

## 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)  $\delta$ -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

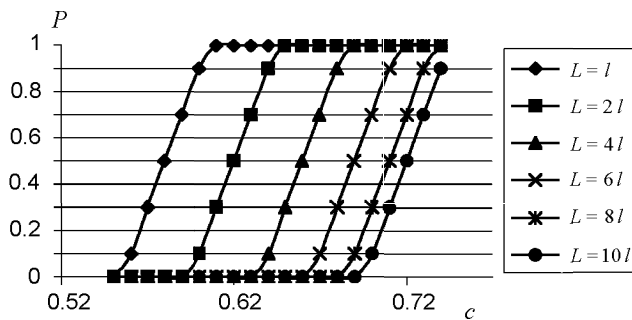


Рис. 1. Зависимость вероятности протекания  $P$  от объемной концентрации металла  $c$  для разных размеров больших частиц  $L$  в двумерном (2D) случае

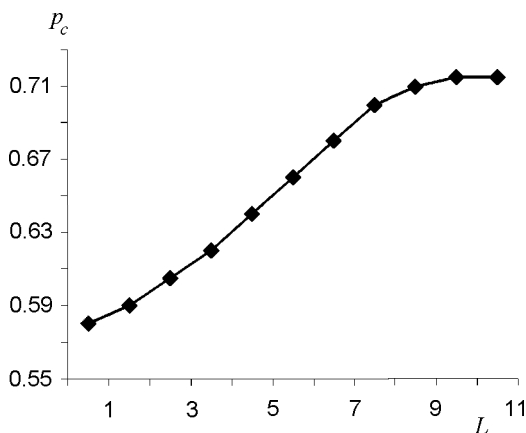


Рис. 2. Зависимость порога перколяции  $p_c$  от размера больших частиц  $L$  в двумерном (2D) случае

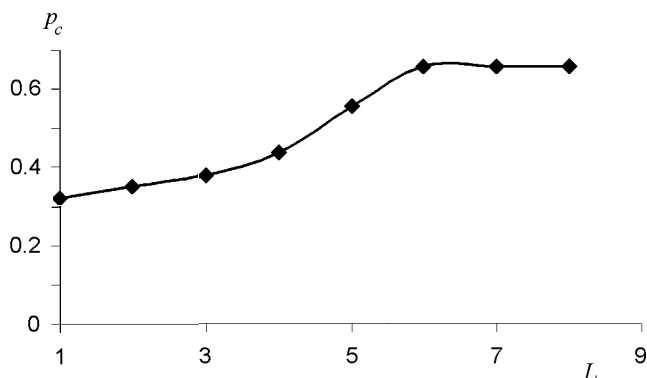


Рис. 3. Зависимость порога перколяции  $p_c$  от размера больших частиц  $L$  в трехмерном (3D) случае

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