

ПЕРКОЛЯЦИЯ ДИМЕРОВ НА ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ (ЗАДАЧА УЗЛОВ)

Черкасова В.А.

Астраханский государственный университет,
Россия, 414056, Астрахань, ул. Татищева 20(а), (8512)610819, vcherkasova@aspu.ru

В последнее время особое внимание вызывают исследования перколяционного поведения неупорядоченных систем частиц различных форм и размеров, например, [1-2]. В работе [2] рассмотрена задача случайной последовательной адсорбции «иголок» на узлах квадратной решетки, которая моделирует необратимую диссоциацию и соединение больших молекул в полимерные цепи.

В данной работе проведены исследования задачи узлов перколяции димеров («иголок» длиной 2) на простой кубической решетке с использованием свободных и периодических граничных условий. С помощью программы, написанной на языке программирования C, определен порог перколяции для димеров на простой кубической решетке. В случае периодических граничных условий порог перколяции оказался равным $p_c = (0,2558 \pm 4,5698) \cdot 10^{-5}$, а в случае свободных граничных условий - $p_c = (0,2565 \pm 2,6091) \cdot 10^{-5}$. Программа использует алгоритм Хошена–Копельмана [3] для разметки кластеров и алгоритм Л'Экюера (L'Esuyer) [4] для генерации случайных чисел.

В случае свободных граничных условий на границах решетка оказывается заполненной с меньшей вероятностью. В случае периодических граничных условий по трем направлениям кластер считается перколяционным, если его узлы присутствуют в каждом слое кубической решетки.

В дальнейшем планируется исследовать явление джемминга для задачи узлов димеров в случае периодических граничных условий на простой кубической решетке.

Исследование было проведено в рамках проекта РФФИ № 06-02-16027-а «Исследование механизмов дегидратационной самоорганизации биологических жидкостей».

Литература

1. *D. L. Carroll, R. Czerw, S. Webster.* Polymer-nanotube Composites for Transparent, Conducting Thin Films // *Synthetic Metals*, V. 155, 2005, P. 694.
2. *G. Kondrat, A. Pekalski.* Percolation and jamming in random sequential adsorption of linear segments on a square lattice // *Phys. Rev. E.*, Vol. 63, 2001, p.051108.
3. *J. Hoshen, R. Kopelman.* Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm // *Phys. Rev. B*, vol. 14, no. 8, 1976, 3438–3445.
4. *W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery.* Numerical Recipes In C: The Art Of Scientific Computing. — Cambridge University Press, 1992, 994 p.