

Рис. 1: Смесь порошков двух разных веществ. Размеры зерен случайны и описываются некоторой функцией распределения.

Неупорядоченные фракталы в природе и их физические свойства.

А.С.Иоселевич

Математики придумывают регулярные фракталы - самоподобные структуры, мелкие детали которых в уменьшенном масштабе воспроизводят картину крупных. Природа создает случайные фракталы - неупорядоченные системы, для которых самоподобие выполняется только в среднем. Примеры таких систем, обладающих классическими свойствами: кластеры из слипшихся частиц, различные гели, шероховатые поверхности и пористые вещества. В квантовой физике фрактальными свойствами обладают волновые функции электрона, движущегося в неупорядоченной системе, если эта система близка к порогу локализации.

Кроме экзотических геометрических свойств, природные фракталы обладают необычными физическими характеристиками.

1 Смеси.

1.1 Кластеры. Явление перколяции.

Если смешать частицы двух разных сортов – скажем, металлические (доля x) и диэлектрические (доля 1-x) – то некоторые частицы одного сорта будут касаться друг друга, образуя кластеры. При малом x в системе будут только малые металлические кластеры – размером порядка размера одной частицы a, и их будет мало. Наоборот, при x, близком к единице, почти все металлические частицы образуют один большой (бесконечный – в термодинамическом пределе) кластер, а маленьких кластеров опять будет мало. Бесконечный кластер имеется при $x > x_{\text{perc}}$, а при $x < x_{\text{perc}}$ его нет. При $x = x_{\text{perc}}$ происходит, как говорят, "перколяционный переход". Вблизи этого перехода, при $x \approx x_{\text{perc}}$ как конечные кластеры (те из них, которые включают много частиц $s \gg 1$), так и бесконечный кластер, имеют фрактальные свойства в некотором большом, но конечном интервале масштабов $a < r < \xi$. На этих масштабах структура кластеров обладает свойством самоподобия

2 Основные решеточные модели перколяции

Статистическими свойствами кластеров занимается теория перколяции. Приведем простейшие из используемых в этой теории моделей

2.1 Задача связей

Рассмотрим кусок квадратной решетки размером $L \times L$. Будем случайным образом удалять "связи" из этой системы, до тех пор, пока доля оставшихся связей не станет равна некоторой заранее выбранной величине p (см. рис. 2). Повторяя этот процесс, мы изготовим ансамбль из $N \gg 1$ случайных систем, характеризуемых одним и тем же значением p, но отличающихся друг от друга конкретной конфигурацией удаленных и оставленных связей (см. рис. 3). Очевидно, что все конфигурации с одинаковым числом связей равно представлены в этом ансамбле. Теория перколяции занимается изучением статистических свойств таких (или подобных) ансамблей, особенно интересуясь поведением системы в термодинамическом пределе, т.е., при $L \to \infty$. Разумеется, задача тривиально обобщается с двумерной квадратной решетки на любую другую решетку любой размерности. Поскольку в данной постановке случайным образом удаляются именно связей (bond percolation problem).



Рис. 2: Образцы систем с различными концентрациями связей *p*, полученные в ходе одного процесса последовательного разрывания связей.

1	2	 Ν

Рис. 3: Четыре образца из ансамбля систем с концентрацией p = 0.66, полученных в результате разных процессов последовательного разрывания связей.



Рис. 4: Протекание: в типичном образце с p = 0.63 имеется множество путей, соединяющих левый берег с правым (показано три из них), в то время, как в образце с p = 0.34 ни одного такого пути найти не удается.



Рис. 5: Два образца с очень малым $p = p_0(L = 16) = 1/32 \approx 0.03$: (а) Редкая флуктуация: все наличные связи собрались в "дорожку" и организовали протекание. Вероятность такой флуктуации $= L/C_{2L(L-1)}^{(L-1)} \approx 10^{-29}$. (b): Типичный образец с этой же концентрацией: протекания нет.

Главный вопрос теории перколяции формулируется так: какова вероятность $\Pi_{\text{perc}}(p, L)$ того, что в системе имеется путь по связям, соединяющий левый край квадрата с правым (см. рис. 4)? Если представить себе, что наша система изображает пористую среду, где некоторая жидкость может распространяться от узла к узлу по порам, представляемым связями, то наличие такого пути отвечает возможности протекания жидкости через всю систему (отсюда термин percolation - протекание). Именно в такой интерпретации задача перколяции была впервые поставлена в пионерской работе Бродбента и Хаммерсли, однако позже было обнаружено множество самых разных физических явлений, приводящих к точно такой же математической задаче. Заметим еще, что, очевидно, вместо протекания "слева направо" в качестве критерия перколяции можно было бы с тем же успехом выбрать протекание "сверху вниз": эти два критерия статистически эквивалентны.

Для больших систем с $L \gg 1$ функция $\Pi_{\text{perc}}(p, L)$ оказывается близкой к ступеньке (см. рис. 6). На самом деле $\Pi_{\text{perc}}(p, L) \equiv 0$ при $p < p_0(L) \sim L^{1-d}$ (d – размерность пространства), затем, при $p = p_0(L)$ впервые появляются (сначала - чрезвычайно маловероятные, см. рис. 5) конфигурации, обеспечивающие протекание, так что величина $\Pi_{\text{perc}}(p, L)$ остается очень малой. Только при $p \approx p_{\text{perc}}$ вероятность протекания становится заметной. В термодинамическом пределе

$$\lim_{L \to \infty} \Pi_{\text{perc}}^{(b)}(p, L) = \theta(p - p_{\text{perc}}), \tag{1}$$

где значение "порога перколяции" p_{perc} зависит от конкретной решетки. Результат (2) означает, что при $p > p_{\text{perc}}$ в достаточно большой системе гарантированно имеется протекание, а при $p < p_{\text{perc}}$ его, напротив, гарантированно нет. В точке $p = p_{\text{perc}}$ происходит "перколяционный фазовый переход".

2.2 Задача узлов

Другая возможная формулировка задачи перколяции, называемая "задачей узлов" (site percolation problem), отличается от приведенной выше тем, что из системы удаляются не связи, а узлы, причем фиксируется концентрация последних, *x*. Узлы удаляются вместе со всеми примыкающими к ним связями.

Понятие протекания в задаче узлов определяется точно так же, как и в задаче связей. Здесь тоже имеется (в термодинамическом пределе) резкий перколяционный фазовый переход:

$$\lim_{L \to \infty} \Pi_{\text{perc}}^{(s)}(x, L) = \theta(x - x_{\text{perc}}), \qquad (2)$$



Рис. 6: Зависимость вероятности протекания от величины p. Сплошная линия – образцы большого, но конечного размера $L \gg 1$; штриховая линия – предельное поведение при $L \to \infty$.



Рис. 7: Образцы систем в "задаче узлов" с различными концентрациями узлов x, полученные в ходе одного процесса последовательного удаления узлов. На образце с x = 0.69 показаны два перколяционных пути.



Рис. 8: "Бесконечный кластер", определенный как максимальный, показан черным. В условиях протекания он занимает конечную долю объема системы. Некоторые из конечных кластеров для примера обведены.

2.3 Конечные и бесконечные кластеры

2.4 Бесконечный кластер и его свойства на различных пространственных масштабах.

Плотность бесконечного кластера:

$$P(x) \propto (x - x_{\text{perc}})^{\beta} \theta(x - x_{\text{perc}}), \qquad \beta = 0.417.$$
(3)

Корреляционный радиус:

$$\xi(x) \propto |x - x_{\text{perc}}|^{\nu}, \qquad \nu = 0.875$$
 (4)

На масштабах $L \gg \xi$ бесконечный кластер "самоусредняется" т.е., выглядит, как сплошная среда, характерный размер неоднородности в которой не превышает ξ . На масштабах $1 \ll L \ll \xi$ бесконечном кластере встречаются "большие" дырки и он проявляет фрактальные свойства – точно такие же, какие имеет и конечный кластер этого масштаба.

2.5 Распределение конечных кластеров по размерам *М*

$$n_M(x) \approx M^{-\tau} f(M/M_c(x)), \qquad M_c(x) \sim |x - x_{\text{perc}}|^{-1/\sigma},$$
 (5)



Рис. 9: В условиях отсутствия протекания все кластеры являются "истинно конечными" (т.е., остаются таковыми и при стремлении размеров системы к бесконечности.



Рис. 10: Плотность бесконечного кластера: (a) – задача связей, (b) – задача узлов.

причем τ и σ – универсальные (зависящие только от размерности пространства) критические индексы:

$$\tau \approx 2.32, \qquad \sigma_{d=3} \approx 0.453.$$
 (6)

Явный вид функции f(y) неуниверсален, более того, он зависит от того, с какой стороны от перехода мы находимся. Однако качественное поведение этой функции – универсально:

$$f(y) \approx \begin{cases} c_1, & \text{при } y \ll 1, \\ c_2 \exp(-y), & \text{при } y \gg 1, \end{cases}$$
(7)

где c_1, c_2 – некоторые константы.

2.6 Фрактальные свойства кластеров: геометрия.

• Зависимость массы кластера M от его размера L

$$\overline{M}(L) \propto (L/a)^{d_{\rm f}}, \qquad \Delta M \sim \overline{M}(L),$$
(8)

причем величина $d_{\rm f}$ называется фрактальной размерностью. В трехмерном случае (который мы только и рассматриваем в этой лекции)

$$d_{\rm f} = 2.524$$
 (9)

Мы видим, что $d_{\rm f} < d = 3$, т.е. число узлов в кластере растет медленнее, чем его объем, так что средняя плотность на масштабе L убывает с L как $\rho(L) \sim L^{-(d-d_{\rm f})}$. С чем связан нетривиальный степенной закон роста (8) для фрактальных объектов? Дело в том, что большой кластер размера L весь усеян дырками различных размеров r в диапазоне от $r \sim 1$ до $r \sim L$, причем распределение дырок по размерам в этом диапазоне имеет степенной вид. Геометрическая картина кластера обладает масшабной инвариантностью – родовым свойством всех фрактальных объектов. Чтобы пояснить это свойство, рассмотрим процедуру огрубления. Разобъем кластер на кубики размером L_1 , такого, что $1 \ll L_1 \ll L$ и сосчитаем число узлов M_i в каждом кубике. Те кубики, в которых оказалось $M_i < \overline{M}(L_1)$, мы сотрем и посмотрим на образовавшуюся картину из оставшихся кубиков. Она окажется подобной исходной! Разумеется, это подобие нужно понимать в статистическом смысле - в смысле эквивалентности соответствующих ансамблей: не конкретная реализация остается самоподобной при огрублении, а ансамбль огрубленных реализаций совпадает (с точностью до масштабного преобразования) с ансамблем исходных. Итак, свойство самоподобия выполняется только для средних по ансамблю величин (например, для $\overline{M}(L)$), а флуктуации от образца к образцу велики: $\Delta M \sim \overline{M}(L)$.

Масса каждого "узла" в огрубленной конфигурации есть $\overline{M}(L_1)$, следовательно, для средней массы исходного кластера размером $L \gg L_1$ мы можем записать

$$\overline{M}(L) = \overline{M}(L/L_1)\overline{M}(L_1).$$
(10)

Этому уравнению удовлетворяют все функции $\overline{M}(L) \sim L^u$, что предопределяет степенной вид (8), однако показатель u таким образом не найдешь.

2.7 Как устроен кратчайший путь, соединяющий две точки расположенные на расстоянии *R* друг от друга на фрактальном кластере?

Выберем какие-нибудь две точки A и B на бесконечном кластере, на расстоянии R друг от друга. По определению, существует по крайней мере один путь по связям, ведущий из A в B. Выберем кратчайший из всех таких путей, а длину его обозначим как ℓ_{AB} (см. рис. 11).

Средняя длина такого пути

$$\bar{\ell}(R) \sim R^{d_{\min}}, \qquad d_{\min(d=3)} \approx 1.34.$$
 (11)

В случае бесконечного кластера формула (11) справедлива только при $R < \xi$, при $R > \xi$ восстанавливается линейный закон $\overline{\ell}(R) \sim cR$, но с большим коэффициентом c.

2.8 Фрактальные свойства кластеров: физика.

2.8.1 Сопротивление и емкость конечного кластера проводящих частиц в диэлектрической матрице.

Средний кондактанс ($G \equiv 1/R$) фрактального кластера размером L:

$$\overline{G}(L) \approx g a^{d-2} (L/a)^{-\zeta}, \qquad \tilde{\zeta} = 1.3.$$
(12)

где a – размер зерна, а g – кондактанс одного зерна.

Средняя емкость

$$\overline{C}(L) \approx L\varepsilon_0(L/a)^{s/\nu}, \qquad s \approx 0.74.$$
 (13)



Рис. 11: На бесконечном кластере жирной линией выделен один из кратчайших путей, ведущих из точки A в точку B, расположенных на расстоянии R друг от друга.



Рис. 12: Принципиальная схема измерения кондактанса большого конечный металлический кластер размера *l*.



Рис. 13: Большой конечный металлический кластер размера l. Стрелка указывает на то, что заряд e пришел на какую-то гранулу этого кластера, непосредственно после чего энергия системы стала равна $\sim e^2/a$. Затем заряд растекся по кластеру и энергия понизилась до значения $e^2/2C$, где $C \sim l\overline{\varepsilon}(l) \ll e^2/a$.

2.8.2 Проводимость и диэлектрическая проницаемость бесконечной системы.

Макроскопическая (на масштабах $L \gg \xi$) проводимость системы:

$$\sigma(p) \sim g(x - x_{\text{perc}})^{\mu} \theta(x - x_{\text{perc}}), \qquad \mu = 2.14.$$
(14)

Диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon_{\rm eff}(x) \sim \varepsilon_0 (x - x_{\rm perc})^{-s}$$
 (15)

2.8.3 Проводимость смеси сверхпроводящих (доля *x*) и нормальных металлических частиц.

В нормальной области (при $x < x_{\rm perc}$) проводимость конечна, но расходится при приближении к порогу перколяции по сверхпроводящим гранулам:

$$\sigma = g(x_{\text{perc}} - x)^{-s} \tag{16}$$

3 Агрегаты.

Агрегаты – это системы, составленные из отдельных макроскопических частиц, как правило – неупорядоченные. Структуры агрегатов бывают самые разные, они зависят как от свойств образующих их частиц, так и от кинетики процесса их образования. Эти структуры, как правило, неравновесные: они не живут долго и со временем деградируют – крошатся или, наоборот, слипаются в комок.



Рис. 14: Иллюстрация процесса агрегации.

3.1 Diffusion-limited aggregation (DLA).

Хрестоматийным примером агрегатов являются хлопья сажи, образующиеся в дымоходах. Симуляции процесса образования таких хлопьев посвящено множество работ. Наиболее распространенная модель этого процесса сводится к следующему:

В какой-то точке пространства закреплена частица затравка конечного размера *a*. Другие такие же частицы диффундируют (или, в другой постановке – движутся баллистически) в окружающем пространстве. Концентрация этих частиц считается малой, так что их взаимодействием друг с другом можно пренебречь. Однако, когда диффундирующая частица касается затравки, она к затравке прилипает и сама тоже приобретает свойства затравок. Затем подлетает следующая частица, тоже прилипает, и так далее (см. Рис. 14).

Поскольку каждая новая частица подходит к растущей затравке со случайной стороны, образующаяся структура оказывается чрезвычайно нерегулярной. Постепенно нарастает кластер из частиц, обладающий фрактальными свойствами (см. Рис. 15):

$$\overline{M}(L) \propto L^{d_{\rm f}}, \qquad d_{\rm f} < d.$$
 (17)

где M – число частиц в агрегате, а L – его размер, определяемый обычно, как среднеквадратичное расстояние от частицы до центра тяжести системы.

Фрактальная размерность $d_{\rm f}$ зависит от деталей постановки задачи – например, от того, замирает ли частица в том положении, в каком прилипла, или ей разрешается "устроиться по-удобнее". Можно представить себе (см. Рис. 16), что вновь прибывшая частица не удовлетворяется единственным контактом с агрегатом и ползет по его поверхности до тех пор, пока не установит еще один контакт (или, в трехмерном случае, даже еще два контакта).

Ясно, что в этом случае должна образовываться более плотная система, чем в случае одного контакта. Во всех указанных вариантах фрактальная размерность оказывается разной. Этим рассматриваемая нерав-



Рис. 15: Фрактальный агрегат.

Рис. 16: Двумерная модель образования "уплотненного" агрегата: подлетевшая частица сначала прилипла к частице агрегата в одной точке, а потом немного проползла по ее поверхности так, чтобы коснуться еще одной.



Рис. 17: Примеры анизотропных агрегатов для 3, 4, 5, и 6 осей симметрии

новесная система отличается от задачи перколяции, где $d_{\rm f}$ универсальна и зависит только от размерности пространства.

На практике слипающиеся частицы часто обладают весьма анизотропными свойствами (например, если речь идет о снежинках). Тогда анизотропным оказывается и образующийся агрегат (см. Рис. 17).

Моделировать рост анизотропных агрегатов можно, например, таким образом: с каждой частицей ассоциируются несколько выделенных осей симметрии, жестко привязанные к частице. когда частица приходит в соприкосновение с агрегатом, она стремится повернуться таким образом, чтобы линия, связывающая центры двух касающихся частиц, по возможности совпадала с какой-нибудь из выделенных осей (см. Рис. 18).

3.2 Cluster-cluster aggregation (CCA). Образование гелей (Gelation transition)

Различные гели играют очень большую роль в современной жизни: в пищевой промышленности, в медицине, в парфюмерии и т.д. Гели тоже образуются в результате агрегации частиц из раствора, но только не на одной какой-то выделенной затравке, а более-менее однородно по всему



Рис. 18: Модель образования анизотропного агрегата: частица сначала подошла к затравке с неудачной стороны, а потом повернулась так, чтобы одна из ее осей симметрии смотрела на центр затравки.



Рис. 19: (a) – исходный раствор, начальная стадия образования кластеров; (b) – развитая стадия образования кластеров: среди них уже встречаются большие, но бесконечного еще нет; (c) – гель: имеется бесконечный кластер из слипшихся частиц.

раствору, за счет слипания частиц друг с другом.

Поэтому большой интерес представляет изучение систем, в которых концентрация частиц не так мала и нельзя пренебрегать вероятностью их столкновения между собой с образованием кластера. Стандартная модель, описывающая свойства такой системы, сводится к следующему:

В пространстве диффундируют частицы конечного размера a с малой концентрацией n_0 ($n_0 a^3 \ll 1$). Как только две частицы касаются друг друга, они слипаются (см. Рис.19а).

Образующиеся кластеры тоже диффундируют (с коэффициентами диффузии D_M , вообще говоря, зависящими от числа частиц в кластере M и его формы) и продолжают слипаться друг с другом. С течением времени t кластеры растут и приобретают фрактальную структуру – разбухают (см. Рис.19b):

$$\overline{M}(t) \propto (L(t)/a)^{d_{\rm f}} \tag{18}$$

Средний размер кластеров L(t) растет, концентрация кластеров $n_{\rm cl}(t)$ падает, а плотность внутри кластера $n_{\rm in}(t)$ уменьшается:

$$n_{\rm cl}(t) \sim \frac{n_0}{\overline{M}(t)}, \quad n_{\rm in}(t) \sim \frac{1}{a^d} \left(\frac{a}{L(t)}\right)^{(d-d_{\rm f})}$$
(19)

В какой-то момент $t_{\rm gel}$ кластеры так разбухают, что выполняется условие

$$n_{\rm cl}(t_{\rm gel})L^d(t_{\rm gel}) \sim 1 \tag{20}$$

и конечная их доля слипается в бесконечный кластер (см. Рис.19с). Образуется гель.

Сравнивая (19) и (20) легко убедиться, что в момент образования геля плотность внутри типичных кластеров $n_{\rm in}(t_{\rm gel})$ оказывается порядка n_0 – исходной плотности раствора. Таким образом, гель представляет собой раствор низкой концентрации n_0 , внутри которого имеется бесконечный кластер, пронизывающий всю систему, но содержащий очень малую долю от всех частиц. Его наличие кардинально меняет многие физические свойства системы: у нее появляются сдвиговые модули (вспомните кефир!), может резко повышаться электропроводность и теплопроводность. Вместе с тем свойства самого раствора, наполняющего систему, практически не отличаются от исходных.

Если позволить кластерам и дальше слипаться, то плотность бесконечного кластера будет продолжать расти за счет прилипания к нему все новых и новых конечных кластеров, а суммарное количество частиц, принадлежащих к конечным кластерам, наоборот, уменьшаться. В конце концов практически все частицы уйдут из раствора и войдут в бесконечный кластер. Как правило, это совсем не то, что нужно потребителю, ему нужно, наоборот, иметь исходный раствор практически неизменного состава, но с улучшенными механическими свойствами (чтобы не растекался, чтобы можно было намазывать и т.п.). Поэтому сразу после образования геля обычно в систему добавляют немножко чего-то такого (например ПАВ), что не позволяет кластерам и дальше слипаться.

4 Шероховатые поверхности.

Шероховатые поверхности обычно получают методом осаждения, очень похожим на агрегацию, с той разницей, что в качестве "затравки" выступает не точка, а поверхность. Представим себе коробку с плоским квадратным дном $L \times L$ и вертикальными стенками. Сверху в нее случайным образом со скоростью ν штук в единицу времени на единицу площади



Рис. 20: (a) – идеализированный процесс образования системы (начальная стадия); (b) – ее вид по прошествии достаточного времени. В нижней части – плотное тело, в верхней – фрактальная "пена".

падают шарики радиуса *a*, которые прочно прилипают к ее дну (если попадают на дно) или к ранее уже прилипшим шарикам, если попадают на них (см. Рис.20а).

Что за структура образуется по прошествии достаточно большого времени? Оказывается, что в нижней части коробки образуется плотное нефрактальное тело: его плотность $\rho_{\text{dense}} \sim a^{-3}$ – порядка максимальной возможной (хотя, конечно, заметно меньше него), а высота $h_{\text{dense}}(t) \sim \nu t a^3$ растет со временем по тривиальному линейному закону. Верхняя поверхность этого плотного тела представляет собой слой фрактальной "пены" со средней толщиной $\overline{\Delta h}_{\text{fract}}(t)$, зависящей от времени (см. Рис.20b). Существует некоторое характерное, зависящее от размеров коробки, время

$$t_0 \sim \frac{1}{\nu a^2} (L/a)^{\gamma}, \qquad \gamma > 0.$$
 (21)

Сначала, на временах $t < t_0$, толщина поверхности $\overline{\Delta h}_{\text{fract}}$ растет со временем:

$$\overline{\Delta h}_{\text{fract}}(t) \sim a(\nu t a^2)^{\beta}, \qquad 0 < \beta < 1,$$
(22)

Позднее, на временах $t > t_0$, толщина $\overline{\Delta h}_{\text{fract}}$ перестает зависеть от времени и выходит на постоянное значение

$$\overline{\Delta h}_{\text{fract}} \sim a(L/a)^{\alpha}, \qquad \alpha = \gamma \beta < 1,$$
(23)

зависящее от размеров коробки. Численные значения критических индексов α, β , входящих в формулы (22,23) – неуниверсальны, они зависят от конкретного механизма прилипания частиц.



Рис. 21: Аэрогель.

5 Пористые вещества, аэрогели.

Пористое вещество представляет собой частный случай смеси, в качестве одной из компонент которой выступает твердое вещество, а в качестве другой – пустота. Поэтому для описания свойств пористых тел часто используют теорию перколяции. Существует, однако, одно важное отличие: В системе не может существовать конечных твердых кластеров, так как они не могут висеть в пустоте (об этом мы уже говорили в одной из лекций). Следовательно, твердая компонента всегда является связной: вся твердая часть принадлежит одному бесконечному кластеру. В обычной двухкомпонентной смеси происходят ДВА перколяционных перехода при разных значениях x, соответствующих образованию бесконечного кластера для каждой из двух компонент. В пористой системе имеется только ОДИН переход, при котором возникает бесконечный кластер пор. Около этого перехода подсистема пор обладает фрактальными свойствами.

Имеется, впрочем, и еще одна область фрактального поведения, не связанная ни с каким перколяционным переходом: это область низкой концентрации твердой компоненты $x \ll 1$. Здесь практически все поры связаны в мощный (нефрактальный) бесконечный кластер, металл же образует весьма хилый бесконечный кластер с малой плотностью P(x) = x и большой корреляционной длиной ξ (см. Рис. 21). Последний обладает ярко выраженными фрактальными свойствами на масштабах $a < L < \xi$. Эти свойства во многом похожи на свойства гелей. Иногда их называют аэрогелями, имея в виду, что они заполнены не жидкостью, как обычные гели, а воздухом..