

1. Képzeljünk el egy gyümölcsös-kert, amelyben a fák szabályos négyzetrácsban helyezkednek el. Ha egy betegség valamelyik fánál felüti a fejét, akkor az átterjedhet a szomszédos fákra. Az átterjedés *véletlenszerű* és  $p$  valószínűséggel következik be. Ez a  $p$  függ a fák egymástól mért távolságától: minél közelebb vannak egymáshoz a fák, annál valószínűbb, hogy a fertőzés átterjed. Hogyan lehet a fákat elég közel ültetni egymáshoz, hogy sok gyümölcsfánk legyen és ugyanakkor elkerülni, hogy az egész kertre kiterjedő járványok keletkezzenek?

2. A hagyományos eszpresszó-kávéfőző vázlatát mutatja az 1. ábra. Melegítés hatására a víz fölött a gőznyomás megnő és átnyomja a vizet a tölcséren, amelyben a kávéőrleményt elhelyezték. A kávészemcsék közötti úton áthaladva a forró víz kioldja a kávé hatóanyagait. Minél sűrűbben pakolják a kávé, annál zegzugosabb, hosszabb lesz a víz útja – annál erősebb lesz az ital. Túl nagy sűrűség esetén azonban előfordulhat, hogy a víz az adott nyomáson nem talál kivezető utat – a kávéfőző felrobbanhat. (A kávéfőző angolul percolator; percolation = szivárgás.)

1986-12-465-1.eps

1. ábra

3. Glicerol és valamilyen kétértékű szerves sav észteresedésénél térháló jön létre. Az egyszerűség kedvéért jelöljük a glicerolt egy ponttól kiinduló három pálcikával, annak megfelelően, hogy három alkoholos „lába” van (a 2. ábra bal oldalán látunk ilyet), a kétértékű savat pedig egy pontból kiinduló két pálcikával (ilyen a 2. ábra jobb oldalán látható). (Az  $x$ -szel jelölt helyekről vízkilépés történik.) A kialakuló térháló elérheti az edény méreteit és mechanikai szilárdságot adhat a rendszernek. Ez a gél fázis. Hasonló átmenet figyelhető meg pl. kocsonya készítésekor, vagy a gumi vulkanizálásánál.

1986-12-465-2.eps

2. ábra

4. Tekintsünk egy kristályrácsot, amelyben mágneses atomok vannak  $p$  koncentrációval, vagyis az atomok  $p$ -ed része mágneses. Tegyük fel továbbá, hogy a mágneses kölcsönhatás rövid hatótávolságú, csak közvetlen szomszédokra terjed ki. Alacsony  $p$  érték esetén a mágneses atomok kis szigetekben helyezkednek el, amelyek nem érzik egymás hatását. Növelve  $p$ -t egyre nagyobb fürtöket találhatunk, amelyekben (elegendően alacsony hőmérsékleten) az „elemi mágnesek” párhuzamosan állnak, de mivel az egyes fürtök függetlenek egymástól, kioltják egymás hatását, és kifelé a rendszer továbbra sem mágneses. Ahhoz, hogy 0-tól különböző mágnessétséget kapjunk,  $p$ -t addig kell növelni, amíg meg nem jelenik egy, az egész rendszerre kiterjedő fürt, mágneses atomokból (3. ábra).

1986-12-465-3.eps

3. ábra

5. Készítsünk keveréket vezető és szigetelő elemekből (pl. acélgolyók + homok). Mérjük a rendszer vezetőképességét! A vezetőképesség gyakorlatilag 0 lesz, amíg nem jön létre egy út a töltéshordozók számára, amely az egész rendszerre kiterjed. Lesz tehát egy olyan kritikus koncentrációja az acélgolyóknak, aminél a vezetőképesség elkezd növekedni.

A fenti példák közös vonása, hogy bennük rendezetlenség hatására létrejövő véletlen kapcsolatok döntő szerepet játszanak. Mivel hasonló jelenségekkel nagyon sok területen lehet találkozni, érdemes elvonatkoztatni a konkrét tulajdonságoktól és a közös jellemzőket tartalmazó modellt vizsgálni. Ez a perkolációs modell.

Képzeljünk el egy *végtelen rácsot*, amelyben a kötések  $p$  valószínűséggel *betöltöttek* (feketék), és  $1-p$  valószínűséggel nem betöltöttek (fehérek). A 4. ábra a négyzetrács példáját mutatja. Az egymásból betöltött (fekete) éleken keresztül elérhető rácspontok együttese *fürtöt* alkot.

1986-12-466-1.eps

4. ábra

A betöltöttség jelenthet fertőzésátvitelt (1), a kávészemcsék között a folyadék számára járható utat (2), kialakult kémiai kötést (3) stb. Az itt ismertetett modell a *kötéssperkoláció*. Ha nem a rács kötéseit, hanem pontjait töltjük be  $p$  valószínűséggel (pl. 3. ábra), akkor rácspont-perkolációs problémával állunk szemben. Növeljük a  $p$ -t 0-tól 1-ig. Kezdetben csak kis elszigetelt fürtöket látunk. Lesz azonban egy kritikus érték,  $p_c$ , amelynél megjelenik egy, az egész rendszerre kiterjedő *végtelen fürt*.

1986-12-466-2.eps

5. ábra

Legyen  $P_\infty$  annak a valószínűsége, hogy egy tetszőlegesen kiválasztott rácspont a végtelen fürthöz tartozik. Ez a perkolációs valószínűség. Nyilván  $p < p_c$ -re  $P_\infty = 0$ . Az 5. ábrán folytonos vonallal vázoltuk  $P_\infty$  változását  $p$  függvényében. Egészen közel  $p_c$ -hez  $P_\infty$  arányos  $(p - p_c)^\beta$ -nal, ahol  $\beta$  egy *kritikus exponens*. Az exponens értéke csak a perkolációs rendszer *dimenziójától* függ, tehát attól nem, hogy háromszög vagy négyzetrácson stb. vizsgáljuk a perkolációt, rácspont- vagy kötés-betöltést nézünk. A kritikus exponensnek ezt a nagyfokú függetlenségét a körülményektől *univerzalitásnak* nevezzük. (Hasonló jelenségekkel a termodinamikai fázisátalakulásoknál – pl. folyadék – gőz átmenetnél lehet találkozni.) Az univerzalitás alapján várható, hogy valódi fizikai rendszerekben, ahol perkolációs átmenet van, a  $\beta$  értéke megegyezik a modellen definiáltéval: 0,139 két dimenzióban és 0,45 háromban. Egy dimenzióban  $\beta$  nincsen értelmezve, hiszen egy láncot teljesen be kell tölteni ahhoz, hogy végtelen fürtt alakuljon ki rajta – ezért  $p_c = 1$  és nincsen  $p > p_c$  tartomány. Egy dimenzióban azt is meg lehet mondani, hogy mi adott  $p$ -nél az  $s$  méretű fürthöz tartozás valószínűsége (tetszőlegesen kiszemelt pontra). Ez a valószínűség pl. rácspont-perkoláció esetén  $s(1-p)^2 p^s$ , amint azt az olvasó könnyen igazolhatja.

Sajnos a fizikailag érdekes két- és háromdimenziós esetben már nem ilyen egyszerű a helyzet. Egzaktnál ismert még néhány kétdimenziós probléma kritikus pontja – pl. a négyzetrács kötésperkolációnál  $p_c = 1/2$ . (Az 1. példában feltett kérdésre tehát azt lehet válaszolni, hogy a fákat olyan távol kell egymástól ültetni, hogy  $p < 1/2$  legyen.) De már a  $P_\infty$  függvényt ilyenkor sem ismerjük, és általában már  $p_c$  meghatározásához is *közelítő módszerekhez* kell folyamodni.

Az egyik legalkalmasabb eljárás a rendszer számítógépes lejátssza, *szimulálása*. A véletlen betöltéshez ún. véletlenszámok kellenek. Ilyeneket a Monte Carlo-i rulett segítségével állíthatunk elő, (innen a véletlenszámokat használó számítások elnevezése: Monte Carlo módszer). Célszerű azonban a véletlenszámokat számítógépen meghatározni. A *véletlenszám-generátorok* olyan algoritmusok, amelyek a (0, 1) intervallumban egyenletesen elosztott véletlen számokat állítanak elő. Mivel egy algoritmus valójában meghatározott módon kiszámít egy értéket, helyesebb ál- vagy pszeudovéletlenszámokról beszélni, amelyek a matematikában megfogalmazott követelmények alapján véletlenszámoknak tekinthetők. Példák véletlenszám-generátorokra BASIC nyelven:

```
x = 1 - 1.99999 * ABS(X - 0.5)
vagy A=23876519 * X : X=A-INT (A/12975433) * 12975433 : X=X/M
```

A legtöbb számítógépen beépített véletlenszám-generátor is található, pl. a COMMODORE 64-en RND(1).

A következő BASIC-program a *négyzetrács rácspontperkolációs* problémát szimulálja (C 64-en):

```
1 INPUT "L"; L : INPUT "P"; P
2 FOR J = 1 TO L : FOR K = 1 TO L
3 IF RND(1) > P THEN GOTO 5
4 POKE 55270 + 40 * J + K, 1 : POKE 998 + 40 * J + K
5 NEXT K : NEXT J
6 END
```

A program első sora az  $L \times L$ -es minta méretét és a  $P$  betöltési valószínűséget olvassa be. A második sorban egy kettős ciklus kezdődik ( $K$  a sorokat,  $J$  az oszlopokat jelöli a mintán). A 3. sort lehet Monte Carlo döntésnek nevezni: itt dől el, hogy a  $K, J$  koordinátájú pont betöltésre kerül-e. Ha a generált véletlenszám ( $RND(1)$ ) kisebb vagy egyenlő  $P$ -vel akkor igen, különben a ciklus végére (5. sor) ugrunk. Betöltés esetén a képernyő megfelelő négyzetét fehérre festi a 4. sor. Mire a program lefut, a képernyőn előttünk áll egy perkolációs minta. Ezen szemmel eldönthető, hogy lehet-e É-D vagy K-NY irányban perkolálni. Különböző  $p$  értékek beadásával a kritikus pontról lehet információt szerezni. Fontos a rendszer kis méretéből eredő erős *ingadozásokat* statisztika segítségével kiszűrni, és figyelembe venni, hogy lehetnek a véges mérettel együtt változó ún. *szisztematikus eltérések*. (Tájékoztatóul:  $p_c \approx 0,593$ .)

Térjünk most át valamilyen fizikai tulajdonság perkolációs rendszeren történő kiszámítására. A legkézenfekvőbb feltenni, hogy egy kötésperkolációs rácson a betöltött éleknek  $R$  ellenállásuk van, a be nem töltött élek pedig legyenek tökéletes szigetelők, vagy ami ugyanaz: töltsük be a rácsot  $p$  valószínűséggel  $\sigma = \frac{1}{R}$  vezetőképességű elemekkel és  $(1-p)$  valószínűséggel 0 vezetőképességű elemekkel. A kérdés most már az, hogy mekkora lesz egy ilyen módon létrehozott nagy (makroszkópikus) minta vezetőképessége.

Ezt általánosan kiszámítani nem tudjuk – hiszen ennek a feladatnak a geometriai perkolációs probléma részfeladata, és már azzal sem boldogultunk az egzaktitás szintjén. Közelítő módszerhez kell folyamodni, ami ebben az esetben az ún. *effektív tér elmélet* lehet.

A gondolatmenet – amelyet a fizikában egyébként igen széles körben alkalmaznak – a következő: Adva van egy sok elemből álló rendezetlen rendszer, amelynek makroszkópikus tulajdonságára vagyunk kíváncsiak. Feltesszük, hogy rendszerünk helyettesíthető egy olyannal, amelynek elemei már rendezettek. Esetünkben a véletlenszerűen betöltött rácsot egy teljesen betöltött ráccsal fogjuk leírni: Az új rendszer elemeinek jellemzőit – itt az egyedi  $g_m$  effektív vezetőképességeket – úgy kell megválasztani, hogy azok kiadják a keresett makroszkópikus mennyiséget. Az elemi jellemzők meghatározásához feltesszük, hogy egy kiválasztott elemről eltekintve az effektív érték érvényesül a rendszerben. A kiválasztott elem pedig figyelembe vesszük a lehetséges állapotokat, de – mivel az effektív jellemző kiátlagolt mennyiség – ezek hatásának el kell tűnnie.

Vizsgáljuk tehát a következő problémát: Adott egy rács, amelynek elemei  $g_m$  vezetőképességűek, kivéve egy élt, amelyen a vezetőképesség  $g_0$  és amelyről feltesszük, hogy  $p$  valószínűséggel  $\sigma$ ,  $1 - p$  valószínűséggel  $0$  értéket vesz fel (6. ábra). Ha  $g_0$  is  $g_m$  lenne, akkor a feszültség sorról sorra  $V_m$ -mel esne, így azonban a  $g_m - g_0$  különbségből eredő eltérést kompenzálni kell az  $A$  pontban bevezetett és  $B$  pontból elvezetett  $i_0$  árammal, ha a feszültségcsökkenést továbbra is egyenletesnek akarjuk tartani. Természetesen a

$$(1) \quad V_m(g_m - g_0) = i_0$$

egyenlet határozza meg  $i_0$ -t. Tetszőleges  $g_m$  esetén ilyenkor az  $A$  és a  $B$  pontok között egy  $V_0$  külön feszültségjárulék esik annak következtében, hogy  $i_0$  folyik  $A$  és  $B$  között, tehát

$$V_0 = i_0(g_0 + G'_{AB}),$$

ahol  $G'_{AB}$  az egész rács  $A$  és  $B$  pontok között mérhető vezetőképessége, ha az  $AB$  él *nincs jelen*. Nyilván  $G'_{AB} = G_{AB} - g_m$ , ahol  $G_{AB}$  a  $g_m$  vezetőképességű élekkel *teljesen* betöltött rács vezetőképessége  $AB$  között.  $G_{AB}$  kiszámításához először fontoljuk meg, hogy mekkora feszültség esik  $AB$  között, ha  $i_0$ -t  $A$ -nál be-,  $B$ -nél pedig kivezetik. Ha *külön* vezetjük be, ill. ki az áramot, akkor szimmetria okok miatt nyilvánvaló, hogy mindkét esetből  $i_0/4$  járulék adódik; tehát az  $AB$  élen összesen  $i_0/2$  áram folyik, amiből

$$G_{AB} = i_0 / \left( \frac{i_0/2}{g_m} \right) = 2g_m, \quad \text{vagyis} \quad G'_{AB} = g_m.$$

$V_0$ -ra tehát  $V_0 = i_0/(g_0 + g_m)$  adódik. Az effektív tér elmélet alapján ettől a  $V_0$ -tól követeljük meg, hogy *átlagban* tűnjön el. Mivel  $g_0$   $p$  valószínűséggel  $\sigma$  és  $(1 - p)$  valószínűséggel  $0$ , (1) felhasználásával

$$(V_0)_{\text{átlag}} = pV_m(g_m - \sigma)/(g_m + \sigma) + (1 - p)V_m,$$

vagyis  $g_m = (2p - 1)\sigma$ . Látható, hogy a vezetőképesség  $p = 1/2$ -ben, a négyzetrács kötésperkoláció kritikus pontjában  $0$ -vá válik, tehát az itt vázolt közelítő elmélet az egzakt perkolációs küszöböt ebben az esetben visszaadja. Megjegyezzük, hogy összevetve az elmélet eredményeit pl. szimuláció útján nyertekkel, az egész  $1/2 \leq p \leq 1$  tartomány nagy részén kitűnő az egyezés, csak  $p_c$  közvetlen környezetében mutatkozik eltérés. Természetesen az effektív tér elmélet nemcsak négyzetrácsra, hanem tetszőleges rácsra alkalmazható az itt vázolt formában.

**Összefoglalva:** *perkolációs* problémával állunk szemben, ha valamilyen rendszer tulajdonságai a benne levő *véletlenszerűen létrejött* – vagy megszakadt – *kapcsolatoktól* függenek. Célszerűnek bizonyult a *modell-alkotás*: a perkolációs modell matematikai formában fogalmazza meg a vizsgált jelenség lényegét. *Egzakt megoldásokat* sajnos csak kevés és többnyire érdektelen (pl. 1-dimenziós) esetben ismerünk. Ezért *közeliítő módszerekhez* kellett folyamodni: ilyenek a Monte Carlo *szimuláció* és az *effektív tér elmélet*. A perkolációs jelenségkör különösen vonzó sajátossága, hogy a problémák közérthetően megfogalmazhatók, és gyakran az alkalmazott módszerek is viszonylag egyszerűek. Így azután előfordulhat, hogy középiskolás diák is részt vesz új kutatási eredmények létrehozásában.

**Kertész János**  
MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézet