

УДК 531.19, 519.24

© С. Р. Галлямов, С. А. Мельчуков

## О КРИТИЧЕСКИХ ИНДЕКСАХ В ТРЕХМЕРНОЙ 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 перколационный 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  $\beta$  — критический индекс. С другой стороны, если магнитный момент на атом есть  $\mu$  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  $\alpha$  — 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  $\beta$  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 перколационной решётки  $L \propto |x - x_c|^{-\nu}$  и т. д. Гипотеза универсальности критических индексов  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$  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  $\delta$  и  $\eta$  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  $\eta$  и  $\nu$ , но не  $\eta$  и  $\delta$ ) 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  $\epsilon$ -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  $\gamma$  и  $\delta$ ), но плохо согласуется с малыми индексами (например  $\alpha$ ,  $\nu$  и  $\beta$ ). Оказалось, что метод ренорм-группы в переколяции обладает серьёзным 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]) переколяционных свойств (порог протекания, вероятность протекания и др.) двухфазной простой кубической решётки получено *первое* соотношение между индексами, которое позволило определить индексы  $\eta$  и  $\delta$ . В § 2 рассмотрена переколяционная задача твёрдых проводящих сфер, находящихся в хаотическом движении (равновесная переколяционная система твёрдых сфер). Решение этой задачи привело к асимптотике поведения энергии и теплоёмкости переколяционной 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  $\beta$ :

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

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

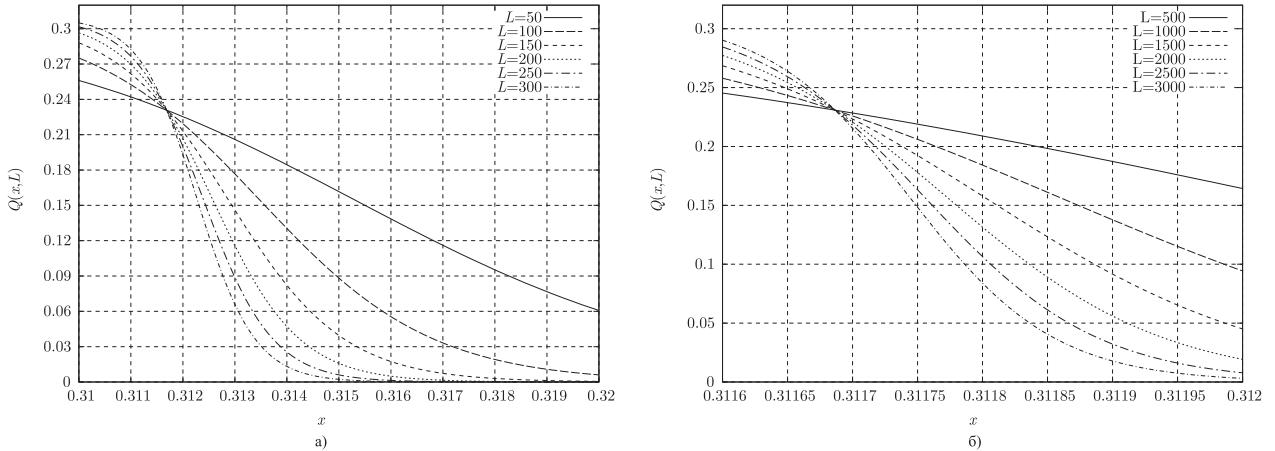
Из (1.1) и (1.2) вероятность  $Q(x_{cL}, L) = x_{cL}/2$  или с учётом (1.3):

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

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  $L \gg \ln(L)$  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

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

Тогда (1.6) можно выразить через критический индекс  $\nu$  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  $\gamma$ :

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

а нулевой момент  $M_0$  функции  $n_s(x, L)$  есть среднее число кластеров на узел и выражается через критический индекс  $\nu$  (или через  $\alpha$  и  $\gamma$ ) 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  $\nu$  и  $\gamma$  (или через  $\alpha$  и  $\gamma$ ):

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

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

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

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 —  $\beta_3$ .

Таким образом (0.1) и (1.15) представляют, как отмечено во введении, *скейлинг первого порядка*, который позволил определить численные значения показателей двух индексов  $\delta_3$  и  $\eta_3$ . Как сказано выше знание  $\delta$  и  $\eta$  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  $\beta_3$ . 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 центрированного 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 центрированного тетраэдра и алмаза.

Оценка  $\beta_3$  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  $\beta_3$  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  $\alpha_3$  по (2.2) также согласуются с результатами 3d модели Гейзенберга в [15]. Отрицательное значение  $\alpha_3$  (подтверждается и в экспериментах в [16] таблица 3) в модели Гейзенберга (см. [15]  $\alpha_3$  в таблице 3 от  $\alpha_3 = -0,21$  до  $\alpha_3 = -0,17$ ) как и в (2.2) *устраняет расходимость теплопроводности 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  $\beta_3$  связан с  $\nu_3$  и  $\gamma_3$  соотношением  $\nu d = 2\beta + \gamma$  из (0.1) и эту связь мы использовали для получения (1.16)–(1.20), поэтому будем искать связь  $\beta_3$  с  $\alpha_3$  *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  $\Delta x$  характеризуется как

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

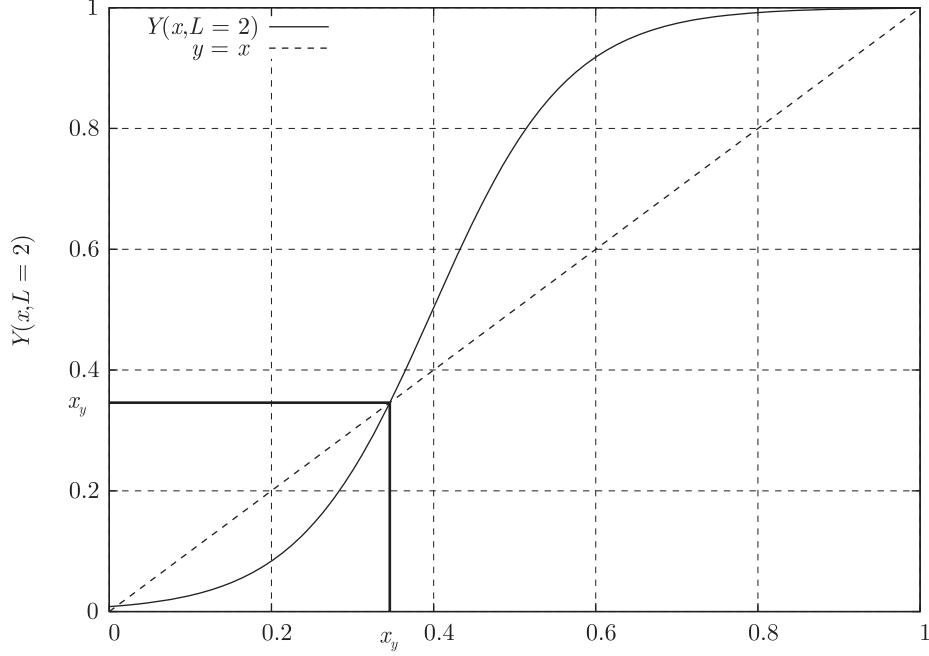
где  $a_1(L) \propto L$ , то есть при  $L \rightarrow \infty$  ширина перехода мала, поэтому внутри интервала  $\Delta x$  любое  $x \approx x_{cL}$  с большой точностью.

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  $\Delta x$ , 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  $L = 2$ ):

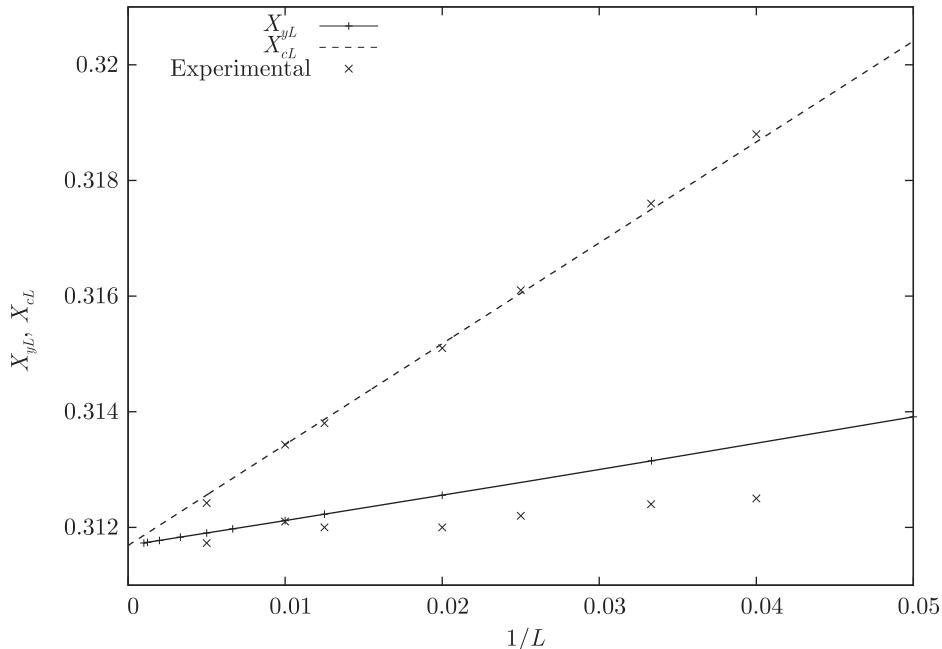
$$Y(x_{YL}, L) = \frac{1}{1 + e^{-A_L(x_{YL} - x_{cL})}} = x_{YL}, \quad (2.9)$$

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

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

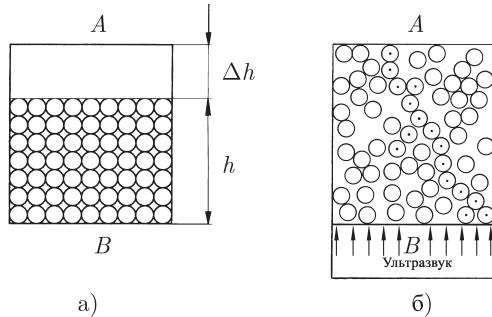
Выразим энергию  $E(x)$  перколяционной системы через концентрацию  $x$  интересующей нас фазы с целью нахождения теплоёмкости, а затем и связи  $\beta_3$  с  $\alpha_3$ . Нам достаточно найти асимптотическое поведение  $E(x)$  и  $C_V(x)$ . Для этого рассмотрим задачу твёрдых сфер, находящихся в хаотическом 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 ( $\mathbf{g}$  направлено вниз на рис. 4 не показано). Сфера 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.



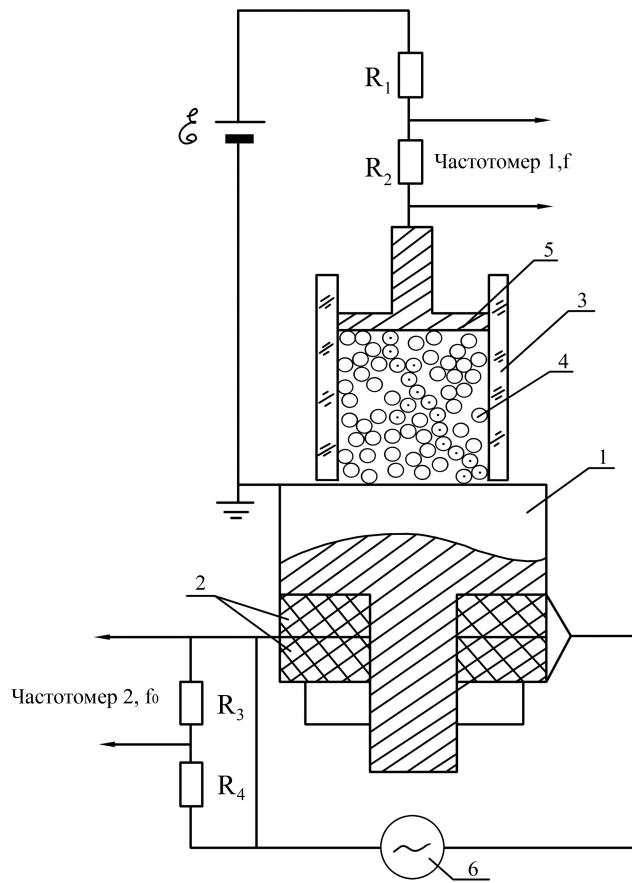
**Рис. 4.**  $N$  проводящих шариков (твёрдых сфер) в ящике высотой  $H = h + \Delta h$ . а) Покоящиеся без внешнего воздействия  $N$  проводящих шариков в поле тяжести Земли ( $g$  направленно вниз, не показано). б) возникновение соединяющего кластера (также как и в решёточных задачах) под действием 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 случайному конфигурациям. Перекрытие означает, что центры двух сфер оказываются на расстоянии меньшем их диаметра. Чем больше концентрация  $x$ , тем менее вероятно, что конфигурация реализована случайному 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  $d = 2.25\text{мм}$ . Сверху по внутренней резьбе ( $M30 \times 1,5$ ) 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 частотометров, соответствовали требуемому входному напряжению частотометра  $\approx 1\text{В}$ . Ультразвуковой излучатель был настроен на частоту  $f_0 \approx 20\text{ кГц}$ .



**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  $\Delta h$  (это означает увеличение  $x$ , так как  $H = h + \Delta h$ , а  $x = NV_1/SH$ , здесь площадь  $S = \pi D^2/4$  вычислялась по внутреннему диаметру резьбы  $D = 28,5\text{мм}$ ) 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 флюктуациями, 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 флюктуации 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  $\Theta$ . Если ультразвук выключен, то движение сфер прекращается и  $\Theta = 0$ . Это означает, что переколяционные 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 (2.13) есть сумма кинетических энергий  $N$  невзаимодействующих сфер или сумма средних значений кинетической энергии  $\epsilon$ , 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  $\epsilon_r$  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 переколяционной 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  $\beta_3$  с  $\alpha_3$ . 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 (2.16)–(2.18):

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

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  $\sigma(x) \propto (x - x_x)^t$ ) с двумя статическими индексами  $\beta$  и  $\nu$  из следствия гипотезы Александера-Орбаха [5]:

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

где  $d$  — размерность пространства. При  $d = 3$  подставим  $\nu_3$  и  $\beta_3$  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  $\beta_3$ : 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  $\alpha_3$  нуль-скейлинга с результатами модели Гейзенберга и экспериментальных работ.

Значения критических индексов  $\nu_3$  и  $\beta_3$  по (2.23) подтверждают следствие из гипотезы Александера-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 // УФН 150 (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: Tailor & 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