv_r^2/2$, где v_r — возможное значение модуля скорости сферы, то вероятность P_r обнаружения сферы в состоянии r с энергией ϵ_r пропорциональна множителю Больцмана: $P_r \propto e^{-\beta\Theta\epsilon_r}$ и статсумма Z имеет хорошо знакомый вид:

$$Z = \sum_r e^{-\beta\Theta\epsilon_r} = \sum_r e^{-\beta\Theta mv_r^2/2}, \quad (2.16)$$

где параметр $\beta\Theta \propto 1/\Theta$, а суммирование идёт по всем возможным состояниям r , то есть по всем возможным значениям энергии (скорости) сферы. Считая, что возможных значений скорости, лежащей в малом интервале от v_r до $v_r + dv_r$, бесконечно суммирование в (2.16) можно заменить интегрированием, после которого получаем

$$Z \propto (\beta\Theta)^{-1/2} \quad (2.17)$$

и среднее значение энергии одной сферы:

$$\epsilon = \frac{-\partial \ln(Z)}{\partial \beta\Theta} \propto \Theta. \quad (2.18)$$

Из (2.16) $x \propto N$ или $N \propto x$, тогда из (2.15) энергия перколяционной системы твёрдых сфер будет

$$E(x) \propto \Theta x, \quad (2.19)$$

а теплоёмкость, по определению равная $C_V = \frac{dE(x)}{d\Theta}$, теперь с учётом (2.12) выражается двояко как

$$C_V \propto x \quad \text{и как} \quad C_V \propto |x - x_c|^{-\alpha}. \quad (2.20)$$

Теперь легко получить связь β_3 с α_3 . Выпишем вероятность протекания вблизи критической точки из (2.11) и из (1.4):

$$P(x_{YL} \rightarrow x_c, L \rightarrow \infty) = x_c^2 \quad \text{и} \quad P(x \rightarrow x_c, L \rightarrow \infty) \propto |x - x_c|^\beta. \quad (2.21)$$

Сравнивая (2.20) при $x \rightarrow x_c$ и (2.21), получаем искомую связь или искомый скейлинг нулевого порядка, имея в виду (1.16)–(1.18):

$$\beta_3 = -2\alpha_3; \quad \nu_3 = 2\beta_3; \quad \alpha_3 = 2 - 6\beta_3; \quad \gamma_3 = 4\beta_3 \quad (2.22)$$

и численные значения

$$\alpha_3 = -2/11 = -0, (18); \quad \beta_3 = 4/11 = 0, (36); \quad \nu_3 = 8/11 = 0, (72); \quad \gamma_3 = 16/11 = 1, (45). \quad (2.23)$$

В завершение, запишем связь динамического критического индекса удельной электропроводности случайной сетки сопротивлений t (вводится как $\sigma(x) \propto (x - x_c)^t$) с двумя статическими индексами β и ν из следствия гипотезы Александра-Орбаха [5]:

$$t = \frac{(3d - 4)\nu - \beta}{2}, \quad (2.24)$$

где d — размерность пространства. При $d = 3$ подставим ν_3 и β_3 из (2.23) и получим

$$t_3 = 18/11 = 1, (63), \quad (2.25)$$

что совпадает с экспериментами [20, 21] и согласуется с результатами многих работ (см. [7, таблица 5.2]).

§ 3. Обсуждение результатов

Полученные численные значения критических индексов по (2.23) ещё ближе, чем по (2.1) и (2.2), к модели Гейзенберга при исследовании температурных фазовых переходов методами Монте-Карло. Особенно это относится к индексу β_3 : сравнение со значением $\beta_3 = 0,3639(35)$ для кластерных алгоритмов Монте-Карло в [15] и полученное нами $\beta_3 = 0, (36)$ дает отличие на 0,08%. Ещё раз выделим согласование отрицательного значения α_3 нуль-скейлинга с результатами модели Гейзенберга и экспериментальных работ.

Значения критических индексов ν_3 и β_3 по (2.23) подтверждают следствие из гипотезы Александра-Орбаха, дающее связь динамического индекса со статическими.

Если рассмотреть двумерный случай, то для больших L в решёточных задачах можно также ввести $Y(x_{YL}, L) = x_{YL}$ согласно (2.9) и прийти к асимптотикам (2.11) и (2.21), то есть получить $\beta = -2\alpha$ и в двумерном случае. Тогда если $\beta_2 = 5/36$ (например, в [6]), то должно быть $\alpha_2 = -5/72 = -0,069(4)$. Однако считается, что $\nu_2 = 4/3$ — точный результат [6] и при $d = 2$ должно быть $\alpha_2 = 2 - \nu_2 d = -2/3 = -0, (6)$. Как видим, согласование в отрицательном знаке сохраняется и в двумерном случае, хотя разница в численных значениях на порядок.

§ 4. Вывод

Согласование изученных критических индексов в трёхмерном случае в перколяции с критическими индексами для температурных фазовых переходов позволяет отнести их к гейзенберговскому классу универсальности критических явлений.

Авторы благодарны В.В. Васькину за конструктивное обсуждение и критические замечания при подготовке данной работы, а также генеральному директору ЗАО НПО «Акустмаш» Л.М. Седлову за предоставленную ультразвуковую технику.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка. — М.: Наука, Глав. Ред. физ. мат. лит., 1982. — 176 с. (Библиотечка «Квант». Вып. 19).
2. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. — М.: Едиториал УРСС, 2002. — С. 13–24.
3. Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. — М.: Наука, 1975.
4. Ма Ш. Современная теория критических явлений. — М.: Мир, 1980.
5. Соколов И. М. Размерности и другие геометрические критические показатели в теории протекания // УФН150 (2) 221–225 (1985).
6. Федер Е. Фракталы. — М.: Мир, 1991 — С. 126–128.
7. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. — М.: Наука, 1979. — С. 126–128, 133–139, 159–165.
8. Kadanoff L. P. et al. Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment // Rev. Mod. Phys. 39, 395–431 (1967).
9. Wilson K. G. Renormalization group and critical phenomena. 1. Renormalization group and Kadanoff scaling picture // Phys. Rev. B4, 3174(1971).
10. Галлямов С. Р. Порог протекания простой кубической решётки в задаче узлов в модели решётки Бёте // Вестник Удмуртского университета. Математика, механика, компьютерные науки. — 2008 — Вып. 3. — С. 109–115.
11. Галлямов С. Р., Мельчуков С. А. О нескейленге вероятности протекания простой кубической решётки: теория и компьютерный эксперимент // Вестник Удмуртского университета. Математика, механика, компьютерные науки. — 2009 — Вып. 2. — С. 29–36.
12. Левинштейн М. Е., Шур М. С., Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. О связи между критическими индексами теории протекания, ЖЭТФ, 1975, т. 69, с. 386.
13. Stauffer D., Aharony A. Introduction to percolation theory. — London: Taylor & Francis, 1992.
14. Галлямов С. Р., Мельчуков С. А. Об одном методе расчёта порогов протекания квадратной и алмазной решёток в перколяционной задаче узлов // Вестник Удмуртского университета. Математика, механика, компьютерные науки. — 2009 — Вып. 4. — С. 33–44.
15. Камилов И. К., Муртазиев А. К., Алиев Х. К. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло. УФН 169 773 (1999).
16. Камилов И. К., Алиев Х. К. Исследование критической динамики магнитоупорядоченных кристаллов ультразвуковыми методами. УФН 168 953 (1998).
17. Парсонидж Н., Стейли Л. Беспорядок в кристаллах. Часть 1. — М.: Мир, 1982 — С. 84.
18. Полухин В. А., Ухов В. Ф., Дзугутов М. М. Компьютерное моделирование динамики и структуры жидких металлов. — М.: Наука, 1981. — С. 34–36.
19. Хархардин А. Н., Топчиев А. И. Уравнения для координационного числа в неупорядоченных системах // Белгородский государственный технологический университет им. В. Г. Шухова. Успехи современного естествознания. — 2003 — № 9 — С. 47.
20. Luthi B., Moran T. J., Pollina R. J. Phys. Chem. Solids 31, 1741 (1970).
21. Bennet H. S. Phys. Rev. 185, 801(1969).

S. R. Gallyamov, S. A. Mel'chukov

On the critical indices in three-dimensional percolation in the problems of lattice points and solid spheres

Three-dimensional lattice points problems for simple cubic lattice and solid spheres in chaotic motion are considered. Additional (to two-exponential scaling) relations between indices are indicated: $2 - \alpha - \gamma = \nu$ (or $\nu d - \gamma = \nu$) and $\beta = -2\alpha$. Numerical values of three-dimensional critical indices are defined: $\alpha = -2/11$, $\eta = 0$, $\beta = 4/11$, $\nu = 8/11$, $\gamma = 16/11$ and $\delta = 5$.

Keywords: percolation, critical exponent, lattice, solid sphere.

Mathematical Subject Classifications: 60K35, 82B43

Галлямов Сергей Рафаэлович, ст. преп., кафедра общей физики, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1 (корп. 4), e-mail: galser@uni.udm.ru

Мельчуков Сергей Анатольевич, ст. преп., кафедра высокопроизводительных вычислений и параллельного программирования, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1 (корп. 4), e-mail: sam@parc.uni.udm.ru