

А. Эфрос

Что такое теория протекания

Два ученых мужа кромсают экранную сетку

Не так уж часто в современных научных журналах появляются отчеты об экспериментах, объектом которых является кусок обыкновенной экранной сетки*), купленный с несколько необычной целью в ближайшем магазине скобяных изделий. И хотя статья американских физиков Ватсона и Лиса, появившаяся в журнале «Физикл Ревью» («Физическое обозрение») в 1974 году, была далеко не первой работой в области теории протекания, наш рассказ начнется именно с нее.

*) Прямое назначение экранной сетки состоит в том, чтобы защищать различную радиоаппаратуру от электрических помех.

Кусок сетки, с которым работали Ватсон и Лис, имел квадратную форму и содержал $137 \times 137 = 18769$ узлов с расстоянием $\frac{1}{4}$ дюйма (6,35 мм) между соседними узлами. Ученые припаяли к двум противоположным сторонам квадрата медные электроды и включили сетку в электрическую цепь (рис. 1, а), чтобы измерить ее электропроводность (напомним, что электропроводность — величина, обратная сопротивлению). Затем они стали вырезать узлы из этой сетки (рис. 1, б) и изучать электропроводность в зависимости от доли вырезанных узлов.

Каждый новый узел, который нужно вырезать, выбирался среди невырезанных ранее узлов случайно. В принципе для этого можно было бы написать координаты каждого узла на отдельной бумажке, положить все бумажки в шапку, хорошенько перемешать и вынимать по одной. Однако при большом количестве узлов такая процедура (как и другие механические способы жеребьевки) крайне неудобна, и потому ученые пользовались случайной по-

следовательностью координат, составленной ЭВМ.

Ясно, что по мере увеличения числа вырезанных узлов электропроводность сетки уменьшалась. Более того, если отношение числа невырезанных узлов к полному числу узлов (137^2) обозначить x , то при некотором значении x , которое в дальнейшем мы будем называть пороговым значением и обозначать x_c , электропроводность обращалась в нуль. Это происходило, когда перерезался последний путь, связывающий левый и правый электроды. Определение величины x_c и являлось одной из задач эксперимента Ватсона и Лиса. Они нашли, что $x_c = 0,59$.

Естественно возникает вопрос: является ли величина x_c случайной и невоспроизводимой от опыта к опыту, или она вполне определенная?

Казалось бы, повторив эксперимент с другим куском экранной сетки и воспользовавшись другой случайной последовательностью вырезаемых узлов, мы получим иное значение x_c . Этот ответ подсказывает здравый смысл: поскольку на каждом этапе вся конфигурация выре-

занных и «уцелевших» узлов во втором эксперименте несколько не похожа на то, что было в первом, разрыв последнего пути, соединяющего электроды, тоже должен произойти при другом значении x , и соответственно x_c будет иное. Но как сильно будут отличаться друг от друга значения x_c , полученные в разных экспериментах?

Допустим, что мы взяли много кусков экранной сетки, содержащих одно и то же число узлов, и для каждого из них определили значение x_c . Это позволяет нам определить среднее значение величины x_c . Обозначим его $\bar{x}_c(N)$ (в знак того, что оно зависит от исходного числа узлов N). Если число кусков было Q , то, очевидно,

$$\bar{x}_c(N) = \frac{x_{c1} + x_{c2} + \dots + x_{cQ}}{Q} = \frac{\sum_{i=1}^Q x_{ci}}{Q}.$$

Для того чтобы определить, насколько в среднем отличаются значения x_{ci} , полученные в разных экспериментах, от $\bar{x}_c(N)$, сделаем следующее. Найдем сумму выражений вида $(x_{ci} - \bar{x}_c(N))^2$ (то есть сумму квадратов отклонений x_{ci} от $\bar{x}_c(N)$) и поделим эту сумму на Q . Величина

$$\delta(N) = \frac{\sum_{i=1}^Q (x_{ci} - \bar{x}_c(N))^2}{Q}$$

представляет собой среднее значение квадрата отклонения x_{ci} от $\bar{x}_c(N)$ при заданном N . Эту величину называют дисперсией. Величина же $\sqrt{\delta(N)}$ и характеризует разброс значений x_{ci} , полученных в серии экспериментов с сетками, содержащими N узлов. (Заметим, что если бы мы стали складывать не квадраты отклонений, а первые степени, то есть выражения вида $x_{ci} - \bar{x}_c(N)$, то для среднего значения отклонения мы получили бы нуль, поскольку $x_{ci} - \bar{x}_c(N)$ имеют как положительные, так и отрицательные значения.)

Итак, для того чтобы оценить «степень случайности» величины x_c , надо проследить за поведением величины $\delta(N)$.

Расчеты показывают, что с увеличением числа узлов сетки N величина $\delta(N)$ резко (по степенному закону)

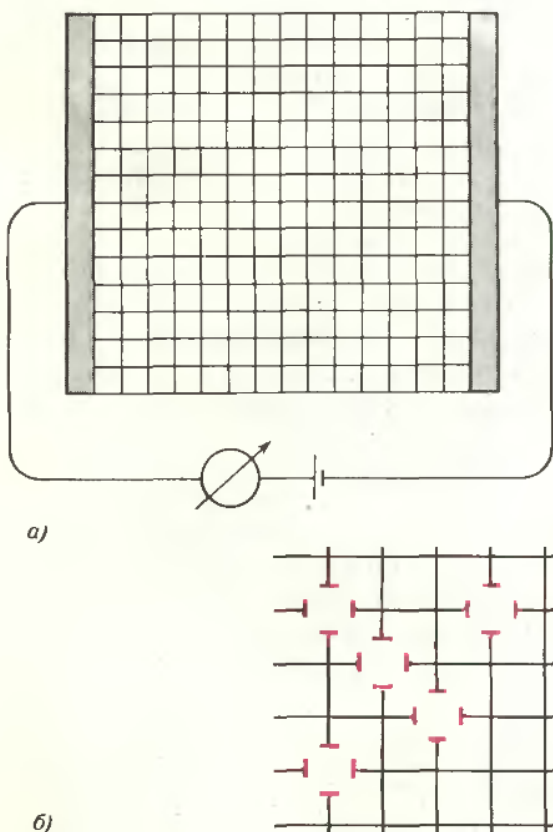


Рис. 1.

уменьшается. Это значит, что для сеток с большим числом узлов результаты отдельных экспериментов будут мало отличаться друг от друга. Более того, при неограниченном увеличении N величина $\bar{x}_c(N)$ стремится к определенному пределу.

Дело в том, что в достаточно большой сетке встречаются всевозможные сочетания целых и вырезанных узлов, так что роль случайности становится малой. Поэтому предельное значение x_c , соответствующее бесконечно большой сетке, является вполне определенной величиной. Именно это предельное значение и называется, на самом деле, порогом протекания. Ради него и ставился эксперимент. А иначе зачем было брать сетку, содержащую почти 19000 узлов? Можно было бы взять сетку 2×2 !

Кстати, для сетки 2×2 задача просто решается и без эксперимента. Расчет показывает, что для сетки с четырьмя узлами среднее значение $\bar{x}_c(4)$ порога протекания равно $5/12$, что довольно сильно отличается от результата обсуждавшегося выше эксперимента (0,59).

Возможно, у кого-нибудь из вас хватит терпения найти $x_c(9)$. Но я думаю, что с $\bar{x}_c(16)$ не справится никто. А ведь это всего лишь сетка 4×4 .

Точное значение x_c , соответствующее бесконечной сетке, до сих пор неизвестно. Задачу эту решают при больших (но конечных!) значениях N с помощью ЭВМ или с помощью экспериментов, похожих на описанный выше (их техника может быть весьма разнообразной). По изменению $\bar{x}_c(N)$ с изменением N можно оценить, насколько близок полученный результат к искомому предельному значению x_c .

Сопоставление результатов, полученных разными методами, позволяет думать, что с точностью до второго знака после запятой $x_c = 0,59$, то есть равно тому значению, которое было получено для сетки с $N = 137^2$ (хотя заранее совсем не очевидно, что это значение N «достаточно большое»). Разумеется, x_c можно бесконечно уточнять за счет следующих знаков после запятой.

Задача, сформулированная в этом разделе, называется задачей узлов (в знак того, что именно узлы играют роль случайных элементов). К ней сводится целый ряд научных проблем, одну из которых мы рассмотрим в следующем разделе.

Ферромагнетик с примесями

Вероятно, многие из вас знают, как устроены постоянные магниты (такие, например, как сталь), чем объясняются их магнитные свойства. Атомы таких веществ обладают магнитными моментами, так же как контур с током или магнитная стрелка. Согласно представлениям классической физики, магнитный момент контура с током равен произведению силы тока на площадь, ограниченную контуром; вектор магнитного момента перпендикулярен плоскости контура, а его направление определяется правилом буравчика.

Если про частицу или тело говорят, что они обладают магнитным моментом, то это значит, что частица или тело создают вокруг себя магнитное поле, силовые линии которого на расстояниях, больших по сравнению с геометрическими размерами тела, имеют такую же форму, как силовые линии магнитного поля петли с током или стрелки компаса.

Магнитный момент атома частично связан с элементарным электрическим током, возникающим при движении электронов по орбитам (орбитальный магнитный момент). Кроме того, квантовая механика приписывает каждому электрону в атоме собственный магнитный момент, величина которого не зависит от характера движения электрона (его называют спиновым магнитным моментом).

В твердом теле магнитные моменты соседних атомов взаимодействуют друг с другом. В некоторых веществах это взаимодействие таково, что магнитные моменты стремятся ориентироваться параллельно друг другу. Такие вещества называют ферромагнитными.

При низких температурах «желание» магнитных моментов выстроиться параллельно друг другу удовлетворяется, вследствие чего

возникает суммарный магнитный момент $M = \mu N$, где N — число атомов в образце, а μ — магнитный момент одного атома. Важно, что магнитный момент, отнесенный к единице объема, не зависит от объема и равен $M = \mu/v_0$, где v_0 — объем, приходящийся на один атом. Величина M называется спонтанной намагниченностью (слово «спонтанная» означает «самопроизвольная», то есть возникающая не под действием внешнего поля, а сама по себе).

Тепловое движение разрушает магнитный порядок, и потому существует критическая температура, называемая температурой Кюри, выше которой спонтанная намагниченность равна нулю. Для железа, например, температура Кюри составляет 770°C . При более высоких температурах железо не может быть ферромагнитным.

Рассмотрим теперь вещество, представляющее твердый раствор (смесь) магнитных и немагнитных (не имеющих магнитного момента) атомов. Это кристалл, в узлах которого располагаются магнитные или немагнитные атомы, причем их расположение оказывается не упорядоченным, а совершенно случайным. Обозначим x относительную концентрацию (долю) магнитных атомов и выясним, при всех ли значениях x существует спонтанная намагниченность, то есть вещество является ферромагнетиком.

Допустим, что взаимодействие между магнитными моментами атомов убывает с расстоянием так быстро, что учитывать нужно лишь взаимодействие ближайших, непосредственных, соседей. Это значит, что если два магнитных атома стоят рядом, то их моменты обязательно параллельны, но если между ними оказался хотя бы один немагнитный атом, то моменты могут быть направлены произвольно: они уже «ничего не знают» друг о друге.

Введем некоторые определения. Будем называть два магнитных атома связанными друг с другом либо если они стоят рядом, либо если они соединены друг с другом цепочкой из стоящих рядом магнитных атомов (рис. 2, а). Совокупность связанных атомов принято называть кластером

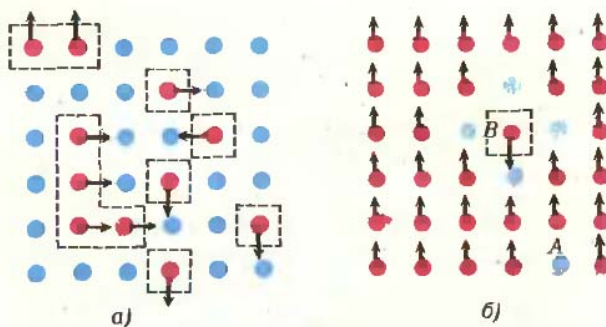


Рис. 2. Магнитные атомы обозначены красными кружочками, немагнитные — синими. Штриховые линии — границы кластеров.

(от английского слова «cluster», что в переводе означает «гроздь», «кисть»).

Предположим, теперь, что магнитных атомов очень мало ($x \ll 1$). Естественно, что при этом они, в основном, располагаются по одиночке. Кластер из двух магнитных атомов представляет собой редкое событие, из трех атомов — еще более редкое и т. д.

Благодаря магнитному взаимодействию магнитные моменты связанных атомов ориентированы в одну сторону. Таким образом, каждый кластер обладает результирующим магнитным моментом, пропорциональным числу атомов в кластере. С другой стороны, мы договорились, что магнитные атомы, не являющиеся ближайшими соседями, не взаимодействуют друг с другом. Поэтому не взаимодействуют друг с другом атомы, принадлежащие разным кластерам. Вследствие этого ориентация магнитных моментов, принадлежащих разным кластерам, оказывается произвольной (см. рис. 2, а), так что средний момент всех кластеров равен нулю.

Итак, мы получили, что при малой концентрации магнитных атомов спонтанная намагниченность отсутствует.

Теперь рассмотрим случай, когда почти все атомы — магнитные. Очевидно, что небольшая примесь немагнитных атомов не уничтожает спонтанной намагниченности, а только несколько уменьшает ее. Обсудим этот вопрос на языке кластеров. При $x=1$ все N атомов принадлежат одному кластеру. Если x немного отли-

чается от единицы, то часть атомов выпадает из этого кластера. Это происходит потому, что, во-первых, некоторые атомы замещаются немагнитными (атом *A* на рисунке 2, б), а во-вторых, некоторые магнитные атомы образуют изолированные кластеры со своим направлением магнитного момента (атом *B* на рисунке 2, б). Тем не менее при значениях x , близких к единице, сохраняется единый кластер, пронизывающий всю решетку, сколь бы велика она ни была. Этот кластер принято называть бесконечным кластером.

Разумеется, понятие «бесконечный кластер» (в дальнейшем мы будем для краткости писать б. к.) приобретает строгий смысл лишь для бесконечной системы. Для системы с конечным числом атомов понятие б. к. имеет следующий смысл. Возьмем серию образцов с одним и тем же полным числом атомов N и со случайно расположенными магнитными и немагнитными атомами. Пусть доля магнитных атомов во всех образцах равна x . Выберем в каждом из образцов кластер, в котором число магнитных атомов максимально. Усредним это число по всем образцам серии и обозначим полученное среднее значение числа магнитных атомов в максимальном кластере $N_{\text{к. макс}}$. Это число зависит от N , однако при безграничном увеличении N отношение $N_{\text{к. макс}}/N$ стремится к определенному пределу:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (N_{\text{к. макс}}/N) = P(x).$$

При достаточно большом числе атомов N доля атомов, принадлежащих самому большому кластеру, то есть величина $P(x)$, не зависит от N и определяется только относительной концентрацией магнитных атомов x . Если при данном x величина $P(x)$ отлична от нуля, то это означает, что при безграничном увеличении числа атомов в системе число атомов в самом большом кластере безгранично растет. Поэтому и говорят о существовании в системе при данном x бесконечно большого кластера.

Отсутствие б. к. проявляется в том, что при заданном x значение $P(x)$ равно нулю.

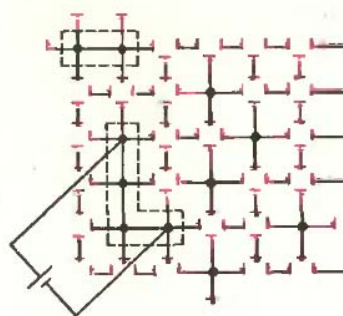


Рис. 3.

Итак, мы получили, что в системе с большим числом атомов при достаточной относительной концентрации магнитных атомов x определенная доля этих атомов принадлежит одному кластеру и имеет определенное направление магнитных моментов. Это означает, что существует спонтанная намагниченность, равная $M \cdot P(x)$.

Если вспомнить, что при малой относительной концентрации x есть только кластеры, состоящие из малого числа атомов (имеющие разные направления магнитных моментов), то мы приходим к выводу, что существует критическая относительная концентрация x_c , при которой возникает б. к., причем $0 < x_c < 1$. При этой же концентрации появляется спонтанная намагниченность. А теперь вернемся к задаче об электропроводности. Ее также легко сформулировать на языке кластеров. Нужно только во всех определениях произвести формальную замену «магнитный атом» —> «невыврезанный узел».

Кластер из невыврезанных узлов обладает тем свойством, что если к любой паре узлов, из которых он состоит, приложить разность потенциалов, то потечет электрический ток (рис. 3). Если $x < x_c$, то в системе есть только кластеры из конечного числа узлов, и потому при увеличении размеров системы ток через боковые электроды рано или поздно обязательно прервется. Если же $x > x_c$, то в очень большой системе на боковых гранях обязательно окажутся узлы, принадлежащие б. к. Этот б. к. и обеспечит отличную от нуля и не зависящую от размеров системы электропроводность $\sigma(x)$.

Задача об электропроводности формулировалась нами для плоской сетки; однако ясно, что ее легко поставить и для куба, к двум противоположным граням которого припаяны электроды. В задаче о ферромагнетике наши рассуждения относились в равной мере и к сетке, и к кубу. Таким образом, с точки зрения критической концентрации x_c задача об электропроводности сетки и задача о примесном ферромагнетике — это одна и та же задача. Ее называют задачей узлов.

В заключение этого раздела еще раз подчеркнем, что основные понятия теории протекания, такие как порог протекания, бесконечный кластер и т. д., приобретают четкий характер лишь в применении к бесконечно большой системе. В любой конечной системе порог протекания «размыт»; при повторении эксперимента результаты воспроизводятся лишь с определенной точностью, само определение порога становится неоднозначным. Например, в эксперименте с проводящей сеткой мы могли бы назвать порогом протекания то значение x , при котором возникает протекание сверху вниз, а не слева направо, или минимальное значение x , при котором существует протекание и сверху вниз, и слева направо. В достаточно большой системе разница между всеми этими определениями стирается, и порог протекания становится вполне определенной величиной.

Заметим, что повышенная чувствительность к размерам системы есть общее свойство всех так называемых критических явлений. Так, температура Кюри, при которой исчезает ферромагнетизм, в конечной системе всегда немного «размазана» по тем же причинам, что и порог протекания. Следует, однако, иметь в виду, что фактически размер системы важен, только если мы пытаемся искусственно моделировать критическое явление (например, с помощью экранной сетки). Реальную же макроскопическую систему практически всегда можно считать бесконечной. Ведь один кубический сантиметр вещества содержит примерно 10^{22} атомов!

Другие решеточные задачи

В предыдущих разделах рассматривалась решеточная задача узлов. Теперь мы объясним, в чем состоит задача связей. Представьте себе, что в эксперименте с экранной сеткой мы не будем трогать узлы, а будем разрезать проволоочки (связи), которыми эти узлы соединены (рис. 4). Обозначим через x долю неразрезанных проволоочек. Тогда снова можно поставить вопрос о критической доле x_c , при которой прерывается ток в очень большой сетке с металлическими контактами на боках. Эту задачу можно сформулировать и на кластерном языке, считая, что узлы связаны друг с другом, если они соединены цепочкой из неразрезанных проволоочек.

Задача узлов и задача связей кажутся очень похожими. Однако они не тождественны. Эти задачи могут быть сформулированы и для решеток более сложных, чем квадратная и кубическая. При этом предполагается, что каждый узел решетки может быть связан со всеми узлами, которые являются его ближайшими соседями. Число ближайших соседей зависит от типа решетки, и потому пороги протекания меняются от решетки к решетке. Но на любой решетке порог протекания в задаче связей не больше порога протекания в задаче узлов.

Задача связей на простой квадратной решетке решается точно; порог протекания $x_c = 1/2$ (он меньше порогового значения $x_c = 0,59$ в задаче узлов на такой же решетке). Точные решения существуют и для некоторых других двумерных (плоских) решеток. Для трехмерных (объемных) решеток пока не найдено ни одного точного решения. Такие трех-

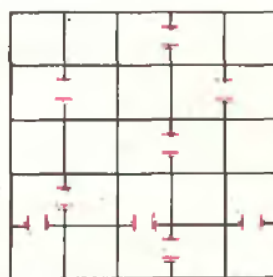


Рис. 4.

будет возможным? Иными словами, до какой высоты должен опуститься уровень воды, чтобы исчез водный путь, пересекающий Кавказский хребет с юга на север? (Разумеется, кораблю разрешается лавировать между выступающими из воды вершинами.)

Эта задача (при условии, что горная система имеет достаточно большую протяженность во всех направлениях) также является задачей теории протекания, только сформулированной не на решетке, а в непрерывном пространстве. Искомый уровень воды называется уровнем протекания.

С помощью представлений об уровне протекания описывается, например, переход диэлектрик — металл, происходящий в полупроводниках с примесями при увеличении концентрации электронов. Дело в том, что примеси в полупроводниках расположены случайно и могут быть заряженными. Вследствие этого в некоторых областях преобладает положительный заряд, в некоторых — отрицательный. Добавляемые в систему электроны собираются в областях с положительным зарядом, образуя там нечто вроде озер или капель. Области, где возникают электронные капли, обладают высокой электропроводностью. Однако если концентрация электронов в системе мала, то эти капли не связаны друг с другом. Между ними находятся области с очень низкой электропроводностью, так что результирующая электропроводность полупроводника оказывается ничтожно малой. Положение резко меняется, когда концентрация электронов увеличивается настолько, что электронные капли, расширяясь, начинают соприкасаться друг с другом или соединяться посредством узких электронных каналов. При некоторой критической концентрации появляется возможность пересечь весь полупроводник, двигаясь только по областям, заполненным электронами. Тогда электропроводность резко возрастает. Это явление и называют переходом диэлектрик — металл. Для определения критической концентрации нужно решить задачу теории протекания, ана-

логичную задаче о водном пути через горную систему.

Можно перечислить самые разнообразные применения теории протекания: проникновения жидкости в пористое тело (каждая пора имеет свой диаметр, и из-за капиллярности жидкость проходит ее лишь при определенном давлении; нужно найти критическое давление, при котором жидкость протекает на очень большое расстояние по системе случайных пор), разрушение горных пород (от старости или от нагрузки образуются микротрещины, которые, сливаясь, раскалывают камень), различные модели перехода металл — диэлектрик, объяснение аномальных свойств переохлажденной воды и т. д.

Попытаемся теперь сформулировать, что общего между всеми этими задачами и что, собственно, является предметом теории протекания. Это сделать довольно сложно. Я бы сказал, что теория протекания занимается связностью очень большого (макроскопического) числа элементов при условии, что связь каждого элемента со своими соседями является величиной случайной, но полученной определенным способом (например, с помощью бросания монетки). Важно, что выработанный с помощью этого способа набор связей должен быть зафиксирован и не может меняться в процессе решения задачи.

Следует еще заметить, что теория протекания занимается не только отысканием пороговых значений, но и (в гораздо большей степени) законами, определяющими поведение различных величин вблизи порога. Если пороговые значения являются специфическими для каждой задачи, то законы, по которым обращаются в нуль такие функции как $P(x)$ в задаче о примесном ферромагнетике или электропроводность в задаче о сетке, оказываются универсальными для всех задач теории протекания. Это, пожалуй, самый интересный круг вопросов теории протекания, но рассказ о нем должен быть длинным, и он выходит за рамки этой статьи.

Тип решетки		Порог протекания (x_c)	
		для задачи связей	для задачи узлов
двумерная	простая квадратная (рис. 5, а)	<u>0,5</u>	$0,593 \pm 0,002$
	треугольная (рис. 5, б)	<u>0,3473</u>	<u>0,5</u>
трехмерная	простая кубическая (рис. 5, в)	$0,247 \pm 0,05$	$0,312 \pm 0,02$
	объемноцентрированная (рис. 5, г)	$0,178 \pm 0,05$	$0,248 \pm 0,003$
	гранецентрированная кубическая (рис. 5, д)	$0,119 \pm 0,002$	$0,198 \pm 0,003$

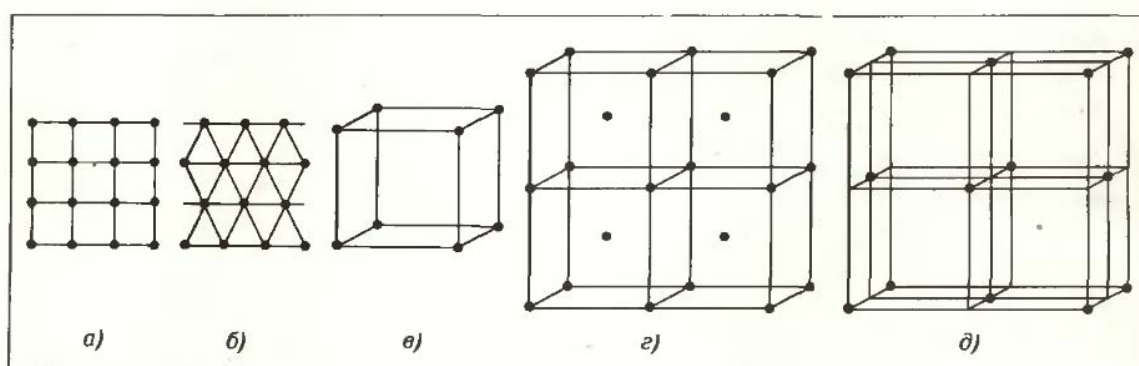


Рис. 5.

мерные задачи решают приближенными методами (вроде описанного в первом разделе) и моделированием на ЭВМ.

Пороговые значения для разных типов решеток приведены в таблице. Точные значения подчеркнуты. Остальные результаты получены приближенными методами. Естественно, приближенные результаты, полученные разными методами, несколько отличаются друг от друга. В таблице приведены результаты, наиболее надежные с точки зрения автора.

Различные применения теории протекания

Теория протекания — очень молодая математическая дисциплина. Ее основные идеи были сформулированы в 1957 году в работе английских математиков Бродбента и Хаммерсли. В этой же работе было дано и название теории. (По-английски она называется «percolation theory». В точном переводе «percolation» означает «просачивание», «фильтра-

ция»; в русской литературе вместо термина «протекание» можно встретить слово «перколяция».)

Несмотря на молодость теории, область ее применений чрезвычайно широка. Мы разобрали в этой статье лишь так называемые решеточные задачи, но они далеко не исчерпывают всей области и играют сравнительно малую роль в приложениях.

Для того чтобы сформулировать еще одну задачу теории протекания, вспомним древнюю легенду о Ноевом ковчеге. В этой легенде говорится, что некогда на Земле произошло грандиозное наводнение. Спаслась от него лишь небольшая группа людей, заранее построивших большой корабль (ковчег). Корабль этот, видимо, курсировал где-то в районе Кавказа, так как первым местом, куда он причалил, когда стала спадать вода, оказался вершина горы Арарат... А теперь представим себе, что путешественники решили пересечь Кавказский хребт с юга на север по воде. При каком минимальном уровне воды это путешествие еще