VI. Perkolationsphänomene

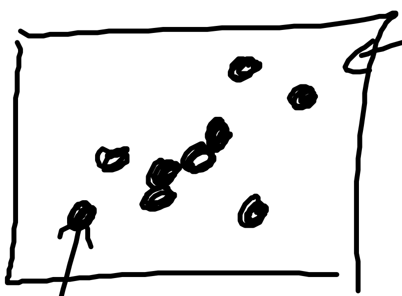
VI.1. Was ist Perkolation

(s. Schwabl)

Beispiele

i) Zweidimensionale elektr. Leiter mit kontinuierlich verteilten Löchern

Filme aus metallischen Legierungen



sei p: Bruchteil der leitende Fläche

Vorstellung:

$p < p_c$: Leitende Flächenstücke haben keine durchgehende Brücke

„Es gibt nur endliche Cluster"

$\longrightarrow$ Insgesamt verschwindet die Leitfähigkeit der Gesamtfläche

$p > p_c$: Leitende Verbindung von einem Ende der Fläche zum andere

„Es gibt einen unendlich großen Cluster"

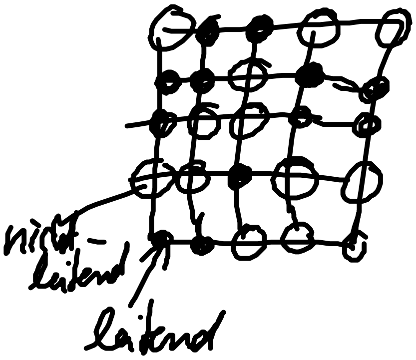
Man nennt p_c die Perkolationsschwelle und das ganze Phänomen einen „Perkolationsphasenübergang"

Bemerkung:

- Dies ist ein Beispiel für Kontinuumsperkolation
- Perkolationsübergang ist ein Phasenübergang geometrischer Natur!

  (im Unterschied zu den früher diskutierten thermischen Phasenübergängen!

ii) Zweidimensionaler Leiter, ~~er~~ der auf einem Gitter „lebt"



Geordnetes Gitter. Nicht alle Plätze sind mit leitenden Elementen besetzt!

p : Wahrsch., daß ein Platz besetzt ist

mit einem leitenden Element

$1-p$: " " ein Platz besetzt ist

$p < p_c$: Leitende Elemente bilden nur kleine Inseln

„isolierende Phase"

$p = p_c$: Es gibt gerade einen durchgehende Verbindung, d.h. einen "unendlichen" oder systemüberspannenden Cluster

(Def.: Zwei Gitterplätze gehören dann zum selben Cluster, wenn es zwischen ihnen eine Verbindung über besetzte nächste Nachbarn gibt!)

$\longrightarrow$ Strom kann perkolieren!

$p > p_c$: "leitende Phase"

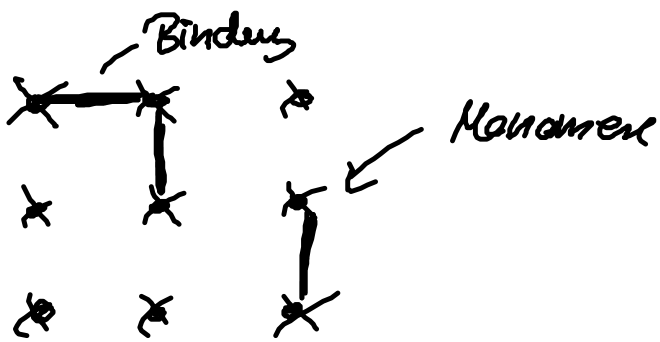
Dies ist ein Beispiel für <u>"site-percolation"</u>

(iii) Sol-Gel-Übergang

Übergang von einer Lösung, z.B. von Atomen oder kleinen Molekülen, in Gelatine

(z.B. Kochen eines Eis!)

Illustration anhand eines Gittermodells



Gitter aus Monomere, die sich verbinden zu großen Makromoleküle;

sei p: Wahrsch. zur Ausbildung einer Bindung

$p < p_c$: Bildung endlich großer Makromoleküle

$p > p_c$: Ausbildung eines systemübergreifenden Netzwerks aus Monomeren (unendliche Cluster)

Dies ist ein Beispiel für „Bond-percolation"

Weitere Beispiele, wo Perkolation wichtig ist: Epidemien (SARS!), Waldbrände

VI.2 Zusammenhang Perkolation ⟷ chemischer Phasenübergang (2. Ordnung)

Ordnungsparameter

P_∞ : Wahrsch., daß ein besetzter Platz (site percolation), oder eine Bindung (bond percolation) zu einem unendlichen Cluster gehört

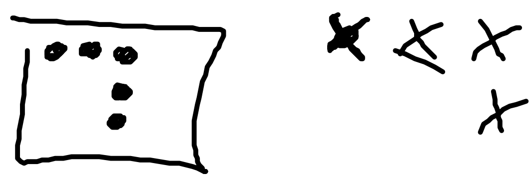
Es gilt: $P_\infty = \begin{cases} 0, & p < p_c \\ (p-p_c)^\beta, & p > p_c \end{cases}$

analog zum Ferromagnet: $M \sim (T_c - T)^\beta$ für $T < T_c$

Korrelationslänge

charakterisiert hier die linearen Abmessungen der endlichen Cluster (für $p < p_c$)

genauer: mittlerer Abstand zweier Gitterpunkte bzw. Bindungen im selben endlichen Cluster



es gilt: $\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}$ divergiert für $p \to p_c$!

Suszeptibilität

hier: ~~mitt~~ Maß für die mittlere Zahl von Plätzen in einem endlichen

Cluster $\quad S \sim |p-p_c|^{-\gamma}$ divergiert!

- man nennt β, ν, γ kritische Exponenten, analog zum Phasenübergang 2. Ordnung
- Es gibt auch bei der Perkolation das Thema der Universalität!

konkret: Die Exponenten sind unabhängig von der Art des Gitters (z.B. fcc, bcc)

und sie sind unabhängig von der <u>Art</u> der Perkolation!

(bond percolation, site percolation, Kontinuum)

— aber sie hängen ab von der ~~Dim~~ Raumdimension des Gitters!

VI.3 Theoretische Beschreibung des Perkolationsübergangs

betrachte folgende wichtige Größen (relevant für $p < p_c$)

n_s : Zahl der Cluster der Größe s
relativ zur Zahl aller Gitterplätze
(N)

$$\Rightarrow \quad s\,n_s : \quad \frac{\text{Zahl der Gitterplätze in Clustern der Größe } s}{N}$$

$\hat{=}$ Wahrscheinlichkeit, daß ein Platz
einem Cluster der Größe s angehört!

außerdem:

$$\sum_{s=1}^{\infty} n_s = \frac{\text{Zahl } \underline{\text{aller}} \text{ Cluster}}{N}$$

$$\sum_{s=1}^{\infty} s\,n_s = \frac{\text{Zahl } \underline{\text{aller}} \text{ Gitterplätze in Clustern}}{N}$$

$$= \frac{\text{Zahl aller besetzten (bzw. gebundenen) Gitterplätze}}{N}$$

= Wahrsch., daß der Platz zu irgendeinem endlichen großen Cluster gehört!

$= p$

Betrachte nun noch die mittlere Größe eines Clusters. ($p<p_c$)

$$S = \sum_{s=1}^{\infty} s \underset{\substack{\uparrow \\ \text{"mal"}}}{\times} \text{Wahrsch. für das Auftreten eines Clusters der Größe } s$$

$$= \sum_{s=1}^{\infty} s \times \frac{\text{Zahl der Plätze in Clustern der Größe } s}{\text{Zahl aller besetzten Plätze}}$$

$$= \sum_{s=1}^{\infty} s \times \frac{s n_s \cdot \cancel{N}}{p \cdot \cancel{N}} = \sum_{s=1}^{\infty} s \times \frac{s n_s}{p}$$

$$= \frac{1}{p} \sum_{s=1}^{\infty} s^2 n_s$$

betrachte jetzt Situation $p > p_c$

d.h. $P_\infty > 0$

Wahrsch., daß ein besetzter Platz zum unendl. Cluster gehört

Es muß für jeden beliebigen Gitterplatz gelten:

allgemeine Summenregel

$$\boxed{\underbrace{1-p}_{\text{Wahrsch., daß ein Platz unbesetzt ist}} + \underbrace{\sum_s s n_s}_{\text{Wahrsch., daß ein Platz besetzt ist und zu einem endlich großen Cluster gehört}} + p P_\infty = 1}$$

Wahrsch., daß der Platz besetzt ist und zu einem unendlich großen Cluster gehört

Spezialfall:

$p < p_c$: $\quad P_\infty = 0$

$$1 - p + \sum_s s n_s = 1$$

konsistent mit unserer früheren Aussage, daß $\sum_s s n_s = p$!