ЖЭТФ, 2002, том 121, вып. 3, стр. 770–778

К ТЕОРИИ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ БИНАРНЫХ КОМПОЗИТОВ В СЛАБОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Б. Я. Балагуров, В. А. Кашин

Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 октября 2001 г.

Для двухкомпонентной неупорядоченной системы расчетами на ЭВМ найдена линейная по магнитному полю $\mathbf{H}$ поправка к напряженности электрического поля. С использованием этой поправки вычислены и затабулированы в графическом виде две двухпараметрические функции, входящие в выражение для магнитосопротивления, в широкой области изменения этих параметров. С помощью той же поправки определена и затабулирована производная от функции, входящей в формулу для эффективного коэффициента Холла, по одному из ее аргументов. Данные, полученные в настоящей работе, вместе с предыдущими результатами авторов позволяют дать полное описание магнитосопротивления бинарных сред (композитов) в духе гипотезы подобия.

PACS: 41.20.Cv, 72.15.Gd

1. ВВЕДЕНИЕ

Определение гальваномагнитных характеристик трехмерных неоднородных сред (в частности, бинарных композитов) является актуальной и достаточно трудной задачей даже в случае слабого магнитного поля $\mathbf{H}$. Наличие дополнительных (по сравнению со случаем $\mathbf{H} = 0$) параметров усложняет задачу и приводит, например, к возможности реализации различных типов критического поведения эффективного коэффициента Холла [1, 2]. Еще более сложного критического поведения следует ожидать для магнитосопротивления, где число дополнительных параметров значительно больше. Тем не менее в разработке теории гальваномагнитных свойств трехмерных двухкомпонентных сред в слабом магнитном поле имеется определенный прогресс.

Изучению линейного по $\mathbf{H}$ приближения — эффекта Холла — посвящен ряд работ (см., например, [1–5]). Шкловским [1] предложена удачная аппроксимационная формула для описания эффективного коэффициента Холла R_e в окрестности точки фазового перехода металл–диэлектрик. Результаты работы [1] дают качественное описание R_e в критической области, оставляя открытым вопрос о количественном подходе к этой проблеме. В работе Скал [2] получено точное (в линейном по $\mathbf{H}$ приближении) формальное выражение для R_e, однако оно не было соответствующим образом теоретически проанализировано и использовалось только для численного исследования коэффициента Холла. Наконец, в [3, 4] выражение для R_e в случае бинарных систем доведено до уровня двухпараметрической функции (см. ниже), причем дано ее явное выражение через напряженность электрического поля в среде при $\mathbf{H} = 0$. Отметим, что в [3] рассмотрен только коэффициент Холла и отсутствует способ вычисления следующих по $\mathbf{H}$ приближений.

Схема последовательного вычисления гальваномагнитных характеристик бинарных композитов в слабом магнитном поле предложена в работе [4]. В ней развита теория возмущений — разложение по степеням $\mathbf{H}$ — и кроме коэффициента Холла достаточно подробно рассмотрено магнитосопротивление. В работе [4] установлена структура квадратичной по $\mathbf{H}$ части эффективного тензора проводимости $\hat{\sigma}_e$, т. е. ее зависимость от гальваномагнитных характеристик отдельных компонент. Коэффициенты при этих характеристиках определяются свойствами среды при $\mathbf{H} = 0$ и являются функциями двух аргументов — концентрации p и отношения проводимостей компонент $h = \sigma_2/\sigma_1$. В квадратичном по $\mathbf{H}$ приближении возникает десять таких не определяемых в теории функций и еще одна — в линейном приближении.

Большая часть этих функций выражается через напряженность электрического поля в среде при $\mathbf{H} = 0$, что позволяет определять их в рамках стандартной задачи о проводимости. Кроме того, между этими функциями в [4] установлен ряд соотношений, что позволяет ограничиться вычислением только некоторых из них. В работе [5] проведен комплексный численный эксперимент, в ходе которого наряду с проводимостью определялись и упомянутые выше функции, входящие в выражения для коэффициента Холла и для магнитосопротивления. В [5] остались не определенными две функции (χ_x и χ_z), для вычисления которых необходимо найти линейную по $\mathbf{H}$ поправку к напряженности электрического поля и, тем самым, выйти за рамки задачи о проводимости.

Настоящая работа посвящена определению численными методами величин χ_x и χ_z как функций p и h в широкой области изменения этих аргументов. С этой целью проведено моделирование задачи о гальваномагнитных свойствах бинарных композитов на паре простых кубических решеток — основной и дополнительной, обобщающей двумерную дуальную на трехмерный случай. Задача об электрическом поле в среде решалась итерационным методом [5, 6] в два этапа: сначала находились потенциалы во всех узлах обеих решеток при $\mathbf{H} = 0$, а затем искались линейные по $\mathbf{H}$ поправки к ним. В обоих случаях применялся чебышевский метод полиномиального ускорения основного итерационного процесса [6]. На первом этапе использовался тот же способ контроля правильности расчетов и оценки их точности, что и в [5], — по разбросу в значениях полного тока, вычисленных в каждом сечении образца. На втором этапе соответствующий контроль осуществлялся сравнением значений функции φ (входящей в выражение для эффективного коэффициента Холла), определенных двумя разными способами, см. разд. 5.

С помощью общих формул из [4] по найденным потенциалам нулевого и первого приближений вычислялись функции χ_x и χ_z во всем интервале изменения концентрации p при трех значениях аргумента h. Соответствующие результаты представлены в графическом виде ниже на рис. 3 и 4. Достаточно подробно рассмотрено поведение величин χ_x и χ_z в окрестности точки фазового перехода металл–диэлектрик, и проведена оценка критических индексов этих функций. Таким образом, результаты, полученные в [5] и в настоящей работе, позволяют дать количественное описание магнитосопротивления бинарных композитов, свойства которых адекватно воспроизводятся в рамках решеточной модели. Для прочих неупорядоченных двухкомпонентных систем эти результаты дают качественное, «на уровне критических индексов» (т. е. в духе стандартной гипотезы подобия [7]), описание магнитосопротивления.

Знание линейной по $\mathbf{H}$ поправки $\mathbf{E}_1(\mathbf{r})$ к напряженности электрического поля позволяет по-новому подойти к проблеме изучения свойств функции φ, входящей в выражение для эффективного коэффициента Холла. Дело в том, что с помощью $\mathbf{E}_1(\mathbf{r})$ можно найти производную $\partial\varphi/\partial h$ без затруднительного численного дифференцирования. Это дает возможность найти независимым, по существу, способом критические индексы, а также один из коэффициентов в разложении φ, неопределяемый из данных для самой функции φ. Таким образом, результаты для величины φ из [5] и для производной $\partial\varphi/\partial h$ из настоящей работы позволяют дать детальное описание функции φ во всем интервале изменения каждого из ее аргументов, в том числе в критической области.

2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Проводимость изотропной среды, помещенной в магнитное поле $\mathbf{H}$, описывается тензором

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_a & 0 \\ -\sigma_a & \sigma_x & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

где принято, что $\mathbf{H}$ направлено вдоль оси z. В целях упрощения последующих формул в (1) введены обозначения: $\sigma_x = \sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, $\sigma_z = \sigma_{zz}$ и $\sigma_a = \sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$ соответственно для поперечной, продольной и недиагональной (холловской) составляющих тензора проводимости $\hat{\sigma}$. В слабом магнитном поле ($\mathbf{H} \to 0$) величина σ_a линейна по H, а поправки в σ_x и σ_z — квадратичны:

$$\begin{aligned} &\sigma_x = \sigma + \gamma_x, \quad \sigma_z = \sigma + \gamma_z; \\ &\gamma_x \propto H^2, \quad \gamma_z \propto H^2. \end{aligned} \qquad (2)$$

Здесь $\sigma = \sigma(\mathbf{r})$ — проводимость среды при $\mathbf{H} = 0$. Составляющие эффективного тензора проводимости σ_e при $\mathbf{H} \to 0$ обладают теми же свойствами, что и $\hat{\sigma}$ из (1): в разложение величины σ_{ae} входят только нечетные по H члены, а в σ_{xe} и σ_{ze} — только четные.

Для двухкомпонентной среды (бинарного композита) эффективная проводимость σ_e (при $\mathbf{H} = 0$) может быть записана в виде

$$\sigma_e = \sigma_1 f(p,h), \quad h = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}, \tag{3}$$

где p — концентрация (доля занимаемого объема) первой компоненты, σ_i — проводимость i-й компоненты. В линейном по $\mathbf{H}$ приближении для холловской составляющей согласно [4] имеем

$$\sigma_{ae} = \sigma_{a2} + (\sigma_{a1} - \sigma_{a2})\varphi(p,h). \tag{4}$$

Функция φ определяется свойствами среды при $\mathbf{H} = 0$ и может быть выражена через напряженность электрического поля [4]:

$$\varphi = \langle e_x^{(x)} e_y^{(y)} - e_y^{(x)} e_x^{(y)} \rangle^{(1)}, \tag{5}$$

$$e_\alpha^{(\nu)}(\mathbf{r}) = E_{0\alpha}^{(\nu)}(\mathbf{r}) \left(\langle E_{0\nu}^{(\nu)} \rangle \right)^{-1}. \tag{6}$$

Здесь $\langle \ldots \rangle^{(1)}$ — интеграл по объему первой компоненты, деленный на объем образца V_s, $\mathbf{E}_0^{(\nu)}(\mathbf{r})$ — напряженность электрического поля в среде при $\mathbf{H} = 0$, где индекс ν означает, что среднее (по всему объему V_s) значение $\langle \mathbf{E}_0^{(\nu)} \rangle$ направлено вдоль оси ν.

Запишем величины σ_{xe} и σ_{ze} в виде, аналогичном (2):

$$\begin{gathered} \sigma_{xe} = \sigma_e + \gamma_{xe}, \quad \sigma_{ze} = \sigma_e + \gamma_{ze}; \\ \gamma_{xe} \propto H^2, \quad \gamma_{ze} \propto H^2, \end{gathered} \tag{7}$$

где σ_e — то же, что и в (3). Согласно [4] γ_{xe} и γ_{ze} выражаются через гальваномагнитные характеристики отдельных компонент (γ_{xi}, γ_{zi} и σ_{ai}, где $i = 1, 2$) следующем образом:

$$\begin{aligned} \gamma_{xe} = \gamma_{x1}\psi_x^{(1)} + \gamma_{z1}\psi_x^{(2)} + \gamma_{x2}\psi_x^{(3)} + \gamma_{z2}\psi_x^{(4)} + \\ + \frac{(\sigma_{a1} - \sigma_{a2})^2}{\sigma_1} \chi_x, \end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} \gamma_{ze} = \gamma_{x1}\psi_z^{(1)} + \gamma_{z1}\psi_z^{(2)} + \gamma_{x2}\psi_z^{(3)} + \gamma_{z2}\psi_z^{(4)} + \\ + \frac{(\sigma_{a1} - \sigma_{a2})^2}{\sigma_1} \chi_z. \end{aligned} \tag{9}$$

Здесь безразмерные коэффициенты $\psi_x^{(a)}$, $\psi_z^{(a)}$ ($a = 1$, 2, 3, 4) и χ_x, χ_z зависят только от свойств среды при $\mathbf{H} = 0$ и являются, как f и φ, функциями аргументов p и h. Все функции $\psi_x^{(a)}$ выражаются через $\psi_z^{(a)}$ [4]:

$$\begin{aligned} \psi_x^{(1)} &= \frac{1}{2}\psi_z^{(1)} + \psi_z^{(2)}, \quad \psi_x^{(2)} = \frac{1}{2}\psi_z^{(1)}, \\ \psi_x^{(3)} &= \frac{1}{2}\psi_z^{(3)} + \psi_z^{(4)}, \quad \psi_x^{(4)} = \frac{1}{2}\psi_z^{(3)}. \end{aligned} \tag{10}$$

В свою очередь функции $\psi_z^{(a)}$ связаны между собой двумя соотношениями, содержащими безразмерную проводимость f и ее производную [4]:

$$\psi_z^{(1)} + \psi_z^{(2)} = f - h\frac{\partial f}{\partial h}, \quad \psi_z^{(3)} + \psi_z^{(4)} = \frac{\partial f}{\partial h}. \tag{11}$$

Функции $\psi_z^{(a)}$ могут быть выражены через напряженность электрического поля в среде при $\mathbf{H} = 0$ [4]:

$$\begin{aligned} \psi_z^{(1)} &= \langle \mathbf{e}_\perp^2 \rangle^{(1)}, \quad \psi_z^{(2)} = \langle \mathbf{e}_\parallel^2 \rangle^{(1)}, \\ \psi_z^{(3)} &= \langle \mathbf{e}_\perp^2 \rangle^{(2)}, \quad \psi_z^{(4)} = \langle \mathbf{e}_\parallel^2 \rangle^{(2)}, \end{aligned} \tag{12}$$

где $\langle \ldots \rangle^{(i)}$ — интеграл по объему i-й компоненты, деленный на объем образца V_s. Здесь $\mathbf{e}(\mathbf{r})$ — то же, что и в (6) (где, например, $\nu = x$), а $\mathbf{e}_\perp(\mathbf{r})$ и $\mathbf{e}_\parallel(\mathbf{r})$ — поперечная и продольная по отношению к $\langle \mathbf{E}_0 \rangle$ составляющие вектора $\mathbf{e}(\mathbf{r})$. Отметим, что с помощью дискретных аналогов формул (5) и (12) в работе [5] были вычислены и затабулированы функции φ и $\psi_z^{(a)}$ ($a = 1, 2, 3, 4$). В частности, в [5] исследовано поведение этих функций в окрестности точки фазового перехода металл–диэлектрик и даны оценки для критических индексов, а также для численных коэффициентов соответствующих разложений φ и $\psi_z^{(a)}$ в критической области.

Для определения функций χ_x и χ_z из (8) и (9) нужно знать линейную по $\mathbf{H}$ поправку $\mathbf{E}_1^{(\nu)}(\mathbf{r})$ к напряженности электрического поля: $\mathbf{E}^{(\nu)}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0^{(\nu)}(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_1^{(\nu)}(\mathbf{r}) + \ldots$ Эта поправка согласно [4] пропорциональна величине $(\sigma_{a1} - \sigma_{a2})$, так что, положив

$$\mathbf{E}_1^{(\nu)}(\mathbf{r}) = \frac{\sigma_{a1} - \sigma_{a2}}{\sigma_1} \boldsymbol{\mathcal{E}}^{(\nu)}(\mathbf{r}), \tag{13}$$

для функций χ_x и χ_z при $\langle \boldsymbol{\mathcal{E}}^{(\nu)} \rangle = 0$ будем иметь следующие выражения [4]:

$$\chi_x = \frac{\langle E_{0x}^{(x)} \mathcal{E}_y^{(\nu)} - E_{0y}^{(x)} \mathcal{E}_x^{(\nu)} \rangle^{(1)}}{\langle E_{0x}^{(x)} \rangle \langle E_{0\nu}^{(\nu)} \rangle}, \quad \nu = x, y, \tag{14}$$

$$\chi_z = \frac{\langle E_{0x}^{(z)} \mathcal{E}_y^{(z)} - E_{0y}^{(z)} \mathcal{E}_x^{(z)} \rangle^{(1)}}{\langle E_{0z}^{(z)} \rangle^2}. \tag{15}$$

Отметим, что согласно (13) величина $\boldsymbol{\mathcal{E}}^{(\nu)}(\mathbf{r})$ не содержит магнитного поля и, следовательно, имеет «нормальный» (как и $\mathbf{E}_0^{(\nu)}(\mathbf{r})$) порядок величины. При вычислении функции χ_x по формуле (14) можно в равной степени полагать как $\nu = x$, так и $\nu = y$.

Для продольного магнитосопротивления

$$\frac{\Delta\rho_{ze}}{\rho_{ze}} = \frac{\rho_{ze}(\mathbf{H}) - \rho_{ze}(0)}{\rho_{ze}(0)},$$

где $\rho_z = 1/\sigma_z$ — продольное удельное сопротивление, в квадратичном по $\mathbf{H}$ приближении имеем

$$\frac{\Delta\rho_{ze}}{\rho_{ze}} = -\frac{\gamma_{ze}}{\sigma_e} \tag{16}$$

с γ_{ze} из (9). Соответственно, для поперечного магнитосопротивления

$$\frac{\Delta\rho_{xe}}{\rho_{xe}} = \frac{\rho_{xe}(\mathbf{H}) - \rho_{xe}(0)}{\rho_{xe}(0)},$$

где $\rho_x = \sigma_x/(\sigma_x^2 + \sigma_a^2)$ — поперечное удельное сопротивление, в том же приближении имеем

$$\frac{\Delta\rho_{xe}}{\rho_{xe}} = -\left(\frac{\gamma_{xe}}{\sigma_e} + \frac{\sigma_{ae}^2}{\sigma_e^2}\right) \tag{17}$$

с σ_{ae} из (4) и γ_{xe} из (8).

Заметим, что знание поправки $\mathbf{E}_1^{(\nu)}(\mathbf{r})$ позволяет вычислить функцию φ из (4) другим, отличным от (5), способом. С помощью метода из работы [4] нетрудно показать, что для φ при $\langle\boldsymbol{\mathcal{E}}^{(\nu)}\rangle = 0$ справедливо следующее выражение:

$$\varphi = \frac{f-h}{1-h} + (1-h)\frac{\langle\mathcal{E}_x^{(y)}\rangle^{(1)}}{\langle E_{0y}^{(y)}\rangle}. \tag{18}$$

Здесь f определено в (3), $\boldsymbol{\mathcal{E}}^{(\nu)}(\mathbf{r})$ в (13). Сравнение вычисленных с помощью формул (5) и (18) значений функции φ дает возможность контролировать правильность вычисления поправки $\mathbf{E}_1^{(\nu)}(\mathbf{r})$.

С помощью метода из работы [4] можно показать также, что через $\mathbf{E}_1^{(\nu)}(\mathbf{r})$ (точнее, через $\boldsymbol{\mathcal{E}}^{(\nu)}(\mathbf{r})$) выражается производная от функции $\varphi(p,h)$ по аргументу h:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial h} = -\frac{1}{h}\,\frac{\langle\mathbf{E}_0^{(x)}\boldsymbol{\mathcal{E}}^{(y)} - \mathbf{E}_0^{(y)}\boldsymbol{\mathcal{E}}^{(x)}\rangle^{(1)}}{\langle E_{0x}^{(x)}\rangle\langle E_{0y}^{(y)}\rangle}. \tag{19}$$

Выражение (19) справедливо при $\langle\boldsymbol{\mathcal{E}}^{(x)}\rangle = \langle\boldsymbol{\mathcal{E}}^{(y)}\rangle = 0$. Вычисление производной $\partial\varphi/\partial h$ с помощью формулы (19) позволяет, во-первых, избавиться от затруднительного численного дифференцирования и, во-вторых, провести более детальное исследование функции $\varphi(p,h)$, в том числе и в критической области.

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Исследование различных свойств неоднородных сред численными методами проводится, как правило, на решеточных моделях. Так, например, электропроводность бинарных систем достаточно подробно изучена с помощью кубических решеток со случайным распределением связей двух типов — с проводимостями σ_1 и σ_2 [8] (см. также [5]) . Существенно, что при малой концентрации одной из компонент отдельная «примесная» связь дает такой же вклад в эффективную проводимость, что и сферическое включение в непрерывной задаче. Этот факт позволяет надеяться, что такая решеточная модель правильно «ухватывает» основные черты зависимости проводимости бинарного композита от ее аргументов p и h во всей области их изменения. Подобное соответствие с непрерывной задачей желательно сохранить и при исследовании с помощью решеток гальваномагнитных свойств бинарных сред.

В настоящей работе предлагается моделировать гальваномагнитные явления при помощи пары решеток — основной и дополнительной. Основная решетка — простая кубическая, связи которой с вероятностью p принадлежат к первому типу (с проводимостями σ_{x1}, σ_{z1}, σ_{a1}) и с вероятностью $(1-p)$ — ко второму (с проводимостями σ_{x2}, σ_{z2}, σ_{a2}). Дополнительная решетка — также простая кубическая — получается из основной переходом к дуальной в плоскости (x,y) и параллельным переносом вертикальных (вдоль оси z) связей, см. рис. 1. При рассматриваемом в настоящей работе случайном распределении связей основная и дополнительная решетки равноправны.

Дискретным аналогом уравнения постоянного тока $\operatorname{div}\mathbf{j} = 0$ является закон Кирхгофа — равенство суммы входящих в узел $\mathbf{r}$ токов сумме выходящих из $\mathbf{r}$ токов. Для простой кубической решетки закон

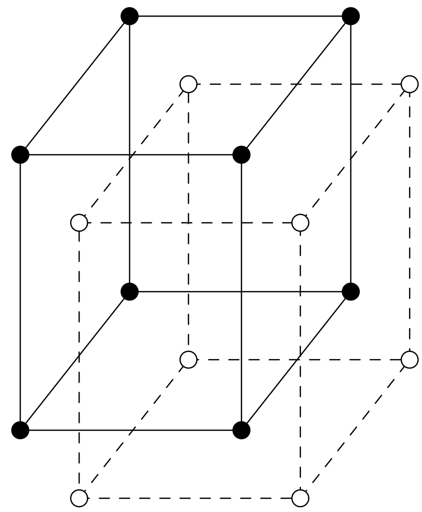

Рис. 1. Элементы основной (сплошные линии) и дополнительной (штриховые линии) решеток

Кирхгофа имеет вид

$$\sum_{\boldsymbol{\Delta}=\boldsymbol{\Delta}_x,\boldsymbol{\Delta}_y,\boldsymbol{\Delta}_z} \{j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}} - j_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta},\mathbf{r}}\} = 0, \qquad (20)$$

где суммирование проводится по ближайшим соседям: $\boldsymbol{\Delta}_x = (1,0,0)$, $\boldsymbol{\Delta}_y = (0,1,0)$, $\boldsymbol{\Delta}_z = (0,0,1)$. В (20) $j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}}$ — ток, протекающий по связи, соединяющей узлы $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}$.

Припишем каждому узлу $\mathbf{r}$ основной решетки потенциал $V_\mathbf{r}$; соответственно каждому узлу

$$\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r} + \frac{\boldsymbol{\Delta}_x}{2} - \frac{\boldsymbol{\Delta}_y}{2}$$

дополнительной решетки припишем потенциал $\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}$. Тогда для равенств, справедливых для непрерывной модели при $\mathbf{H} \neq 0$,

$$j_x = \sigma_x E_x + \sigma_a E_y, \quad j_y = -\sigma_a E_x + \sigma_x E_y, \quad j_z = \sigma_z E_z$$

(где $\mathbf{E} = -\nabla V(\mathbf{r})$), будем иметь следующие дискретные аналоги:

$$\begin{aligned} j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x} &= \sigma^x_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x}(V_\mathbf{r} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x}) + \\ &+ \sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_y}\right), \\ j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_y} &= -\sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_y}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x+\boldsymbol{\Delta}_y} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_y}\right) + \\ &+ \sigma^x_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_y}(V_\mathbf{r} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_y}), \\ j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_z} &= \sigma^z_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_z}(V_\mathbf{r} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_z}). \end{aligned} \qquad (21)$$

Здесь $\sigma^\gamma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}}$ (где $\gamma = x,z,a$) — соответствующая проводимость связи между узлами $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}$. Величины $j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_\alpha}$ (где $\alpha = x,y,z$) в (21) — выходящие из узла $\mathbf{r}$ токи. Выражения для входящих в узел $\mathbf{r}$ токов $j_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_\alpha,\mathbf{r}}$ следуют из (21) при заменах $\mathbf{r} \to \mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_\alpha$ (с $\alpha = x,y,z$) и $\boldsymbol{\rho} \to \boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_\alpha$ (с $\alpha = x,y$).

Подстановка $j_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_\alpha}$ из (21) и соответствующих выражений для $j_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_\alpha,\mathbf{r}}$ в (20) дает

$$\begin{aligned} &\sum_{\boldsymbol{\Delta}=\pm\boldsymbol{\Delta}_x,\pm\boldsymbol{\Delta}_y} = \sigma^x_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}}(V_\mathbf{r} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}}) + \\ &+ \sum_{\boldsymbol{\Delta}=\pm\boldsymbol{\Delta}_z} \sigma^z_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}}(V_\mathbf{r} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}}) = \\ &= -\sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_y}\right) + \\ &+ \sigma^a_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_x,\mathbf{r}}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x+\boldsymbol{\Delta}_y}\right) + \\ &+ \sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_y}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x+\boldsymbol{\Delta}_y} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_y}\right) - \\ &- \sigma^a_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_y,\mathbf{r}}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}\right). \end{aligned} \qquad (22)$$

Для дополнительной решетки аналогичным образом находим

$$\begin{aligned} &\sum_{\boldsymbol{\Delta}=\pm\boldsymbol{\Delta}_x,\pm\boldsymbol{\Delta}_y} \sigma^x_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}}\right) + \\ &+ \sum_{\boldsymbol{\Delta}=\pm\boldsymbol{\Delta}_z} \sigma^z_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}}\right) = \\ &= -\sigma^a_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_x}(V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x-\boldsymbol{\Delta}_y} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x}) + \\ &+ \sigma^a_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x,\boldsymbol{\rho}}(V_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_y} - V_\mathbf{r}) + \\ &+ \sigma^a_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_y}(V_\mathbf{r} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x}) - \\ &- \sigma^a_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_y,\boldsymbol{\rho}}(V_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_y} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x-\boldsymbol{\Delta}_y}). \end{aligned} \qquad (23)$$

В соответствии с процедурой построения дополнительной решетки имеют место следующие равенства:

$$\begin{gathered} \sigma^\gamma_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_x} = \sigma^\gamma_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x-\boldsymbol{\Delta}_y,\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x}, \\ \sigma^\gamma_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_y} = \sigma^\gamma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x}, \\ \sigma^\gamma_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x,\boldsymbol{\rho}} = \sigma^\gamma_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_y,\mathbf{r}}, \\ \sigma^\gamma_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_y,\boldsymbol{\rho}} = \sigma^\gamma_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_y,\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x-\boldsymbol{\Delta}_y}, \ldots, \end{gathered}$$

(где $\gamma = x,y,a$) и $\sigma^z_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}\pm\boldsymbol{\Delta}_z} = \sigma^z_{\mathbf{r},\mathbf{r}\pm\boldsymbol{\Delta}_z}$.

Совместное решение систем уравнений (22), (23) (при соответствующих граничных условиях) позволяет найти потенциалы $V_\mathbf{r}$ и $\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}$, что в свою очередь дает возможность вычислить гальваномагнитные характеристики исследуемой решеточной модели. Отметим, что уравнения (22), (23) справедливы для всех точек $\mathbf{r}$ и $\boldsymbol{\rho}$ кроме, возможно, граничных узлов (см. разд. 4).

Заметим,что если $\sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}}$ и $\sigma^a_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}}$ не зависят от координат, то правые части (22) и (23) обращаются в нуль, так что холловская составляющая σ^a из уравнений для потенциалов выпадает. Поэтому подстановка

$$\begin{aligned} \sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}} &\to \sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}} + \mathrm{const}, \\ \sigma^a_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}} &\to \sigma^a_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}} + \mathrm{const} \end{aligned} \qquad (24)$$

не меняет уравнений (22) и (23), оставляя неизменными потенциалы $V_\mathbf{r}$ и $\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}$, хотя токи (21) (и аналогичные выражения для $\tilde{j}_{\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}}$) при этом очевидным образом преобразуются. Этим заменам в непрерывном случае имеется аналог — преобразование симметрии [4] $\mathbf{E} = \mathbf{E}'$, $\mathbf{j} = \mathbf{j}' + \hat{C}\mathbf{E}'$ (где $\hat{C}$ — антисимметричный тензор, не зависящий от координат), не меняющее уравнения постоянного тока $\mathrm{rot}\,\mathbf{E} = 0$, $\mathrm{div}\,\mathbf{j} = 0$. При этом тензор проводимости преобразуется согласно $\hat{\sigma}(\mathbf{r}) \to \hat{\sigma}'(\mathbf{r}) = \hat{\sigma}(\mathbf{r}) - \hat{C}$, что эквивалентно подстановке (24). Существование такого преобразования означает, в частности, что линейная по $\mathbf{H}$ поправка к напряженности электрического поля $\mathbf{E}_1(\mathbf{r})$ пропорциональна величине $(\sigma_{a1} - \sigma_{a2})$.

Отмеченным обстоятельством можно воспользоваться следующим образом. Выбрав в (24) в качестве const холловскую составляющую тензора проводимости второй компоненты σ_{a2} (или σ_{a1}) с обратным знаком, добьемся обращения в нуль в правых частям (22) и (23) всех членов, относящихся к связям второго (или первого) типа. Этот прием можно использовать при численном анализе системы уравнений (22), (23) для некоторого упрощения расчетов.

В заключение этого раздела отметим, что решение задачи о потенциале в основной (и, соответственно, в дополнительной) решетке с одной «дефектной» связью с помощью уравнений (22) и (23) показывает почти полное совпадение с аналогичной непрерывной задачей (см. например, [9]). Единственное отличие — это замена коэффициентов деполяризации $n^{(\alpha)}$ [10] на их решеточные аналоги $N^{(\alpha)}$ (при $\sigma_x = \sigma_y \neq \sigma_z$):

$$N^{(z)} = \iiint\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{\sigma_z(1-\cos k_z)}{\sigma_x\left[(1-\cos k_x)+(1-\cos k_y)\right]+\sigma_z(1-\cos k_z)}\,\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3},$$
$$N^{(x)} = N^{(y)} = \frac{1}{2}(1-N^{(z)}). \tag{25}$$

Значения величин $N^{(\alpha)}$ численно близки к соответствующим значениям $n^{(\alpha)}$ при всех $\sigma_x/\sigma_z \lesssim 1$. В частности, при $\sigma_x=\sigma_y=\sigma_z$ для $N^{(\alpha)}$, как и для $n^{(\alpha)}$, имеем $N^{(x)}=N^{(y)}=N^{(z)}=1/3$.

4. ОРГАНИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В настоящей работе численный эксперимент поставлен на паре простых кубических решеток размера $N\times N\times N = 51\times 51\times 51$ узлов или, соответственно, $50\times 50\times 50$ связей каждая. В общем случае немалых магнитных полей $\mathbf{H}$ системы уравнений (22), (23) для $V_\mathbf{r}$ и $\tilde V_{\boldsymbol\rho}$ необходимо решать совместно. В слабом магнитном поле систему (22), (23) можно решать с помощью теории возмущений — разложением по степеням $\mathbf{H}$. В этом случае потенциалы $V_\mathbf{r}$ и $\tilde V_{\boldsymbol\rho}$ представляются рядами

$$V_\mathbf{r} = V_\mathbf{r}^{(0)} + V_\mathbf{r}^{(1)} + \ldots, \quad \tilde V_{\boldsymbol\rho} = \tilde V_{\boldsymbol\rho}^{(0)} + \tilde V_{\boldsymbol\rho}^{(1)} + \ldots, \tag{26}$$

где $V_\mathbf{r}^{(n)}$ и $\tilde V_{\boldsymbol\rho}^{(n)}$ — члены n-го порядка по $\mathbf{H}$.

В нулевом по $\mathbf{H}$ приближении для потенциалов $V_\mathbf{r}^{(0)}$ имеем систему уравнении

$$\sum_{\boldsymbol\Delta} \sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol\Delta}\left(V_\mathbf{r}^{(0)} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol\Delta}^{(0)}\right) = 0, \tag{27}$$

где $\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol\Delta}$ — проводимость (при $\mathbf{H}=0$) связи между узлами $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}+\boldsymbol\Delta$; суммирование в (27) ведется по всем ближайшим соседям. Величина $\sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol\Delta}$ принимает значение σ_1 с вероятностью p («чистые» связи) и σ_2 — с вероятностью $(1-p)$ («дефектные» связи). Узлам двух противоположных внешних граней решетки, перпендикулярных оси x, приписываются постоянные значения потенциала — соответственно 0 и 1. В направлениях осей y и z задаются периодические граничные условия.

При проведении конкретных расчетов система уравнений (27) записывается, как и в [5], в квазиодномерном виде

$$\hat A \mathbf{v}^{(0)} = \mathbf{b}^{(0)}. \tag{28}$$

Здесь $\hat A$ — квадратная матрица размера $M\times M$, где $M=(N-1)^2(N-2)$, имеющая так называемый ленточный вид. Вектор $\mathbf{v}^{(0)}$ — столбец из M элементов, составленный из искомых потенциалов $V_\mathbf{r}^{(0)}$; вектор $\mathbf{b}^{(0)}$ — столбец, состоящий из M элементов, из которых только $(N-1)^2$ отличны от нуля. Ненулевая правая часть в (28) возникает из-за того, что система уравнений (27) непригодна для узлов, находящихся на внешних гранях решетки, перпендикулярных оси x.

Задача о нахождении в нулевом приближении потенциалов $\tilde V_{\boldsymbol\rho}^{(0)}$, подчиняющихся системе уравнений

$$\sum_{\boldsymbol\Delta} \sigma_{\boldsymbol\rho,\boldsymbol\rho+\boldsymbol\Delta}\left(\tilde V_{\boldsymbol\rho}^{(0)} - \tilde V_{\boldsymbol\rho+\boldsymbol\Delta}^{(0)}\right) = 0, \tag{29}$$

в узлах дополнительной решетки ставилась аналогичным образом. В этом случае граничные значения потенциала (0 и 1) присваивались узлам, находящимся на противоположных внешних гранях дополнительной решетки, перпендикулярных оси y; в направлениях осей x и z задавались периодические граничные условия. При проведении конкретных расчетов система (29) также записывалась в квазиодномерном виде

$$\hat{\tilde{A}}\tilde{\mathbf{v}}^{(0)} = \tilde{\mathbf{b}}^{(0)}. \tag{30}$$

Матрица $\hat{\tilde{A}}$ и векторы $\tilde{\mathbf{v}}^{(0)}$ и $\tilde{\mathbf{b}}^{(0)}$ строятся аналогично соответствующим величинам из (28).

Системы уравнений (28) и (30) решались на ЭВМ итерациями с применением, как и в [5], чебышевского метода полиномиального ускорения основного итерационного процесса [6]. Найденные таким образом потенциалы $V_{\mathbf{r}}^{(0)}$ и $\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}^{(0)}$ использовались, в частности, для определения функции φ с помощью формулы типа (5), что служило одним из способов проверки правильности вычислений (см. ниже). Однако главное предназначение этих величин — быть «затравочными» потенциалами при вычислении линейных по $\mathbf{H}$ поправок к $V_{\mathbf{r}}^{(0)}$ и $\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}^{(0)}$.

В линейном по $\mathbf{H}$ приближении для величин $V_{\mathbf{r}}^{(1)}$ из (22) следует система уравнений

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{\Delta}} \sigma_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}} \left(V_{\mathbf{r}}^{(1)} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}}^{(1)}\right) = \\ = -\sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_x}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}^{(0)} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_y}^{(0)}\right) + \\ + \sigma^a_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_x,\mathbf{r}}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x}^{(0)} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x+\boldsymbol{\Delta}_y}^{(0)}\right) + \\ + \sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_y}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x+\boldsymbol{\Delta}_y}^{(0)} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_y}^{(0)}\right) - \\ - \sigma^a_{\mathbf{r}-\boldsymbol{\Delta}_y,\mathbf{r}}\left(\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\Delta}_x}^{(0)} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}^{(0)}\right).\end{aligned} \tag{31}$$

Воспользуемся описанным в разд. 3 приемом и сделаем замену $\sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}} \to \sigma^a_{\mathbf{r},\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}} - \sigma_{a2}$. В этом случае в правой части (31) отличны от нуля только члены, относящиеся к связям первого типа, причем они пропорциональны величине $(\sigma_{a1}-\sigma_{a2})$. Проведем поэтому еще одну замену

$$V_{\mathbf{r}}^{(1)} = \frac{\sigma_{a1} - \sigma_{a2}}{\sigma_1}\, U_{\mathbf{r}}. \tag{32}$$

В результате уравнение для $U_{\mathbf{r}}$, следующее из (31) и записанное в квазиодномерном виде

$$\hat{A}\mathbf{u} = \mathbf{b}^{(1)}, \tag{33}$$

не содержит малого параметра $(\sigma_{a1}-\sigma_{a2})/\sigma_1$. В (33) матрица $\hat{A}$ — та же, что и в (28), $\mathbf{u}$ — столбец, составленный из величин $U_{\mathbf{r}}$, $\mathbf{b}^{(1)}$ — столбец, происходящий из правой части (31). Отметим, что на внешних гранях решетки, перпендикулярных оси x, величины $U_{\mathbf{r}}$ (как и $V_{\mathbf{r}}^{(1)}$) равны нулю.

Уравнение (33) отличается от (28) только видом правой части. Поэтому оно решалось точно тем же методом, что и (28). Таким же способом находились и линейные по $\mathbf{H}$ поправки $\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}^{(1)}$ к потенциалам и $\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}^{(0)}$. Найденные в результате величины $V_{\mathbf{r}}^{(1)}$ и $\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}^{(1)}$ использовались при вычислении функции φ, ее производной $\partial\varphi/\partial h$ и функции χ_x, см. разд. 5. Для определения функции χ_z проводилась аналогичная процедура по вычислению $V_{\mathbf{r}}^{(0)}$ и $V_{\mathbf{r}}^{(1)}$ при условии, что разность потенциалов приложена в направлении оси z.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

При использовании формул (5), (14), (18) и (19) для вычисления соответствующих эффективных гальваномагнитных характеристик решеток делаются следующие замены:

$$\begin{aligned} E_{0\alpha}^{(x)}(\mathbf{r}) &\to V_{\mathbf{r}}^{(0)} - V_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_\alpha}^{(0)}, \\ E_{0\alpha}^{(y)}(\mathbf{r}) &\to \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}^{(0)} - \tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_\alpha}^{(0)}, \\ \mathcal{E}_{\alpha}^{(y)}(\mathbf{r}) &\to U_{\mathbf{r}} - U_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\Delta}_\alpha}, \\ \mathcal{E}_{\alpha}^{(x)}(\mathbf{r}) &\to \tilde{U}_{\boldsymbol{\rho}} - \tilde{U}_{\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\Delta}_\alpha} \end{aligned} \tag{34}$$

$(\alpha = x, y, z)$ и вместо интегрирования проводится суммирование по узлам. В (34) $\tilde{U}_{\boldsymbol{\rho}}$ связано с $\tilde{V}_{\boldsymbol{\rho}}^{(1)}$ соотношением вида (32). При определении функции χ_z с помощью (15) применялись аналогичные замены с использованием потенциалов $V_{\mathbf{r}}^{(0)}$ и $V_{\mathbf{r}}^{(1)}$, вычисленных при условии, что разность потенциалов приложена вдоль оси z.

Определение функции $\varphi(p,h)$ с помощью формул (5), (18) и сравнение с данными работы [5] показало, что все три результата в пределах точности вычислений совпадают во всей области изменения аргументов p и h. Это совпадение служит, в частности, подтверждением правильности определения поправки $\mathbf{E}_1(\mathbf{r})$.

Согласно [4, 5] в окрестности точки фазового перехода металл–диэлектрик ($h \ll 1$, $|\tau| \ll 1$, $\tau = (p-p_c)/p_c$, где p_c — критическая концентрация) функция $\varphi(p,h)$ в рамках гипотезы подобия ведет себя следующим образом:

$$\begin{aligned} &\tau > 0, \quad \Delta_0 \ll \tau \ll 1: \\ &\quad \varphi = \tau^l \left\{C_0 + C_1 \frac{h}{\tau^{t/s}} + \ldots\right\}, \\ &|\tau| \ll \Delta_0: \quad \varphi = h^u\left\{c_0 + c_1\frac{\tau}{h^{s/t}} + \ldots\right\}, \\ &\tau < 0, \quad \Delta_0 \ll |\tau| \ll 1: \\ &\quad \varphi = \frac{h^2}{(-\tau)^r}\left\{D_2 + D_3\frac{h}{(-\tau)^{t/s}} + \ldots\right\}, \end{aligned} \tag{35}$$

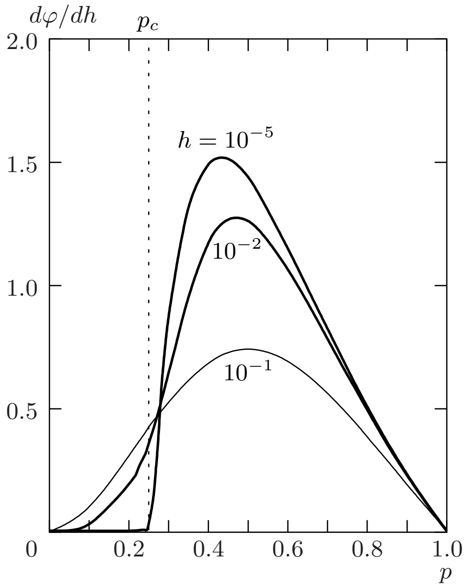

Рис. 2. Производная $\partial\varphi/\partial h$ как функция концентрации первой компоненты p при трех значениях аргумента h

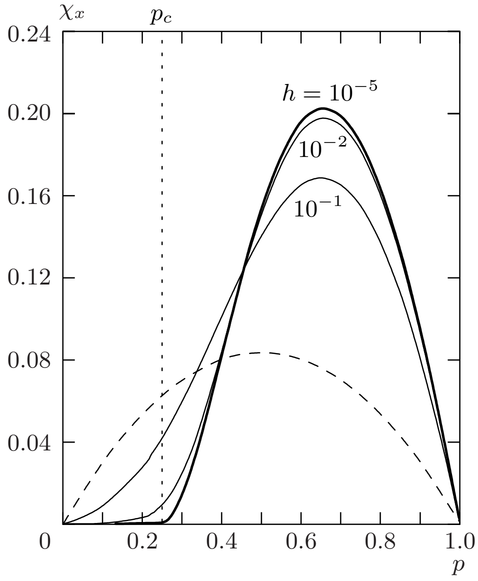

Рис. 3. Величина $\chi_x(p,h)$ как функции концентрации при трех значениях аргумента h (сплошные линии). Штриховой кривой изображена зависимость χ_x от p при $h=1$: $\chi_x(p,1) = p(1-p)/3$

где $\Delta_0 = h^{s/t}$ — размер области размазки [7], а t и s — критические индексы эффективной проводимости. Индексы l, u и r связаны двумя соотношениями [4], из которых u и r можно выразить через l:

$$u = \frac{s}{t}l, \quad r = 2\frac{t}{s} - l. \tag{36}$$

Для критических индексов проводимости имеют место следующие оценки (см., например, [5]):

$$t \approx 2, \quad s \approx 0.7 \quad q \approx 0.8, \tag{37}$$

где q — третий индекс проводимости, связанный с t и s соотношением [7]: $q + t = t/s$. Обработка данных численных экспериментов по определению функции φ, проведенных в [5] и в настоящей работе, дает

$$\begin{gathered} l = 3.7 \pm 0.4, \quad u = 1.3 \pm 0.1, \quad r = 1.7 \pm 0.2, \\ C_0 = 0.3 \pm 0.3, \quad c_0 = 1.4 \pm 0.7, \\ D_2 = 1.5 \pm 0.8. \end{gathered} \tag{38}$$

Производная $\partial\varphi/\partial h$, вычисленная с помощью формулы (19), представлена на рис. 2. Критическое поведение величины $\partial\varphi/\partial h$ находится дифференцированием разложений (35). Обработка по соответствующим формулам результатов численного эксперимента для $\partial\varphi/\partial h$ дает

$$\begin{gathered} l - \frac{t}{s} = 0.9 \pm 0.6, \quad u - 1 = 0.33 \pm 0.1, \\ r = 1.8 \pm 0.3, \quad C_1 = 2.9 \pm 2.1, \\ uc_0 = 1.8 \pm 0.8, \quad 2D_2 = 2.8 \pm 0.6. \end{gathered} \tag{39}$$

Сравнение (38) с (39), (37) показывает удовлетворительное (с учетом довольно большой погрешности определения индексов и особенно численных коэффициентов) согласие в значениях этих величин, полученных двумя разными способами. Отметим, что коэффициент C_1 может быть определен только из данных для $\partial\varphi/\partial h$.

Функции $\chi_x(p,h)$ и $\chi_z(p,h)$, вычисленные с помощью формул (14) и (15), представлены на рис. 3 и 4. В окрестности точки фазового перехода металл–диэлектрик для функций χ_x и χ_z следует ожидать критического поведения вида (выписываем только главные члены соответствующих разложений)

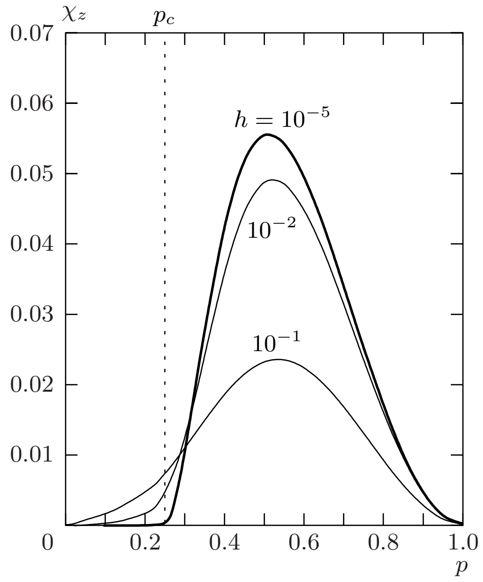

Рис. 4. Величина $\chi_z(p,h)$ как функция концентрации при трех значениях аргумента h

$$\begin{aligned}
&\tau > 0, \quad \Delta_0 \ll \tau \ll 1: \quad \chi_x \approx X_0 \tau^{t_x}, \\
&\quad \chi_z \approx Z_0 \tau^{t_z}, \\
&|\tau| \ll \Delta_0: \quad \chi_x \approx x_0 h^{s_x}, \quad \chi_z \approx z_0 h^{s_z}, \\
&\tau < 0, \quad \Delta_0 \ll |\tau| \ll 1: \quad \chi_x \approx X_2 \frac{h^2}{(-\tau)^{q_x}}, \\
&\quad \chi_z \approx Z_2 \frac{h^2}{(-\tau)^{q_z}}.
\end{aligned} \tag{40}$$

Критические индексы в разложениях (40) связаны соотношениями, аналогичными (36):

$$\begin{aligned}
s_x &= \frac{s}{t} t_x, \quad q_x = 2\frac{t}{s} - t_x, \\
s_z &= \frac{s}{t} t_z, \quad q_z = 2\frac{t}{s} - t_z.
\end{aligned} \tag{41}$$

Обработка данных численного эксперимента для $\chi_x(p,h)$ и $\chi_z(p,h)$ в критической области дает

$$\begin{aligned}
&t_x = 1.9 \pm 0.1, \quad s_x = 0.74 \pm 0.03, \\
&q_x = 3.3 \pm 1.1, \quad X_0 = 0.26 \pm 0.05, \\
&x_0 = 0.26 \pm 0.04, \quad X_2 = 2.1 \pm 1.1,
\end{aligned} \tag{42}$$

$$\begin{aligned}
&t_z = 1.86 \pm 0.14, \quad s_z = 0.67 \pm 0.08, \\
&q_z = 3.4 \pm 1.2, \quad Z_0 = 0.3 \pm 0.1, \\
&z_0 = 0.3 \pm 0.2, \quad Z_2 = 1.8 \pm 1.1.
\end{aligned} \tag{43}$$

Критические индексы из (42) и (43) удовлетворяют пределах погрешности их определения соотношениям (41).

Для случайно-неоднородных двухкомпонентных сред для величин χ_x и χ_z справедливы равенства [5]

$$\begin{aligned}
\chi_x(p,h) &= \frac{1}{h} \chi_x\left(1-p, \frac{1}{h}\right), \\
\chi_z(p,h) &= \frac{1}{h} \chi_z\left(1-p, \frac{1}{h}\right).
\end{aligned} \tag{44}$$

С помощью этих соотношений функции $\chi_x(p,h)$ и $\chi_z(p,h)$ могут быть найдены при $h > 1$, если они известны при $h < 1$ во всем интервале изменения концентрации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. И. Шкловский, ЖЭТФ **72**, 288 (1977).
2. А. С. Скал, ДАН СССР **260**, 602 (1981).
3. D. J. Bergman and D. Stroud, Phys. Rev. B **32**, 6097 (1985).
4. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **93**, 1888 (1987).
5. Б. Я. Балагуров, В. А. Кашин, ЖЭТФ **110**, 1001 (1996).
6. Л. Хейгеман, Д. Янг, *Прикладные итерационные методы*, Мир, Москва (1986).
7. A. L. Efros, B. I. Shklovskii, Phys. Stat. Sol. (b) **76**, 475 (1976).
8. S. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **45**, 574 (1973).
9. Б. Я. Балагуров, ФТТ **28**, 3012 (1986).
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1992).