ЖЭТФ, 2022, том 161, вып. 3, стр. 358–362

О ПРОВОДИМОСТИ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ РЭЛЕЯ В ОБЛАСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ–ДИЭЛЕКТРИК

Б. Я. Балагуров *

Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119334, Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 декабря 2021 г.,
после переработки 4 декабря 2021 г.
Принята к публикации 7 декабря 2021 г.

Рассмотрена проводимость двумерной модели Рэлея в критической области — окрестности точки фазового перехода металл–диэлектрик. Выведено аналитическое выражение, описывающее эффективную проводимость σ_e модели во всей предпороговой (вплоть до соприкосновения круговых включений) критической области. Проведено сравнение полученных для σ_e разложений с соответствующими результатами гипотезы подобия.

DOI: 10.31857/S0044451022030051

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование свойств вещества при фазовом переходе представляет общефизический интерес и является актуальной задачей теории. В твердых телах достаточно подробно изучены сегнетоэлектрические, магнитные, структурные и т. д. фазовые превращения [1]. В то же время в бинарных композитах имеет место специфический фазовый переход типа металл–диэлектрик, при котором происходит резкое изменение их электрофизических свойств, в частности, проводимости. Во всех этих явлениях вблизи точки фазового перехода имеются особенности в поведении соответствующих физических величин. При этом зависимость различных свойств вещества от параметров близости к критической точке (порогу протекания) имеет аномальное, неаналитического типа, поведение. Теоретическое описание подобных аномальных зависимостей наталкивается, вообще говоря, на серьезные трудности. Хотя во многих случаях (сегнетоэлектричество, магнетизм, сверхпроводимость) применима общая теория фазовых переходов второго рода Ландау [2], она, однако, непригодна в критической области, в которой проявляются упомянутые выше аномалии. Точное решение двумерной модели Изинга [2] продемонстрировало как аномальное поведение ее магнитных характеристик в критической области, так и отсутствие применимости метода Ландау. Отметим, что полное решение получила также задача о проводимости двумерного композита со структурой шахматной доски [3].

В общем случае из-за отсутствия строгих результатов для описания фазового перехода типа металл–диэлектрик в композитах со случайным распределением компонент в [4, 5] была предложена гипотеза подобия, в которой особенности физических величин аппроксимируются степенны́ми функциями. При этом игнорируется возможное присутствие логарифмических зависимостей от параметров близости к точке фазового перехода. Основным количественным результатом гипотезы подобия является соотношение между критическими индексами (показателями степеней).

Фазовый переход металл–диэлектрик может происходить и в композитах другого класса — бинарных системах с регулярной структурой. Периодичность в расположении включений позволяет развивать последовательный подход к вычислению проводимости таких систем. Так, например, для двумерной модели Рэлея [6] удается свести эту задачу к решению бесконечной системы алгебраических уравнений [7–9]. Использование конечной подсистемы этих уравнений достаточного размера позволяет найти эффективную проводимость σ_e модели численными методами практически во всем предпороговом диапазоне изменения концентрации (вплоть до соприкосновения включений). Такой подход, од-

* E-mail: balagurov@deom.chph.ras.ru, byabalagurov@mail.ru

нако, не позволяет выяснить истинный вид аномальных зависимостей величины σ_e в окрестности точки перехода.

В настоящей работе проводимость двумерной модели Рэлея в области фазового перехода металл–диэлектрик рассмотрена аналитическим методом. Для решения этой задачи использовано так называемое бинарное приближение [10, 11], точность которого тем выше, чем ближе модель к точке фазового перехода. Полученное таким способом аналитическое выражение для эффективной проводимости σ_e двумерной модели Рэлея оказывается справедливым во всей предпороговой критической области (окрестности точки перехода), в которой проявляется аномальное поведение величины σ_e. Сравнение с соответствующими результатами гипотезы подобия показывает, что некоторые общие положения этой гипотезы, сформулированные для случайно-неоднородных сред, применимы и к композитам с периодической структурой.

2. ЭФФЕКТИВНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ

Двумерная модель Рэлея представляет собой изотропную матрицу проводимости σ_1 с системой включений круговой формы радиуса R и проводимости σ_2. Центры кругов расположены в узлах квадратной решетки с периодом $2a$. Эффективная проводимость σ_e такой модели изотропна и является функцией трех аргументов: $\sigma_e = \sigma_e(p;\sigma_1,\sigma_2)$, где $p = (4a^2 - \pi R^2)/(2a)^2$ — безразмерная концентрация (доля занимаемой площади) первой компоненты — матрицы. Для дальнейшего удобно ввести безразмерную эффективную проводимость $f(p,h)$ согласно

$$\sigma_e(p;\sigma_1,\sigma_2) = \sigma_1 f(p,h), \quad h = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}. \tag{1}$$

При $\sigma_2 = 0$ по мере увеличения радиуса включений эффективная проводимость монотонно убывает, обращаясь в нуль при соприкосновении кругов (при $R = a$). В этом случае при критической концентрации (пороге протекания)

$$p_c = 1 - \frac{\pi}{4} \tag{2}$$

происходит фазовый переход металл–диэлектрик, так что $f(p_c, 0) = 0$. Если же $\sigma_2 \neq 0$, но малá ($h \ll 1$), то $f(p_c, h)$ отлична от нуля, однако ее аномальное поведение в окрестности точки перехода сохраняется.

Общее выражение для безразмерной эффективной проводимости двумерной модели Рэлея в допороговой области концентраций ($p \geqslant p_c$) получено в работе [10]:

$$f(p,h) = \frac{1}{\pi}\left\{\xi_0 + 2h\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\,\frac{\operatorname{th} n\xi_0}{h + \operatorname{th} n\xi_0}\,e^{-n\xi_0}\right\}. \tag{3}$$

Здесь

$$\xi_0 = \frac{\sqrt{a^2 - R^2}}{a}, \tag{4}$$

так что

$$\xi_0^2 = \frac{4-\pi}{\pi}\,\tau, \quad \tau = \frac{p - p_c}{p_c}. \tag{5}$$

Выражение (3) выведено в рамках бинарного приближения [10], при котором проблема вычисления эффективной проводимости сводится к задаче о протекании тока через пару соседних кругов. Как отмечено в [10, 11], погрешность бинарного приближения обращается в нуль при стремлении к точке фазового перехода. Поэтому выражение (3) применимо в непосредственной окрестности точки перехода — предпороговой ($p \geqslant p_c, \tau \geqslant 0$) критической области ($\xi_0 \ll 1, h \ll 1$).

В работе [10] из выражения (3) найдено разложение величины $f(p,h)$ по параметру $h/\xi_0 \ll 1$. Рассмотрим теперь случай, когда отношение h/ξ_0 произвольно. Для того чтобы провести суммирование в формуле (3) при этих значениях h и ξ_0, введем величину N такую, что

$$\left\{1, \frac{h}{\xi_0}\right\} \ll N \ll \frac{1}{\xi_0}, \tag{6}$$

и разделим сумму в выражении (3) на две части:

$$\sum_{n=1}^{\infty}\Big(\ldots\Big) = S_1 + S_2. \tag{7}$$

Здесь

$$S_1 = \sum_{n=1}^{N}\Big(\ldots\Big), \tag{8}$$

$$S_2 = \sum_{n=N+1}^{\infty}\Big(\ldots\Big). \tag{9}$$

В формулах (7)–(9) под $(\ldots)$ понимается выражение, стоящее в (3) под знаком суммы. При $h \ll 1$ и $\xi_0 \ll 1$ с учетом условий (6) имеем

$$S_1 \simeq \sum_{n=1}^{N}\frac{1}{n+\gamma}, \quad \gamma = \frac{h}{\xi_0}, \tag{10}$$

$$S_2 \simeq \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{e^{-n\xi_0}}{n}\,. \tag{11}$$

Для того чтобы вычислить сумму в формуле (10), введем функцию

$$F(x) = \sum_{n=1}^{N} \frac{e^{-(n+\gamma)x}}{n+\gamma}\,, \tag{12}$$

$$F(0) = S_1\,, \quad F(\infty) = 0\,. \tag{13}$$

Из (12) находим производную функции $F(x)$

$$F'(x) = -e^{-\gamma x}\sum_{n=1}^{N} e^{-nx} = -e^{-\gamma x}\frac{1-e^{-Nx}}{1-e^{-x}}\, e^{-x}\,. \tag{14}$$

Отсюда с учетом (13) находим

$$S_1 = \int_0^{\infty} e^{-\gamma x}\,\frac{1-e^{-Nx}}{1-e^{-x}}\,e^{-x}\,dx\,. \tag{15}$$

Положив $e^{-x}\,dx = d(1-e^{-x})$, проведем в (15) интегрирование по частям:

$$S_1 = \gamma\int_0^{\infty} e^{-\gamma x}\ln\bigl(1-e^{-x}\bigr)\,dx - (N+\gamma)\times \\ \times\int_0^{\infty} e^{-(N+\gamma)x}\ln\bigl(1-e^{-x}\bigr)\,dx\,. \tag{16}$$

Второй интеграл в (16), положив $(N+\gamma)x = t$, преобразуем следующим образом:

$$(N+\gamma)\int_0^{\infty} e^{-(N+\gamma)x}\,\ln\bigl(1-e^{-x}\bigr)\,dx = \\ = \int_0^{\infty} e^{-t}\,\ln\Bigl(1-\exp\bigl\{-t/(N+\gamma)\bigr\}\Bigr)\,dt\,. \tag{17}$$

Отсюда, в силу того, что $N \gg \{1,\gamma\}$, получим

$$\int_0^{\infty} e^{-t}\,\ln\Bigl(1-\exp\bigl\{-t/(N+\gamma)\bigr\}\Bigr)\,dt \simeq \\ \simeq \int_0^{\infty} e^{-t}\,\ln\frac{t}{N}\,dt = -\ln N - \mathbb{C}\,, \tag{18}$$

где

$$\mathbb{C} = -\int_0^{\infty} e^{-t}\,\ln t\,dt = 0.577\ldots \tag{19}$$

— постоянная Эйлера. Таким образом,

$$S_1 = \gamma\int_0^{\infty} e^{-\gamma x}\,\ln\bigl(1-e^{-x}\bigr)\,dx + \ln N + \mathbb{C}\,. \tag{20}$$

Перепишем S_2 в виде

$$S_2 = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-n\xi_0}}{n} - \sum_{n=1}^{N}\frac{e^{-n\xi_0}}{n}\,. \tag{21}$$

Далее имеем

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-n\xi_0}}{n} = \ln\bigl(1-e^{-\xi_0}\bigr) \simeq \ln\frac{1}{\xi_0}\,, \tag{22}$$

$$\sum_{n=1}^{N}\frac{e^{-n\xi_0}}{n} \simeq \sum_{n=1}^{N}\frac{1}{n} = \ln N + \mathbb{C} + \ldots \tag{23}$$

Здесь учтено, что $\xi_0 \ll 1$ и $1 \ll N \ll 1/\xi_0$.

В результате получаем окончательно:

$$f(p,h) = \frac{1}{\pi}\left\{\xi_0 + 2h\left[\ln\frac{1}{\xi_0} - g(\gamma)\right]\right\}, \quad \gamma = \frac{h}{\xi_0}\,, \tag{24}$$

$$g(\gamma) = -\gamma\int_0^{\infty} e^{-\gamma x}\,\ln\bigl(1-e^{-x}\bigr)\,dx\,. \tag{25}$$

Формулы (24), (25) описывают безразмерную эффективную проводимость исследуемой двумерной модели Рэлея во всей предпороговой ($p \geqslant p_c$) критической ($\xi_0 \ll 1, h \ll 1$) области.

Положив в (25) $\gamma e^{-\gamma x}\,dx = d(1-e^{-\gamma x})$ и проведя интегрирование по частям, получим

$$g(\gamma) = \int_0^{\infty}\frac{1-e^{-\gamma x}}{e^x - 1}\,dx\,. \tag{26}$$

Отсюда разложением по степеням γ найдем

$$\gamma \ll 1 : g(\gamma) = \frac{\pi^2}{6}\,\gamma - \zeta(3)\,\gamma^2 + \frac{\pi^4}{90}\,\gamma^3 + \ldots, \tag{27}$$

где

$$\zeta(3) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^3} = 1.202\ldots \tag{28}$$

В противоположном случае больших значений γ сделаем в (25) замену $x = t/\gamma$ и приведем полученное выражение к следующему виду:

$$g(\gamma) = -\int_0^\infty e^{-t} \left(\ln t - \ln\gamma - \frac{t}{2\gamma}\right) dt - \\ - \int_0^\infty e^{-t} \ln\frac{\operatorname{sh}\Omega(t)}{\Omega(t)}\, dt\,, \quad (29)$$

так что

$$g(\gamma) = -\ln\frac{1}{\gamma} + \mathbb{C} + \frac{1}{2\gamma} - J\,, \\ J = \int_0^\infty e^{-t} \ln\frac{\operatorname{sh}\Omega(t)}{\Omega(t)}\, dt\,. \quad (30)$$

В (29), (30) введено обозначение

$$\Omega(t) = \frac{t}{2\gamma}\,. \quad (31)$$

В выражении для J из (30) проведем интегрирование по частям:

$$J = \int_0^\infty e^{-t} \left\{\frac{1}{2\gamma}\operatorname{cth}\Omega(t) - \frac{1}{t}\right\} dt\,.$$

Поскольку

$$\operatorname{cth} x = \frac{1}{x} - \frac{x}{3} + \frac{x^3}{45} + \ldots\,, \quad x \ll 1,$$

то

$$J = \int_0^\infty e^{-t} \left\{-\frac{t}{12\,\gamma^2} + \frac{t^3}{720\,\gamma^4} + \ldots\right\} dt\,, \quad (32)$$

так что с учетом определения (31) получаем

$$\gamma \gg 1:\; g(\gamma) = -\ln\frac{1}{\gamma} + \mathbb{C} + \frac{1}{2\gamma} - \frac{1}{12}\frac{1}{\gamma^2} + \\ + \frac{1}{120}\frac{1}{\gamma^4} + \ldots \quad (33)$$

Последующие члены разложения (33) представляют собой четные степени величины $1/\gamma$. Отметим также, что $g(1) = 1$.

3. СРАВНЕНИЕ С ГИПОТЕЗОЙ ПОДОБИЯ

Согласно результатам предыдущего раздела для функции $f(p,h)$, в двух предельных случаях имеем следующие разложения (при $\tau = (p-p_c)/p_c \geqslant 0$):

$$f(p,h) = \xi_0 \left\{\frac{1}{\pi} + \frac{2}{\pi}\frac{h}{\xi_0}\ln\frac{1}{\xi_0} - \frac{\pi}{3}\left(\frac{h}{\xi_0}\right)^2 + \right. \\ \left. + \frac{2}{\pi}\zeta(3)\left(\frac{h}{\xi_0}\right)^3 + \ldots\right\}, \quad h \ll \xi_0 \ll 1, \quad (34)$$

$$f(p,h) = h \left\{\frac{2}{\pi}\left(\ln\frac{1}{h} - \mathbb{C}\right) + \frac{1}{6\pi}\left(\frac{\xi_0}{h}\right)^2 - \right. \\ \left. - \frac{1}{60\pi}\left(\frac{\xi_0}{h}\right)^4 + \ldots\right\}, \quad \xi_0 \ll h \ll 1. \quad (35)$$

Разложение (34) практически совпадает с найденным в работе [10]. Из разложения (35) при $p = p_c\,(\xi_0 = 0)$ следует выражение для $f(p_c,h)$, полученное в [11]. При этом величины

$$\frac{f(p_c,h)}{h} = \frac{2}{\pi}\left(\ln\frac{1}{h} - \mathbb{C}\right) \quad (36)$$

и

$$\frac{\partial f(p_c,h)}{\partial h} = \frac{2}{\pi}\left(\ln\frac{1}{h} - \mathbb{C} - 1\right) \quad (37)$$

являются линейными функциями аргумента $\ln(1/h)$, отличаясь друг от друга на единицу. Заметим также, что из разложения (35) следует

$$h\,\frac{\partial f(p,h)}{\partial p}\bigg|_{p=p_c} = \frac{2}{3\pi^2} \quad (h \ll 1)\,. \quad (38)$$

Здесь учтено, что $\xi_0^2 = (4/\pi)\,(p-p_c)$. Равенство (38) может использоваться для проверки правильности вычислений при компьютерном исследовании проводимости модели при $p = p_c\,(\tau = 0)$.

В рамках гипотезы подобия [4, 5] безразмерная эффективная проводимость $f(p,h)$ в окрестности точки фазового перехода металл–диэлектрик является некоторой функцией аргументов τ и h, для которой имеют место следующие разложения [4] (см. также [9]):

$$f(p,h) = \\ = \tau^t \left\{A_0 + A_1\frac{h}{\tau^{t/s}} + A_2\left(\frac{h}{\tau^{t/s}}\right)^2 + \ldots\right\}, \quad (39) \\ \tau > 0, \quad \Delta \ll \tau \ll 1,$$

$$f(p,h) = \\ = h^s \left\{ a_0 + a_1 \frac{\tau}{h^{s/t}} + a_2 \left(\frac{\tau}{h^{s/t}}\right)^2 + \ldots \right\}, \qquad (40) \\ |\tau| \ll \Delta \ll 1,$$

$$f(p,h) = \frac{h}{(-\tau)^q} \times \\ \times \left\{ B_1 + B_2 \frac{h}{(-\tau)^{t/s}} + B_3 \left(\frac{h}{(-\tau)^{t/s}}\right)^2 + \ldots \right\}, \qquad (41) \\ \tau < 0, \quad \Delta \ll |\tau| \ll 1.$$

Здесь

$$\Delta = h^{s/t}, \qquad (42)$$

t, s и q — критические индексы, связанные соотношением

$$q = t\,\frac{1-s}{s}, \qquad (43)$$

а $A_0, A_1, A_2, \ldots, a_0, a_1, a_2, \ldots,\ B_1, B_2, B_3, \ldots$ — численные коэффициенты. Для двумерного композита со случайным распределением включений

$$s = 1/2, \quad t = q \simeq 1.3\,. \qquad (44)$$

Подчеркнем, что в разложениях (39)–(41) не учитывается возможность присутствия логарифмических зависимостей от аргументов τ и h.

Сравнение формул (34), (35) с (39), (40) показывает, что для описания проводимости двумерной модели Рэлея в духе гипотезы подобия следует опустить логарифмические зависимости и положить

$$t = 1/2, \quad s = 1, \quad \Delta = h^2\,. \qquad (45)$$

Кроме того, можно ожидать, согласно (43), что критический индекс $q = 0$. Несмотря на столь существенные различия в значениях критических индексов, структуры разложений (34), (35) и (39), (40) практически одинаковы. Действительно, множитель перед фигурной скобкой в (34) $\xi_0 \sim \sim \sqrt{\tau} \sim \tau^t$, а разложение идет по степеням величины $h/\xi_0 \sim h/\sqrt{\tau} \sim h/\tau^{t/s}$. Аналогичным образом в (35) общий множитель $h = h^s$, а параметром разложения является величина $(\xi_0/h)^2 \sim \tau/h^2 = \tau/h^{s/t}$, так что разложение идет по целым степеням τ.

Проведенное сравнение показывает, что, с одной стороны, найденные в настоящей работе разложения для безразмерной эффективной проводимости $f(p,h)$ значительно отличаются от соответствующих результатов гипотезы подобия. Это касается как конкретных значений критических индексов, так и наличия логарифмических зависимостей от параметров близости к точке фазового перехода. С другой стороны, при игнорировании (как и в [4]) логарифмических зависимостей разложения (34), (35) и (39), (40), несмотря на численные различия в показателях степеней, фактически совпадают. Оказывается, таким образом, что основные положения гипотезы подобия, сформулированные для случайно-неоднородных сред, в задаче о проводимости применимы, по-видимому, и к композитам с регулярной структурой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1992).

2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, часть 1, Наука, Москва (1995).

3. Ю. П. Емец, *Электрические характеристики композиционных материалов с регулярной структурой*, Наукова думка, Киев (1986).

4. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, Phys. Stat. Sol. (b) **76**, 475 (1976).

5. J. P. Straley, J. Phys. C **9**, 783 (1976).

6. Lord Rayleigh, Phil. Mag. **34**(211), 481 (1892).

7. W. T. Perrins, D. B. McKenzie, and B. C. McPhedran, Proc. Roy. Soc. London A **369**, 207 (1979).

8. Б. Я. Балагуров, В. А. Кашин, ЖЭТФ **117**, 978 (2000).

9. Б. Я. Балагуров, *Электрофизические свойства композитов. Макроскопическая теория*, URSS, Москва (2015).

10. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **157**, 669 (2020).

11. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **159**, 553 (2021).