

УДК 539.22

М. І. Лебовка, Р. М. Мельник, М. П. Купчик

ПЕРКОЛЯЦІЙНИЙ ПЕРЕХІД ДЛЯ МОДЕЛІ СКОРЕЛЬОВАНОГО РОСТУ

Проведено вивчення процесів росту і перколяції для сітки скорельованих зв'язків. Дослідження виконані для квадратної ґратки розміром $L \times L$, де L змінюється в інтервалі від $L=20$ до 100 з періодичними граничними умовами вздовж напрямків x і y . Ступінь асоціації зв'язків контролюється параметром f . При $f=1$ (випадок притягання зв'язків) спостерігається ріст одного кластеру зв'язків, і ця модель тотожна з моделлю Едена. При $f=-1$ (випадок відштовхування зв'язків), спостерігається утворення дуже подрібненої сітки зв'язків і модель тотожна з моделлю випадкової послідовної адсорбції (RSA) з вилученням найближчих сусідів. Ступінь анізотропії вводиться як $\Delta = (\theta_y - \theta_x) / (\theta_y + \theta_x)$, де θ_y і θ_x є відповідно долі вертикальних і горизонтальних зв'язків у системі. Вивчена скейлінгова поведінка порога перколяції θ_c при різних значеннях f і Δ . Обговорюються кореляції між порогом перколяції θ_c та середнім координаційним числом зв'язків у кластерах, Z_c в точці перколяції для нескінченно великих систем $L \rightarrow \infty$.

Вступ

В останні роки теорія перколяції стала широко застосовуватись у найрізноманітніших галузях для вивчення багатьох цікавих фізичних явищ. Тут можна навести приклади класичної задачі перколяції для випадкових сіток резисторів, композиційних систем типу метал-ізолятор, явищ золь-гель переходу [1,2], механічного руйнування [3, 4] і пробою діелектриків [5—7], дифузії, течії і транспорту в неупорядкованих ґратках і в пористих середовищах [8, 9]. Перколяційна поведінка може проявлятися як в твердих, так і в м'яких конденсованих системах. Наприклад, перколяційний розгляд є дуже плідним при вивченні структури рідкої води, мікроемульсійних систем, гелеутворення і т. ін. Основні успіхи в даній галузі обумовлені широким використанням різноманітних комп'ютерних модельних досліджень.

Серед найголовніших моделей перколяції, що найбільш інтенсивно вивчаються, на даний час можна виділити модель випадкової і модель скорельованої перколяції. Найпопулярнішою є модель випадкової перколяції на регулярних ґратках. Для цієї моделі ґратка випадково заповнюється зв'язками, або вузлами з вірогідністю θ . Ці заповнені зв'язки, або вузли, далі будемо називати елементами. Величина θ власне відповідає ступеню заповнення ґратки. Вважається, що два сусідні елементи зв'язані й належать до одного кластеру. Поріг перколяції $\theta = \theta_c$ відповідає виникненню суцільного перколяційного кластеру зв'язків, або вузлів, що з'єднують протилежні

сторони ґратки. На даний час виконано багато аналітичних і обчислювальних робіт для моделі випадкової перколяції на різноманітних ґратках з різною топологією і в просторах різної вимірності. В деяких роботах розглядалися також неґраткові моделі випадкової перколяції (див., наприклад [10—12], а також літературу до цих робіт).

До найважливіших властивостей перколяційних систем слід віднести те, що вони описуються масштабними законами, з певним набором критичних експонент, ν , β , τ , ..., що характеризують перколяційний клас універсальності. Тут істотно відзначити, що значення критичних експонент не залежать від типу ґраток, або, навіть, наявності ґратки (неґратковий варіант), і вони залежать тільки від вимірності простору d . Але поріг перколяції θ_c істотно залежить від симетрії і типу ґраток. Наведемо деякі приклади масштабних законів [1,2,8,9]. Однією з найважливіших характеристик просторово-неоднорідних систем є кореляційна довжина ξ . Перколяційні системи характеризуються явно вираженою просторовою неоднорідністю. На малих просторових масштабах $l < \xi$ ці системи проявляють самоподібні, або фрактальні, властивості, на великих просторових масштабах $l > \xi$ вони є просторово однорідними. Таким чином, кореляційна довжина характеризує масштаб макроскопічної однорідності системи. При збільшенні θ розміри кластерів, що складаються зі зв'язаних елементів, збільшуються, і величина ξ також збільшується. Поблизу точки перколяції ξ розбігається за степеневим законом

$$\xi \propto (\theta - \theta_c)^{-\nu}, \quad (1)$$

де ν є експонента довжини кореляції.

Виходячи з того, що заповнені елементи відповідають надпровідним вузлам, або зв'язкам, доходимо висновку, що електропровідність G буде дорівнювати нулю при $\theta < \theta_c$ і збільшується при $\theta > \theta_c$ за степеневим законом

$$G(p) \propto (\theta - \theta_c)^t, \quad (2)$$

де t є експонента електропровідності.

Вірогідність того, що даний елемент належить найбільшому (перколяційному) кластеру, $P_\infty(\theta)$ дорівнює нулю при $\theta < \theta_c$ і збільшується при $\theta > \theta_c$ за степеневим законом

$$P_\infty(\theta) \propto (\theta - \theta_c)^\beta. \quad (3)$$

Величину $P_\infty(\theta)$ ще називають параметром порядку, а β — експонентою параметра порядку.

Слід відзначити, що фрактальна вимірність перколяційного кластеру визначається співвідношенням

$$D = d - \beta/\nu, \quad (4)$$

яке легко отримати зі скейлінгових міркувань (див., наприклад, [13, 14]).

В таблиці наведено величини критичних експонент, що обговорювались вище, для двовимірних та тривимірних систем.

На даний час встановлено ряд цікавих співвідношень між порогом перколяції θ_c , координаційним числом z (котре характеризує певною мірою топологію ґратки), і вимірністю простору d . Як один із прикладів такої залежності можна навести добре відому формулу Флорі для перколяції на дереві Кейлі [15]:

$$\theta_c = 1/(z-1), \quad (5)$$

котра добре описує залежність $\theta_c(z)$ для високих вимірностей простору d як для задачі вузлів, так і зв'язків, але працює незадовільно для вимірностей $d < 3$.

Згодом були запропоновані різні формули для задачі зв'язків і вузлів (див. роботи [16—28] для огляду), однак їх точність не є достатньо задовільною для ґраток з різною топологією і вони не виявляють універсальності при низьких вимірностях. Нещодавно Galam і Mauger [17—19] отримали досить задовільну степеневу залежність, що описує перколяційні пороги як для задачі зв'язків так і вузлів для різних ґраток Браве, квазікристалів та інших ґраток. Вони спостерігали існування обмеженого числа різних класів універсальності і довели, що в межах одного класу універсальності поріг перколяції θ_c при заданій вимірності простору d залежить тільки від координаційного числа Z , або у випадку складних ґраток — від ефективного координаційного числа Z_{eff} . Крім того, вони запропонували спеціальний топологічний інваріант, що є

комбінацією перколяційних порогів для задачі зв'язків і вузлів. Цей інваріант має практично сталі значення для ґраток різних топологій і різних вимірностей простору [20]. Це вражаючі результати, хоча нещодавно показано, що вони також не є абсолютно точними, й інколи спостерігаються випадки значного відхилення від ідеальної степеневі залежності [21—24] і топологічної інваріантності перколяційних переходів [25].

В даній роботі наша увага буде сконцентрована на більш загальній проблемі скорельованої перколяції, яка останнім часом привертає підвищену увагу [26—29]. Що таке скорельована перколяція? Для звичайної (випадкової) перколяції елементи довільним чином, випадково займають вільні місця на базисній d -вимірній системі. Але характер безпорядку в реальних системах звичайно не є цілком випадковим. Як правило, спостерігається просторова скорельованість у розташуванні елементів. Ступінь просторової скорельованості системи можна характеризувати за допомогою звичайної кореляційної функції [30]. Наприклад, для найпростішої задачі вузлів можна ввести парну кореляційну функцію, що має вигляд

$$C(r_{ij}) = \langle r_i r_j \rangle - \langle r_i \rangle \langle r_j \rangle, \quad (6)$$

де $r_i = r(r_i)$ — густина, що характеризує заповнення вузлів, r_{ij} — відстань між двома вузлами.

В рівнянні (6) для заповненого вузла $\rho_i = 1$ і для порожнього — $\rho_i = 0$. З цього визначення при $r_{ij} \rightarrow \infty$, маємо $C(r_{ij}) \rightarrow 0$, що означає втрату кореляцій на великих відстанях. Для випадкової перколяції маємо $C(r) = p(1-p)\delta_{r,0}$.

Характер кореляцій між елементами гетерогенної системи можна також описувати за допомогою статичного структурного фактору $S(k)$. Структурний фактор $S(k)$ визначається як просторовий Фур'є-образ кореляційної функції

$$S(k) = \int dr e^{-ikr} C(r). \quad (7)$$

Для алгебраїчного вигляду кореляційної функції $C(r) \propto r^{-\lambda}$ (7) маємо

$$S(k) \propto 1/k^{(d-\lambda)}. \quad (8)$$

Ступінь дальності визначається характером поведінки функції $S(k)$. Для короткодючих кореляцій структурний фактор не залежить від k , $S(k) \propto \text{const}$, для дальностіючих маємо $\lambda \leq d$.

Скорельована перколяція спостерігається в процесах міжчастинкової агрегації (опис таких процесів, що спостерігаються при виробництві паперу, дано в [31]), при адсорбції частинок, або в процесах осаду на двовимірній поверхні [32], в композиційних матеріалах, пористих середовищах, адсорбентах і мембранах [2, 33], в процесах розтріскування неоднорідних матеріалів, або у процесах електропробою [3—7].

Одним з класичних прикладів скорельованої перколяції є також перколяційна модель Ізінга (див., наприклад [34]). При її розгляді можна визначити ізінговські кластери, в яких найближчі сусіди в околі Мура (m -кластери) мають один напрям спінів. Зв'язність у цих кластерах характеризується поведінкою, властивою для скорельованої перколяції, а температура фазового переходу в моделі Ізінга T_c відповідає точці перколяції.

Відзначимо, що морфологія таких великих міст, як Берлін, Париж, Лондон та урбаністичних агломератів може бути описана за допомогою спеціальних моделей фрактального або скорельованого перколяційного росту [35].

Скейлінгові властивості, що визначають клас універсальності скорельованих перколяційних систем, можуть залежати від будови гетерогенної системи, характеру кореляцій між елементами і ступеня дальності. Із загальних міркувань можна передбачити, що скейлінгові властивості перколяційних систем з короткодючими кореляціями будуть такими самими, як і для випадкових перколяцій, якщо масштаб довжини, що нас цікавить, перевищує довжину кореляцій. Зміни класу універсальності можна чекати для систем з дальніючими кореляціями [36, 37]. Визначення залежності класу універсальності від параметрів, що характеризують модель скорельованої перколяції, є дуже важливою проблемою, але, на жаль, у цій галузі досі отримані тільки окремі результати, що стосуються оцінок лише певних критичних індексів для різних моделей скорельованої перколяції. Наприклад, у роботах [27—29] проведено теоретичний розгляд перколяційної системи, для якої кореляційна функція має алгебраїчний вигляд

$$C(r) \propto r^{-\lambda}, \quad (9)$$

і показано, що для дальніючої моделі скорельованої перколяції, за умови $\lambda < d$, експонента кореляційної довжини ν починає відрізнятися од її значення для нескорельованої перколяції $\nu = 4/3$, і збільшується при зростанні ступеня дальності. В [37] методами числового моделювання вивчені скейлінгові властивості задачі зв'язків з короткодючими і дальніючими кореляціями для систем з $d=2$ і $d=3$. Випадок короткодючих кореляцій відповідав $S(k) \propto \text{const}$, тобто моделі нескорельованої перколяції, а випадок дальніючих кореляцій відповідав $S(k) = b + ak^2$. Показано, що у випадку дальніючих кореляцій критична експонента параметра порядку β_1 значно збільшується порівняно із звичайною експонентою β_s для короткодючої (випадкової) перколяції. В [34, 38] відзначено, що критична експонента електропровідності t для випадків скорельованої перколяції для двови-

мірних систем може бути значно нижче її значення для випадкової перколяції і бути для моделі електропробою $t \approx 1.0$ [38] і для магнеторезистивної моделі (що базується на моделі Ізінга) $t \approx 0.2$ [34].

Цікавою є також поведінка порога перколяції θ_c для скорельованих систем. Поріг перколяції може залежати від параметрів задачі навіть при збереженні класу універсальності випадкової перколяції. Загалом поведінка θ_c для моделей скорельованої перколяції є досить складною. Наприклад, у дисперсії частинок при притяганні між ними може підсилуватись кластеризація, яка, в залежності від умов формування кластерів, їхньої форми, морфології тощо може призводити як до підвищення, так і до зниження θ_c [39—41]. Чутливою є також залежність θ_c від ступеня анізотропії форми частинок, можливості їх перекриття та ін. факторів [42, 43].

Модель скорельованої перколяції, що розглядається в даній роботі, базується на моделі скорельованого анізотропного росту. Проводиться дослідження задачі зв'язків на квадратній ґратці, ріст кластерів відбувається шляхом осаду зв'язків при врахуванні взаємодії між найближчими елементами в околі Мура. Ступінь асоціації зв'язків контролюється параметром f , що визначає підсилення притягання або відштовхування між зв'язками в процесах росту кластерів. Цікавість даної моделі полягає в тому, що вона дозволяє імітувати протікання скорельованої перколяції, що спостерігаються при моделюванні процесів електропробою, або механічного руйнування неоднорідних систем [38, 44, 45]. Для врахування анізотропії, що спостерігається при електропробої або механічному руйнуванні, в цю модель вводиться також можливість розгляду анізотропних систем.

Дана робота має таку структуру. В наступному розділі дано розгляд комп'ютерної моделі й описані основні параметри, що використовуються при моделюванні. Представлено результати числових розрахунків та подано їх обговорення. В розділі “Висновки” наведено заключні коментарі й наші висновки.

Комп'ютерна модель та опис її основних параметрів

Ми розглядаємо звичайну задачу зв'язків на квадратній ґратці розміром $L \times L$, де L — парне. Вздовж горизонтального (x) і вертикального (y) напрямків будемо застосовувати періодичні граничні умови. Розглянемо спочатку алгоритм побудови перколяційних кластерів зв'язків для ізотропної моделі:

1) На початку моделювання всі зв'язки є цілими. На першому кроці Монте-Карло вибира-

емо довільний зв'язок i з вірогідністю F ($0 \leq F \leq 1$) руйнуємо його. У випадку успішного руйнування ми помічаємо даний зв'язок як зруйнований.

2) На кожному наступному кроці Монте-Карло руйнуємо цілий зв'язок з вірогідністю:

- F , якщо цей зв'язок не зв'язаний із зруйнованими зв'язками, і
- $1 - F$, якщо цей зв'язок зв'язаний із зруйнованими зв'язками.

3) Крок 2) повторюється до досягнення заданого заповнення θ системи зруйнованими зв'язками.

Як правило, процедура росту припиняється за умови досягнення точки перколяції $\theta = \theta_c$. Для даної моделі вірогідність руйнування певного зв'язку залежить від наявності у нього уже зруйнованих найближчих сусідів. Введено параметр асоціації, визначений як $f = 1 - 2F$ ($-1 \leq f \leq 1$). Додаткові значення параметра f відповідають підсиленню асоціації між елементами, їх "притягання", навпаки від'ємні значення параметра f відповідають "відштовхуванню" між елементами. Випадок $f \rightarrow 1$ відповідає ростові одного суцільного кластеру, що є еквівалентом кластеру Едена [46] для задачі зв'язків. Випадок $f \rightarrow -1$ відповідає моделі випадкової послідовної адсорбції (RSA) (опис цієї моделі дано, наприклад, в [32]) для задачі зв'язків на квадратній ґратці при врахуванні ефектів виключення найближчих сусідів. В останньому випадку на ґратці є тільки поодинокі зруйновані зв'язки, і жоден зруйнований зв'язок не має найближчих зруйнованих сусідів. При цьому концентрація зруйнованих елементів не може перевищувати деякого критичного значення $\theta = \theta_j \approx 0.23$, що називається межею загальмованого осадження. Швидкість росту при заповненнях поблизу цієї точки значно гальмується. Такий режим росту є звичайним режимом загальмованого осадження (jamming limit), і його добре вивчено у випадку задачі вузлів, для якого $\theta = \theta_j \approx 0.364133$ [47]. Збільшення f в даній моделі відповідає підсиленню ступеня дальньої кореляції.

В моделі анізотропної перколяції враховується можливість різної ймовірності руйнування вертикальних (вздовж осі y) і горизонтальних (вздовж осі x) зв'язків. Коефіцієнт анізотропії руйнування Δ визначимо як

$$\Delta = (\theta_y - \theta_x) / (\theta_y + \theta_x), \quad (10)$$

де θ_y і θ_x є, відповідно, долі вертикальних і горизонтальних зв'язків у системі.

Алгоритм обчислень для моделі анізотропної перколяції є таким самим, як і описаний вище, але вертикальні і горизонтальні зв'язки з набору незруйнованих елементів вибираються з частотою, яка забезпечує виконання співвідношення (10). Величина Δ лежить в інтервалі

$-1 \leq \Delta \leq 1$. При додатніх Δ кластери складаються переважно з вертикальних зруйнованих зв'язків, при від'ємних Δ — з горизонтальних. Випадки $\Delta \rightarrow 1$ і $\Delta \rightarrow -1$ відповідають руйнуванню тільки вертикальних або горизонтальних зв'язків. Відзначимо, що точка досягнення режиму загальмованості для анізотропних систем трохи зменшується і складає $\theta_j \approx 0.219$ при $|\Delta| = 1$.

Ефективне координаційне число для зв'язаних елементів обчислювалось за формулою

$$Z = [n_1 + 2 \cdot n_2 + 3 \cdot n_3 + 4 \cdot n_4] / [n_1 + n_2 + n_3 + n_4], \quad (11)$$

де n_1, n_2, n_3, n_4 — кількість вузлів для всієї системи, з яких виходять 1, 2, 3 і 4 зруйновані зв'язки.

Величина усереднюється по всіх вузлах, з яких виходить хоча б один розірваний зв'язок. Для режиму RSA, $f \rightarrow -1$ маємо $Z \rightarrow 1$, тобто з кожного вузла виходить тільки один зв'язок. Для режиму Едена, $f \rightarrow 1$, маємо $Z \rightarrow 4$, що відповідає росту компактних кластерів зв'язків. Поблизу порога перколяції величина Z може перебувати в інтервалі $2 \leq Z < 4$. В точці перколяції $Z_p = Z(\theta = \theta_p)$.

Для ідентифікації різних кластерів і визначення точки перколяції використовувався алгоритм Хошена — Копельмана [48]. Розміри ґраток складали від $L = 20$ до $L = 100$ з кроком $\Delta L = 10$. Всі результати усереднювались по 1000 вимірів з досягненням похибки виміру точки перколяції $\leq 0.05\%$ (середньоквадратичні відхилення будь-яких вимірів не перевищували 0.1%).

Основні результати та їх обговорення

Для скінченних систем в точці перколяції величини θ_p і Z_p можуть істотно залежати від розміру системи. Скейлінгова залежність $\theta_p(L)$ для задачі вузлів на квадратній ґратці з періодичними граничними умовами досить детально вивчена в [49] випадку ізотропної системи ($\Delta = 0$). За аналогією з тим, як це зроблено в [49], для аналізу залежностей $\theta_p(L)$ і $Z_p(L)$ будемо використовувати звичайні скейлінгові співвідношення типу

$$\theta_p(L) = \theta_c + k_\theta L^{-1/\nu} \quad (12)$$

$$Z_p(L) = Z_c + k_z L^{-1/\nu}, \quad (13)$$

де θ_c і Z_c є значення порога перколяції та ефективного координаційного числа в цій точці за умови, що $L \rightarrow \infty$, k_θ і k_z є постійні, а $\nu = 4/3$ є експонента довжини кореляції (див. таблицю).

Приклади залежностей θ_p і Z_p від $L_s = L^{-1/\nu}$ для анізотропної системи з $\Delta = -0.6$ при різних значеннях коефіцієнта асоціації f приведено на рис. 1а, б. З цих залежностей можна зробити висновок про належність системи, що вивчається, до певного класу універсальності, а також провести оцінки величин θ_c і Z_c . Взагалі поведінка, що спостерігається для $\theta_p(L)$ і $Z_p(L)$, є досить складною й істотно залежить від параметрів f і Δ .

Наприклад, при $f = 0$ з ростом L

- θ_p зростає, а Z_p — спадає, для ізотропних систем, при $\Delta = 0$,
- θ_p зростає, і Z_p — зростає, при $\Delta > 0$,
- θ_p спадає, і Z_p — спадає, при $\Delta < 0$.

З наших досліджень випливає, що при не досить великих значеннях параметра асоціації, в інтервалі $-1 \leq f < 0.9$, тобто для систем з “відштовхуванням” елементів, або їх не дуже істотним “притяганням” і при всіх значеннях параметра асиметрії Δ , клас універсальності для даної моделі є тотожним з класом універсальності випадкової перколяції, для якої $\nu = 4/3$ (див., наприклад, прями 1—5 на рис. 1). Однак, при великих $f (\geq 0.99)$ починають спостерігатися досить значні порушення універсальності, й на залежностях $\theta_p(L_s)$ і $Z_p(L_s)$ при певних значеннях L можуть спостерігатися навіть максимуми (див., наприклад, залежності 8—9 на рис. 1).

Як можна пояснити таку аномальну поведінку? Розглянемо детальніше характер кореляцій, що існують для даного типу моделей скорельованої перколяції. Закон росту, що використовується в даних моделях, базується на локальних короткодійчих кореляціях між найближчими сусідами. Взагалі при $f \leq 0$ і не досить великих додатніх f в даному класі моделей можуть проявлятися тільки короткодійчі кореляції. Тому ми

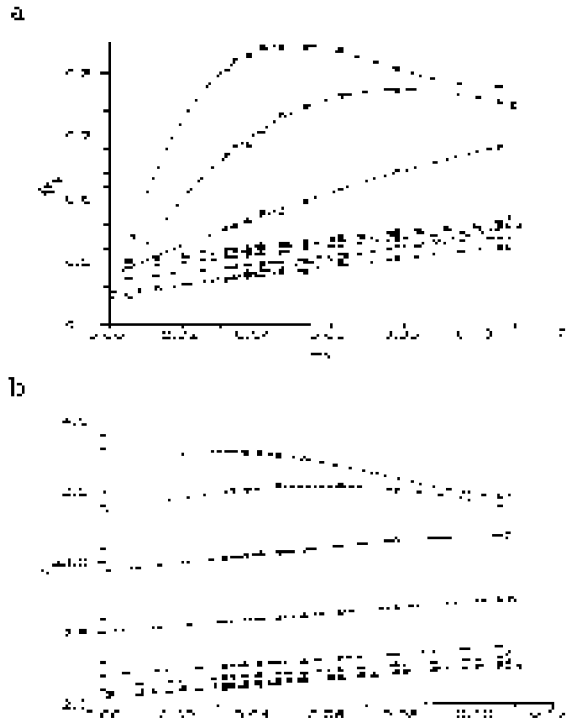


Рис. 1. Скейлінгові залежності порога перколяції $\theta_p(a)$ та ефективного координаційного числа $Z_p(b)$ (в точці перколяції) від $L_s = L^{-\nu}$ ($\nu = 4/3$ є експонента довжини кореляції для випадкової перколяції) для анізотропної системи з $\Delta = -0.6$ при різних значеннях коефіцієнта асоціації $f = 0(1)$, $0.25(2)$, $0.5(3)$, $0.75(4)$, $0.9(5)$, $0.99(6)$, $0.999(7)$, $0.9999(8)$, $0.99999(9)$. Знаком запитання (?) для кривих 8,9 підкреслена певна невизначеність оцінки θ_c і Z_c при великих значеннях f .

і спостерігаємо при $f < 0.9$ клас універсальності випадкової кореляції, оскільки згідно з висновками робіт [27—29,36,37] клас універсальності моделей з короткодійчими кореляціями не повинен відрізнятися од класу універсальності випадкової перколяції. Таким чином, тут можна виділити клас універсальності короткодійчих кореляцій, який спостерігається в інтервалі $-1 \leq f < 0.9$ і режим росту в цій області будемо називати *режимом короткодійчих кореляцій*.

При великих $f (\geq 0.99)$ у класі моделей, що вивчаються в цій роботі, спостерігається ріст деякої кількості великих компактних кластерів. При цих значеннях f починається інший режим росту кластерів, які в процесі збільшення θ можуть зростатися й утворювати неоднорідну сітку, в якій переплітаються області компактного росту та області відсутності кластерів. Цей режим будемо називати *режимом росту компактних кластерів*. Вище вже відзначалося, що при $f = 1$ взагалі спостерігається ріст тільки одного компактного кластеру і дана модель відповідає моделі Едена. Оскільки вірогідність виникнення зародка нового ізольованого кластеру визначається величиною $F = (1-f)/2$, то кількість компактних кластерів у системі N_c можна приблизно оцінити за формулою

$$N_c \approx 2L^2 F = L^2 (1-f), \quad (14)$$

де $2L^2$ є загальна кількість зв'язків в системі. Середня відстань між компактними кластерами λ дорівнює приблизно

$$\lambda \approx \frac{1}{\sqrt{1-f}}. \quad (15)$$

Наприклад, при $f = 0.9999$, $\lambda = 100$.

Масштаб λ визначає ступінь лакуарності для цієї системи і характеризує розмір компактних кластерів та пустих дірок. Таким чином, структура даної системи втрачає самоподібність та універсальність на масштабах $l < \lambda$.

Якої поведінки можна очікувати на великих масштабах $l \gg \lambda$ і яким є клас універсальності для *режиму росту компактних кластерів*? Якщо при $l \gg 1$ розглядати дану модель як модель випадкової перколяції, для якої будівними елементами є компактні кластери розміром λ , то клас універсальності цієї моделі також не буде відрізнятися од класу універсальності випадкової перколяції. Найявніші максимуми, що спостерігаються на рис. 1, якісно пояснюються проявом масштабу довжини, що визначається співвідношенням (15). Найпростіше таку поведінку можна пояснити при $f \rightarrow 1$, коли спостерігається ріст невеликої кількості компактних кластерів, розглядаючи залежність $\theta_p(L)$. При малих розмірах системи можуть істотно проявлятися флуктуації форми компактних кластерів та ефекти ширини

поверхневої зони [50]. Цей скейлінговий ефект призводить до того, що перколяція спостерігається при значно менших значеннях q_p , що характерні для великих систем, і при збільшенні L спостерігається збільшення q_p (скейлінг форми кластерів та ширини активної зони росту). На масштабах довжини $l > 1$ починає проявлятися універсальність, характерна для даної системи, тобто спостерігається звичайний перколяційний скейлінг. Якщо цій універсальності відповідає зменшення $\theta_p(L)$ при збільшенні L , як, наприклад, для системи, представленої на рис. 1а, то ми будемо спостерігати максимум на залежності $q_p(L)$. Положення цього максимуму визначається співвідношенням цих двох скейлінгових ефектів, але він приблизно спостерігається при $L \approx \lambda$. Наявність описаних вище двох скейлінгових ефектів утруднює точне визначення класу універсальності. З даних, представлених на рис. 1, ми можемо висловити припущення, що в режимі росту компактних кластерів клас універсальності починає змінюватись і залежати від значення параметра f . Вид кривих 7—9 на залежностях $\theta_p(L_s)$ (рис. 1а) відповідає збільшенню експоненти довжини кореляції ν відносно значення, характерного для випадкової кореляції $\nu = 4/3$. Взагалі при $f = 1$, при зростанні одного кластеру Едена при великих L величина $\theta_p = \pi/4$, тобто не залежить від L , що відповідає $\nu = \infty$. Збільшення ν при зростанні ступеня скорельованості росту або дальності скорельованості спостерігалось також у роботах [27—29,37]. Таким чином, зміна класу універсальності для нашої моделі є подібною до тієї, яка спостерігається в задачі дальнотіючої скорельованої перколяції.

Звичайно, точність визначення значень θ_c і Z_c при великих f ($f \rightarrow 1$) не є задовільною, і певна невизначеність оцінки θ_c і Z_c в цій області відображена знаком запитання (?) на рис. 1а, б. Більш точна оцінка θ_c і Z_c потребує проведення крупномасштабних досліджень для систем з $L \gg \lambda$, і це виходить за межі даної роботи.

Кореляційні залежності між θ_p і Z_p для систем з розмірами $L = 50, 100$ і ∞ (результати скейлінгової апроксимації) при різних значеннях f і Δ представлені на рис. 2. Для того, щоб не ускладнювати сприйняття, результати для систем з $L = 50, 100$ представлено у вигляді тільки усереднених кривих, а для системи з $L = \infty$ показані також обчислені точки. З отриманих даних можна дійти висновку, що існує істотна асиметрія між системами з $\Delta > 0$ і $\Delta < 0$. На перший погляд, існування такої асиметрії є дивним. Справді, системи з однаковим абсолютним значенням $|\Delta|$ і різними знаками Δ є абсолютно еквівалентними і відрізняються тільки тим, що для додатних Δ більшість зв'язків спрямовано вздовж вер-

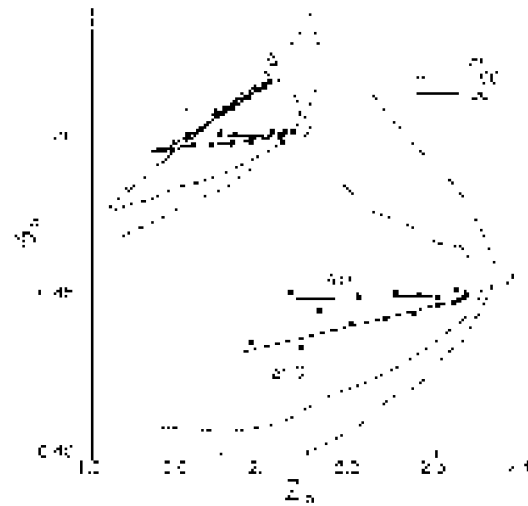


Рис. 2. Кореляційні залежності між θ_p і Z_p для систем з розмірами $L = 50, 100$ і ∞ при різних значеннях f і Δ . Дані, що відповідають певним сталим значенням $f = -0.9(1), 0(2), 0.9(3)$ з'єднані лініями. Точки відповідають даним комп'ютерних обчислень для випадку $L = \infty$, для якого величини $\theta_c = \theta_p$ і $Z_c = Z_p$ отримані за результатами скейлінгової апроксимації.

тикальної осі y , а для від'ємних Δ — вздовж горизонтальної осі x . Причина породження асиметрії в тому, що ми розглядаємо перколяцію тільки вздовж одного вибраного напрямку, в нашому випадку вздовж осі y . Найдужче така асиметрія проявляється для систем з малими розмірами.

Залежності θ_c і Z_c від Δ при постійних значеннях f приведені на рис. 3а, б. Криві $Z_c(\Delta)$ на рис. 3б проходять через максимум при $D = 0$, який є найбільш вираженим для скорельованого росту з “притяганням” ($f < 0$) і найменш вираженим для росту з “відштовхуванням” ($f < 0$). Таким чином в усіх випадках введення анізотропії призводить до зниження компактності кластерів у точці перколяції і до відповідного зростання ступеня їх розгалуженості. Криві $\theta_c(\Delta)$ (рис. 3а) також проходять через максимум при $\Delta = 0$, який, однак, не так явно виражений, як для кривих $Z_c(\Delta)$ (рис. 3б).

Хід залежностей $\theta_c(\Delta)$ можна пояснити, враховуючи той факт, що збільшення розгалуженості перколяційних кластерів повинно приводити до зменшення значення порога перколяції. Відхилення від умов ізотропного росту викликає збільшення розгалуженості, що пояснює максимум на кривих $\theta_c(\Delta)$, причому, цей максимум є найбільш вираженим для максимально розгалужених структур росту з “відштовхуванням” ($f < 0$).

На рис. 4 приведені узагальнені кореляційні залежності в координатах поріг перколяції (θ_p) — ефективно координаційне число (Z_p) за умови, що $L \rightarrow \infty$ при різних значеннях f і Δ . Розглянемо детальніше таку кореляційну залежність для ізотропної системи. При збільшенні параметра

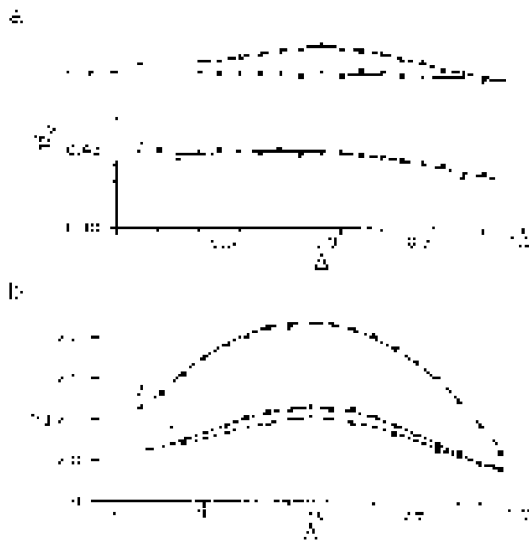


Рис. 3. Залежності порога перколяції θ_c (a) й ефективного координаційного числа Z_c (b) для нескінченної системи при $L = \infty$ від Δ при постійних значеннях $f = -0.9(1), 0(2), 0.9(3)$.

асоціації f , тобто при збільшенні ступеня скорельованості росту, спочатку спостерігається зменшення порога перколяції θ_c . Зменшення θ_c при зростанні ефективного координаційного числа Z_c можна пояснити, беручи до уваги зменшення ступеня розгалуженості кластерів при переході від режиму росту з “притяганням” ($f < 0$) до режиму росту з “відштовхуванням” ($f > 0$). Однак, при досить великих f і досягненні $Z_c \approx 2.5\text{—}2.7$, величина θ_c починає зростати, поки не досягає значення $\pi/4$, яке відповідає формуванню ідеального кругового кластеру Едена при $Z_c \approx 4.0$. На даний час ми не маємо певних фізичних міркувань, що змогли б пояснити зростання θ_c в інтервалі значень $Z_c \approx 2.5\text{—}4.0$.

Тут можна лише зауважити, що отримані вище дані із залежностей $\theta_c(Z_c)$ корелюють з результатами досліджень залежності порога перколяції θ_c від об’єму взаємодії, енергії і довжини зв’язності для моделі скорельованої перколяції взаємодіючих частинок [39—41]. Автори цих робіт показали, що величина θ_c знижується при збільшенні енергії міжчастинкової взаємодії, або при збільшенні ступеня кластеризації, але взагалі, в залежності від значення довжини зв’язності величина θ_c може збільшуватись або зменшуватись. Відзначимо також, що зміна характеру залежності θ_c від Z_c спостерігається при переході між різними режимами росту: *режимом*

Значення критичних експонент довжини кореляції ν , електропровідності t , параметра порядку β фрактальної вимірності перколяційного кластеру D для двовимірних ($d = 2$) та тривимірних ($d = 3$) систем [1, 2, 8, 9]

d	ν	t	β	D
2	4/3	$\approx 1.299(0.002)$	5/36 (≈ 0.139)	91/48 (≈ 1.896)
3	9/10	≈ 2	0.41	2.52

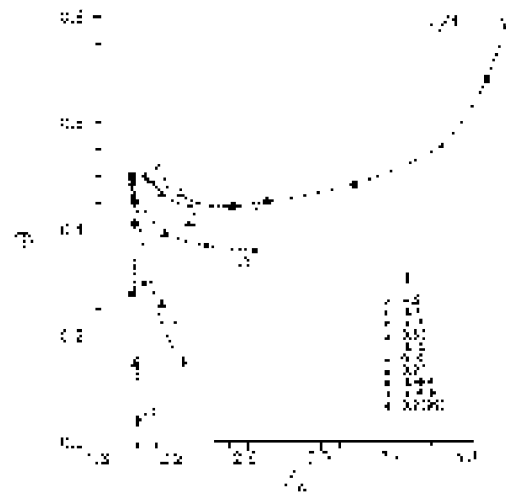


Рис. 4. Узагальнені кореляційні залежності в координатах поріг перколяції (θ_c) — ефективного координаційного числа (Z_c) для нескінченних систем, $L \rightarrow \infty$, при різних значеннях f і Δ . Числа біля символів відповідають значенням f , прямими лініями з’єднані символи, що відповідають однаковим значенням $\Delta = 0(1), -0.6(2), 0.9(3), 0.99(4), 0.9999(5)$.

короткодючих кореляцій і режимом росту компактних кластерів. При цьому, як показано вище, може відбуватись зміна класу універсальності.

Для анізотропних систем з $\Delta \neq 0$ існують певні максимальні значення $Z_c = Z_{c\text{max}}$, які не можуть бути перевищені. Ці максимальні значення звичайно спостерігаються при $f = 1$ і їх неважко оцінити за умови високих ступенів анізотропії $|\Delta| \rightarrow 1$. За цієї умови, скажімо, при $\Delta \rightarrow 1$ перколяційний кластер складається з переважно вертикальних суцільних ліній, які з’єднані поодинокими горизонтальними зв’язками. В місцях з’єднання горизонтальними зв’язками координаційне число дорівнює $z = 3$, і число таких вузлів дорівнює $2N_x$, а в інших N_y вузлах $z = 2$. Тут $N_x = \theta_x L^2$ і $N_y = \theta_y L^2$ є відповідно число горизонтальних і вертикальних зв’язків для даної задачі. Враховуючи визначення (10) і (11), ефективного координаційного числа $Z (= Z_{c\text{max}})$ можна оцінити за допомогою співвідношення

$$Z_{c\text{max}} \approx (2(\theta_y - 2\theta_x) + 3\theta_y) / (\theta_y + 2\theta_x) \approx 2 + (1 - \Delta) \quad (16)$$

або в загальному випадку $|\Delta| \rightarrow 1$,

$$Z_{c\text{max}} \approx 2 + (1 - |\Delta|). \quad (17)$$

Нагадуємо, що ця формула може бути використана лише за умови сильної анізотропії, і, наприклад, при $|\Delta| = 0.99$, координаційне число в точці перколяції не може перевищувати $Z_{c\text{max}} = 2.1$.

Саме така поведінка і спостерігається для сильно анізотропних систем (див. рис. 4). В цих випадках спостерігається тільки *режим короткодіючих кореляцій*, для якого характерним є зменшення θ_c при зростанні Z_c і не спостерігається переходу до *режиму росту компактних кластерів*. При великих Δ спостерігається дуже різке зниження перколяційного порога θ_c при збільшенні ступеня асоціації, що якісно відповідає результатам інших спостережень для анізотропних систем [42, 43].

Висновки

В даній роботі вивчено широкий клас перколяційних моделей скорельованого анізотропного росту, котрі охоплюють класичну модель випадкової послідовної адсорбції та модель Едена як граничні випадки. Дослідження проведені для задачі зв'язків на квадратній ґратці. Параметр f скорельованості або асоціації визначає ступінь взаємодії між елементами росту і додатні значення f відповідали “притягання” між зв'язками, а від'ємні — відштовхуванню. В залежності від значень параметра f встановлено існування двох різних режимів росту кластерів: *режиму короткодіючих кореляцій* (при $-1 \leq f < 0.9$) і *режиму росту компактних кластерів* (при $f > 0.9$). Складна скейлінгова поведінка для останнього режиму обумовлена проявом ново-

го масштабу довжини для цієї системи, який характеризує розмір компактних кластерів і пустих дірок. Для режиму короткодіючих кореляцій клас перколяційної універсальності збігається з класом універсальності випадкової перколяції. Висловлено припущення, що для режиму росту компактних кластерів відбувається зміна класу універсальності, і ця поведінка подібна до тієї, що спостерігається в задачі дальнодіючої скорельованої перколяції. Для режиму короткодіючих кореляцій характерним є зменшення θ_c при зростанні ефективного координаційного числа Z_c , а для режиму росту компактних кластерів спостерігається зворотна поведінка. Для систем з сильною анізотропією спостерігається дуже різке зниження перколяційного порога θ_c при збільшенні ступеня асоціації f . Ми вважаємо, що запропонована модель може бути цінною при визначенні перколяційних характеристик моделей скорельованого росту для реальних фізичних систем, наприклад, моделі розвитку електропробою.

Подяки

Автори висловлюють глибоку подяку S. C. van der Marck за надану можливість ознайомлення з результатами його останніх робіт по моделях перколяції та алгоритмом розрахунку θ_p , що використовувався в роботах [21—23].

Література

1. D. Stauffer and A. Aharony. Introduction to Percolation Theory, 2nd ed. (Taylor and Francis, London, 1994).
2. M. Sahimi. Applications of Percolation Theory (Taylor and Francis, London, 1994), M. Sahimi. Flow phenomena in rocks: From continuum models to fractals, percolation, cellular automata and simulated annealing. Rev. Mod. Phys., vol. 65, p. 1393, 1993.
3. Statistical Models for the Fracture of Disordered Media, edited by H. J. Herrmann and S. Roux (North-Holland, Amsterdam, 1990).
4. O. Pla, R. Harcia-Molina, F. Guinea, E. Louis. Properties of elastic percolating networks in isotropic media with arbitrary elastic constants., Phys. Rev. B 41, 11449—11456 (1990).
5. P. M. Duxbury, P. D. Beale, C. Moukarzel. Breakdown of two-phase resistor networks. Phys. Rev. B 51, N 6, 3476—3488 (1995).
6. C. G. Batrouni, A. Hansen, B. Larson. Current distribution in the three-dimensional random resistor network at the percolation threshold. Phys. Rev. E 53, N 3, 2292—2297(1996). (LANL E-print: cond-mat/9508041).
7. M. Acharyya, B. K. Chakrabarti. Growth of breakdown susceptibility in random composites and the stick-slip model of earthquakes. Prediction of dielectric breakdown and other catastrophes. Phys. Rev. E 53, N1, 140—147 (1996).
8. M. Sahimi. Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock (VCH, Weinheim, 1995).
9. R. Hilfer. Transport and relaxation phenomena in porous media, Adv. Chem. Phys., 42, 299 (1996).
10. S. Feng, B. Halperin and P. Sen. Transport properties of continuum systems near the percolation threshold, Phys. Rev. B, vol. 35, p. 197, 1987.
11. S. B. Lee. Universal behaviour of the amplitude ration of percolation susceptibilities for off-lattice percolation models. Phys. Rev. E 53, N 4, 3319—3329 (1996).
12. A. Okazaki, K. Maruyama, K. Okumura, Y. Hasegawa, S. Miyazima. Critical exponents of a two dimensional continuum percolation system. Phys. Rev. E 54, N 4, 3389—3392 (1996).
13. Е. Федер. Фракталы, М.: Мир, 1991, 260с.
14. H. Gould and J. Tobochnik. An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems Part 2 (Addison-Wesley, New York, 1988).
15. P. J. Flory. Principles of Polymer Chemistry (Cornell University Press, Ithaca, 1953).
16. S. Galam, A. Mauger. J. Appl. Phys. 75(10), 5526 (1994).
17. S. Salam, A. Mauger. Universal formulas for percolation thresholds. Phys. Rev. E. 1996. 53, N3. P. 2177—2181. (LANL E-print: cond-mat/9606081).
18. S. Galam, A. Mauger. Reply to the comment on “Universal formulae for percolation thresholds” Phys. Rev. E 55, 1230—1232 (1997). (LANL E-print: cond-mat/9702108).
19. S. Galam, A. Mauger. Universal formulas for percolation thresholds. II. Extension to anisotropic and aperiodic lattices. Phys. Rev. E 56, N 1, 322—325 (1997). (LANL E-print: cond-mat/9706304).
20. S. Galam, A. Mauger. Topology invariance in percolation thresholds, Eur. Phys. B1, N 1, 255—258(1998).
21. S. C. van der Marck. Comment on “Universal formulae for percolation thresholds”. Phys. Rev. E 55, 1228—1229 (1997).
22. S. C. van der Marck. Percolation threshold and universal formulas. Phys. Rev. E 55, N 2, 1514—1517 (1997).

23. *S. C. van der Marek*. Percolation threshold of the duals of the face-centered-cubic, hexagonal-close-packed, and diamond lattices. *Phys. Rev. E* 55, N 6, 6593—6597 (1997).
24. *F. Babalievski*. Comment on “Universal formulae for percolation thresholds”, LANL E-print: cond-mat/9711164.
25. *S. C. van der Marek*. “Comment on “Topology invariance in percolation thresholds”, *Eur. Phys.* (to be published, LANL E-print: cond-mat/9802187).
26. *D. Stauffer* 1979. Scaling theory of percolation clusters. *Phys. Reports*. 54: 1—74.
27. *A. Weinrib, B. I. Halperin*. *Phys. Rev. B* 27, 413 (1983).
28. *A. Weinrib*. *Phys. Rev. B* 29, 386 (1984).
29. *S. Prakash, S. Havlin, M. Schwartz, H. E. Stanley*. *Phys. Rev. A* 46, R1724 (1992).
30. *H. E. Stanley*. Introduction to phase transition and critical phenomena, Clarendon Press, Oxford, 1971.
31. *N. Protavas, M. Haataja, E. Seppala, S. Majjaniemi, J. Asrrom, M. Alava, T. Ala-Nissila*. Growth, percolation, and correlations in disordered fiber networks. LANL E-print: cond-mat/9611046.
32. *H. S. Choi, J. Talbot, G. Tarjus, P. Viot*. Percolation and structural properties of particle deposits. *Phys. Rev. E* 51, N 2, p. 1353—1363 (1995).
33. *A. R. Mehrahi, H. Rassamdana, M. Sahimi*. Characterization of long-range correlations in complex distributions and profiles. *Phys. Rev. E* 56, N 1, 712—719 (1997).
34. *P. J. M. Bastiaansen, H. J. F. Knops*. Correlated percolation and the correlated resistor network, LANL E-print: cond-mat/9610088.
35. *H. A. Makse, S. Havlin, H. E. Stanley*. Modeling Morphology of Cities and towns (LANL E-print: cond-mat/9504111).
36. *M. Sahimi, S. Mukhopadhyay*. Scaling properties of a percolation model with long-range correlations. *Phys. Rev. E* 54, N 4, 3870—3880 (1996).
37. *U. Bauerschafer, M. Schulz*. Bond percolation on a dilute lattice with short and long range correlations: numerical simulation. *Phys. Rev. E* 54, N 2, 1442—1448 (1996).
38. *Н. И. Лебовка, В. В. Манк, И. И. Марцин, М. И. Бажал, М. П. Купчик*. Моделирование электропробоя гетерогенных систем. Вибротехнология, ч. 2, с. 31—39, Одесса (1996).
39. *A. L. Bug, S. A. Safran, G. S. Grest, I. Webman*. Do interactions raise or lower a percolation threshold? *Phys. Rev. Lett.* 55, 1896—1898 (1985), *S. A. Safran, I. Webman, G. S. Grest*. *Phys. Rev. A* 32, 506 (1985).
40. *B. D. Silberman, D. E. Platt*. Percolation of a simulated metallic film on a porous substrate: The copper-polyimide interface. *Phys. Rev. E* 49, N 2, p. 1028—1039 (1994).
41. *A. Drory, I. Balberg, B. Berkowitz*. Random-adding determination of percolation thresholds in interacting systems. *Phys. Rev. E* 49, N 2, p. R949—R952 (1994), *A. Drory, I. Balberg, B. Berkowitz*, Application of the central-particle-potential approximation for percolation in interacting systems. *Phys. Rev. E* 52, N 4, p. 4482—4494 (1995).
42. *I. Balberg, N. Binenbaum*. Computer study of the percolation threshold in two-dimensional anisotropic system of conducting sticks. *Phys. Rev. B* 28, N 7, p. 3799—3812 (1983).
43. *T. Hoffman, J. Martinez-Salazar, P. Herrero, J. Petermann*. Percolative behavior of an anisotropic two-dimensional network: Growth of tellurium onto an oriented polymer film, *Phys. Rev. E* 55, N3, p. 1858—1863 (1997).
44. *И. С. Гульий, Н. И. Лебовка, В. В. Манк, М. П. Купчик, М. И. Бажал, А. Б. Матвиенко, А. Я. Папченко*. Научные и практические принципы электрической обработки пищевых продуктов и материалов. // УкрИНТЭИ.— 1994, 60 с.
45. *N. I. Lebovka, V. V. Mank*. Phase diagram and kinetics of inhomogeneous square lattice brittle fracture. *Physica A*. 1992, 181 A, 346—363.
46. *M. Eden*. In Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical, Statistics and Probability, edited by *J. Neyman* (University of California Press, Berkeley, 1961), Vol. 4, p. 223.
47. *R. Dickman, J.-S. Wang, I. Jensen*. *J. Chem. Phys.* 94, 8252 (1991).
48. *J. Hoshen and R. Kopelman*. Percolation and cluster distribution. 1. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Phys. Rev. B* 14, 3488 (1976), *F. Babalievski*. Cluster counting: the Hoshen-Kopelman algorithm vs spanning tree approaches. *Intern. J. Mod. Phys. C* (to be published, LANL E-print: cond-mat/9711304).
49. *M. S. Watanabe*. Percolation with a periodic boundary condition: The effect of system size for crystallization in molecular dynamics. *Phys. Rev. E* 51, N 5, p. 3945—3951 (1995).
50. *М. Плишке, З. Рац*. Активная зона в модели ДОА и в модели Идена. В кн.: Фракталы в физике /Под ред. Л. Пьетронеро и Э. Тозатти. М.: Мир, 1988, с. 301—309.

N. I. Lebovka, R. M. Melnyk, M. P. Kupchuk

PERCOLATION THRESHOLD FOR CORRELATED GROWTH MODEL

Growth and percolation in a correlated network of bonds are studied. We consider a square lattice of size $L \times L$, where L varies from $L = 20$ to 100 with periodic boundary conditions in the x and y directions. The bonds clustering is controlled by a parameter f . For $f = 1$ (case of bonds attraction), the single cluster of bonds can grow, and this model is identical to that of Eden model. For $f = -1$ (case of bonds repulsion), the fine-meshed network is observed, and this model is identical to that of random sequential adsorption (RSA) model with excluded nearest neighbours. The degree of anisotropy is introduced as $\Delta = (\theta_y - \theta_x)/(\theta_y + \theta_x)$, where θ_x, θ_y are the fraction of bonds along the x and y axes, respectively. The scaling relations of percolation threshold θ_c are studied at different values of f and Δ . We discuss the correlations between θ_c and mean coordination numbers of bonds in a cluster, Z_c , at the percolation threshold for the limit of infinite system size $L \rightarrow \infty$.