

ОРИЕНТИРОВАННАЯ ПЕРКОЛЯЦИЯ ДИМЕРОВ НА ПЛОСКОСТИ

Черкасова В.А., Тарасевич Ю.Ю.

Астраханский государственный университет, Россия, 414056, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, телефон: (88512)610925, E-mail: vcherkasova@aspu.ru

В рамках теории перколяции [1] проведено моделирование фазового перехода в электропроводящее состояние при осаждении нанотрубок на подложку при наличии упорядочивающих факторов.

В данной работе была исследована коррелированная задача узлов димеров на квадратной решетке с использованием тороидальных граничных условий. Для определения порога перколяции использовалось определение перколяционного кластера как оборачивающего (wrapping cluster) по одному направлению [2]. Степень упорядоченности задавалась параметром упорядочивания $s = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-}$, где N_+ — число димеров, лежащих в вертикальном направлении, N_- — число димеров, лежащих в горизонтальном направлении. Для нахождения порога перколяции использовалась стандартная методика [1]. В программе использовался алгоритм Хошена–Копельмана [3] и генератор случайных чисел «Вихрь Мерсенна» [4].

В ходе моделирования были получены пороги перколяции и джемминга при различных значениях параметра упорядочивания s . Было выявлено, что эти пороги хорошо аппроксимируются квадратичными функциями: $p_c(s) = 0,0251s^2 - 0,0007s + 0,5618$, $p_{jam}(s) = -0,0124s^2 - 0,0291s + 0,9065$. Кроме того, были вычислены критические показатели γ и β , которые совпали в пределах погрешности с ранее известными [1].

Полученные при моделировании результаты позволяют оценить концентрацию осажденных на подложку нанотрубок, при которой возникает электропроводящее состояние при наличии упорядочивающих факторов и наибольшую возможную долю нанотрубок на подложке.

Литература

1. Stauffer D., Aharony A. Introduction to Percolation Theory - London: Taylor & Francis, 1992. 181 p.
2. Pruessner G., Moloney M. Numerical results for crossing, spanning and wrapping in two-dimensional percolation // J. Phys. A. Vol. 36, № 44, 2003, p. 11213.
3. Hoshen J., Kopelman R. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm // Phys. Rev. B. Vol. 14, № 8, 1976, p. 3438–3445.
4. Matsumoto M. Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator // ACM Trans. on Modeling and Computer Simulations Vol 8, № 1, 1998, p.3–30.