Письма в ЖЭТФ, том 29, вып.1, стр. 72–76 *5 января 1979 г.*

УРАВНЕНИЕ ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛАСТЕРОВ В ПЕРКОЛЯЦИОННОЙ ТЕОРИИ

А. А. Абрикосов

Выведено уравнение для функции распределения кластеров по размерам вблизи перколяционного порога в задаче "шаров".

Показано, что решение содержит лишь одну произвольную геометрическую константу, зависящую от размерности пространства. Найдены асимптотики. В двух моделях, в которых вычислена функция распределения, она удовлетворяет уравнениям подобным выведенному в настоящей работе.

Одной из наиболее фундаментальных характеристик в перколяционной теории является функция распределения кластеров по размерам. Через эту функцию выражаются такие важные величины, как вероятность частице принадлежать бесконечному кластеру и средний размер конечных кластеров. Она может определять и другие физические характеристики (см. [1]). До сих пор все попытки определения этой функции сводились к непосредственному численному расчету на моделях, представлявших, как правило, узельные задачи на двумерных решетках. Имелись также некоторые общие теоремы, касающиеся асимптотического поведения вдали от перколяционного порога (см. [2], где приведен и список соответствующей литературы).

Настоящая заметка посвящена выводу уравнения для функции распределения в окрестности перколяционного порога и некоторым его следствиям. В качестве модели используется "задача шаров" в 2-х или 3-х измерениях. Она ставится так. Пусть в пространстве случайно разбросаны точки с плотностью n_m. Окружим каждую из них сферой радиуса r_0. Если эти сферы для двух точек пересекаются, то мы будем относить их к одному кластеру. Введем величину $p = \frac{4\pi}{3} n_m r_0^3$. Как показано в [3] при критическом значении $p_c = 0{,}38 \pm 0{,}1$ для $d = 3$ (в [3] в действительности используется величина $\beta = 8p$) образуется бесконечный кластер. Это перколяционный порог. Мы обозначим $\epsilon = (p_c - p)/p_c$. Число кластеров, содержащих n частиц, пропорционально полному числу частиц в системе (т.е. $N = n_m V$). Поделив на N, мы получаем $a(n)$, которую мы и назовем функцией распределения кластеров.

Вблизи перколяционного порога ($|\epsilon|$ T<<1) и для больших кластеров ($n >> 1$) функция распределения должна иметь автомодельный вид [4] (см. также [1])

$$a(n) = \frac{1}{n^b} f(\epsilon n^a), \tag{1}$$

где функция $f(x)$ аналитична при $x \to 0$, и убывает при $x \to \pm\infty$. В [1] приведены условие нормировки функции f и ее связь с основными величинами перколяционной теории.

Уравнение для $a(n)$ может быть получено из следующих соображений. Увеличим слегка радиус взаимодействия r_0. При этом происходит слияние каких-то кластеров. Число кластеров с n частицами будет увеличиваться за счет слияния меньших кластеров и уменьшаться за счет прилипания n-кластеров к другим конечным кластерам, или к бесконечному кластеру (при $\epsilon < 0$). Если бы процесс слияния мог осуществляться любыми частицами из каждого кластера, то вероятность процесса была бы пропорциональна произведению вероятностей принадлежности частиц к соответствующим кластерам. Такая вероятность равна $na(n)$ ($Na(n)$ кластеров с n-частицами, $nNa(n)$ частиц в n-кластерах). Но на самом деле частицы внутренних частей кластера или поверхностей глубоких "фьордов" неэффективны, а потому вероятность слияния кластеров с n_1 и n_2-частицами мы положим пропорциональной $n_1^q\, a(n_1) \times n_2^q\, a(n_2)$, где для d-измерений $(d-1)/d < q < 1$

Изложенные соображения приводят к следующему уравнению

$$-\frac{\partial a(n)}{\partial \epsilon} = \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{n-1} m^q a(m)(n-m)^q a(n-m) - n^q a(n)\left[\sum_{m=1}^{\infty} m^q a(m) + S(\epsilon)\right], \tag{2}$$

где $S(\epsilon)$ – вероятность частице принадлежать к эффективной части бесконечного кластера. Постоянный коэффициент в вероятности слияния включен в ϵ.

При $\epsilon > 0$ $S(\epsilon) = 0$. Умножая (2) на n и суммируя от 1 до ∞, получаем $\frac{\partial}{\partial \epsilon}\sum_{n=1}^{\infty} na(n) = 0$, что соответствует условию нормировки. Перегруппировывая члены, получаем

$$-\frac{\partial a(n)}{\partial \epsilon} = \sum_{m=1}^{n/2} m^q a(m)\left[(n-m)^q a(n-m) - n^q a(n)\right] - \tag{3}$$

$$- n^q a(n) \Big[\sum_{n/2}^{\infty} m^q a(m) + S(\epsilon) \Big].$$

В этой форме видно, что при $n >> 1$ в суммах участвуют лишь $m >> 1$, что дает возможность перейти к интегралам.

Поскольку слияние кластеров не влияет на суммарное число эффективных частиц, то имеет место соотношение

$$\sum_{n=1}^{\infty} n^q [a(n, \epsilon) - a(n, 0)] = - S(\epsilon). \tag{4}$$

Это дает возможность написать уравнение (3) в другой форме

$$- \frac{\partial a(n, \epsilon)}{\partial \epsilon} = \int_0^{n/2} m^q a(m, \epsilon) [(n-m)^q a(n-m, \epsilon) -$$

$$- n^q a(n, \epsilon)] dm + n^q a(n, \epsilon) \xi \int_0^{n/2} m^q [a(m, \epsilon) - a(m, 0)] dm - \tag{5}$$

$$- \int_{n/2}^{\infty} m^q a(m, 0) dm.$$

Наконец, пользуясь тем, что

$$\sum_{n=1}^{\infty} n [a(n, \epsilon) - a(n, 0)] = - P(\epsilon), \tag{6}$$

где $P(\epsilon)$ – вероятность частице принадлежать бесконечному кластеру (см. [1]), получаем из (3) при $\epsilon < 0$

$$\frac{\partial P}{\partial |\epsilon|} = S(|\epsilon|) \sum_{n=1}^{\infty} n^{q+1} a(n). \tag{7}$$

Из теории подобия следует

$$P(\epsilon) \quad [illegible] |^{\beta} \theta(-\epsilon), \quad S(\epsilon) = s |\epsilon|^{\delta} \theta(-\epsilon). \tag{8}$$

Подстановка [illegible] ме (1) в уравнение (3) или (5), а также в (4), (6) и (7) дает:

а) уравнения

$$- \frac{\partial f}{\partial x} = \int_0^{1/2} u^{-\xi} f(xu^a) \{ (1-u)^{-\xi} f[x(1-u)^a] - f(x) \} du$$

$$- f x \int_{1/2}^{\infty} u^{-\xi} f(xu^a) du - f(x) \theta(-x) s x^{\delta} \tag{3'}$$

$$-\frac{\partial f}{\partial x} = \int_0^{1/2} u^{-\xi} f(xu^a)\{(1-u)^{-\xi} f[x(1-u)^a] - f(x)\}\,du$$

$$+ f(x)\int_0^{1/2} u^{-\xi}[f(xu^a) - f(0)]\,du - f(x)f(0)\int_{1/2}^{\infty} u^{-\xi}\,du, \qquad (5')$$

где $\xi = b - q$, б) соотношения между показателями

$$a = 2q + 1 - b, \quad \delta = \frac{q}{a} - 1, \quad \beta = \frac{b-2}{a}; \qquad (8)$$

в) дополнительные условия, накладываемые на решение.

$$\int_0^{\infty} x^{1-\frac{q}{a}} f'(x)\,dx = 0$$

$$\frac{1}{q-a}\int_0^{\infty} x^{1-\frac{q}{a}} f_1'(x)\,dx = \int x^{1-\frac{2q-1}{a}} f_1'(x)\,dx \Big/ \Big[\int_0^{\infty} x^{\frac{1-q}{a}} f_1(x)\,dx\Big], \qquad (9)$$

где $f_1(x) = f(-x)$, и г) выражения для констант ρ и s через $f_1(x)$, которые мы не приводим.

Подставляя в уравнение (5′)

$$f(x) = \sum_{s=0}^{\infty} f_s x^s \qquad (10)$$

получаем систему

$$-(s+1)f_{s+1} = \left(\frac{1}{2}\right)^{1+as-2\xi} \sum_{s_1=0}^{s} f_{s_1} f_{s-s_1}\cdot$$

$$\left[\frac{1}{1+s_1 a-\xi} + \frac{a(s-s_1)-\xi}{1+as_1-\xi}\int_0^1 u^{s_1 a+1-\xi}(2-u)^{a(s-s_1)-1-\xi}\,du\right]. \qquad (11)$$

Отсюда все f_s выражаются через f_0. Итак, остаются следующие неизвестные: q, f_0, a. Показатель q зависит от числа измерений. Численные расчеты дают $q = 0{,}83 \pm 0{,}03$ ($d = 3$) и $q = 0{,}73 \pm 0{,}01$ ($d = 2$). При заданном q условия (9) определяют f_0 и a.

Асимптотики $f(x)$ при $x \to \pm\infty$ получаются из уравнения (3′):

1) $f(x) \approx c x^{\nu} \exp(-t x^{1/a})$, $x \to \infty$

$$\nu = \frac{1}{a} - 1, \quad \frac{t}{a} = c\,\phi(q), \quad \phi(q) = \int_0^{1/2} u^{-q}(1-u)^{-q}\,du$$

2) $f(x) \approx c_1 x^{\nu_1} \exp(-t_1 |x|^{q/a})$, $x \to -\infty$ $\quad t_1 = \dfrac{q}{a} s \qquad (12)$

Эти формулы соответствуют общим формам и результатам численных расчетов (см. [2]). Существуют две модели, которые допускают непосредственное вычисление функции $a(n)$: решетка Бете $\left(b = \frac{5}{2}, \ a = \frac{1}{2}\right.$ $\left. f(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)\right)$ [5] и одномерная задача "шаров" ($a(n) = \lambda^2(1-\lambda)^{n-1}$, $\lambda = \exp(-n_m\Delta)$, ($\Delta$ – радиус взаимодействия) (см. [6]). В первом случае $f(x)$ удовлетворяет уравнению (3′) с $q = 1$ (дополнительные условия (9) не относятся к этому случаю). Во втором случае $a(n)$ удовлетворяет уравнению (3) с левой частью $-\frac{\lambda^2}{2}\frac{\partial a(n)}{\partial \lambda}$, $q = 0$, $S(\epsilon) = 0$. Перколяционному порогу соответствует $\lambda = 0$; область ниже порога отсутствует. То, что развитый подход подтверждается в двух крайних случаях ($q = 0$ и $q = 1$), является убедительным свидетельством его правильности.

Институт
теоретической физики
им. Л.Д.Ландау

Поступила в редакцию
27 ноября 1978 г.

Литература

[1] А. А.Абрикосов. Письма в ЖЭТФ, 27, 696, 1978.

[2] P.L.Leath, G.R.Reich. J. Phys., C11, 4017, 1978.

[3] F.D.K.Roberts, S.H.Storey. Biometrika, 55, 288, 1969; А.С.Скал, Б.И.Шкловский. Физика и техника полупроводников, 7, 1589, 1973.

[4] K.Binder, D.Stauffer, H.Müller-Krumbhaar. Phys. Rev., B10, 3853, 1974; D.Stauffer. Phys. Rev. Lett., 35, 394, 1975.

[5] D.A.Smith. Jour. Phys., F4, 1266, 1974; J. Phys., F5, 2148, 1975.

[6] G.Theodorou. Phys. Rev., B16, 2264, 1977