

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 538.221:538.632

**ВЛИЯНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ГРАНУЛ ПО РАЗМЕРАМ
НА ВЕЛИЧИНУ ПОРОГА ПЕРКОЛЯЦИИ В ГРАНУЛИРОВАННЫХ
СПЛАВАХ****А. Б. Ханикаев, А. Б. Грановский, Ж.-П. Клерк****(кафедра магнетизма)*

E-mail: granov@magn.ru

Методом численного моделирования исследовано влияние распределения гранул по размерам на величину порога перколяции в гранулированных сплавах «металл–диэлектрик». Рассматривается модель сплава, в которой гранулы металла имеют два характерных размера: l и L , где $L > l$. Порог перколяции значительно возрастает с увеличением отношения L/l как для двумерного, так и для трехмерного случая и при больших значениях отношения L/l испытывает тенденцию к насыщению. Результаты расчета позволяют объяснить высокие значения порога перколяции, наблюдаемые для большинства гранулированных сплавов.

Введение

Порог перколяции, или порог протекания, p_c является одной из важнейших характеристик гранулированных сплавов «металл–диэлектрик» [1, 2]. Для магнитных гранулированных сплавов, объемное содержание металла в которых близко к p_c , недавно обнаружены гигантское магнетосопротивление [3], гигантский аномальный эффект Холла [4], сильные нелинейности оптических и магнитооптических свойств [5]. Для большинства исследованных гранулированных пленок значение p_c лежит в диапазоне $0.5 \div 0.6$ [3–6]. В рамках теории эффективного поля в трехмерном (3D) случае для сферических частиц $p_c = 0.33$, что близко к значению p_c , рассчитанному по теории протекания для задачи узлов [1, 2]. Столь существенное отличие экспериментальных значений для p_c реальных сплавов от результатов указанных расчетов, очевидно, связано с влиянием топологии внутреннего строения сплава на величину p_c . Прежде всего, величина p_c может сильно зависеть от ближнего и дальнего порядка расположения гранул [1, 2], от формы гранул (см., напр., [7]). Однако в эксперименте, как правило, не наблюдается сильной эллиптичности частиц, и гранулы металла достаточно хаотично распределены в матрице диэлектрика. Объяснение высоких значений p_c ($0.5 \div 0.6$) близостью структуры соответствующих сплавов к двумерной (2D) также не подтверждено экспериментом.

В настоящей работе предпринята попытка численного моделирования явления перколяции в гранулированных 2D- и 3D-сплавах, в которых гранулы металла имеют разный размер. Распределение гранул по размерам, возникающее в силу технологических условий изготовления (распыление, растекание, отжиг и т. д.) гранулированных сплавов,

неоднократно обнаруживалось методами электронной микроскопии. Этому факту ранее уделялось недостаточное внимание, и только недавно выяснилось, что существование гранул разного размера сильно влияет на электронный транспорт в магнитных гранулированных сплавах (см., напр., [4]). В исследованных нами случаях получено, что порог перколяции p_c может значительно возрастать, если в сплаве имеются гранулы металла разного размера.

Постановка задачи

Будем рассматривать гранулированный сплав «металл–диэлектрик», в котором имеются гранулы металла двух характерных размеров: l и L . Пусть гранулы первого сорта имеют один и тот же строго определенный размер l , а распределение гранул второго сорта по размерам вокруг среднего значения L_0 описывается: а) δ -функцией $f(L) = A\delta(L - L_0)$; б) нормальным распределением $f(L) = B \exp(-(L - L_0)^2/(2d)^2)$; в) равномерным распределением в некотором интервале $2d$

$$f(L) = \begin{cases} C: L_0 - d < L < L_0 + d, \\ 0: L_0 + d < L \text{ и } L_0 - d > L. \end{cases}$$

Параметры распределений A, B, C пусть определяются из условий нормировки таким образом, что число гранул второго сорта всегда в десять раз меньше, чем число гранул первого сорта.

Численный эксперимент состоял в задании случайного распределения гранул по объему образца без пересечения границ гранул, распределенных на предшествующих итерациях. После завершения процесса распределения гранул по объему проводилась дискретизация: область образца разбивалась на ячейки размера l , и ячейки, попадавшие в обла-

*) Университет Прованса, Марсель, Франция.

сти внутри кластеров, считались занятыми, а не попадавшие — свободными. Протекание полученного образца определялось методом Хошена–Копельмана (также известного под названием метода маркировки кластеров) [8]. Вероятность протекания определялась по 50 итерациям для каждой концентрации.

Результаты расчетов и их обсуждение

В двумерном случае размер образца составлял $100 \times 100l$. Размер гранул второго сорта L варьировался в пределах от l до $10l$. Ограничение сверху размера гранул L значением $10l$ связано с попыткой исключить влияние граничных эффектов. Результаты расчетов (рис. 1) показывают, что величина порога перколяции увеличивается с ростом размера

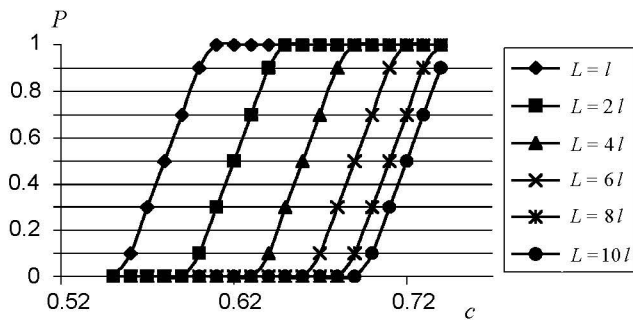


Рис. 1. Зависимость вероятности протекания P от объемной концентрации металла c для разных размеров больших частиц L в двумерном (2D) случае

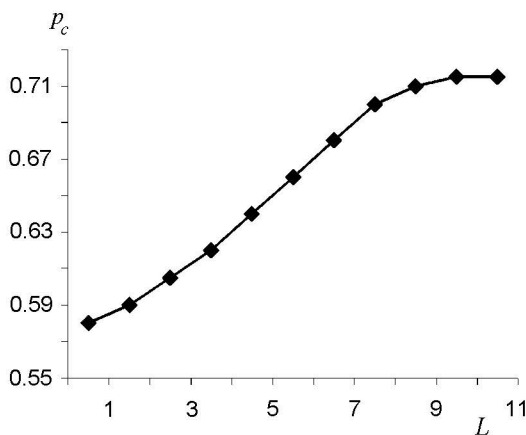


Рис. 2. Зависимость порога перколяции p_c от размера больших частиц L в двумерном (2D) случае

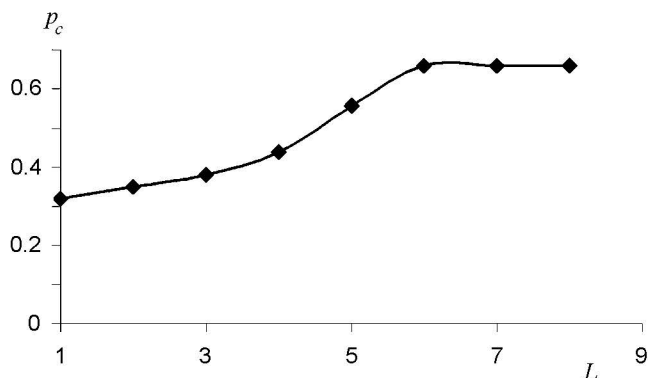


Рис. 3. Зависимость порога перколяции p_c от размера больших частиц L в трехмерном (3D) случае

гранул второго сорта L от значения $p_c = 0.603$ ($L = 2l$) до $p_c = 0.719$ ($L = 10l$), при этом, когда размер L близок к $10l$, эта зависимость выходит на насыщение (рис. 2).

Величина порога перколяции в пределах точности эксперимента (0.001) оказалась не зависящей ни от формы распределения, ни от величины разброса размера гранул около среднего значения d , которая изменялась в пределах от 0 до $2l$.

Зависимость значения порога перколяции от размера гранул большего размера L и от функции распределения их по размерам для трехмерной структуры была исследована нами аналогично двумерному случаю. Как показал численный расчет, эта зависимость для трехмерной структуры оказывается более сильной. Поскольку в трехмерном случае расчеты требовали в несколько раз большего вычислительного времени, они проводились на образце размерами $50 \times 50 \times 50l$, а размеры гранул второго сорта варьировались от $L = 2l$ до $L = 10l$. Результаты, полученные в ходе численного эксперимента (рис. 3), показывают, что порог перколяции увеличился от $p_c = 0.328$ при $L = 2l$ до $p_c = 0.661$ при $L = 6l$ и впоследствии не изменялся. Подобная тенденция к насыщению была обнаружена в работе [9], однако нельзя исключить, что этот эффект частично связан с конечностью размеров исследованной системы. Зависимость от функций распределения и величины разброса вокруг среднего в трехмерном случае также не была обнаружена.

Таким образом, результаты данной работы показывают, что наблюдаемый рост величины порога перколяции в гранулированных сплавах, по всей вероятности, связан с тем, что в них наряду с маленькими гранулами присутствуют гранулы существенно большего размера.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант 00-02-17797).

Литература

1. Шкловский Б.И., Эфрос А.А. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979.
2. Clerc J.P., Giraund G., Laugier J.M. et al. // Adv. in Phys. 1990. **3**. P. 191.
3. Mitani S., Fujimori H., Takanashi K. et al. // J. Magn. Magn. Mater. 1999. **198–199**. P. 179.
4. Pakhomov A.B., Yan X. // Solid State Commun. 1996. **99**. P. 139.
5. Shalaev V.M., Sarychev A.K. // Phys. Rev. 1998. **B57**. P. 13265.
6. Chien C.L. // Appl. Phys. 1991. **69**. P. 5267.
7. Brouer E.W. // J. Phys. C. 1986. **19**. P. 7183.
8. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир, 1990.
9. Oger L., Troadec J.P., Bedeau D. et al. // Powder Technology. 1986. **46**. P. 133.

Поступила в редакцию
16.05.01